

# ACOUSTOELECTRONIC SENSORS

---

## АКУСТОЕЛЕКТРОННІ СЕНСОРИ

---

---

PACS 81.07.Bc, 66.30.Lw

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.2.106606>

### ВПЛИВ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ АДАТОМІВ НА ЗАКОН ДИСПЕРСІЇ ТА ШИРИНУ АКУСТИЧНОЇ ФОНОННОЇ МОДИ КВАЗІРЕЛЕЄВСЬКОЇ ХВИЛІ

*М. Я. Сенета, Р. М. Пелешак*

*Кафедра загальної фізики  
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка  
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, Львівська обл., 82100  
E-mail: marsen18@i.ua*

### ВПЛИВ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ АДАТОМІВ НА ЗАКОН ДИСПЕРСІЇ ТА ШИРИНУ АКУСТИЧНОЇ ФОНОННОЇ МОДИ КВАЗІРЕЛЕЄВСЬКОЇ ХВИЛІ

*М. Я. Сенета, Р. М. Пелешак*

**Анотація.** У межах нелокальної пружної взаємодії адсорбованого атома з атомами матриці з врахуванням диполь-дипольної взаємодії адатомів та сил дзеркального зображення знайдено в довгохвильовому наближенні закон дисперсії поверхневої квазірелеєвської акустичної хвилі, який враховує залежність від концентрації адатомів, деформаційного потенціалу та температури субстрату. Розраховано зміну енергетичної ширини поверхневої акустичної моди, зумовленої диполь-дипольною взаємодією адсорбованих атомів при температурах 100 К і 300 К.

**Ключові слова:** диполь-дипольна взаємодія, адатоми, сили дзеркального зображення, акустична квазірелеєвська хвиля

## INFLUENCE OF ADATOMS DIPOLE-DIPOLE INTERACTION ON THE DISPERSION LAW AND ACOUSTIC PHONON MODE WIDTH OF QUASI-RAYLEIGH WAVE

*M. Ya. Seneta, R. M. Peleshchak*

**Abstract.** Within the nonlocal elastic interaction between adsorbed atoms and matrix atoms taking into account the adatoms dipole-dipole interaction and mirror image forces the dispersion law of quasi-Rayleigh surface acoustic wave is found in the long-wave approximation. The dependences on the adatoms concentration, the deformation potential and the substrate temperature are taken into account. The change of energy width of the surface acoustic mode is calculated. The change is caused of adsorbed atoms dipole-dipole interaction at the temperatures 100 K and 300 K.

**Keywords:** dipole-dipole interaction, adatoms, mirror image forces, acoustic quasi-Rayleigh wave

## ВЛИЯНИЕ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АДАТОМОВ НА ЗАКОН ДИСПЕРСИИ И ШИРИНУ АКУСТИЧЕСКОЙ ФОНОННОЙ МОДЫ КВАЗИРЕЛЕЕВСКОЙ ВОЛНЫ

*М. Я. Сенета, Р. М. Пелещак*

**Аннотация.** В рамках нелокального упругого взаимодействия адсорбированного атома с атомами матрицы с учетом диполь-дипольного взаимодействия адатомов и сил зеркального изображения найдено в длинноволновом приближении закон дисперсии поверхностной квазирелеевской акустической волны, учитывающий зависимость от концентрации адатомов, деформационного потенциала и температуры субстрата. Рассчитано изменение энергетической ширины поверхностной акустической моды, обусловленной диполь-дипольным взаимодействием адсорбированных атомов при температурах 100 К и 300 К.

**Ключевые слова:** диполь-дипольное взаимодействие, адатомы, силы зеркального изображения, акустическая квазирелеевская волна

### 1. Вступ

Дослідження впливу неоднорідностей поверхні (адсорбовані атоми, шороховатість поверхні) на розповсюдження поверхневих акустичних хвиль (ПАХ) представляє не тільки теоретичний інтерес, але й може знайти практичне використання в області неруйнівного контролю [1]. Характеристики розповсюдження поверхневих хвиль – області існування, спектр, ширина акустичної фононної моди та розподіл поля – залежать від властивостей поверхні та межі поділу середовищ. Зокрема, вони суттєво видозмінюються, якщо на поверхні є адсорбовані атоми або поверхня (межа поділу) не є гладкою і має періодичні

або випадкові нерівності. На адсорбованих атомах і на нерівностях поверхні відбувається багатократне розсіяння поверхневої хвилі. При значних концентраціях адсорбовані атоми починають взаємодіяти як між собою (диполь-дипольна взаємодія та взаємодія, яка пов'язана з силами дзеркального зображення, прикладеними до поверхні кристалу), так і з атомами підкладки (взаємодія адсорбованого атома з атомами матриці в наближенні нелокального закону Гука) і з поверхневою акустичною хвилею через деформаційний потенціал [2]. Наявність адсорбованих атомів і динамічної деформації, створеної поверхневою акустичною хвилею, приводить до перенормування спектру поверхневих акустичних

хвиль, ширини фононної моди та до виникнення локалізованих електронних станів поблизу двовимірних нерівностей на поверхні [3]. Дослідження механізмів збудження електронних станів на адсорбованій поверхні напівпровідників з врахуванням поверхневої акустичної хвилі є необхідним для створення сучасних мікро- і наноелектронних приладів з керованими параметрами.

У роботах [4,5] було досліджено вплив взаємодії адатомів із самоузгодженою акустичною квазірелеєвською хвилею на її дисперсію та ширину фононної моди при різних значеннях концентрації адсорбованих атомів без врахування диполь-дипольної взаємодії адсорбованих атомів.

У цій роботі в довгохвильовому наближенні проведено дослідження впливу диполь-дипольної взаємодії адсорбованих атомів на спектр та ширину поверхневих акустичних мод квазірелеєвської хвилі у межах узагальненої моделі напівпровідника Халдейна-Андерсона.

## 2. Модель взаємодії адатомів з поверхневою акустичною хвилею (ПАХ) з урахуванням диполь-дипольної взаємодії адатомів

Нехай у процесі молекулярно-променевої епітаксії (МПЕ) на поверхню напівпровідника  $z=0$  (вісь  $z$  напрямлена з поверхні монокристалу в глибину) напрямлений потік атомів. При скінченних концентраціях адсорбовані атоми починають взаємодіяти як між собою, так і з атомами підкладки. Існують такі основні канали взаємодії адатомів: диполь-дипольне відштовхування заряджених адатомів; опосередкована взаємодія (обмін) адатомів через електрони субстрату; прямий обмін, що виникає при безпосередньому перекритті орбіталей сусідніх атомів [6]; взаємодія, яка пов'язана з силами дзеркального зображення, прикладеними до поверхні кристалу [4] та взаємодія адатомів з атомами підкладки через деформаційний потенціал поверхневої акустичної хвилі [5, 7, 8]. Необхідно зазначити, що диполь-дипольна взаємодія заряджених адатомів домінує при адсорбції атомів лужних металів, газів на  $d$ -металах і напівпровідниках [9]. Як було показано у роботі [10], при малих адсорбованих покриттях електростатична дія

інших адатомів на виділений адатом ( ) може бути описана потенціалом  $V_{d-d}(\vec{r})$ .

$$V_{d-d}(\vec{r}) \approx -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} 2e^2 l^2 \bar{A} Z_a(\theta) N_d^{3/2}(x), \quad (1)$$

де  $\theta = N_d(x)/N_{ML}$  – ступінь покриття поверхні адатомами,  $N(x)$  – число адатомів на поверхні напівпровідника;  $N_{ML}$  – число адатомів у моношарі ( $0 \leq \theta \leq 1$ );  $\bar{A} \approx 10$  – коефіцієнт, який несуттєво залежить від геометрії адсорбованого шару;  $l = r_a + r_s$  – довжина адсорбційного зв'язку ( , – атомні радіуси адсорбованого атома і атома напівпровідника, з яким адатом безпосередньо зв'язаний). Заряд  $Z(\theta)$  адатома визначається через число заповнення адатома  $n_a$ , тобто  $Z_a = -n_a$ . Число заповнення  $n_a$  адатомів знаходиться в межах моделі Халдейна-Андерсона [9, 11].

$$n_a = \sum_{\sigma} (n_{v\sigma} + n_{c\sigma} + n_{l\sigma}), \quad (2)$$

де  $n_{v\sigma}$ , – внески у числа заповнення адатома, зумовлені взаємодією стану адатома з континуумом станів валентної зони та зони провідності відповідно; – число заповнення локальних рівнів, які виникають в адсорбованій системі.

$$n_{v\sigma} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{-\Delta/2} \frac{\Gamma}{[\omega - \epsilon_{a\sigma} - \Lambda(\omega)]^2 + \Gamma^2} f(\omega) d\omega, \quad (3)$$

$$n_{c\sigma} = \frac{1}{\pi} \int_{\Delta/2}^{\infty} \frac{\Gamma}{[\omega - \epsilon_{a\sigma} - \Lambda(\omega)]^2 + \Gamma^2} f(\omega) d\omega,$$

$$n_{l\sigma} = \left[ 1 + \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma \Delta}{(\Delta/2)^2 - \omega_{l\sigma}^2} \right]^{-1} f(\omega_{l\sigma}), \quad (4)$$

де  $f(\omega) = \{1 + \exp[(\omega - \mu) / k_B T]\}^{-1}$  – функція розподілу Фермі-Дірака, – хімічний потенціал; – стала Больцмана; – ширина забороненої зони напівпровідника.

Енергія локальних адсорбованих рівнів знаходиться з рівняння

$$\omega - \epsilon_{a\sigma} - \Lambda(\omega) = 0, \quad (5)$$

де  $\epsilon$  – енергія атомного електрона у стані  $|a\sigma\rangle$  із врахуванням кулонівського відштовхування електронів із протилежними спінами [9].

Півширина  $\Gamma(\omega)$  і гібридаційний зсув  $\Lambda(\omega)$  квазірівня адатома визначається:

$$\Gamma(\omega) = \begin{cases} \pi V^2 \rho_s \equiv \Gamma, & |\omega| \geq \Delta/2, \\ 0, & |\omega| < \Delta/2; \end{cases} \quad (6)$$

$$\Lambda(\omega) = \frac{\Gamma}{\pi} \ln \left| \frac{\Delta/2 - \omega}{\Delta/2 + \omega} \right|,$$

де  $\rho_s(\omega)$  – енергетична густина станів власного напівпровідника

$$\rho_s(\omega) = \begin{cases} \rho_s, & |\omega| \geq \Delta/2, \\ 0, & |\omega| < \Delta/2. \end{cases} \quad (7)$$

Необхідно зазначити, що у випадку адсорбції атомів лужних металів, заряд адатома є порядку одиниці, а довжину адсорбційного зв'язку  $l$  можна прирівняти до іонного радіусу адатома  $r_i$  [12]. При адсорбції газів заряд адатомів порівняно невеликий. Для оцінки кулонівського зсуву у якості  $l$  можна брати атомний радіус  $r_a$  [13].

Завдяки деформаційному потенціалу та локальному перенормуванню поверхневої енергії як адсорбовані атоми, так і поверхнева пружна акустична квазірелеєвська хвиля неоднорідно деформують приповерхневий шар товщиною  $a$  ( $a$  – період ґратки в напрямі осі  $z$ ). У свою чергу, виникаюча неоднорідна самоузгоджена деформація через потенціал деформації перерозподіляє адсорбовані атоми уздовж поверхні, тобто індукує додатковий деформаційно-дифузійний потік адатомів [8]. Вплив адсорбованих атомів зводиться до зміни крайових умов для тензора напруг  $\sigma_{ij}$  на поверхні  $z=0$ .

Вектор зміщення точок середовища  $\vec{u}(\vec{r}, t)$  задовольняє рівняння [4]:

$$\frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2} = c_i^2 \Delta_{\vec{r}} \vec{u} + (c_l^2 - c_t^2) \overrightarrow{\text{grad}}(\text{div} \vec{u}) \quad (8)$$

Розв'язок рівняння (8) для поверхневої хвилі Релея, яка розповсюджується у напрямку

осі  $x$ , представляємо у вигляді:

$$\begin{aligned} u_x(x, z) &= -iqAe^{iqx-i\omega t-k_l z} - ik_l B e^{iqx-i\omega t-k_l z}, \\ u_z(x, z) &= k_l A e^{iqx-i\omega t-k_l z} + qB e^{iqx-i\omega t-k_l z}, \end{aligned} \quad (9)$$

де  $k_{l,t}^2 = q^2 - \frac{\omega^2}{c_{l,t}^2}$ ;  $A, B$  – амплітуди ПАХ.

Напрямок  $x$  на поверхні кристала визначається пружною анізотропією, а на ізотропній поверхні визначається зовнішньою дією, яка індукує пружну анізотропію або завдяки спонтанному порушенню симетрії дефектно-деформаційної системи.

Просторово-неоднорідна поверхнева деформація  $\epsilon(x, t)$  приводить до неоднорідного перерозподілу адатомів  $N_d(x, t)$ :

$$N_d(x, t) = N_{0d} + N_{1d}(q) e^{iqx-i\omega t}, \quad (10)$$

де  $N_{0d}$  – просторово-однорідна складова концентрації адатомів;  $N_{1d}(q)$  – амплітуда періодичного збурення ( $N_{1d} \ll N_{0d}$ ).

Енергія взаємодії адсорбованого атома з атомами матриці  $W_{da}$  в наближенні нелокального закону Гука визначається як:

$$W_{da}^{\text{int}}(x) = -K\epsilon(x)\Delta\Omega_d - K \frac{\partial^2 \epsilon(x)}{\partial x^2} l_d^2 \Delta\Omega_d, \quad (11)$$

де  $K$  – модуль пружності;  $\Delta\Omega$  – зміна об'єму кристала, зумовлена одним адсорбованим атомом;  $l_d$  – середнє значення квадрата характеристичної відстані взаємодії адатома з атомами матриці [4].

Поряд із пружною взаємодією адсорбованих атомів, яка зменшується з відстанню за степеневим законом, існує взаємодія, яка плавно змінюється на відстанях порядку розміру кристалу й пов'язана з силами дзеркального зображення, прикладеними до поверхні кристала. Така енергія  $W_{dd}^{\text{int}}$  взаємодії адсорбованого атома з іншими адатомами може бути визначена [14]:

$$W_{dd}^{\text{int}}(x) = -\frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)a} \theta_d^2 N_d(x), \quad (12)$$

де  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона;  $\theta_d = K \cdot \Delta\Omega_d$  – поверхневий деформаційний потенціал.

Пружне поле, що виникає в імплантованій адатомами матриці, діє на адатом із силою

$$F = -\frac{\partial(W_{da}^{int}(x) + V_{d-d}(x) + W_{dd}^{int}(x))}{\partial x} = \theta_d \frac{\partial \varepsilon(x,t)}{\partial x} + \theta_d l_d^2 \frac{\partial^3 \varepsilon(x,t)}{\partial x^3} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} 2e^2 l^2 \bar{A} Z_a(\theta) \frac{\partial N_d^{3/2}(x)}{\partial x} + \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)a} \theta_d^2 \frac{\partial N_d(x)}{\partial x}, \quad (13)$$

яка індукує, окрім звичайного дифузійного потоку  $\left(-D_d \frac{\partial N_d(x)}{\partial x}\right)$ , додатковий деформаційний потік адатомів. Цей додатковий деформаційний потік адатомів зумовлений градієнтами деформації  $\frac{\partial \varepsilon(x,t)}{\partial x}$  й концентрації  $\frac{\partial N_d(x)}{\partial x}$  дефектів.

Під дією сили (13) адатоми у пружному полі отримують швидкість

$$v = \mu \cdot F = \frac{D_d \theta_d}{k_B T} \frac{\partial \varepsilon(x,t)}{\partial x} + \frac{D_d \theta_d l_d^2}{k_B T} \frac{\partial^3 \varepsilon(x,t)}{\partial x^3} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{D_d}{k_B T} 2e^2 l^2 \bar{A} Z_a(\theta) \frac{\partial N_d^{3/2}(x)}{\partial x} + \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)} \frac{D_d \theta_d^2}{k_B T a} \frac{\partial N_d(x)}{\partial x}, \quad (14)$$

де  $\mu$  – коефіцієнт дифузії адатома;  $T$  – температура субстрату. Тут для визначення рухливості адатомів використано співвідношення Ейнштейна.

З урахуванням наближення (10) та взаємодій (1), (11), (12) рівняння для концентрації адатомів набуде вигляду:

$$\begin{aligned} &(-i\omega + D_d(1 - \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{K(1-\nu)a} \frac{\theta_d^2}{k_B T} N_{0d} - \\ & - \frac{3}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{k_B T} e^2 l^2 \bar{A} Z_a(\theta) N_{0d}^{3/2} q^2) N_{1d}(q) = \\ & = \frac{D_d \theta_d}{k_B T} N_{0d} \varepsilon(q) q^2 (1 - l_d^2 q^2). \end{aligned} \quad (15)$$

З рівняння (15) отримаємо вираз для амплітуди поверхневої концентрації адатомів  $N_d(q)$ .

Просторово-неоднорідний розподіл адатомів модулює поверхневу енергію, що приводить до виникнення латеральної механічної напруги

$$\sigma_{xz} = \frac{\partial F(N(x))}{\partial x}, \quad (16)$$

яка компенсується напругою зсуву в середовищі [15].

Межова умова виражає баланс латеральних напруг:

$$\mu \left( \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \Big|_{z=0} = \left( \frac{\partial F}{\partial N_d} \right) \frac{\partial N_{1d}(x)}{\partial x}, \quad (17)$$

де  $\mu$  – модуль зсуву середовища.

Крім цього, в результаті взаємодії адатомів з атомами напівпровідника на поверхні виникає нормальна механічна напруга, де межова умова має вигляд

$$\left( \frac{\partial u_z}{\partial z} + (1-2\beta) \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) \Big|_{z=0} = \frac{(\theta_d + V_{d-d}) N_{1d}(x)}{\rho c_l^2 a}, \quad (18)$$

де  $a$  – параметр кристалічної ґратки на поверхні напівпровідника;  $\beta = \frac{c_t^2}{c_l^2}$ ;  $\rho$  – густина кристалу.

### 3. Дисперсійне рівняння та ширина акустичної фононної моди квазірелеєвської хвилі з урахуванням диполь-дипольної взаємодії адатомів

Для отримання дисперсійного рівняння для поверхневої акустичної хвилі, яка взаємодіє з адсорбованими атомами підставимо (15), з врахуванням (10), а також (8) і (9), у (17) і (18).

$$\begin{aligned} &(q^2 + k_t^2)^2 - 4q^2 k_t k_l = -\frac{2}{\beta} \frac{\omega^2}{c_l^2} \frac{\theta_d N_{0d}}{k_B T \rho c_l^2} \cdot \\ & \cdot \frac{D_d q^2}{-i\omega + D_d(1 + W_{dd}^{int} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d}) q^2} \times \\ & \times (1 - l_d^2 q^2) \cdot \left( q^2 k_t \frac{\partial F}{\partial N_d} + (q^2 + k_t^2) \frac{\theta_d + V_{0d-d}}{2a} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

$$\text{де } V_{0d-d} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} 2e^2 l^2 \bar{A} Z_a(\theta) N_{0d}^{3/2}.$$

Ліва частина рівняння (19) співпадає з детермінантом Релея, рівність нулю якого визначає закон дисперсії поверхневої релеєвської акустичної хвилі без наявності адсорбованих атомів [15]. Права частина рівняння (19) перенормує дисперсійне рівняння релеєвської

акустичної хвилі за рахунок силової дії ( ) адсорбованих атомів, які деформують приповерхневий шар кристалічної ґратки. Підставляючи в рівняння (19)  $\omega = c q \xi$ , отримуємо

$$(2 - \xi^2)^2 - 4\sqrt{1 - \xi^2} \sqrt{1 - \frac{c_i^2}{c_t^2} \xi^2} = -\frac{2\xi^2 \theta_d N_{0d}}{k_B T \rho c_i^2} \times \frac{D_d q (D_d (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d}) q + i c_i \xi)}{\left( D_d (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d}) \right)^2 q^2 + c_i^2 \xi^2} \times (20)$$

$$\times (1 - l_d^2 q^2) \left( q \sqrt{1 - \xi^2} \frac{\partial F}{\partial N_d} + (2 - \xi^2) \frac{\theta_d + V_{0d-d}}{2a} \right).$$

Вираз (20) має дійсну і уявну частини, які в кінцевому результаті визначають поправку до закону дисперсії релеєвської хвилі і її затухання. Наявність множника  $q$  у чисельнику (20) дозволяє розв'язати це рівняння ітераціями в довгохвильовій області  $qa \ll 1$ .

Позначимо ліву частину рівняння (20) функцією  $f(\xi)$ , яку розвинемо в ряд Тейлора в околі точки

$$f(\xi_0 + \delta\xi) \approx f(\xi_0) + f'(\xi_0) \delta\xi, \quad (21)$$

де  $f(\xi_0) = 0$  – розв'язок рівняння  $f(\xi) = 0$ .

Тоді поправка  $\delta\xi$  визначається правою частиною (20) із заміною  $\xi \rightarrow \xi_0$ .

$$\delta\xi = -\frac{1}{f'(\xi_0)} \frac{2\xi_0^2 \theta_d N_{0d}}{k_B T \rho c_i^2} \times \frac{D_d^2 q^2 (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d})}{\left( D_d (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d}) \right)^2 q^2 + c_i^2 \xi_0^2} \times (22)$$

$$\times (1 - l_d^2 q^2) \left( q \sqrt{1 - \xi_0^2} \frac{\partial F}{\partial N_d} + (2 - \xi_0^2) \frac{\theta_d + V_{0d-d}}{2a} \right) - i \frac{1}{f'(\xi_0)} \frac{2c_i \xi_0^3 \theta_d N_{0d}}{k_B T \rho c_i^2} \times$$

$$\times \frac{D_d q}{\left( D_d (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d}) \right)^2 q^2 + c_i^2 \xi_0^2} \times (22)$$

$$\times (1 - l_d^2 q^2) \left( q \sqrt{1 - \xi_0^2} \frac{\partial F}{\partial N_d} + (2 - \xi_0^2) \frac{\theta_d + V_{0d-d}}{2a} \right).$$

Числовий аналіз показує, що  $f'(\xi) > 0$  у всій області зміни  $\xi$ .

Виділивши дійсну та уявну частини у (22), з урахуванням  $\omega = c_i q \xi + c_i q \delta\xi$ , отримаємо вирази для закону дисперсії  $\omega'(q)$  поверхневої пружної акустичної хвилі та її ширини  $\omega''(q)$ , що зумовлена взаємодією адсорбованих атомів із самоузгодженою квазірелеєвською хвилею із врахуванням як нелокальної пружної взаємодії імплантованої домішки з атомами матриці [16], так і сил дзеркального зображення [14]

$$\omega'(q) = c_i q \xi_0 \left[ 1 - \frac{1}{f'(\xi_0)} \frac{2\xi_0^2 \theta_d N_{0d}}{k_B T \rho c_i^2} \frac{D_d^2 q^2 (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d})}{\left( D_d (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d}) \right)^2 q^2 + c_i^2 \xi_0^2} \right] \times (23)$$

$$\times (1 - l_d^2 q^2) \left( q \sqrt{1 - \xi_0^2} \frac{\partial F}{\partial N_d} + (2 - \xi_0^2) \frac{\theta_d + V_{0d-d}}{2a} \right);$$

$$\omega''(q) = -c_i^2 \frac{1}{f'(\xi_0)} \frac{2\xi_0^3 \theta_d N_{0d}}{k_B T \rho c_i^2} \frac{D_d q^2}{\left( D_d (1 + W_{dd}^{\text{int}} + \frac{3}{2k_B T} V_{0d-d}) \right)^2 q^2 + c_i^2 \xi_0^2} \times (24)$$

$$\times (1 - l_d^2 q^2) \left( q \sqrt{1 - \xi_0^2} \frac{\partial F}{\partial N_d} + (2 - \xi_0^2) \frac{\theta_d - V_{0d-d}}{2a} \right).$$

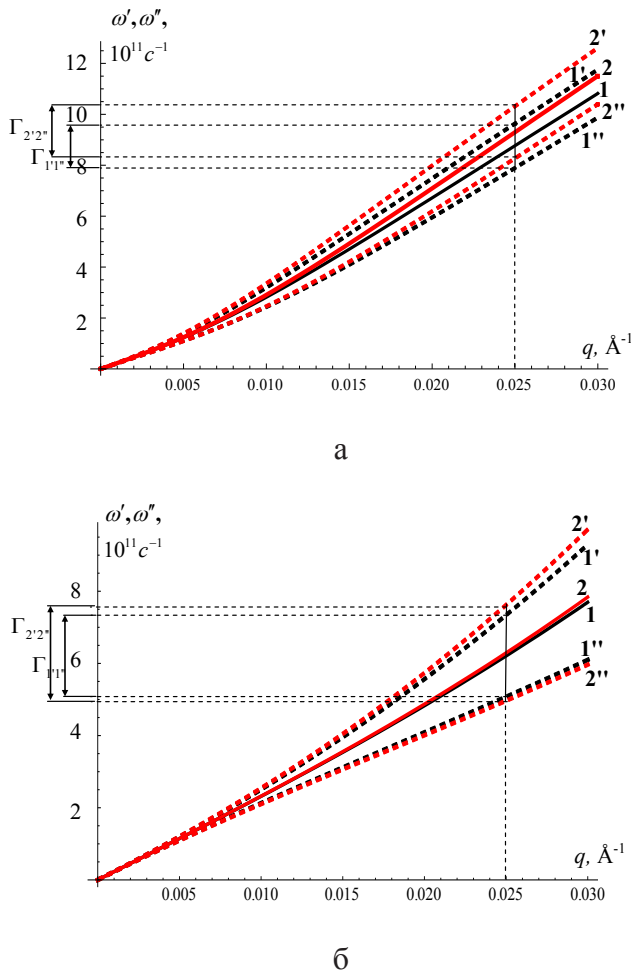
#### 4. Числовий розрахунок закону дисперсії і ширини поверхневої пружної акустичної моди з урахуванням диполь-дипольної взаємодії адатомів

Розрахунок залежності закону дисперсії  $\omega'(q) = \text{Re } \omega(q)$  поверхневої пружної акустичної хвилі та ширини  $\omega''(q) = \text{Im } \omega(q)$  акустичної моди проводився для напівпровідника GaAs (110) при наступних значеннях параметрів:

$$l_d = 2,9 \text{ нм}; \quad a = 0,565 \text{ нм}; \quad c_l = 4400 \text{ м/с};$$

$$c_t = 2475 \text{ м/с}; \quad \rho = 5320 \text{ кг/м}^3; \quad \theta_d = 10 \text{ еВ};$$

$$N_{0d} = 3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}; D_d = 5 \cdot 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}; \frac{\partial F}{\partial N_d} = 0,1 \text{ eВ.}$$

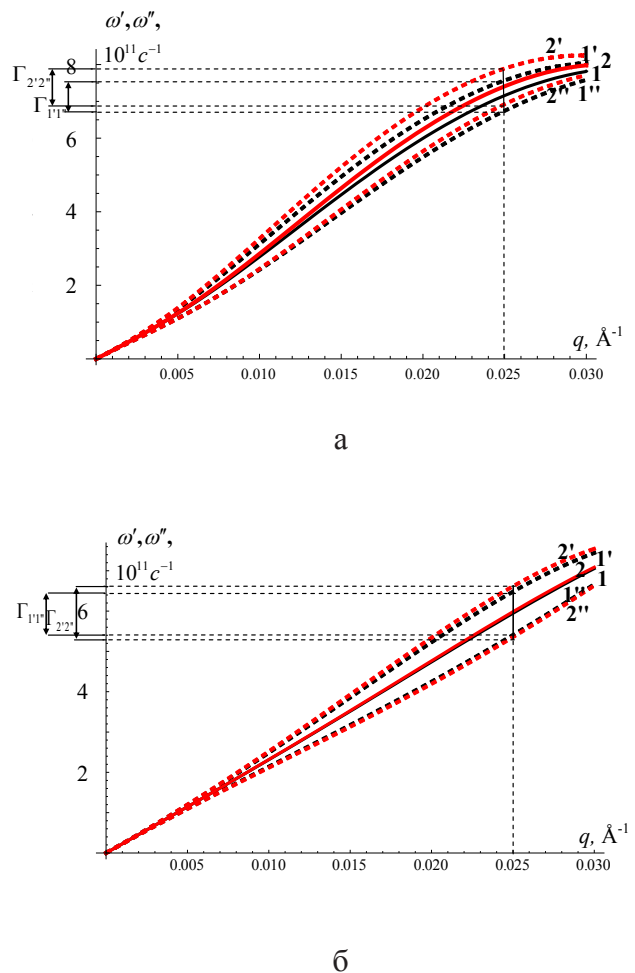


**Рис. 1.** Дисперсійна залежність  $\omega'(q)$  (криві 1, 2) та ширина  $\omega''(q)$  (криві 1'1'', 2'2'') поверхневої акустичної фононної моди, взаємодіючої з адсорбованими молекулами  $O_2$  як з врахуванням диполь-дипольної взаємодії (криві 2, 2'2''), так і без неї (криві 1, 1'1'') без врахування нелокальної взаємодії ( ) адмолекули з атомами матриці): а – при температурі  $T=100$  К; б – при температурі  $T=300$  К.

Значення характеристичної довжини взаємодії адатома з атомами ґратки знайдене з умови мінімуму вільної енергії кристала з адсорбованими атомами [8].

На рис. 1, 2 наведені результати розрахунку закону дисперсії  $\omega'(q)$  (рис. 1, 2, криві 1, 2) поверхневої акустичної моди та залежності її ширини  $\omega''(q)$  (рис. 1,2, криві 1'1'', 2'2'') від модуля хвильового вектора  $q$ , зумовленої вза-

ємодією молекул  $O_2$ , адсорбованих на поверхні GaAs (110), із самоузгодженою акустичною квазірелеєвською хвилею, як з врахуванням диполь-дипольної взаємодії адсорбованих молекул (рис. 1,2, криві 2, 2'2''), так і без її врахування (рис.1,2, криві 1, 1'1''). У роботах [13, 17] зазначено, що у випадку адсорбції молекул  $O_2$  на поверхню напівпровідника має місце електронегативна адсорбція, тобто молекула  $O_2$  приймає негативний заряд ( $Z_a \approx -0,5$ ) з довжиною адсорбційного зв'язку  $l=2\text{Å}$ .



**Рис. 2.** Дисперсійна залежність  $\omega'(q)$  (криві 1, 2) та ширина  $\omega''(q)$  (криві 1'1'', 2'2'') поверхневої акустичної фононної моди, взаємодіючої з адсорбованими молекулами  $O_2$  як з врахуванням диполь-дипольної взаємодії (криві 2, 2'2''), так і без неї (криві 1, 1'1'') з врахуванням нелокальної взаємодії ( $l_d = 29 \text{ Å}$ ) адмолекули з атомами матриці): а – при температурі  $T=100$  К; б – при температурі  $T=300$  К.

Аналіз графічних залежностей  $\omega'(q)$ ,  $\omega''(q)$  (рис. 1, 2) показує, що у довгохвильовому наближенні ( $ql \ll \lambda$ ) як диполь-дипольна взаємодія адмолекул  $O_2$ , так і зростання температури субстрату приводять до збільшення ширини поверхневої акустичної фононної моди. Зокрема, при  $q=0,025 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $T=100 \text{ K}$  диполь-дипольна взаємодія адмолекул приводить до збільшення ширини акустичної моди на  $\Delta\Gamma = \Gamma_{2'2''} - \Gamma_{1'1''} = 20 \text{ мкеВ}$  та  $10 \text{ мкеВ}$  при  $l_d = 29 \text{ \AA}$ , відповідно, а при  $T=300 \text{ K}$  – на  $26 \text{ мкеВ}$  та  $12 \text{ мкеВ}$  відповідно.

Необхідно зазначити, що при адсорбції атомів лужних металів ( ) диполь-дипольна взаємодія адатомів на поверхні GaAs (110) приводить до зменшення енергетичної ширини поверхневої акустичної фононної моди.

Збільшення температури субстрату від  $100 \text{ K}$  до  $300 \text{ K}$  за наявності диполь-дипольної ( $V_{d-d} \neq 0$ ) та нелокальної взаємодії адатомів ( $l_d = 29 \text{ \AA}$ ) енергетична ширина фононної моди зростає на  $19 \text{ мкеВ}$  при  $q=0,025 \text{ \AA}^{-1}$ . Тоді як за відсутності нелокальної взаємодії ( ) значення енергетичної ширини зростає на  $40 \text{ мкеВ}$ . Таким чином, збільшення температури субстрату приводить до зростання енергетичної ширини акустичної фононної моди.

Отримані вирази для закону дисперсії поверхневої акустичної хвилі Релея  $\omega'(q, N)$  (23) та ширини фононної моди  $\omega''(q, N)$  (24) на адсорбованій поверхні кристалу можуть бути використані для оцінки середньої концентрації адсорбованих атомів та деформаційного потенціалу, попередньо вимірявши величини зміни дисперсії  $\Delta\omega'(q, N)$  та ширини фононної моди  $\Delta\omega''(q, N)$ , які є характеристиками статистично-шороховатої адсорбованої поверхні кристалу.

## 5. Висновки

1. З урахуванням диполь-дипольної взаємодії адсорбованих атомів та сил дзеркального зображення розвинуто в довгохвильовому наближенні теорію дисперсії поверхневих

акустичних квазірелеєвських хвиль в межах нелокальної пружної взаємодії адсорбованого атома з атомами матриці.

2. Показано, що як диполь-дипольна взаємодія адсорбованих молекул  $O_2$ , так і збільшення температури субстрату приводять до зростання енергетичної ширини поверхневої акустичної фононної моди.

3. Встановлено, що при адсорбції атомів лужних металів ( ) диполь-дипольна взаємодія адатомів на поверхні GaAs (110) приводить до зменшення енергетичної ширини поверхневої акустичної фононної моди.

## Список використаної літератури

- [1]. V. V. Kosachev, Yu. N. Gandurin, S. E. Murav'ev. Acoustic wave-based non-destructive control of the damaged layer and roughness parameters of the free surface of an anisotropic solid // *Phys. Solid State* 54 (10), pp. 2112-2116 (2012).
- [2]. G. L. Bir, G. E. Pikus, Symmetry and strain-induced effects in semiconductors. Wiley, NY. 484 p. (1974).
- [3]. V. A. Pogrebnyak, V. M. Yakovenko, I. V. Yakovenko. Electronic surface states at the irregular interface of media // *Phys. Lett. A* 209 (1-2), pp. 103-106 (1993); doi: 10. 1016/0375-9601(95)00791-2.
- [4]. R. M. Peleshchak, M. Ya. Seneta. Interaction between a surface acoustic wave and adsorbed atoms // *Condens. Mat. Phys.* 19 (4), pp. 43801:1-9 (2016); doi: 10. 5488/CMP. 19. 43801.
- [5]. R. M. Peleshchak, M. Ya. Seneta. Dispersion law and the dependence of the surface acoustic mode width on the concentration of adsorbed atoms // *Ukr. J. Phys.* 62 (3), pp. 256-262 (2017); doi: 10. 5488/CMP. 19. 43801.
- [6]. O. M. Braun, V. K. Medvedev. Interaction between particles adsorbed on metal surfaces // *Sov. Phys. Usp.* 32 (4), pp. 328-348 (1989); doi: 10. 1070/PU1989v032n04ABEH002700.
- [7]. V. I. Emel'yanov, K. I. Eremin. Threshold nucleation of a nanometer-scale periodic adatom structure with the participation of a static surface acoustic wave // *JETP Lett.*, 2002, 75 (2), pp. 98-101; doi:10. 1134/1. 1466485.
- [8]. R. M. Peleshchak, O. V. Kuzyk, O. O.



Dan'kiv. Temperature regimes of formation of nanometer periodic structure of adsorbed atoms in GaAs semiconductors under the action of laser irradiation // *Condens. Mat. Phys.* 18 (4), pp. 43801: (2015); doi: 10. 5488/CMP. 18. 43801.

[9]. S. Yu. Davydov, S. V. Troshin. Adsorption on metals and semiconductors: Anderson-Newns and Haldane-Anderson models // *Phys. Solid State* 49 (8), pp. 1583-1588 (2007); doi: 10. 1134/S1063783407080318.

[10]. J. P. Muscat, D. M. Newns. The interpretation of work-function variation in alkali chemisorption from the atomic viewpoint // *J. Phys. C: Solid State Phys.* 7, pp. 2630-2644 (1974).

[11]. F. D. M. Haldane, P. W. Anderson. Simple model of multiple charge states of transition-metal impurities in semiconductors // *Phys. Rev. B* 13, pp. 2553-2559 (1976); doi: 10. 1103/PhysRevB. 13. 2553

[12]. S. Yu. Davydov, A. V. Pavlyk. Calculation

of the variation in the work function caused by adsorption of metal atoms on semiconductors // *Semiconductors* 35 (7), pp. 796-799 (2001); doi: 10. 1134/1. 1385715.

[13]. S. Y. Davydov, V. A. Moshnikov, A. A. Fedotov. Gas adsorption on semiconducting oxides: A change in the work function // *Tech. Phys. Lett.* 30 (9), pp. 727-729 (2004); doi: 10. 1134/1. 1804577.

[14]. M. A. Krivoglaz, *X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals.* Springer, M. 466 p. (1996).

[15]. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Theory of elasticity.* Pergamon Press, NY. 165 p. (1970).

[16]. I. A. Kunin, *Nonlocal Theory of Elasticity.* Polish Academy of Sciences, W. 416 p. (1975).

[17]. V. E. Henrich, P. A. Cox, *The surface science of metal oxides.* Cambridge University Press, C. 478 p. (1994).

Стаття надійшла до редакції 08.05.2017 р.

PACS 81.07.Bc, 66.30.Lw

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.2.106606>

## INFLUENCE OF ADATOMS DIPOLE-DIPOLE INTERACTION ON THE DISPERSION LAW AND ACOUSTIC PHONON MODE WIDTH OF QUASI-RAYLEIGH WAVE

*M. Ya. Seneta, R. M. Peleshchak*

Department of general physics  
Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University  
Stryiska Str., 3, Drohobych, Lviv Region, 82100  
E-mail: marsen18@i.ua

### Summary

The dispersion theory of surface elastic acoustic wave is developed in the work within the long-wave approximation. This surface wave emission occurs the semiconductor GaAs (110) surface, which is covered by adsorbed atoms of metal (or molecules  $O_2$ ).

The dispersion equation and the acoustic phonon mode width of the quasi-Rayleigh wave are received. The dipole-dipole interaction and the interaction related by mirror image forces acting on the crystal surface, and the interaction between the adatoms and the substrate atoms and the surface acoustic wave through the deformation potential, are taken into account.

The dipole-dipole interaction between the adsorbed atoms of metal (or molecules of gas) on the surface of the semiconductor GaAs (110) was calculated within the generalized Haldane-Anderson model of semiconductor, which takes into account the electrostatic adatoms interaction.

A numerical calculation of the dependence of surface acoustic quasi-Rayleigh wave frequency on wave vector and the acoustic phonon mode width is realized.

The dipole-dipole interaction of O<sub>2</sub> molecules adsorbed on the GaAs (110) surface at the temperatures 100 K and 300 K is taking into account.

It is shown that the dipole-dipole interaction of adsorbed molecules O<sub>2</sub> on GaAs (110) and the temperature increase from 100 K to 300 K lead to the increase of the elastic surface acoustic mode width.

**Keywords:** dipole-dipole interaction, adatoms, mirror image forces, acoustic quasi-Rayleigh wave

PACS 81.07.Bc, 66.30.Lw

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2017.2.106606>

## ВПЛИВ ДИПОЛЬ-ДИПОЛЬНОЇ ВЗАЄМОДІЇ АДАТОМІВ НА ЗАКОН ДИСПЕРСІЇ ТА ШИРИНУ АКУСТИЧНОЇ ФОНОННОЇ МОДИ КВАЗІРЕЛЕЄВСЬКОЇ ХВИЛІ

*М. Я. Сенета, Р. М. Пелещак*

Кафедра загальної фізики  
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка  
вул. Стрийська, 3, Дрогобич, Львівська обл., 82100  
E-mail: marsen18@i.ua

### Реферат

У роботі в межах довгохвильового наближення розвинуто теорію дисперсії поверхневої пружної акустичної хвилі, що розповсюджується на поверхні напівпровідника GaAs (110), яка покрита адсорбованими атомами металу (або молекулами O<sub>2</sub>).

Отримані дисперсійне рівняння та ширина акустичної фононної моди квазірелеєвської хвилі з врахуванням диполь-дипольної взаємодії, взаємодії, пов'язаної з силами дзеркального зображення, прикладеними до поверхні кристала, та взаємодії адатомів з атомами підкладки і з поверхневою акустичною хвилею через деформаційний потенціал.

Диполь-дипольна взаємодія адсорбованих атомів металу (або молекул газу) на поверхні напівпровідника GaAs (110) розраховувалась у межах узагальненої моделі напівпровідника Халдейна-Андерсона, яка враховує електростатичну взаємодію адатомів.

Проведено числовий розрахунок залежності частоти поверхневої акустичної квазірелеєвської хвилі від хвильового вектора та ширини акустичної фононної моди з врахуванням диполь-дипольної взаємодії адсорбованих молекул O<sub>2</sub> на поверхні GaAs (110) при температурах 100 K і 300 K.

Показано, що як диполь-дипольна взаємодія адсорбованих молекул O<sub>2</sub> на GaAs (110), так і зростання температури від 100 K до 300 K приводить до збільшення ширини поверхневої пружної акустичної моди.

**Ключові слова:** диполь-дипольна взаємодія, адатоми, сили дзеркального зображення, акустична квазірелеєвська хвиля