

УДК 621.315.592

## СИНЕРГЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РОСТА НАНОСТРУКТУР В ОБЪЕМЕ МЕЗОФАЗЫ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

С. Зайнабидинов, Б. Аскаров, Ш. Акбаров

*Виброн эффектлари билан боғлиқ номувозанат шароитида нанозаррачаларни ўсиш жараёнида янги янгица ёндашув таклиф этилган. Атомларнинг локал гуруҳида вужудга келувчи нотурғунликни ўрганишнинг бир параметрлик модели тузилган. Нанозаррачанинг чизиқли ўлчами ва электрон структурадаги энергия тирқиши ўртасидаги боғланишни акс эттирувчи аналитик ифода топилган. Кремний ва германий мезофазаси ҳажмида тетраэдрик тузилмаларнинг ҳосил бўлиш имконияти кўрсатилган.*

**Калит сўзлар:** кремний, виброн эффекти, атом тузилмаларнинг ўзгариши, нанотузилма, мезофаза, энергия тирқиши, нотурғунлик, бифуркация.

*Предложен новый подход для изучения процессов роста наночастиц в неравновесных условиях, связанных вибранными эффектами. Построена однопараметрическая модель изучения неустойчивости атомных перестроек в локальной группе атомов. Найдена аналитическая связь между энергетической целью электронной структуры и линейным размером наночастицы. Показана возможность образования тетраэдрических структур в объеме мезофазы кремния и германия.*

**Ключевые слова:** кремний, вибранный эффект, атомные перестройки, наноструктура, мезофаза, энергетическая цель, неустойчивость, бифуркация.

**Введение.** Разработка новых методов получения наноструктур становится актуальной задачей в микроэлектронике. В данной работе приводятся результаты исследования процессов самоорганизации наноструктур в мезофазе кремния и германия. Найдены основные параметры, характеризующие устойчивость структуры и построена модель для изучения процесса самоорганизации в кремнии и германии.

Технология выращивания монокристаллов развивается по пути получения наноструктур с новыми свойствами. Эпитаксиальный рост на поверхности гомоатомных полупроводников позволил синтезировать пленки с уникальными фотоэлектрическими свойствами [1-4]. Планирование экспериментов в этом направлении действительно требует организации целенаправленного поиска новых методов исследования.

Целью данной работы является определение электрон-ионных параметров, характеризующих атомные перестройки в объеме мезофазы растущего кристалла. Через него проходит непрерывный поток тепловой энергии и химических элементов, что поддерживает электрон-ионную систему в неравновесном состоянии по отношению к внешней среде.

В данной работе предлагается новый подход моделирования процессов атомных перестроек в объеме мезофазы на основе методов синергетики [5]. Мезофаза формируется в объеме между жидкой и твердой фазами и находится в нерав-

новесном состоянии. Если атомы в жидкой фазе находятся в состоянии интенсивного теплового движения, то твердая фаза характеризуется их упорядоченным расположением и малыми колебаниями от положения равновесия. Атомная подсистема в объеме мезофазы находится в неустойчивом состоянии и возникают новые каналы атомных перестроек, приводящие к спонтанному формированию наноструктур.

**Вибронные эффекты в равновесных и неравновесных условиях в объеме мезофазы.** Если процесс роста наноструктуры происходит в объеме мезофазы находящегося в условиях термодинамического равновесия с внешней средой, то процессы атомных перестроек изучают путем минимизации свободной энергии системы:  $F = E - TS$ , где  $E$  - энергия,  $T$  - температура,  $S$  - энтропия. Свободная энергия описывает баланс между упорядочивающей величиной -  $E$ , и разупорядочивающей -  $TS$ . При низких температурах упорядоченная структура определяется минимизацией энергии электронной подсистемы. При малых смещениях локальной группы атомов из положения равновесия можно ввести функцию, называемую функцией производства энтропии:  $P(X) \geq 0$ , Этой неотрицательной функции присуще свойство потенциала. При отклонении от состояния равновесия ( $P=0$ ), необратимые процессы сопровождаются диссипацией энергии. В таких условиях, если система удерживается в слабо неравновесном состоянии под воздействи-

ем внешней среды (жидкая фаза), то её стационарное состояние определяют из следующего соотношения:  $dP(X)/dt = 0$ . В таких условиях свойства слабонервновесных систем качественно неотличимы от свойств равновесных систем. Стационарное состояние слабонервновесной системы является асимптотически устойчивым. Согласно теореме Гленсдорфа и Пригожина [6] существует критическое значение величины отклонения от состояния равновесия, при превышении которого стационарное состояние становится неустойчивым. Согласно синергетике, термодинамическая ветвь претерпевает бифуркацию в точке неустойчивости, благодаря существующим в системе нелинейностям. В химических системах нелинейности возникают из-за наличия стадии автокатализа и определенных ограничений, налагаемых параметру порядка – концентрации наиболее медленной компоненты реагентов. Таким образом, за термодинамическим порогом самоорганизации возникает область синергетики, где огромное количество объектов подчиняется одному или нескольким параметрам порядка, управляющим процессами самоорганизации в иерархически устроенных в различных пространственных и временных масштабах структурах. В нашем подходе параметром порядка является вибронно лабилизированная колебательная мода локальной группы атомов, поступающих из жидкой фазы.

Влияние внутренних и внешних флуктуаций на процессы самоорганизации существенно различается.

Внутренние флуктуации. Амплитуда внутренних флуктуаций системы существенно зависит от их  $V$ -объема. Эта зависимость в общем виде описывается степенной функцией следующего вида:  $A = V^\gamma$ . В устойчивом состоянии степень этой функции равна:  $\gamma = -1$ , а в точке бифуркации:  $\gamma = -1/2$ . Так что в обоих случаях с уменьшением объема амплитуда флуктуаций возрастает.

где уровни энергии  $\varepsilon_1$  - ВЗМО (верхняя занятая молекулярная орбиталь) и  $\varepsilon_2$  - НСМО (нижняя свободная молекулярная орбиталь),  $\Delta = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$  энергетическая щель,  $Q$  - координата колебательных мод ЛГА,  $k$  - силовая и  $c$  - вибронная константы химической связи между атома-

ми. Если в больших системах они становятся пренебрежимо малыми, то в наномасштабных объектах их роль возрастает.

Внешние флуктуации. В неравновесных условиях внешние флуктуации, обусловленные случайностью внешней среды, существенно влияют на процессы самоорганизации. Отсутствует обратная зависимость амплитуды от размера системы, присущая внутренним флуктуациям. С увеличением дисперсии внешних флуктуаций возникает новый тип бифуркации, отсутствующий в детерминированном описании динамической системы. Воздействие внешнего шума зависит от состояния системы. В отличие от Ланжевена, рассмотревшего влияние аддитивного шума, Хорстхемке и Лефевр [7] показали, что в нелинейных системах с мультипликативным шумом возникают качественно новые состояния, отсутствующие при их детерминированном описании. В таких системах амплитуды флуктуации становятся пропорциональными объему занимаемой системой. Детерминированная нелинейная система при воздействии быстро флуктуирующей среды не только подстраивается под её средние свойства, а проявляет состояние запрещенного при отсутствии такого воздействия. С позиций синергетики процессы атомных перестроек в мезофазе определяются от характера взаимовлияния двух подсистем – электронной и ионной в равновесных и неравновесных условиях в объеме мезофазы.

Потенциальный рельеф атомных перестроек в объеме мезофазы. В конденсированных средах электронная подсистема быстро следует за движением атомной подсистемы. В рамках вибронной концепции [8] потенциальный рельеф атомных перестроек описывается с учетом эффектов перемешивания электронных состояний локальной группы атомов (ЛГА), возникающих в мезофазе [9]. В двухуровневом приближении потенциальный рельеф вдоль координаты колебательных мод ЛГА описывается следующим аналитическим выражением:

$$\varepsilon = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) / 2 + (1/2)kQ^2 - (1/2)\sqrt{\Delta^2 + 4c^2Q^2} \quad (1),$$

ми. Для выявления качественных особенностей изменения потенциального рельефа при малых смещениях  $\tilde{Q} = Q - Q_0$  ЛГА разложим адиабатический потенциал (1) в ряд Тейлора в окрестности точки равновесия ЛГА -  $Q_0$ . Ограничиваясь членом четвертого порядка, напишем следующее выражение для адиабатического потенциала:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + (k - 2c^2 / \Delta)\tilde{Q}^2 + \frac{24c^4}{\Delta^3}\tilde{Q}^4 \quad (2)$$

Экстремумы потенциала определяются из условия  $d\varepsilon(Q)/dQ = 0$ ,

$$\frac{d\varepsilon}{dQ} = (k - 2c^2 / \Delta)\tilde{Q} + \frac{48c^4}{\Delta^3}\tilde{Q}^3 = 0 \quad (3)$$

В точке  $Q=0$ , потенциал (2) имеет следующие три качественно различных формы: 1) при выполнении следующего условия:  $k > (2c^2 / \Delta)$  в точке  $Q=0$ , потенциал (2) обладает минимумом; 2) если выполняется следующее условие:  $k < (2c^2 / \Delta)$ , то потенциал в данной точке имеет максимум. И, наконец, 3) при выполнении следующего условия:  $k = (2c^2 / \Delta)$  возникает маргинальная форма потенциала. Если ограничиться гармоническим приближением, то потенциал (2) можно представить в следующем виде:  $\varepsilon = (k - 2c^2 / \Delta)\tilde{Q}^2$ . Атомная перестройка ЛГА идет вдоль координаты потенциального рельефа с наименьшей крутизной, т.е. происходит эффект вибронной лабилизации атомных перестроек ЛГА. Используя методы теории катастроф [10], зависимость экстремальных точек адиабатического потенциала от его параметров можно представить в следующем виде

(см. рис.2):  $\tilde{Q}^2 + u_1 = 0$ ; здесь  $u_1 = \frac{\Delta^3}{48 \cdot c^4} (k - \frac{2c^2}{\Delta})$  является управляющим параметром модели.

Бифуркационная диаграмма (рис.2.) показывает, что для анализа устойчивости ЛГА является достаточным использование одного управляющего параметра –  $u_1$ . При  $u_1 > 0$  потенциал имеет один единственный минимум (устойчивое состояние атомной подсистемы) в точке  $\tilde{Q} = 0$ . Колебание атомов происходит в окрестности положения равновесия  $Q_0$ . При  $u_1 = 0$  происходит бифуркация равновесной конфигурации ЛГА, т.е. происходит раздвоение положения равновесия совокупности связанных атомов. При  $u_1 < 0$ , потенциал имеет один максимум (неустойчивое состояние атомной подсистемы) в точке  $\tilde{Q} = 0$ . и два минимума (устойчивое состояние атомной конфигурации). Координаты минимумов потенциала определяются из следующего соотношения:  $\tilde{Q} = \pm\sqrt{-u_1}$ .

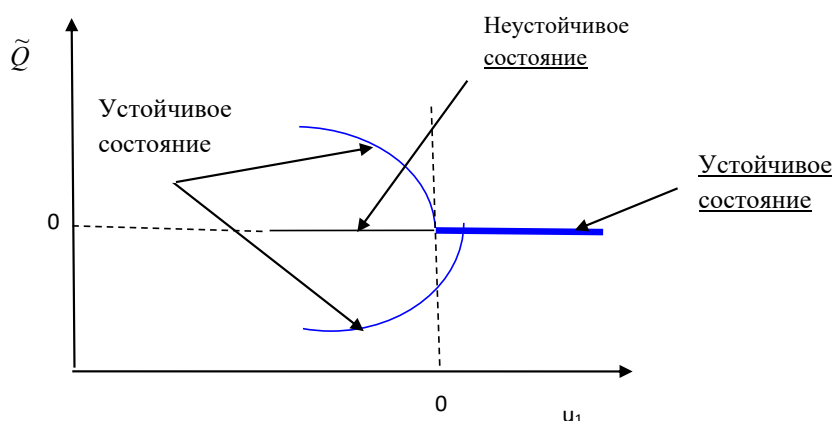


Рис.2. Бифуркационная диаграмма.

Таким образом, в рамках данного подхода исследование устойчивости ЛГА можно свести к изучению одного управляющего параметра –  $u_1$ , который зависит от энергетической щели меж-

ду уровнями энергии ВЗМО и НСМО. Если ЛГА представить в виде линейной цепочки из  $n$  атомов, получаем следующие соотношения для определения энергетической щели:

а) для четного  $n$ :

$$\Delta_g(n) = -4\beta \sin\left(\frac{\pi}{2n+1}\right); \quad (4)$$

б) для нечетного  $n$ :

$$\Delta_u(n) = -2\beta \sin\left(\frac{\pi}{n+1}\right); \quad (5)$$

Здесь  $\beta$  – обменная энергия взаимодействия электронов ЛГА;  $n$  – число связанных атомов в линейной цепочке ЛГА. Длина цепочки равна  $L=nr$ ; где  $r$  – межатомное расстояние.

Из (4) и (5) видно, что энергетическая щель электронного спектра сужается с увеличением  $n$ , что приводит к вибронной неустойчивости при выполнении условия:  $\Delta < 2c^2 / k$ . Следовательно, вибронная неустойчивость ограничивает линейный размер ЛГА мезофазы. Характерный линейный размер полупроводниковых наночастиц лежит в интервале 1-100 нм. Межатомное расстояние для кристалла кремния и германия равно 2.39 и 2.43 (Å<sup>0</sup>), соответственно. Тогда для нижнего предела  $n_{\min}$  получаем 4 атома для обоих кристаллов. Для алмаза  $n_{\min} = 6$ . Это показывает, что виброн-

ные эффекты способствуют образованию тетраэдрических структур в мезофазе для кремния и германия и невозможность образования таких структур для алмаза.

Закключение. Предложен новый подход для изучения процессов роста наночастиц в неравновесных условиях, связанных с вибронными эффектами. Построена однопараметрическая модель изучения неустойчивости атомных перестроек в локальной группе атомов. Найдена аналитическая связь между энергетической щелью электронной структуры и линейным размером наночастицы. Показана возможность образования тетраэдрических структур в объеме мезофазы кремния и германия из-за перемешивания электронных состояний ЛГА в неравновесных условиях.

### Литература:

1. Baraton M.I. Synthesis, Functionalization, and Surface Treatment of Nanoparticles. Los-Angeles, CA: American Science Publishers, 2002. – 299 p.
2. Teshaboyev A.T., Zaynobidinov S., Ismoilov Q.A., Ermatov Sh.A., Abduazimov V.A. Nanozarralar fizikasi, kimyosi va texnologiyalari. – Toshkent: Kamalak-Press, 2014. – 368 b.
3. Зайнобидинов С. Кремний в современном материаловедении и электронном приборостроении / Материалы республиканской конференции “Рост, свойства и применение кристаллов”. – Нукус, 2005. – С. 7 – 10.
4. Зайнобидинов С., Бахадырханов М.К. Компенсированный кремний – новый класс полупроводниковых материалов (обзор) // Узбекский физический журнал, 1991. – №6. – С. 5 – 22.
5. Хакен Г. Синергетика. – Москва: Мир. 1980. – 406 с.
6. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного. – Москва: Мир, 1990. – 344 с.
7. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. – Москва: Мир, 1987. – 397 с.
8. Bersuker, I.B. The Jahn–Teller Effect and Vibronic Interactions in Modern Chemistry. New York: Plenum press, 1984. – 320 p.
9. Аскарлов Б. Нанотузилмалардан иборат тизимни синергетикавий моделлаштириш / Республика илмий-амалий анжумани материаллари. – Андижон, 2018 йил 20 – 21 апрель. – Б. 106 – 107.
10. Arnold V.I. Catastrophe Theory. – Moscow: Nauka, 1983. – 80 p.

## SYNERGETIC SIMULATION OF NANOSTRUCTURE GROWTH PROCESSES IN THE VOLUME OF MESOPHASE OF SILICON AND GERMANIUM

S.Z. Zainabidinov<sup>1</sup>, B. Askarov<sup>2</sup>, Sh.K. Akbarov<sup>1</sup>

*Ilmiy xabarnoma. Fizika-matematika tadqiqotlari – Scientific Bulletin. Physical and Mathematical Research.* 2020. 1(3). 95 – 99.

<sup>1</sup>Andijan State University, Andijan, 170100, str. University, 129 (Uzbekistan). E – mail: agsu\_info@edu.uz

<sup>2</sup>Andijan Machine Building Institute, Andijan, 170119, str. Bobur Shokh, 56 (Uzbekistan). E – mail: dr.asqarov@mail.ru

**Key words:** silicon, vibronic effect, atomic rearrangements, nanostructure, mesophase, energy gap, instability, bifurcation.

A new approach is proposed for studying the processes of nanoparticle growth under nonequilibrium conditions associated with vibronic effects. The adiabatic potential for studying atomic rearrangements of a local group of atoms is constructed. The nanoparticle growth process was studied by the method of synergetic modeling, taking into account the anharmonic terms in the adiabatic potential. Based on the methods of catastrophe theory, the

conditions for the instability in a local group of atoms are found. It is shown that the number of bound atoms in a local group affects the stability of the local group of atoms. An analytical dependence was found between the energy gap in the electronic structure of a linear chain on its length. It is shown that with an increase in the interatomic distance in the linear chain of the local group of atoms, the energy gap narrows in its electronic spectrum. Using this vibronic effect, the analysis of the possibility of spontaneous atomic rearrangements in the volume of the mesophase of diamond, silicon and germanium is carried out. The possibility of the formation of tetrahedral nanostructures for silicon and germanium, and a hexagonal nanostructure for carbon in the volume of their mesophase is shown.

By using the concepts of the vibronic theory and the principles of synergetics, a new method for modeling the processes of formation of nanostructures has been developed. In the framework of the quasi-one-dimensional approximation, a criterion is found for the formation of nanostructures of a certain symmetry in the bulk of the mesophase of the growing crystal. Synergetic modeling opens up new possibilities in semiconductor microelectronics and nanotechnology in instrument making.

### References:

1. Baraton, M. I. (2002) *Synthesis, Functionalization, and Surface Treatment of Nanoparticles*. Los-Angeles, CA: American Science Publishers.
2. Teshaboyev, A.T., Zaynobidinov, S., Ismoilov, Q.A., Ermatov, Sh.A., Abduazimov, V.A. (2014) *Nanozarralar fizikasi, kimyosi va texnologiyalari [Physics, Chemistry of Nanoparticles and Nanotechnology]*. Toshkent: Kamalak-Press.
3. Zaynobidinov, S. (2005) *Kremnij v sovremennom materialovedenii i elektronnom priborostroenii [Silicon in modern materials science and electronic instrumentation] "Rost, svoystva i primeneniye kristallov"*. [Growth, properties and application of crystals]. Materials of the Republican Conference. Nukus. P. 7-10.
4. Zaynobidinov, S., Bahadirhanov, M.K. *Kompensirovannyj kremnij – novyj klass poluprovodnikovyh materialov [Compensated Silicon – a new class of Semiconductor Materials]*. *Uzbekskij fizicheskij zhurnal*. 6. Pp. 5-22.
5. Haken, G. (1980) *Sinergetika [Synergetics]*. Moscow: Mir.
6. Nikolis, G., Prigozhin, I. (1990) *Poznanie slozhnogo [Knowledge of the complex]*. Moscow: Mir.
7. Horsthemke, V., Lefever R. (1987) *Inducirovannyye shumom perekhody [Noise-Induced Transitions]*. Moskva: Mir.
8. Bersuker, I.B. (1984) *The Jahn-Teller Effect and Vibronic Interactions in Modern Chemistry*. New York: Plenum press.
9. Askarov, B. (2018) *Nanotuzilmalardan iborat tizimni sinergetikaviy modellashtirish [Synergetic modeling of nanostructured systems]*. Respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari [Materials of the Republican scientific-practical Conference]. Andijan. April 20-21. Pp.106-107.
10. Arnold, V.I. (1983) *Catastrophe Theory*. Moscow: Nauka.

*Муаллифлар ҳақида маълумот:*

**Зайнабидинов Сирожиддин Зайнабидинович** – физика-математика фанлари доктори, Андижон давлат университети Физика кафедраси профессори, ЎзР ФА академиги. E-mail: prof\_sirojiddin@mail.ru

**Аскарлов Баҳодиржон** – физика-математика фанлари номзоди, Андижон машинасозлик институти Метрология, стандартлаштириш ва маҳсулот сифати менежменти кафедраси доценти. E-mail: dr.asqarov@mail.ru

**Акбаров Шухратжон Косимович** – Андижон давлат университети Физика кафедраси ўқитувчиси. E-mail: akbarovshuhratjon1975@gmail.com