

ная теория оптимального синтеза знаний в то же время может быть представлена как наиболее общая теория открытых систем.

Ключевые слова: термодинамика, открытые системы, синтез, квантовая механика, полиметрический анализ, энтропия, гибридная теория систем.

Trokhimchuck Petro. The Problem of Open Systems Theories Creation. The thermodynamic and statistical theory in the interpretations by I. Prigozhin and Yu. Klimontovich are analyzed. Quantum mechanics is considered from this point of view. It is shown that trends of open systems theories creation are related to the problem of creating of synthetic theories. For this case synergetics may be represented as one of candidates of the theory of open systems. It is concluded that polymetric analysis as a universal theory of optimal synthesis of knowledge at the same time may be represented as the most general theory of open systems.

Key words: thermodynamics, open systems, synthesis, quantum mechanics, polymetric analysis, entropy, hybrid theory of systems.

Стаття надійшла до редколегії
11.12.2014 р.

УДК 539.104

**Петро Трохимчук
Михайло Пеньковський
Геннадій Березюк**

Проблеми моделювання дифузійних процесів у релаксаційній оптиці

Обговорено основні проблеми моделювання дифузійних процесів релаксаційної оптики. Запропоновано модель фотостимульованої дифузії. Проаналізовано моделі дифузійних процесів у гомогенному й гетерогенному середовищах. Проведено порівняльний аналіз результатів моделювання та експериментальних даних.

Ключові слова: дифузія, фотостимульована дифузія, релаксаційна оптика, фазони, гетерогенні системи.

Постановка наукової проблеми та її значення. Проблема опису й моделювання дифузійних процесів релаксаційної оптики надзвичайно важлива для розуміння процесів, які проходять при незворотній взаємодії оптичного випромінювання з речовиною. Дифузійні моделі були використані для пояснення форми профілів розподілу донорних центрів в антимоніді й арсеніді індію. Було створено феноменологічну однодифузійну модель, яка ґрунтувалася на адаптованих рівняннях фото-ефекту; та напівфеноменологічну дводифузійну модель, яка ґрунтувалася на різних коефіцієнтах самодифузії та фотостимульованої дифузії компонент бінарних напівпровідників.

Однак для більш адекватного опису процесів дифузії та фотостимульованої дифузії під час релаксаційнооптичних процесів у таких напівпровідниках, як кремній і германій, дводифузійна модель в атомарному наближенні не може бути використана. Тут потрібно шукати підходи, які пов'язані зі структурними фазовими трансформаціями, що виникають при лазерному опроміненні. Зокрема, потрібно акцентувати увагу на таких аспектах, як внутрікластерна та кластерна дифузія, дифузійне фазоутворення тощо.

Отож **мета** статті – дослідити проблему опису та моделювання дифузійних процесів релаксаційної оптики в ширшому аспекті.

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження. Згідно з класифікацією релаксаційнооптичних процесів і явищ дифузійні процеси належать до вторинних динамічних (колективних) процесів. У випадку релаксаційної оптики дифузію треба розглядати в комплексі з процесами перевипромінювання, оскільки обидва ці процеси пов'язані з переносом і перерозподілом енергії взаємодії [1–12].

При структурному підході маємо враховувати такі типи дифузії: фотостимульована дифузія «свелінгового» типу, пов'язана з надлишком фотоіндукованого від'ємного заряду в приповерхневій області поглинання випромінювання, у зв'язку із цим відбувається перерозподіл і хімічних компонент напівпровідника, і зміна його структури по глибині опроміненого матеріалу за рахунок фотоіонізаційних, включаючи плазмові, процеси; релаксаційна дифузія, пов'язана з тепловою релаксацією новоутворених структур та їх перехід у більш стабільний стан [11; 12].

© Трохимчук П., Пеньковський М., Березюк Г., 2014

Фотостимульовану дифузію можна віднести ще до реактивної дифузії [1; 3; 11; 12]. Прикладами фотостимульованої реактивної дифузії можуть бути профілі розподілу донорних центрів в антимоніді й арсеніді індію, які були отримані після опромінення імпульсами рубінового лазера (тривалість імпульсу 20 нс, довжина хвилі опромінення 0,6943 мкм), що наведені на рис. 1.

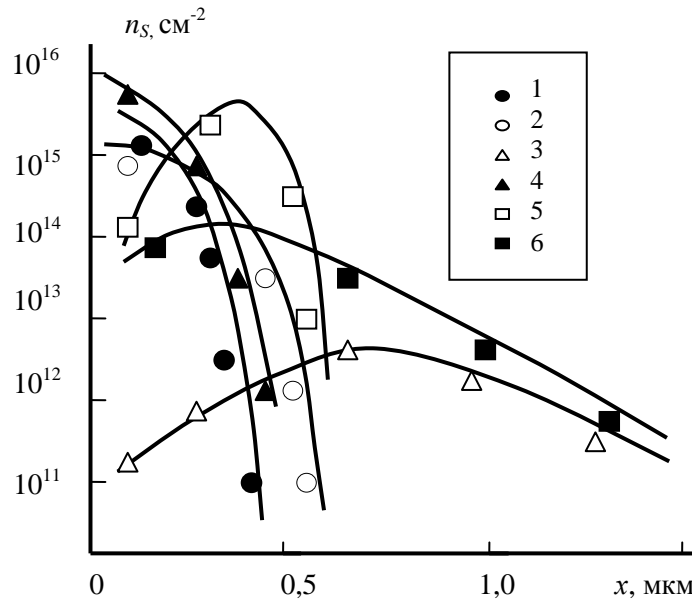


Рис. 1. Профілі розподілу шарової концентрації донорних центрів в інверсійних шарах InSb та InAs, отриманих після лазерного опромінення з різною густиною енергії в імпульсі: 0,07 (1); 0,096 (2); 0,16 (3); 0,16 (4); 0,25 (5); 0,5 Дж·см⁻² (6). 1–3 – InSb, 4–6 – InAs

З рис. 1 випливає, що для виникнення дифузійних процесів потрібна більша густина енергії опромінення (криві 3, 5, 6), ніж для генерації максимально можливої концентрації донорних центрів у приповерхневому шарі (криві 1, 2, 4).

Для порівняння наведемо профілі розподілу донорних центрів в антимоніді індію, які були отримані після опромінення мілісекундними імпульсами рубінового лазера та серіями імпульсів неодимового лазера. Ці дані наведені на рис. 2.

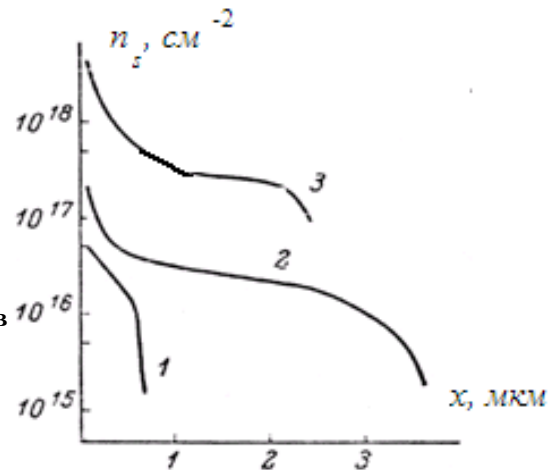


Рис. 2. Профілі розподілу об'ємної концентрації електронів після лазерного опромінення. 1, 2 – рубіновий лазер (тривалість імпульсу 5–6 нс, довжина хвилі 0,6943 мкм); 3 – YAG:Nd лазер (тривалість імпульсу 10 нс, довжина хвилі 1,064 мкм, частота слідування імпульсів 12,5 Гц). Густина енергії в імпульсі, Дж/см²: 1 – 5; 2 – 40

Як видно з форм кривих 2 та 3, вирішальну роль у формуванні хвостів профілів розподілу донорних центрів відіграють процеси перевипромінювання: кут нахилу «поличок» кривих 2 та 3 відповідає коефіцієнтові поглинання випромінювання з енергією кванта рівній ширині забороненої зони антимоніду індію – 0,18 Ев.

Про роль реакційної та релаксаційної дифузії можна судити з вигляду фотогенерованих поверхневих наноструктур. На рис. 3 наведено наногорби отримані опроміненням серіями наносекундних

імпульсів другої гармоніки неодимового лазера (тривалість імпульсу 10 нс, довжина хвилі опромінення 0,532 мкм, частота слідування імпульсів 12,5 Гц) на кремнії покритого плівкою окису кремнію [11; 12].

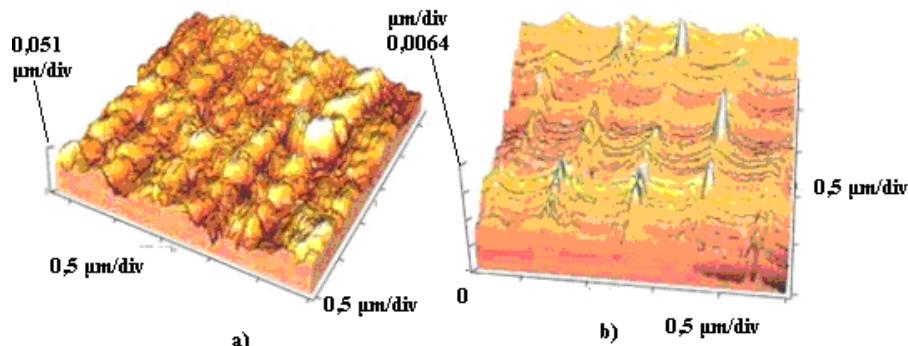


Рис. 3. Зображення в атомному силовому мікроскопі: (а) поверхні SiO_2 після опромінення структури SiO_2/Si другою гармонікою Nd:YAG лазера з густиною потужності $I = 2,0 \text{ MBm/cm}^2$ та (б) поверхня Si після видалення шару SiO_2 плавиковою кислотою [12]

На рис. 4 наведено поверхневі наноструктури, отримані на поверхні кремнію після опромінення його через воду серіями імпульсів фемтосекундного лазера [12].

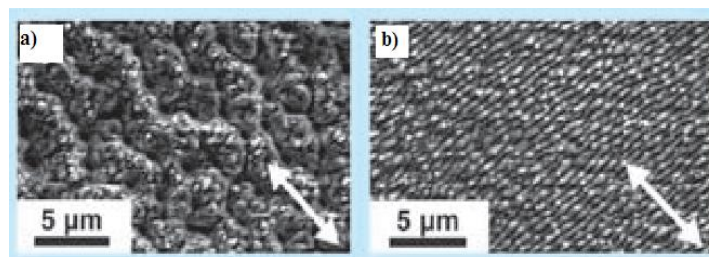


Рис. 4. Упорядковані структури, генеровані на поверхні кремнію після лазерного опромінення через шар води (стрілка в нижньому правому кутку рисунків показує напрям поляризації лазерного випромінювання); тривалість імпульсу 100 фс, число імпульсів – 200, довжина хвилі – 0,8 мкм, густина енергії опромінення а) 25 кДж/м^2 , б) 5 кДж/м^2 [12]

На рис. 5 наведено структури рис. 4, додатково опромінені серіями імпульсів того ж фемтосекундного лазера [12].

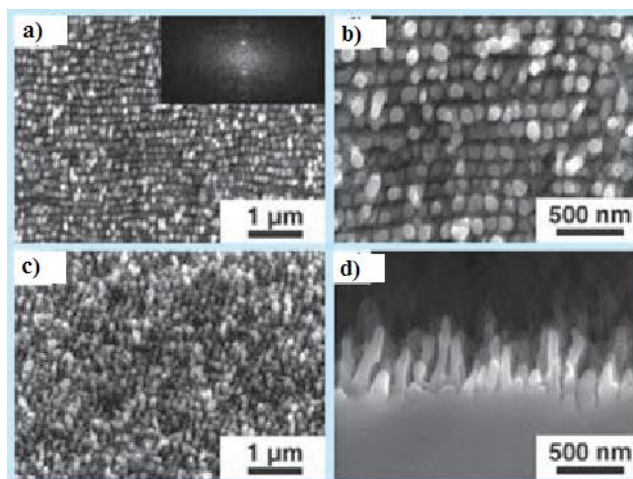


Рис. 5. Наноколони, які генеруються на поверхні структур рис. 3 (тривалість імпульсу 100 фс, число імпульсів – 200, довжина хвилі – 0,8 мкм, густина енергії опромінення $0,5 \text{ кДж/м}^2$): а) та б) поворот площини поляризації на 90° , б) поворот площини поляризації на 45° , д) поздовжній переріз наноколон. На вкладці до рис. 4 а – Фур'є-зображення структури [12]

Варто зазначити, що, на відміну від наносекундного режиму опромінення, висота наноколон сягає 400–450 нм. Це підтверджує гіпотезу про електромагнітну природу утворення поверхневих наноструктур за рахунок електромагнітного свелінгу поверхні.

Загалом дифузійні процеси можна віднести до релаксаційних процесів [10]. Окрім дифузійних процесів може бути ще релаксація дебаївська, дисипація енергії, недебаївська релаксація, пластична релаксація, різного виду електромагнітні релаксації [10]. Такий поділ доречний із того погляду, що електромагнітні процеси проходять зі швидкістю на три-чотири порядки більшою ніж теплові.

При цьому фотостимульована дифузія може бути віднесена й до електромагнітної релаксації. Взагалі ж процес фотостимульованої дифузії пов'язаний із фотоіонізацією відповідних центрів, що збільшує або зменшує їх рухливість.

Повернемося тепер до одnodифузійної та дводифузійної моделей, які використовують для пояснення експериментальних результатів, наведених на рис. 1.

Наведемо детальніше цю модель та покажемо, як її можна використовувати для опису перерозподілу домішок акцепторного чи донорного типу в напівпровідниках. До експериментальних результатів, які наглядно демонструють такі процеси, слід віднести утворення δ -шарів германію в евтектиках кремній германій при лазерному опроміненні [11; 12]. Пояснення цих результатів досить просте при співрозмірному співвідношенні атомів германію та кремнію в плівці при підсвітці її лазерним випромінюванням у режимах далеких від лазерного розпилення матеріалу проходить фізично неоднорідний свелінг, решітка германію має більші розміри, ніж решітка кремнію. Тому в цьому випадку отримуємо чітку фізико-хімічну картину розподілу елементів за хімічними властивостями: атоми германію за рахунок меншого значення хімічних зв'язків та більшої сталої ґратки виходять на поверхню й утворюють δ -шари.

Експериментальні результати про перерозподіл домішок при лазерному опроміненні можуть бути пояснені аналогічно до попереднього випадку. Для цього використаємо формули для динамічного (дифузійного у цьому разі наближення). Будемо вважати, що коефіцієнти дифузії та самодифузії основних компонент напівпровідника та домішок різні:

$$N_{D_i} = \frac{\eta x(1-R)I_0 \tau'}{hvL_i \tau_r} \exp\left(-\frac{x}{L_i}\right), \quad i \in (\text{Осн. комп., домішки}), \quad (1)$$

де η – ефективність фотоіонізації, що приводить до утворення донорних центрів; x – глибина, на якій визначається концентрація; R – коефіцієнт відбивання світла; I_0 – густина енергії опромінення; τ' час життя збудженого стану; hv – енергія кванта випромінювання, що призводить до незворотних змін; L_i – дифузійна довжина пробігу відповідного атома; τ_r – термодинамічний час релаксації системи.

Згідно з [1–12] температурна залежність коефіцієнтів дифузії задається за співвідношенням

$$D_i = D_{0i} e^{-Q_i/kT}, \quad i \in (\text{Осн. комп., домішки}), \quad (2)$$

де D_{0i} – коефіцієнт дифузії відповідних атомів середовища до опромінення; Q_i – енергія активації дифузії чи самодифузії відповідного компонента; kT – теплова енергія.

Розглянемо докладніше вплив фотоіонізації на процеси дифузії. Дифузія пов'язана зі збільшенням рухливості відповідних компонент матеріалу. При фотоіонізації як правило ця рухливість збільшується, хоча й бувають винятки, коли фотоіонізація приводить до більш стабільних станів (лазерний відпал йонно-імплантованих шарів матеріалу випромінюванням з енергією кванта менше ширини забороненої зони).

Для обох цих випадків формулу (2) для коефіцієнтів дифузії та самодифузії можна записати у вигляді:

$$D_i = D_{0i} e^{-\frac{Q_i \pm khv}{kT}}, \quad i \in (\text{Осн. комп., домішки}). \quad (3)$$

Тут знак «–» відповідає збільшенню рухливості компонент відповідного матеріалу, а знак «+» – відповідно зменшенню рухливості. Коефіцієнт k , загалом, залежить від режимів опромінення. Так, скажімо, для опромінення антимоніду індію випромінюванням рубінового лазера його можна прийняти рівним $\sim 1/4,3$, для арсеніду індію $\sim 1/3,7$, тоді як для випадку опромінення випромінюванням CO_2 -лазера, відповідно, $\sim 1,8$ для антимоніду індію та $\sim 3,6$ для арсеніду індію. Співвідношення (3) може бути використане для визначення вкладу фотоіонізації в дифузійні процеси. Зокрема для визначення енергії активації дифузії та її зміни.

У роботах [5; 7–9] ураховано лише «теплову» частину формули (3) та використовувалась формула (2). Однак для більш адекватного опису експериментальних результатів із фотостимульованої дифузії ми повинні враховувати й процеси фотоіонізації. Так, при зменшенні енергії активації обидва процеси (фотоіонізації та нагріву) ведуть до збільшення коефіцієнту дифузії. Якщо ж енергія активація і температура збільшуються, тоді ми можемо мати або протилежний ефект або ж незмінність коефіцієнту дифузії.

При лазерно-індукованому утворенні наногорбів та нанокolon (наностовбів) поряд із дифузією «працюють» електромагнітні процеси фазових трансформацій і перерозподілу та переносу опроміненого матеріалу, включаючи й домішки. Якщо домішка є більшим акцептором, як сурма чи миш'як відповідно в антимоніду індію та арсеніду індію, то вона буде міститись у наногорбах, причому в при

вершинній області її буде більше, ніж в нижній частині. Для донорної домішки буде все навпаки, вона переважно мігруватиме в об'єм матеріалу. Тому і з цих міркувань для лазерного відпалювання іонноімплантованих шарів антимоніду й арсеніду індію слід вибирати випромінювання, що не іонізує базового матеріалу.

Вплив іонізації можна враховувати через довжину дифузії, яка пов'язана з коефіцієнтом дифузії та часом релаксації за допомогою наступного співвідношення

$$L_i = \sqrt{D_i \tau_r}. \quad (4)$$

Для випадку лазерного опромінення можна скористатися ланцюжком часів релаксації, побудованого для каскадної моделі поетапного послідовного збудження відповідного типу хімічних зв'язків у режимі насичення збудження [11; 12].

Процеси утворення поверхневих та об'ємних наноструктур також можуть бути віднесені і до реакційної дифузії, і до електромагнітної та теплової релаксації.

Висновок. Отже, у запропонованій роботі проведено аналіз проблеми моделювання дифузійних процесів у релаксаційній оптиці. Наведено модель фотостимульованої дифузії та показано її використання для опису різного виду дифузійних процесів.

Джерела та література

1. Болтакс Б. И. Диффузия в полупроводниках / Б. И. Болтакс. – М. : Физматлит, 1961. – 463 с.
2. Вавилов В. С. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках / В. С. Вавилов, А. Е. Кив, О. Р. Ниязова. – М. : Наука, 1981. – 388 с.
3. Джафаров Т. Д. Радиационно-стимулированная диффузия в полупроводниках / Т. Д. Джафаров. – М. : Энергоатомиздат, 1991. – 287 с.
4. Маннинг Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах / Дж. Маннинг. – М. : Мир, 1971. – 278 с.
5. Моделювання процесів релаксаційної оптики в арсеніді індію / П. Трохимчук, Д. Петрович, Г. Березюк, М. Пеньковський // Наук. вісн. Східноєвроп. нац. ун-ту ім. Лесі Українки. Сер. : Фізичні науки. – 2014. – № 15 (292). – С. 55–59.
6. Стафеев В. И. Элементарные структурные единицы конденсированных фаз и связанные с их электрическим зарядом явления / В. И. Стафеев // Прикладная физика. – 2005. – № 4. – С. 31–38.
7. Трохимчук П. Моделювання процесів релаксаційної оптики / П. Трохимчук, М. Пеньковський // Пр. Наук. т-ва ім. Т. Шевченка. – Т. 29 : Фізичний збірник. – Львів : [б. в.], 2011. – Т. 8. – С. 198–204.
8. Трохимчук П. П. Проблема моделювання дифузійних процесів та процесів переносу випромінювання в релаксаційній оптиці / П. П. Трохимчук, І. П. Дмитрук, М. С. Пеньковський // Наук. вісн. Волин. нац. ун-ту ім. Лесі Українки. Сер. : Фізичні науки. – 2012. – № 16 (241). – С. 63–67.
9. Трохимчук П. П. Проблема моделювання фотостимульованої дифузії в бінарних напівпровідниках / П. П. Трохимчук // Наук. вісн. Волин. нац. ун-ту ім. Лесі Українки. Сер. : Фізичні науки. – 2010. – № 29. – С. 52–55.
10. Hanechok G. Relaksacje migracyjne w ciałach stałych / G. Hanechok. – Katowice : Wyd-wo un-tu Śląskiego, 2011. – 228 s.
11. Trokhimchuck P. P. Foundations of Relaxed Optics / P. P. Trokhimchuck. – Lutsk : Vezha, 2011. – 627 p.
12. Trokhimchuck P. P. Nonlinear and Relaxed Optical Processes. Problems of interactions / P. P. Trokhimchuck. – Lutsk : Vezha-Print, 2013. – 280 p.

Трохимчук Петр, Пеньковский Михаил, Березюк Геннадий. Проблемы моделирования диффузионных процессов релаксационной оптики. Обсуждаются проблемы моделирования процессов релаксационной оптики. Предложена модель фотостимулированной диффузии. С помощью этой модели описаны процессы релаксационной оптики в антимониде и арсениде индия. Также проанализированы другие модели диффузионных процессов в однородной и неоднородной среде. Проведен сравнительный анализ других методов моделирования и экспериментальных результатов.

Ключевые слова: диффузия, фотостимулированная диффузия, релаксационная оптика, фазоны, неоднородные системы.

Trokhimchuck Petro, Pen'kovskiy Mykhaylo, Berezyuk Gennadiy. Problems of Modeling of Diffusive Processes of Relaxed Optics. Problems of modeling of diffusive processes of Relaxed Optics is discussed. Models of diffusive processes in homogeneous and heterogeneous matter are analyzed. Model for photostimulated processes of diffusivity is represented. Methods of this model are used for modeling of relaxed optical processes in indium antimonite and indium arsenide. Comparative analysis of other methods of modeling and other experimental data is represented too.

Key words: diffusion, photostimulated diffusion, Relaxed Optics, phasons, heterogeneous systems.

Стаття надійшла до редколегії
22.12.2014 р.