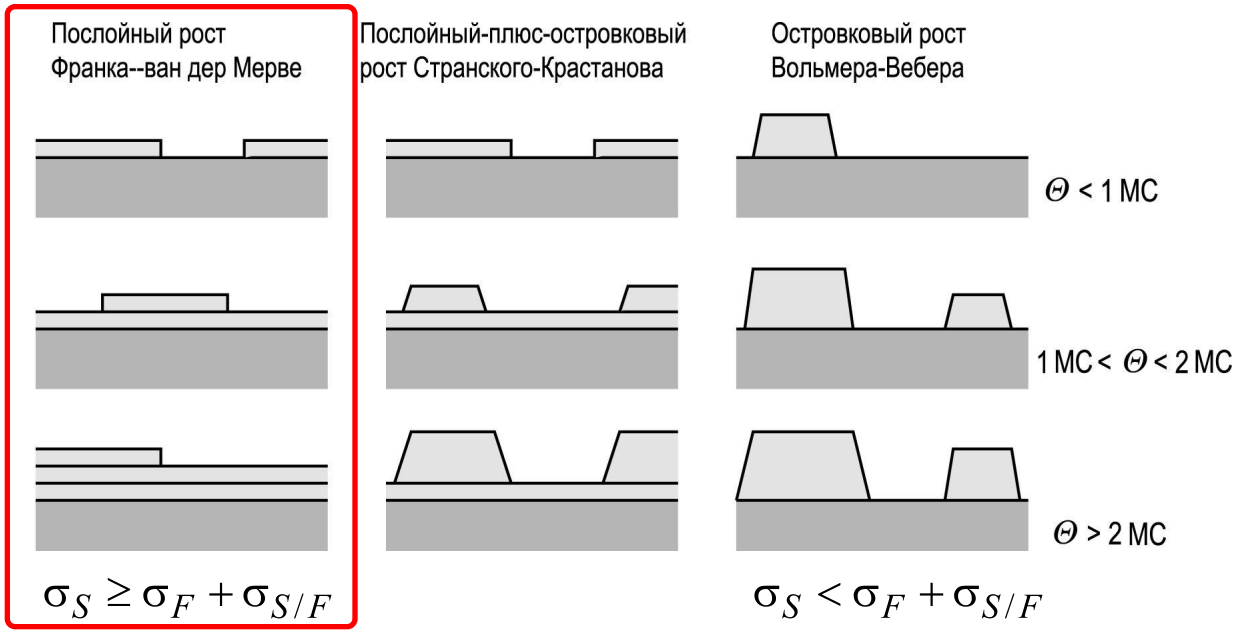
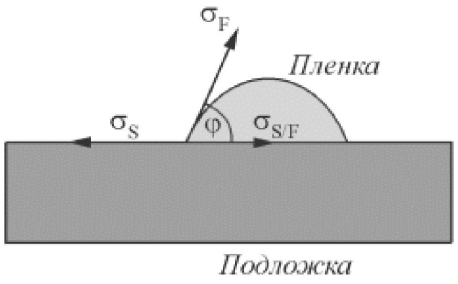
Упругие напряжения и псевдоморфизм в гетероэпитаксиальных структурах

Основные механизмы эпитаксиального роста

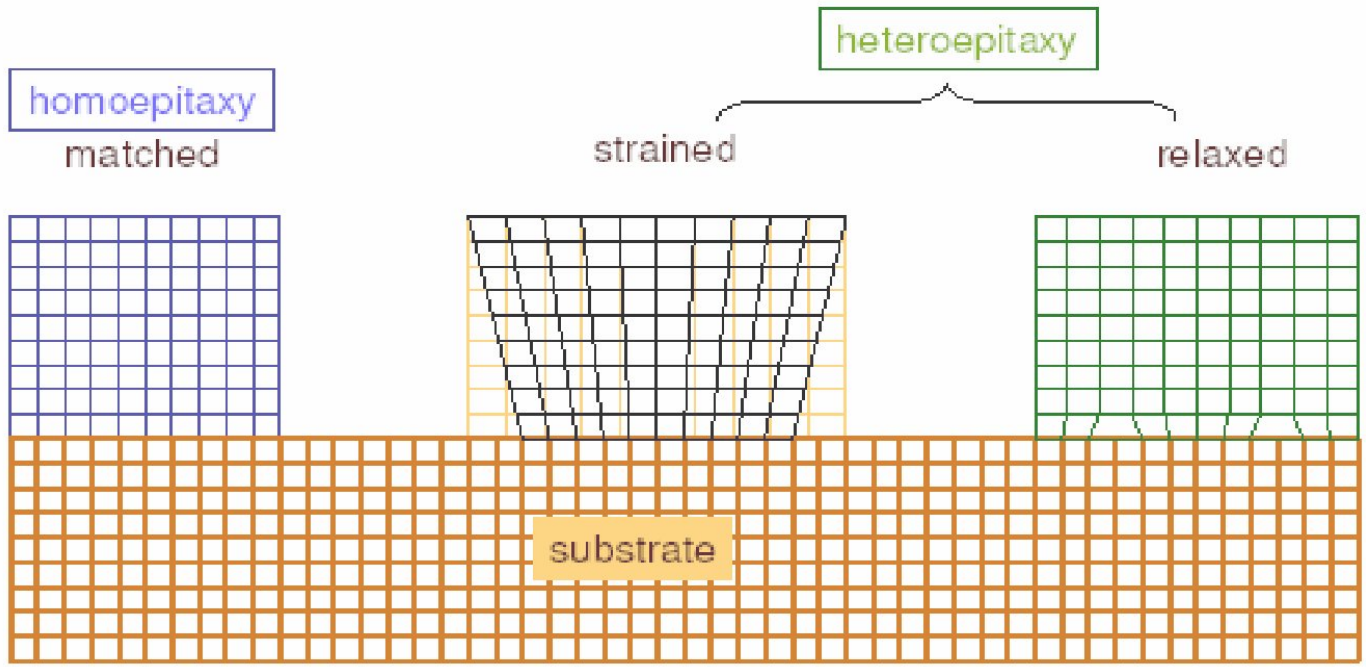




$$\sigma_S = \sigma_{S/F} + \sigma_F \cos\varphi$$

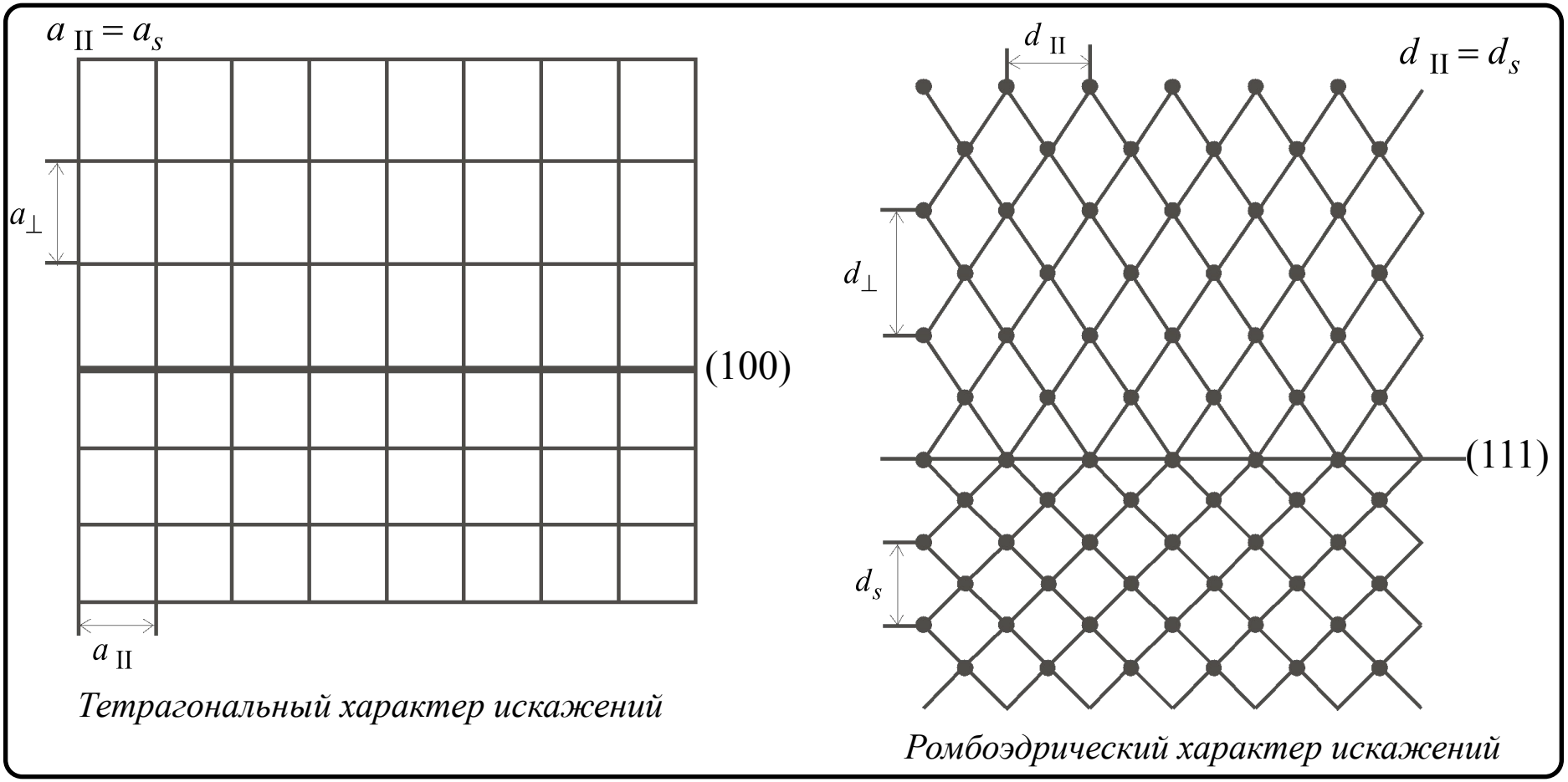
- ***При послойном механизме роста (называемым также механизмом роста Франка-ван дер Мерве) каждый последующий слой пленки начинает формироваться только после полного завершения роста предыдущего слоя. Послойный рост имеет место, когда взаимодействие между подложкой и слоем атомов значительно больше, чем между ближайшими атомами в слое.***
- ***Условием реализации островкового роста или роста Вольмера-Вебера является преобладание взаимодействия между ближайшими атомами над взаимодействием этих атомов с подложкой. При островковом механизме роста вещество с самого начала оседает на поверхности в виде многослойных конгломератов атомов.***
- ***Промежуточным между этими двумя механизмами является рост Странски-Крастанова, при котором первый слой полностью покрывает поверхность подложки, а на нем происходит рост трехмерных островков пленки. К этому механизму может приводить, в частности, достаточно большое несоответствие между параметрами кристаллических решеток пленки и подложки.***

Упругие напряжения и псевдоморфизм в гетероэпитаксиальных структурах



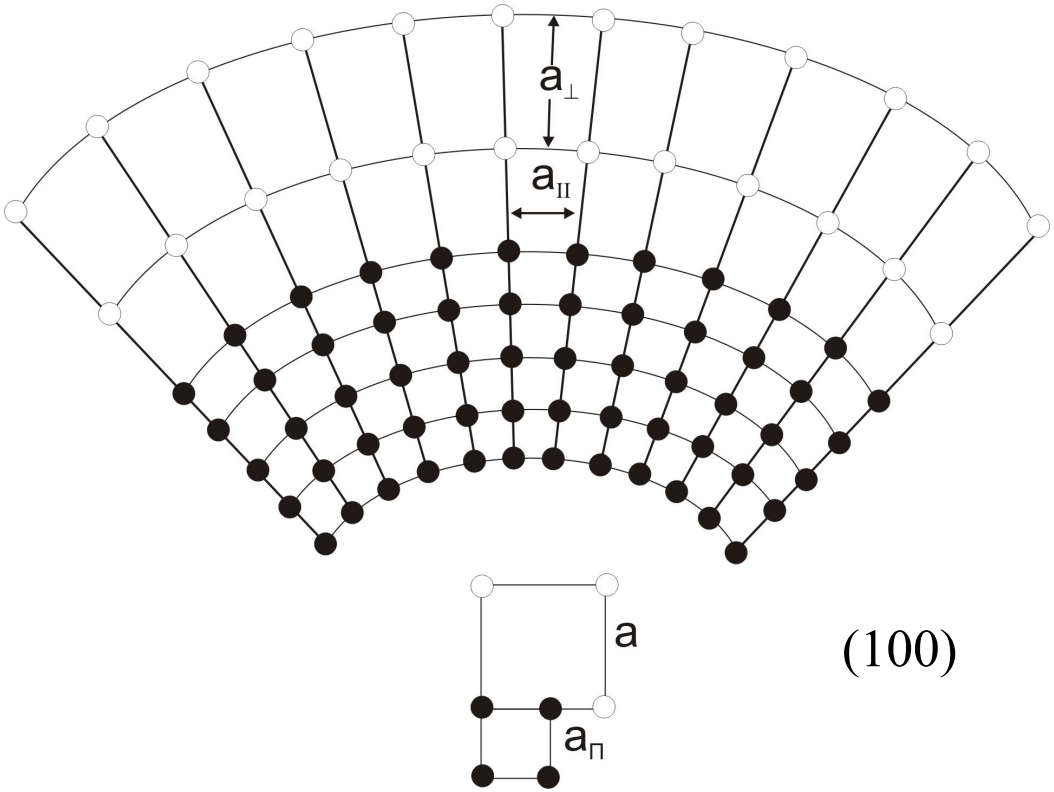
- **При гетероэпитаксиальном росте слоев с различными межатомными расстояниями происходит смещение атомов из своих положений равновесия.**
- **В случае если рассогласование по периоду кристаллической решетки незначительно, то смещения атомов носят упругий характер, и гетероэпитаксия протекает по механизму псевдоморфизма.**
- **Псевдоморфный рост наблюдается в том случае, если все несоответствия межатомного расстояния компенсируются упругими смещениями атомов из своих положений равновесия. При этом обеспечивается когерентность гетерограницы.**

Упругие напряжения и псевдоморфизм в гетероэпитаксиальных структурах



При псевдоморфном росте не происходит нарушения микроскопической сплошности материала. Кристаллографические плоскости непрерывным образом переходят из подложки в эпитаксиальный слой. При этом, в плоскости гетерограницы в результате упругой адаптации кристаллических решеток возникают внешние упругие напряжения, которые называют напряжениями несоответствия. Эти напряжения приводят к тому, что межплоскостные расстояния в направлениях, перпендикулярном и параллельном поверхности гетерограницы, оказываются различными.

Упругие напряжения и псевдоморфизм в гетероэпитаксиальных структурах



Характер упругих искажений кристаллической решетки при псевдоморфном росте

$$a_{\text{II}} = a_s$$

$$a_{\perp} = \frac{2c_{12}}{c_{11}}(a_0 - a_s) + a_0$$

$$f_0 = \frac{a_0 - a_s}{a_0}$$

$$f_{\perp} = \frac{a_{\perp} - a_s}{a_0} \neq f_0$$

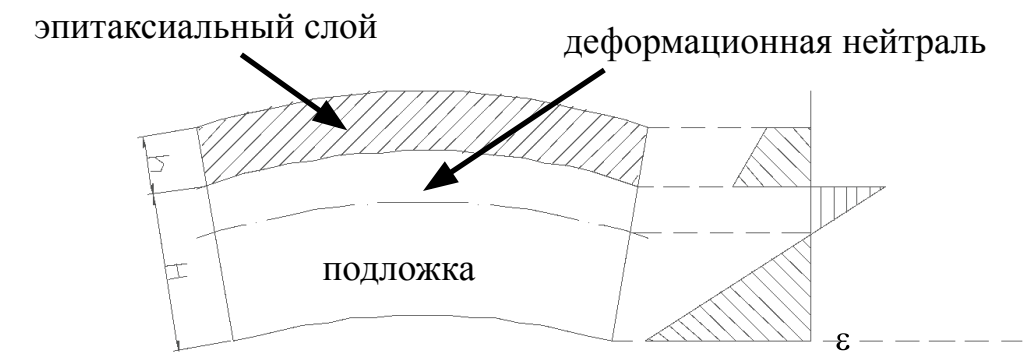
$$a_{\text{II}} = a_s$$

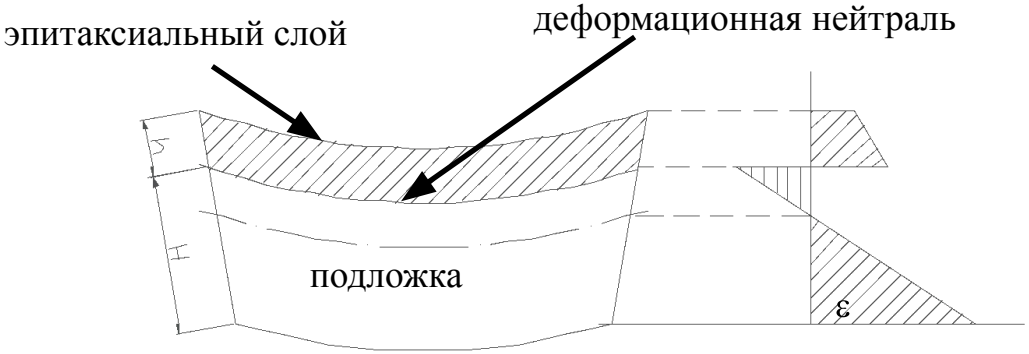
Основной признак когерентности гетерограницы

При псевдоморфном росте подложка навязывает свой период формируемому эпитаксиальному слою

Кристаллические решетки псевдоморфных фаз когерентно рассеивают акустические, оптические и рентгеновские лучи

Упругие напряжения и псевдоморфизм в гетероэпитаксиальных структурах

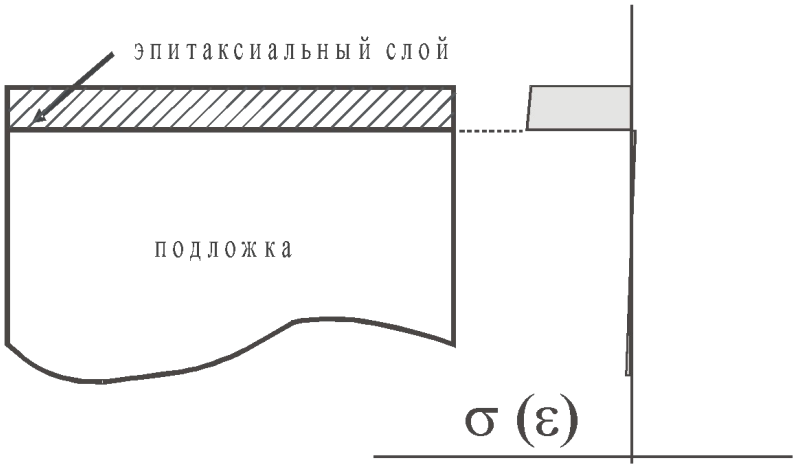




Если толщина подложки относительно невелика, то упругая энергия, обусловленная размерным несоответствием периодов решеток, может частично уменьшаться за счет упругого изгиба гетероструктуры

Радиус изгиба гетероструктуры зависит от соотношения толщин эпит. слоя и подложки.
Если *h<<H* –деформация слоя становится однородной и деформацией подложки можно пренебречь.

Особенности распределения деформаций и напряжений:
1) изменение величины знака σ и ε при переходе через межфазную границу;
2) скачок деформаций на гетерогранице определяется рассогласованием периодов решеток сопрягаемых материалов;
3) Знак дилатационного рассогласования решеток (±Δa) определяет знак сферической кривизны поверхности раздела фаз;
4) изменение величины знака σ и ε при переходе через деформационную нейтраль.

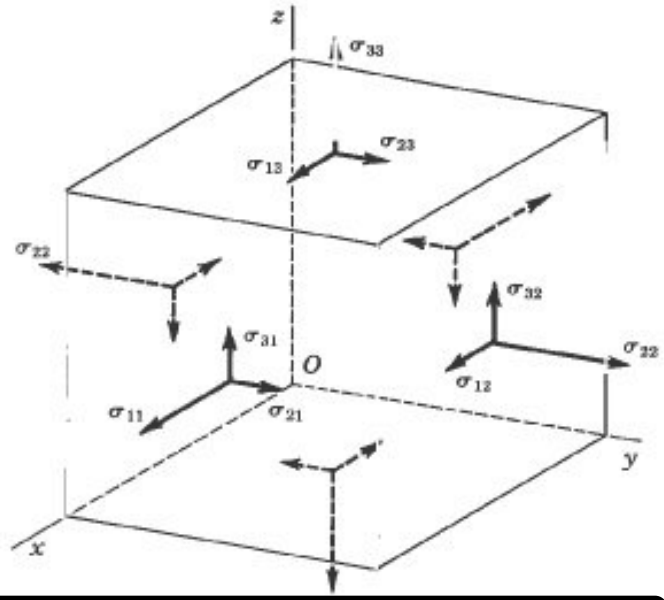


Упругие напряжения и псевдоморфизм в гетероэпитаксиальных структурах

$$\sigma_{kl} = c_{klmn}\varepsilon_{mn}$$

Закон Гука устанавливает линейные соотношения между компонентами тензоров напряжений и деформаций

Напряжения и деформации – тензоры II-го ранга;
Модули упругости – тензор IV-го ранга.



В матричной записи

$$\sigma_i = \sum_{k=1}^{6} c_{ik}\varepsilon_k$$

Переход от тензорной записи к матричной

тенз.:	**11**	**22**	**33**	**23**	**13**	**12**
матр.:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**

$c_{mn} = c_{nm}$
в силу симметрии

$$\sigma_{12} = \sigma_6 = c_{1211}\varepsilon_{11} + c_{1212}\varepsilon_{12} + c_{1213}\varepsilon_{13} + c_{1221}\varepsilon_{21} +$$
$$+c_{1222}\varepsilon_{22} + c_{1223}\varepsilon_{23} + c_{1231}\varepsilon_{31} + c_{1232}\varepsilon_{32} + c_{1233}\varepsilon_{33} =$$
$$= c_{61}\varepsilon_1 + c_{66}\varepsilon_6 + c_{65}\varepsilon_5 + c_{66}\varepsilon_6 + c_{62}\varepsilon_2 + c_{64}\varepsilon_4 +$$
$$+c_{65}\varepsilon_5 + c_{64}\varepsilon_4 + c_{63}\varepsilon_3 =$$
$$= c_{61}\varepsilon_1 + c_{62}\varepsilon_2 + c_{63}\varepsilon_3 + 2c_{64}\varepsilon_4 + 2c_{65}\varepsilon_5 + 2c_{66}\varepsilon_6$$

σ_{ij} - i-ый компонент силы на единицу площади плоскости, внешняя нормаль к которой параллельна положительному направлению x_j

При механическом равновесии $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$

При переходе от тензорной индексации к матричной **недиагональные компоненты** тензора деформации в описании напряжений следует учитывать с **множителем два**

Закон Гука в применении к деформированным гетероструктурам

Закон Гука

$$\sigma_i = \sum_{k=1}^{6} c_{ik}\varepsilon_k$$

Переход от тензорной записи к матричной

тенз.:	**11**	**22**	**33**	**23**	**13**	**12**
матр.:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**

$c_{mn} = c_{nm}$
в силу симметрии

При переходе от тензорной индексации к матричной **недиагональные компоненты** тензора деформации в описании напряжений следует учитывать с **множителем два**

Вид тензора модуля упругости зависит от симметрии кристалла и кристаллографической ориентации гетероструктуры

c_{mn}	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6
σ_1	c_{11}	c_{12}	c_{12}	0	0	0
σ_2	c_{12}	c_{11}	c_{12}	0	0	0
σ_3	c_{12}	c_{12}	c_{11}	0	0	0
σ_4	0	0	0	c_{44}	0	0
σ_5	0	0	0	0	c_{44}	0
σ_6	0	0	0	0	0	c_{44}

Матрица c_{klmn} содержит 81 коэффициент.
Благодаря симметрии тензора лишь 21 коэффициент матрицы c_{mn} являются независимыми

В кристаллах кубической системы, благодаря высокой симметрии лишь **три коэффициента** c_{mn} **независимы один от другого**.
Координатные оси ***x***, ***y***, ***z*** направлены вдоль ребер элементарной кубической ячейки

Модули упругости соединений $A^{III}B^{V}$ и $A^{II}B^{VI}$

Material	C_{ij} (10^{11} dyn/cm^2)		
	C_{11}	C_{12}	C_{44}
BN (zb)	82.0	19.0	48.0
BP (zb)	31.5	10	16
BAs (zb)[b]	27.9	12.0	11.3
AlN (zb)[b]	31.5	15.0	18.5
AlP (zb)[b]	15.0	6.42	6.11
AlAs (zb)	11.93	5.72	5.72
AlSb (zb)	8.769	4.341	4.076
GaN (zb)[b]	29.1	14.8	15.8
GaP (zb)	14.050	6.203	7.033
GaAs (zb)	11.88	5.38	5.94
GaSb (zb)	8.838	4.027	4.320
InN (zb)[b]	19.2	7.30	9.35
InP (zb)	10.22	5.73	4.42
InAs (zb)	8.329	4.526	3.959
InSb (zb)	6.608	3.531	3.027

Material	C_{ij} (10^{11} dyn/cm^2)		
	C_{11}	C_{12}	C_{44}
BeS (zb)[b]	12.3	7.30	5.69
BeSe (zb)[b]	11.0	6.66	5.03
BeTe (zb)[b]	8.87	5.54	3.86
MgO (rs)	29.4	9.3	15.5
MgS (zb)[b]	8.88	5.53	3.87
MgSe (zb)[b]	7.58	4.86	3.17
MgTe (zb)[b]	5.28	3.66	1.93
ZnS (zb)	10.2	6.46	4.46
ZnSe (zb)	8.57	5.07	4.05
ZnTe (zb)	7.15	4.08	3.11
CdS (zb)	7.70	5.39	2.36
CdSe (zb)	6.67	4.63	2.23
CdTe (zb)	5.35	3.69	2.02
HgS (zb)	8.13	6.22	2.64
HgSe (zb)	6.08	4.46	2.23
HgTe (zb)	5.32	3.68	2.08

[*S. Adachi, Properties of Semiconductor Alloys - Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, John Wiley & Sons Ltd., United Kingdom, 2009*]

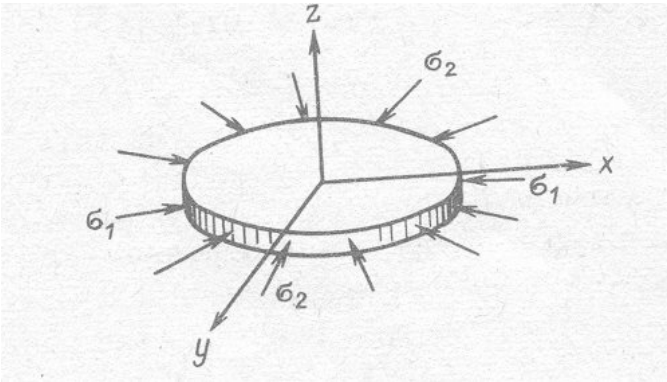
10 dyn/cm^2 = 1 Pa

c_{mn}	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6
σ_1	c_{11}	c_{12}	c_{12}	0	0	0
σ_2	c_{12}	c_{11}	c_{12}	0	0	0
σ_3	c_{12}	c_{12}	c_{11}	0	0	0
σ_4	0	0	0	c_{44}	0	0
σ_5	0	0	0	0	c_{44}	0
σ_6	0	0	0	0	0	c_{44}

В кристаллах кубической системы, благодаря высокой симметрии лишь **три коэффициента** c_{mn} **независимы один от другого**.
Координатные оси ***x***, ***y***, ***z*** направлены вдоль ребер элементарной кубической ячейки

Закон Гука в применении к деформированным гетероструктурам

<u>При ориентации слоя в плоскости **(100)**</u>
(*направление роста совпадает с осью* **z**)



В плоскости слоя нормальные напряжения одинаковы $\sigma_1 = \sigma_2$
а касательные напряжения отсутствуют $\sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0$
Индексы 1, 2 и 3 соответствуют осям ***x***, ***y***, ***z***.
По направлению нормали к плоскости гетероструктуры, т.е. вдоль оси ***z*** ,
эпитаксиальная структура ненагружена, поэтому $\sigma_3 = 0$,
однако деформация отлична от нуля.

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \frac{a_s - a_0}{a_0} = -f_0 = -\Delta a / a$$

$$\sigma_1 = \sigma_2;\ \sigma_3 = 0;$$

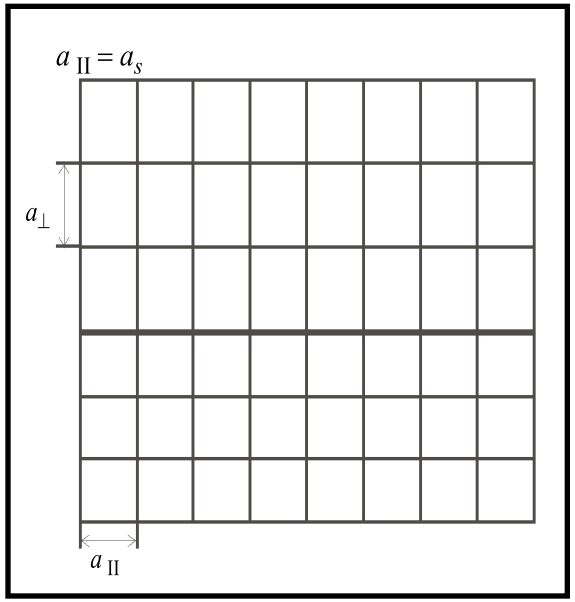
$$\sigma_3 = c_{12}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_2 + c_{11}\varepsilon_3 = 0 \Longrightarrow \boxed{\varepsilon_3 = -\left(2c_{12}/c_{11}\right)\varepsilon_1}$$

Для полупроводников $A^{III}B^{V}$ и $A^{II}B^{VI}$
$c_{44} \approx c_{12} \approx 0.5c_{11}$

Для полупроводников $A^{III}B^{V}$ зависимость c_{mn} от температуры выражена слабо

$$f_\perp = \frac{a_\perp - a_s}{a_0} = \frac{\left(a_\perp - a_0\right) + \left(a_0 - a_s\right)}{a_0} = \varepsilon_3 - \varepsilon_1 = \left(2c_{12}/c_{11} + 1\right) f_0 \approx 2 f_0$$

Экспериментально измеряемое различие периодов решеток подложки и слоя в направлении нормали к границе раздела приблизительно в два раза превосходит несоответствие периодов решеток этих материалов в недеформированном состоянии



$$\sigma_1 = \sigma_2 = c_{11}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_2 + c_{12}\varepsilon_3 = c_{11}\varepsilon_1 + c_{12}\varepsilon_1 - \left(2c_{12}/c_{11}\right)c_{12}\varepsilon_1$$

$$\boxed{\sigma_1 = \sigma_2 = \left[c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{12}^2}{c_{11}}\right]\left(-f_0\right)}$$

Закон Гука в применении к деформированным гетероструктурам

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \left[c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{12}^2}{c_{11}} \right] (-f_0)$$

Плотность упругой энергии для кубических кристаллов:

$$G^{упр} = 0.5c_{11}\left(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2\right) + c_{12}\left(\varepsilon_1\varepsilon_2 + \varepsilon_1\varepsilon_3 + \varepsilon_2\varepsilon_3\right) + 2c_{44}\left(\varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2\right) =$$

$$= 0.5c_{11}\left[2\varepsilon_1^2 + \left(\frac{4c_{12}^2}{c_{11}^2}\right)\varepsilon_1^2\right] + c_{12}\left[\varepsilon_1^2 - \left(\frac{4c_{12}}{c_{11}}\right)\varepsilon_1^2\right] = \left[c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{12}^2}{c_{11}}\right]\varepsilon_1^2 = \sigma_1\varepsilon_1$$

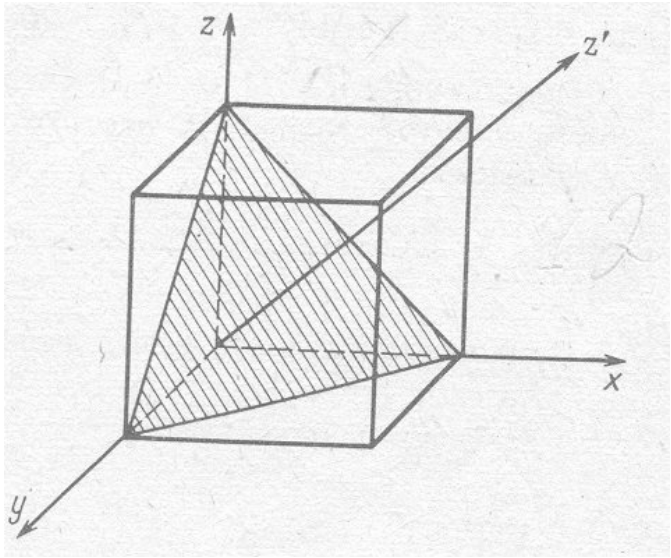
При ориентации слоя в плоскости **(111)**

(*направление роста совпадает с* $\mathbf{z}^{/}$)

Для расчета деформаций и напряжений в этом случае целесообразно перейти к основной координатной системе, в которой нормальные и сдвиговые напряжения совпадают с направлениями **{100}**

По отношению к направлениям **{111}** оси ***x***, ***y***, ***z*** кристалло-графически эквивалентны. Благодаря симметрии имеем:

$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$; $\sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 \neq 0$; $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3$; $\varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6$;



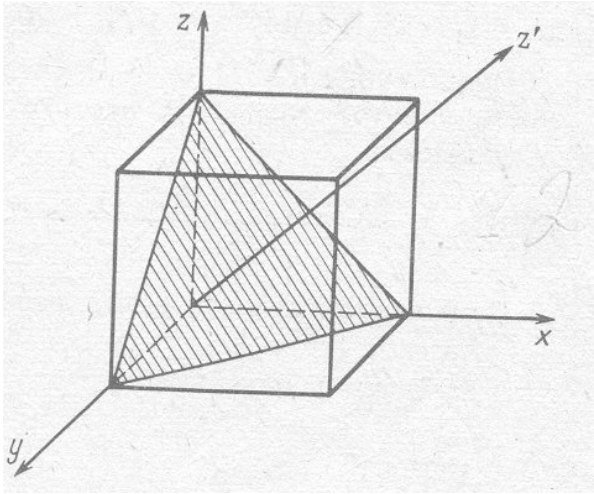
Закон Гука в применении к деформированным гетероструктурам

$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3;\ \sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 \neq 0;\ \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon_3;\ \varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6;$

Правило преобразования компонент тензоров при переходе из одной системы координат в другую:

$$X'_{ik} = \alpha_{il}\,\alpha_{km} X_{lm}$$

α_{ij} – направляющие косинусы, т.е. проекции единичного вектора, направленного вдоль i на направление j



тенз.:	**11**	**22**	**33**	**23**	**13**	**12**
матр.:	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**

Для преобразования координатной системы сначала осуществляем поворот осей **x** и **y** вокруг оси **z** на **45°** (в плоскости **xy**), а затем оси **z**/ и **x**/ поворачиваем вокруг оси **y**/ на **45°**

$$\Longrightarrow \begin{vmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & -\sqrt{2/3} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix}$$

учитывая, что $\sigma'_3 = 0$ получаем:

$$\sigma'_{33} = \sigma'_3 = \alpha_{3l}\alpha_{3m}\sigma_{lm} = \frac{1}{3}\sigma_{11} + \frac{1}{3}\sigma_{22} + \frac{1}{3}\sigma_{33} + \frac{2}{3}\sigma_{12} + \frac{2}{3}\sigma_{13} + \frac{2}{3}\sigma_{23} = 0;$$

$$\sigma'_{33} = \sigma_{11} + 2\sigma_{12} = 0;$$

$$\sigma_{11} = c_{11}\varepsilon_{11} + c_{12}\varepsilon_{22} + c_{13}\varepsilon_{33} = (c_{11} + 2c_{12})\varepsilon_{11} = (c_{11} + 2c_{12})\varepsilon_1;$$

$$\sigma_{12} = \sigma_6 = 2c_{66}\varepsilon_6 = 2c_{44}\varepsilon_6;$$

$$\sigma'_{33} = (c_{11} + 2c_{12})\varepsilon_1 + 2(2c_{44}\varepsilon_6) = 0;$$

$$\Longrightarrow \quad \varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = -\varepsilon_1(c_{11} + 2c_{12})/(4c_{44})$$

c_{mn}	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6
σ_1	c_{11}	c_{12}	c_{12}	0	0	0
σ_2	c_{12}	c_{11}	c_{12}	0	0	0
σ_3	c_{12}	c_{12}	c_{11}	0	0	0
σ_4	0	0	0	c_{44}	0	0
σ_5	0	0	0	0	c_{44}	0
σ_6	0	0	0	0	0	c_{44}

Закон Гука в применении к деформированным гетероструктурам

$$\varepsilon'_{11} = \varepsilon'_1 = \alpha_{1l}\alpha_{1m}\varepsilon_{lm} = \alpha_{11}\alpha_{11}\varepsilon_{11} + \alpha_{12}\alpha_{11}\varepsilon_{21} + \alpha_{13}\alpha_{11}\varepsilon_{31} + \alpha_{11}\alpha_{12}\varepsilon_{12} +$$

$$+\alpha_{12}\alpha_{12}\varepsilon_{22} + \alpha_{13}\alpha_{12}\varepsilon_{32} + \alpha_{11}\alpha_{13}\varepsilon_{13} + \alpha_{12}\alpha_{13}\varepsilon_{23} + \alpha_{13}\alpha_{13}\varepsilon_{33} =$$

$$= \frac{1}{6}\varepsilon_{11} + \frac{1}{6}\varepsilon_{21} - \frac{1}{3}\varepsilon_{31} + \frac{1}{6}\varepsilon_{12} + \frac{1}{6}\varepsilon_{22} - \frac{1}{3}\varepsilon_{32} - \frac{1}{3}\varepsilon_{13} - \frac{1}{3}\varepsilon_{23} + \frac{2}{3}\varepsilon_{33} =$$

$$= \varepsilon_{11} - \varepsilon_{21} = \varepsilon_1 - \varepsilon_6 = \varepsilon_1 + \varepsilon_1\left(c_{11} + 2c_{12}\right)/\left(4c_{44}\right);$$

$$\begin{vmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{vmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & -\sqrt{2/3} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \end{bmatrix} \begin{vmatrix} X \\ Y \\ Z \end{vmatrix}$$

$$\boxed{\varepsilon'_1 = \varepsilon_1\left(c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}\right)/\left(4c_{44}\right) = -f_0}$$

$$\varepsilon'_1 = \varepsilon'_2 = -f_0$$

c_{mn}	ε_1	ε_2	ε_3	ε_4	ε_5	ε_6
σ_1	c_{11}	c_{12}	c_{12}	0	0	0
σ_2	c_{12}	c_{11}	c_{12}	0	0	0
σ_3	c_{12}	c_{12}	c_{11}	0	0	0
σ_4	0	0	0	c_{44}	0	0
σ_5	0	0	0	0	c_{44}	0
σ_6	0	0	0	0	0	c_{44}

По аналогии с разложением ε'_{11} можно получить:

$$\sigma'_{11} = \sigma_{11} - \sigma_{21} = \sigma_{11} + \frac{1}{2}\sigma_{11} = \frac{3}{2}\sigma_{11}; \quad \Longleftarrow \quad \sigma'_{33} = \sigma_{11} + 2\sigma_{12} = 0;$$

$$\sigma_{11} = \left(c_{11} + 2c_{12}\right)\varepsilon_{11} = \left(c_{11} + 2c_{12}\right)\left(\frac{4c_{44}}{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}\right)\varepsilon'_{11};$$

$$\sigma'_{11} = \frac{3}{2}\sigma_{11} = \frac{3}{2}\left(\frac{\left(c_{11} + 2c_{12}\right)4c_{44}}{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}\right)\varepsilon'_{11} = -\frac{3}{2}\left(\frac{\left(c_{11} + 2c_{12}\right)4c_{44}}{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}\right)f_0;$$

$$\boxed{\sigma'_{11} = \sigma'_1 = -\frac{6\left(c_{11} + 2c_{12}\right)c_{44}}{c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}f_0}$$

Закон Гука в применении к деформированным гетероструктурам

По аналогии с разложением σ'_{33} можно получить

$$\varepsilon'_{33} = \varepsilon_{11} + 2\varepsilon_{12}; \quad \varepsilon_{11} = \left(\frac{4c_{44}}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}\right)\varepsilon'_{11}; \quad \varepsilon_{12} = -\frac{c_{11}+2c_{12}}{4c_{44}}\varepsilon_1 = -\left(\frac{c_{11}+2c_{12}}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}\right)\varepsilon'_{11};$$

$$\varepsilon'_{33} = \varepsilon'_3 = \left(\frac{4c_{44}}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}\right)\varepsilon'_{11} - 2\left(\frac{c_{11}+2c_{12}}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}\right)\varepsilon'_{11} = \left(\frac{2\left(c_{11}+2c_{12}-2c_{44}\right)}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}\right)f_0;$$

$$\boxed{f_\perp = \varepsilon'_{33} - \varepsilon'_{11} = \varepsilon_{11} + 2\varepsilon_{12} - \varepsilon_{11} + \varepsilon_{21} = 3\varepsilon_{12} = \frac{3\left(c_{11}+2c_{12}\right)}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}f_0;} \qquad f_\perp \approx 1.5 f_0 \Leftarrow \left(c_{44} \approx c_{12} \approx 0.5c_{11}\right)$$

$$G^{упр} = 0.5c_{11}\left(\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2+\varepsilon_3^2\right) + c_{12}\left(\varepsilon_1\varepsilon_2+\varepsilon_1\varepsilon_3+\varepsilon_2\varepsilon_3\right) + 2c_{44}\left(\varepsilon_4^2+\varepsilon_5^2+\varepsilon_6^2\right) =$$

$$= \frac{3}{2}c_{11}\varepsilon_1^2 + 3c_{12}\varepsilon_1^2 + 6c_{44}\varepsilon_6^2 = \frac{3}{2}\varepsilon_1^2\left(c_{11}+2c_{12}\right) + \frac{6c_{44}\left(c_{11}+2c_{12}\right)^2}{16c_{44}^2}\varepsilon_1^2 \qquad \varepsilon'_1 = \varepsilon_1\left(c_{11}+2c_{12}+4c_{44}\right)/\left(4c_{44}\right) = -f_0$$

$$G^{упр} = \frac{3}{2}\frac{\left(c_{11}+2c_{12}\right)}{4c_{44}}\left(c_{11}+2c_{12}+4c_{44}\right)\varepsilon_1^2 = \boxed{G^{упр} = \frac{6c_{44}\left(c_{11}+2c_{12}\right)}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}}f^2}$$

Пример расчета деформированного состояния гетероструктуры

Система ZnS_ySe_{1-y}/GaAs (001)
T_S=300°C, x=0.06

	ZnS	ZnSe	GaAs
a, Å (300K)	5.4102	5.6692	5.6533
$\alpha_{th} \cdot 10^6$, K^{-1}	6.71	7.8	6.03
$C_{ij} \cdot 10^{10}$, Pa (C_{11}; C_{12})	10.2; 6.46	8.57;5.07	11.88; 5.38

Характеристики эпит. слоя:

$$a(y) = y a_{ZnS} + (1-y) a_{ZnSe};$$

$$c_{ij}(y) = y c_{ij(ZnS)} + (1-y) c_{ij(ZnSe)};$$

$$\alpha_{th}(y) = y \alpha_{th(ZnS)} + (1-y) \alpha_{th(ZnSe)};$$

$$c_{11} = 8.68 \cdot 10^{10};\ c_{12} = 5.15 \cdot 10^{10}\ \text{Па};$$

$$a_0 = a(0.06) = 5.65366\ \text{A};\ \alpha_{th}(0.06) = 7.73 \cdot 10^{-6}\ K^{-1};$$

T_S=300K

Химически обусловленное несоответствие решеток:

$$f_0 = \frac{a_0 - a_s}{a_0} = 6.4 \cdot 10^{-5};$$

Рассогласование периодов решеток вдоль нормали к гетерогранице:

$$f_\perp = \frac{a_\perp - a_s}{a_0} = (2c_{12}/c_{11} + 1) f_0 = 1.4 \cdot 10^{-4};$$

Упругая деформация в плоскости гетерограницы:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -f_0 = -6.4 \cdot 10^{-5}$$

Упругая деформация в направлении роста:

$$\varepsilon_3 = -(2c_{12}/c_{11})\varepsilon_1 = (2c_{12}/c_{11}) f_0 = 7.6 \cdot 10^{-5}$$

Упругие напряжения в плоскости слоя:

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \left[c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{12}^2}{c_{11}} \right](-f_0) = -4.94 \cdot 10^6\ \text{Па}$$

(напряжения сжатия)

Пример расчета деформированного состояния гетероструктуры

Система ZnS_ySe_{1-y}/GaAs (001)
T_S=300°C, x=0.06

	ZnS	ZnSe	GaAs
a, Å (300K)	5.4102	5.6692	5.6533
$\alpha_{th} \cdot 10^6$, K^{-1}	6.71	7.8	6.03
$C_{ij} \cdot 10^{10}$, Pa (C_{11}; C_{12})	10.2; 6.46	8.57;5.07	11.88; 5.38

Характеристики эпит. слоя:

$$a(y) = y a_{ZnS} + (1-y) a_{ZnSe};$$

$$c_{ij}(y) = y c_{ij(ZnS)} + (1-y) c_{ij(ZnSe)}; \qquad c_{11} = 8.68 \cdot 10^{10};\ c_{12} = 5.15 \cdot 10^{10}\ \text{Па};$$

$$\alpha_{th}(y) = y \alpha_{th(ZnS)} + (1-y) \alpha_{th(ZnSe)}; \qquad a_0 = a(0.06) = 5.65366\ \text{A};\ \alpha_{th}(0.06) = 7.73 \cdot 10^{-6}\ K^{-1};$$

T_S=300°C (температура эпитаксии)

$$\varepsilon_{th} = \alpha_{th} \cdot (\Delta T);$$
$$a(T) = (\varepsilon_{th} + 1) \cdot a_0;$$

$$a_{ZnS}(T = 300°\text{C}) = 5.421\ \text{A};\quad a_{ZnSe}(T = 300°\text{C}) = 5.6825\ \text{A};$$

$$a_{GaAs}(T = 300°\text{C}) = 5.6635\ \text{A};\quad a_{ZnSSe}^{x=0.06}(T = 300°\text{C}) = a_0 = 5.6668\ \text{A};$$

$$f_0(300°\text{C}) = \frac{a_0 - a_s}{a_0} = 5.83 \cdot 10^{-4};$$

$$f_\perp(300°\text{C}) = 1.27 \cdot 10^{-3};$$

$$\sigma_1(300°\text{C}) = \sigma_2(300°\text{C}) = \left[c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{12}^2}{c_{11}} \right](-f_0) = -4.5 \cdot 10^7\ \text{Па};$$

Пример расчета деформированного состояния гетероструктуры

Система $Ga_xIn_{1-x}P/GaAs(111)$
T_S=800°C, x=0.5

		GaP	InP	GaAs
a, нм (300K)		0.54505	0.58688	0.56532
$\alpha_l \cdot 10^6$, K^{-1}		5.9	4.6	6.4
Модули упругости, н/м^2 $C_{ij} \cdot 10^{-10}$	C_{11}	14.12	10.22	11.8
	C_{12}	6.26	5.76	5.32
	C_{44}	7.05	4.6	5.94

Характеристики эпит. слоя:

$$a(x) = xa_{GaP} + (1-x)a_{InP};$$

$$c_{ij}(x) = xc_{ij(GaP)} + (1-x)c_{ij(InP)}; \quad c_{11} = 12.17 \cdot 10^{10};\ c_{12} = 6.0 \cdot 10^{10};\ c_{44} = 5.83 \cdot 10^{10}\ Н/м^2;$$

$$\alpha^l(x) = x\alpha^l_{GaP} + (1-x)\alpha^l_{InP}; \quad a_0 = a(0.5) = 0.56965\ нм;\ \alpha^l(0.5) = 5.25 \cdot 10^{-6}\ K^{-1};$$

T_S=300K Химически обусловленное несоответствие решеток: $f_0 = \dfrac{a_0 - a_s}{a_0} = 1.141 \cdot 10^{-3};$

Рассогласование периодов решеток вдоль нормали к гетерогранице: $f_\perp = \dfrac{3(c_{11}+2c_{12})}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}} f_0 = 1.74 \cdot 10^{-3};$

Упругая деформация в плоскости гетерограницы: $\varepsilon'_{11} = \varepsilon'_1 = -f_0 = -1.141 \cdot 10^{-3};$

Упругая деформация в направлении роста: $\varepsilon'_{33} = \varepsilon'_3 = f_\perp + \varepsilon'_1 = f_\perp - f_0 = (1.74 - 1.14) \cdot 10^{-3} = 6 \cdot 10^{-4};$

Упругие напряжения в плоскости слоя: $\sigma'_{11} = \sigma'_1 = -\dfrac{6(c_{11}+2c_{12})c_{44}}{c_{11}+2c_{12}+4c_{44}} f_0 = -2.02 \cdot 10^8\ Н/м^2;$

(напряжения сжатия)

T_S=800°C (температура эпитаксии)

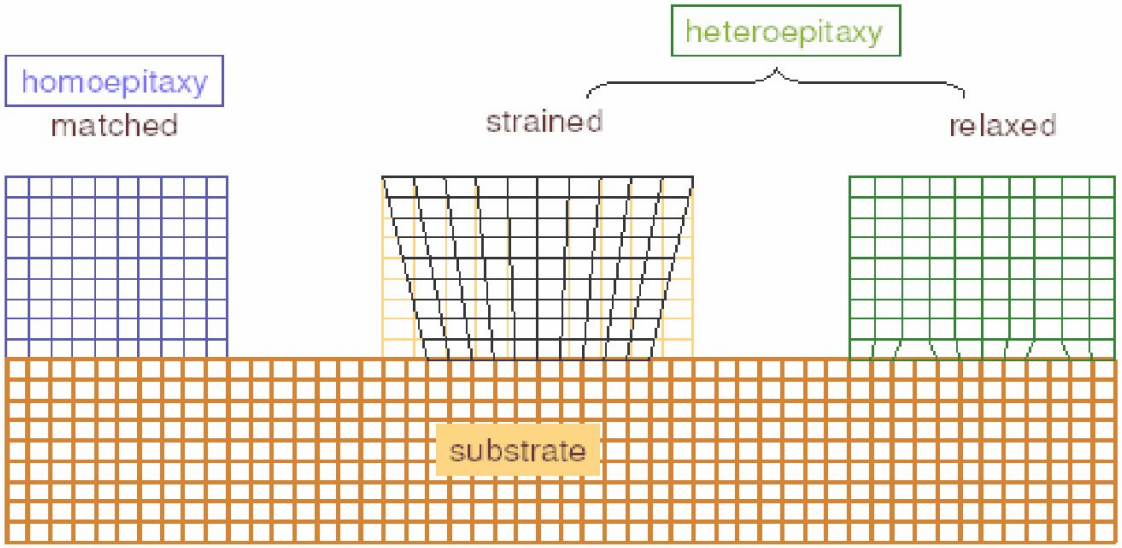
$a_{InP}(T = 800°C) = 0.588986$ нм; $a_{GaP}(T = 800°C) = 0.547558$ нм;

$a_{GaAs}(T = 800°C) = 0.568142$ нм; $a_{x=0.5}(T = 800°C) = a_0 = 0.568272$ нм;

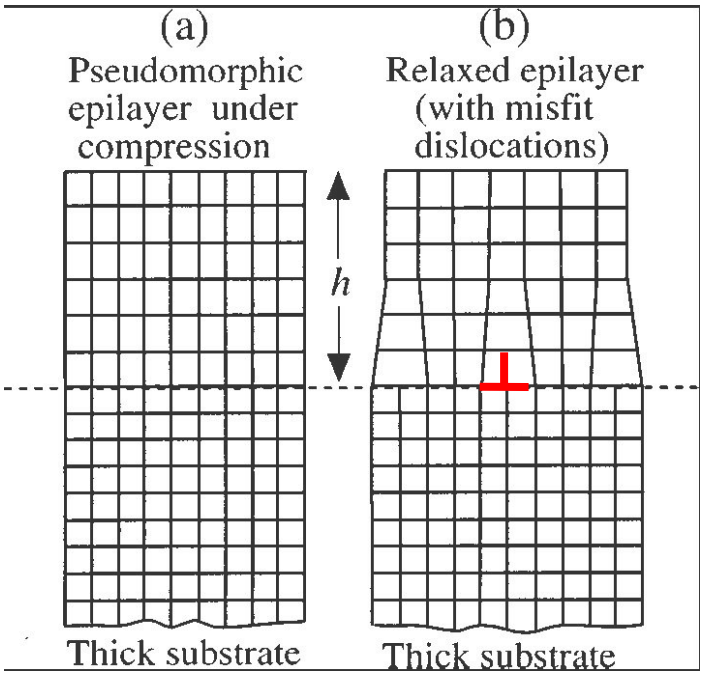
$$f_0(800°C) = \frac{a_0 - a_s}{a_0} = 2.29 \cdot 10^{-4}; \quad f_\perp(800°C) = 3.49 \cdot 10^{-4}; \quad \sigma'_1(800°C) = -4.05 \cdot 10^7\ Н/м^2;$$

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

- При превышении толщины слоя, осаждаемого по механизму псевдоморфизма, некоторого критического значения минимум свободной энергии системы уже не соответствует когерентному сопряжению. Начинается релаксация упругих напряжений.



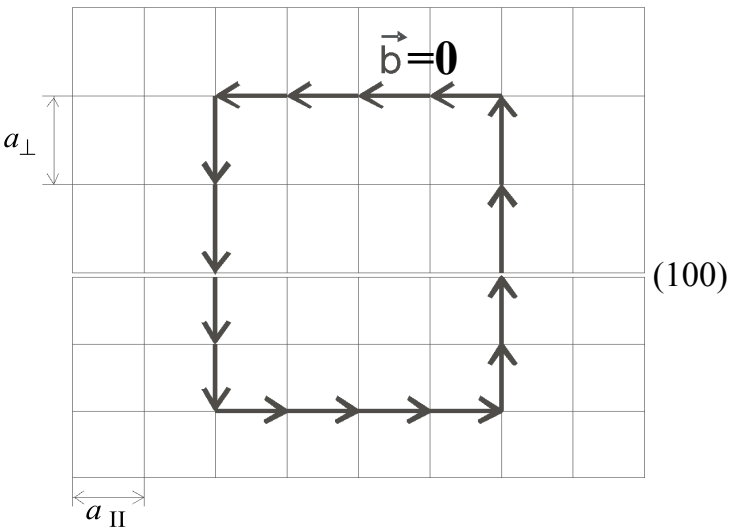
- Релаксация чаще всего протекает путем пластической деформации. В случае пластической деформации упругая энергия уменьшается вследствие появления дислокаций несоответствия в плоскости гетерограницы.

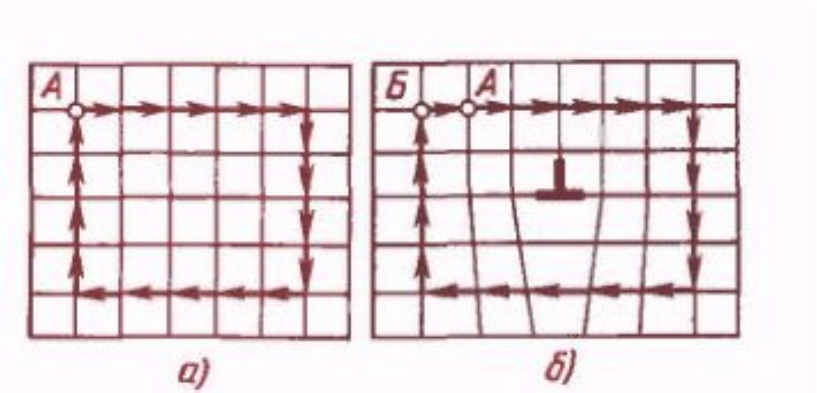


- Дислокации несоответствия представляют собой области, в которых локализуются упругие искажения структуры. Здесь имеет место нарушение микроскопической сплошности материала – появляется лишняя полуплоскость.
Лишние полуплоскости (экстраплоскости) локализуются в материале с меньшим периодом решетки.

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур
Контур Бюргерса

$a_{\text{II}} = a_s$ Совершенный кристалл:





Контур Бюргерса всегда замкнут

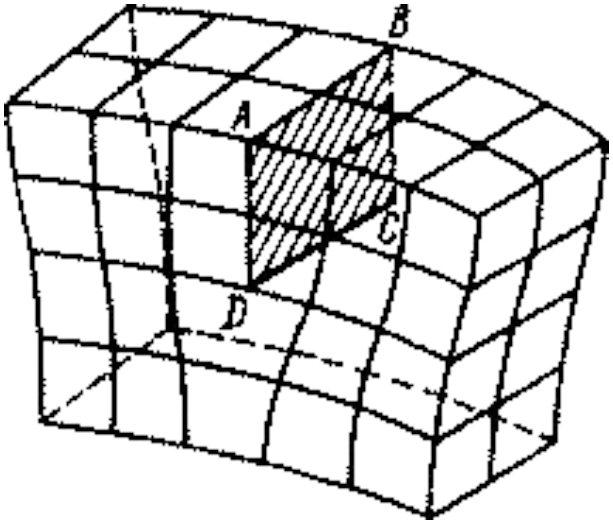
Контур Бюргерса – замкнутый контур произвольной формы, построенный в реальном кристалле путем последовательного обхода дефекта от атома к атому в совершенной области кристалла.

Вектор Бюргерса, замыкающий контур в несовершенном кристалле, является мерой искажения решетки, которое вызвано дислокацией. Величина вектора Бюргерса не зависит от того, насколько контур Бюргерса удален от дислокации.

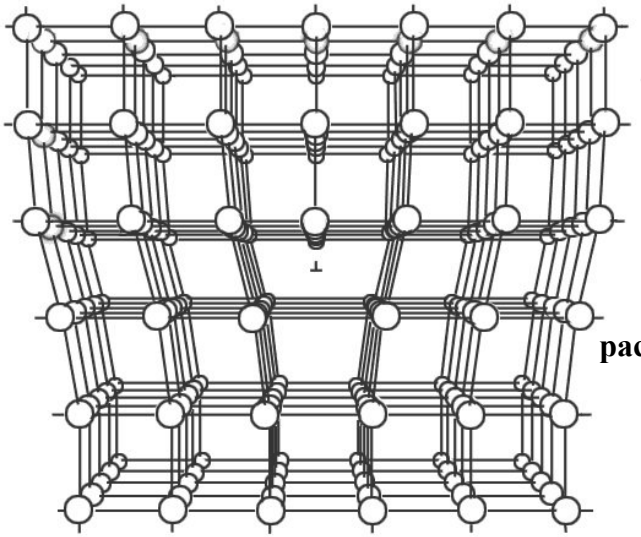
Чем дальше от дислокации мы располагаем этот контур, тем меньше упругие смещения атомов в совершенной области, но тем длиннее контур, и сумма всех упругих смещений, накопившаяся при его обходе, остается постоянной.

Вектор Бюргерса для контура, замыкающегося вокруг нескольких дислокаций, равен сумме векторов Бюргерса отдельных дислокаций.

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур



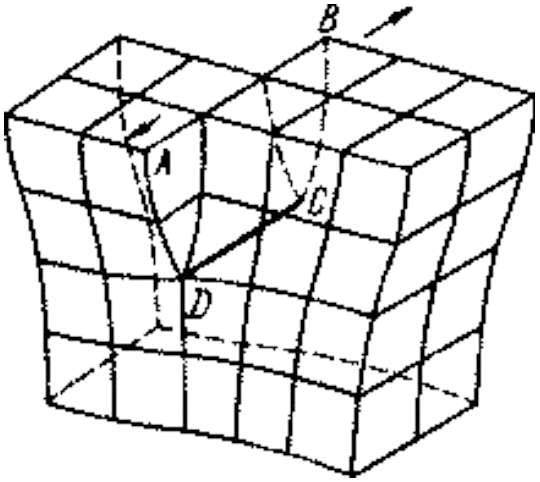
Краевая дислокация образуется путем внедрения в кристалл лишней плоскости атомов ABCD, (экстраплоскости). Граница экстраплоскости - линия CD- является краевой дислокацией. Экстраплоскость действует как клин, создавая сильное искажение кристаллической решетки, особенно в окрестности атомов, расположенных на линии дислокации CD.



Если экстраплоскость расположена сверху дислокации, то дислокацию называют ***положительной*** и обозначают знаком ⊥. Дислокация является ***отрицательной***, если экстраплоскость расположена под ней. В этом случае она обозначается знаком ⊤ .

В краевой дислокации линия дислокации CD, отделяющая неподвижную область от сдвинутой, ***перпендикулярна вектору сдвига и вектору Бюргерса***.

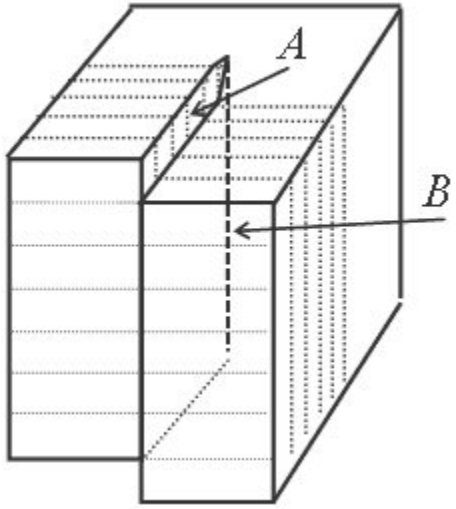
Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур



Винтовая дислокация образуется при смещении части кристалла, разделенного плоскостью ABCD, относительно другой в направлении AB. Линия DC есть винтовая дислокация. В зависимости от направления движения дислокации бывают ***правого*** и ***левого*** вращения

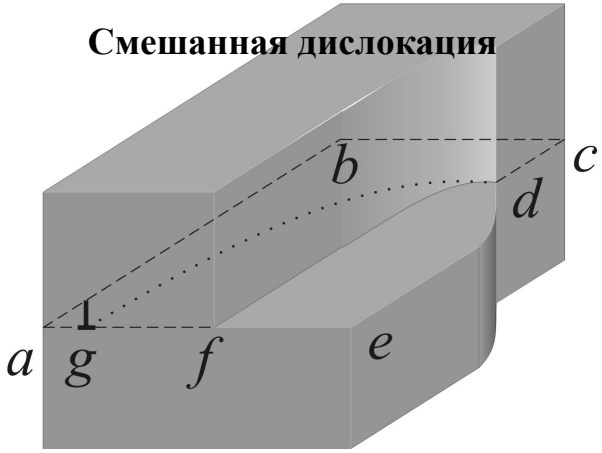
К ***линейным*** относят смешанные дислокации, в которых содержаться части в виде краевой и винтовой дислокации.

Между предельными типами краевой и винтовой дислокации возможны любые промежуточные (**смешанные**), в которых линия дислокации не обязательно прямая: она может представлять собой плоскую или пространственную кривую.



Угол φ между вектором Бюргерса и линией дислокации:
винтовые (φ=0);
краевые (φ=90°);
смешанные (произвольный угол φ).

Смешанная дислокация



abcdef – плоскость скольжения (сдвига); *gd* – линия дислокации

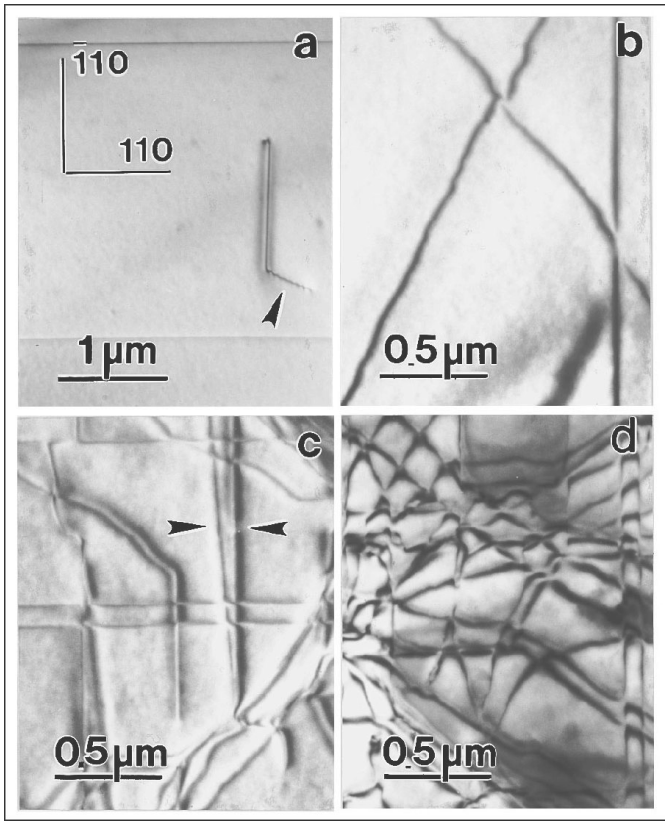
Различают ***единичные***, ***частичные*** **и** ***супердислокации***, вектор Бюргерса которых соответственно равен межатомному расстоянию, меньше или больше его. В реальном кристалле, как правило, присутствуют все виды дислокаций.

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

- При наличии ДН в плоскости гетерограницы имеет место неоднородное распределение напряжений
- Принято считать, что устранение дилатационного несоответствия вдоль каждого направления в гетерогранице происходит независимым образом. Экспериментальным подтверждением этого тезиса является образование плоской дислокационной сетки в реальных гетероструктурах.
- Геометрический тип сетки дислокаций определяется расположением плоскостей скольжения кристалла относительно плоскости границы раздела.
- Плоскостями скольжения обычно являются наиболее плотно-упакованные плоскости, расстояние между которыми максимально

- В п/п $A^{III}B^{V}$ (ГЦК решетка) плоскостями скольжения являются плоскости семейства {111}. Дилатационное несоответствие на границах раздела фаз типа (100) в гранецентрированных кристаллах компенсируется двумя взаимно перпендикулярными системами краевых дислокаций, а при гетероэпитаксии на подложках (111) образуется гексагональная сетка ДН.

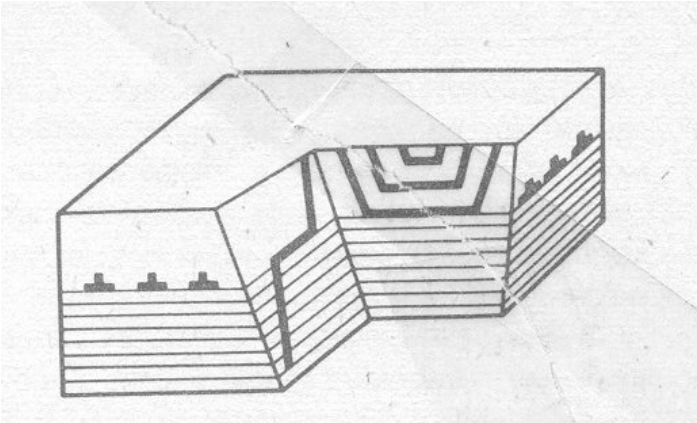
- **При деформационном равновесии** ДН вдоль выбранного направления в границе раздела расположены **эквидистантно**, на расстояниях, обратно пропорциональных величине рассогласования решеток.
- Образование ДН является **термически активированным процессом**

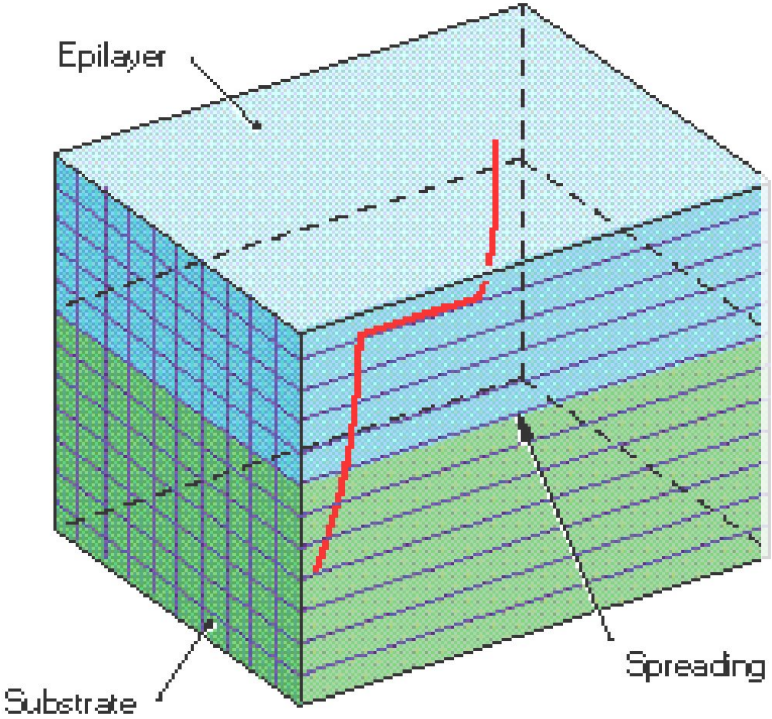


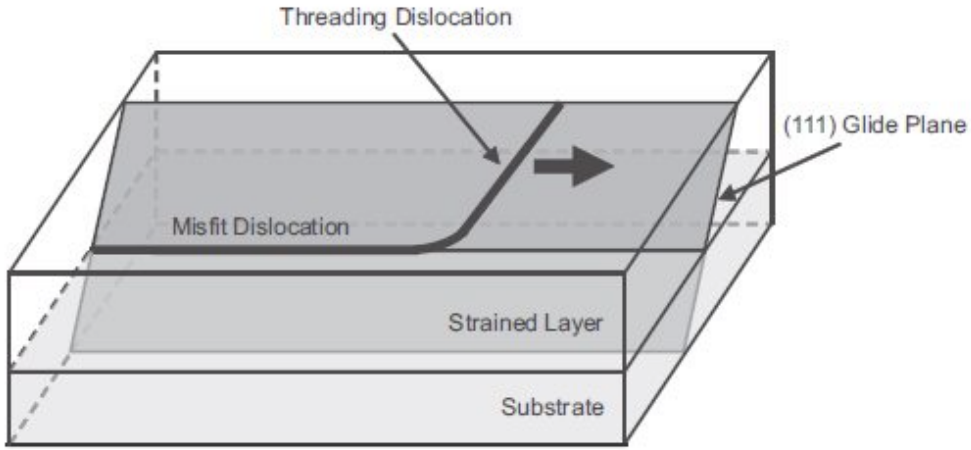
ПЭМ изображение гетероинтерфейса ZnSe/GaAs, демонстрирующее эволюцию сетки ДН с увеличением толщины слоя

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

- Экспериментальные данные позволяют выявить несколько механизмов генерации ДН:
  - Изгиб наклонных дислокаций в плоскости гетерограницы и их прорастание из подложки в эпитаксиальный слой. Этот механизм эффективен при высокой плотности дислокаций в подложке.

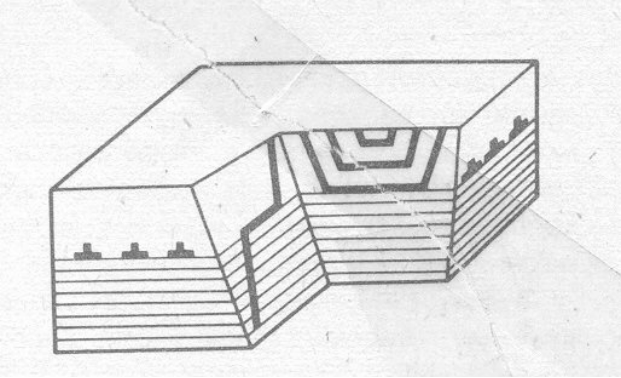




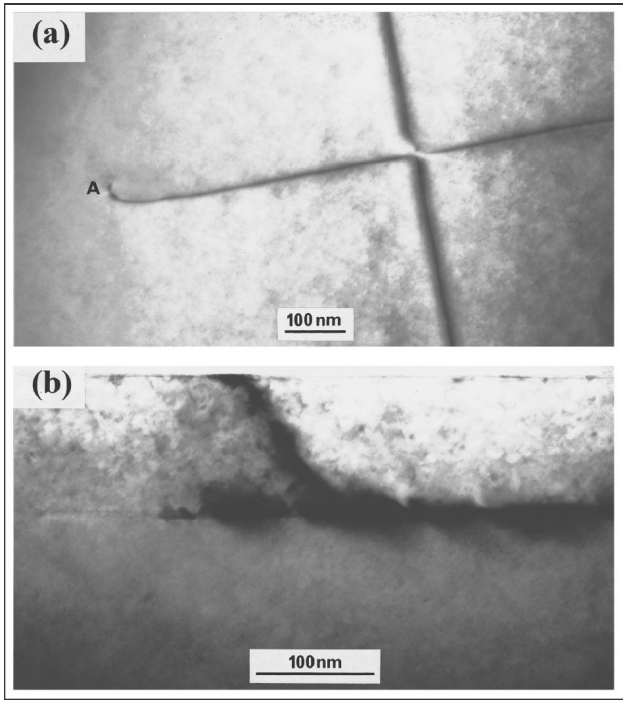


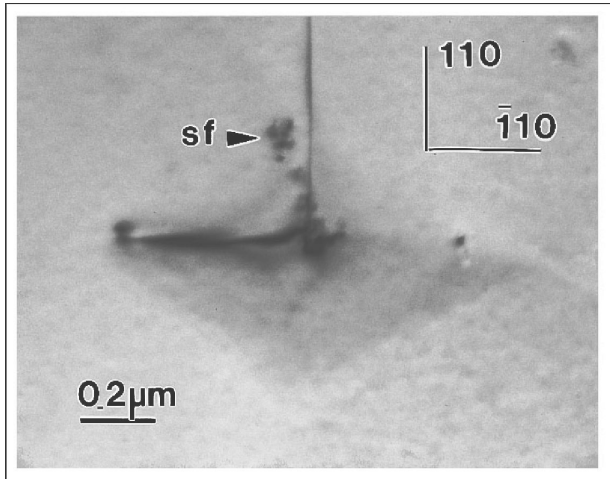
Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

- Гетерогенное зарождение полупетель на поверхности роста и их последующее прорастание в плоскость гетерограницы путем скольжения. Скольжение осуществляется последовательным переключением связей.



Зарождение полупетель наиболее вероятно в процессе осаждения слоя на участках с высокими локальными напряжениями. Такими концентраторами напряжений могут служить края пленки, царапины, микровключения, дефекты упаковки и т.д.
Генерация полупетель может происходить при гетероэпитаксии даже на бездислокационных подложках.





ПЭМ изображение с поверхности гетероинтерфейса ZnSe/GaAs, демонстрирующее зарождение ДН на выступе поверхности

ПЭМ изображение с поверхности и в геометрии поперечного сечения, демонстрирующее генерацию ДН в слое ZnSe толщиной 100 нм, выращенного на подложке GaAs (МПЭ)

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

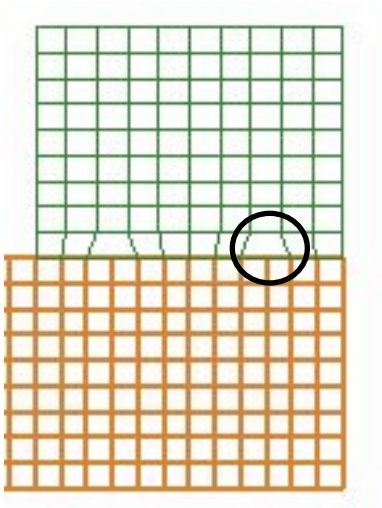
- Пластическая деформация приводит к уменьшению напряжений. Часть упругой энергии превращается в энергию дислокаций, другая ее доля идет на работу, совершаемую кристаллической решеткой при расширении или сжатии объема твердой фазы после частичной релаксации упругих напряжений. Третья часть упругой энергии остается в кристалле и реализуется через остаточную деформацию.

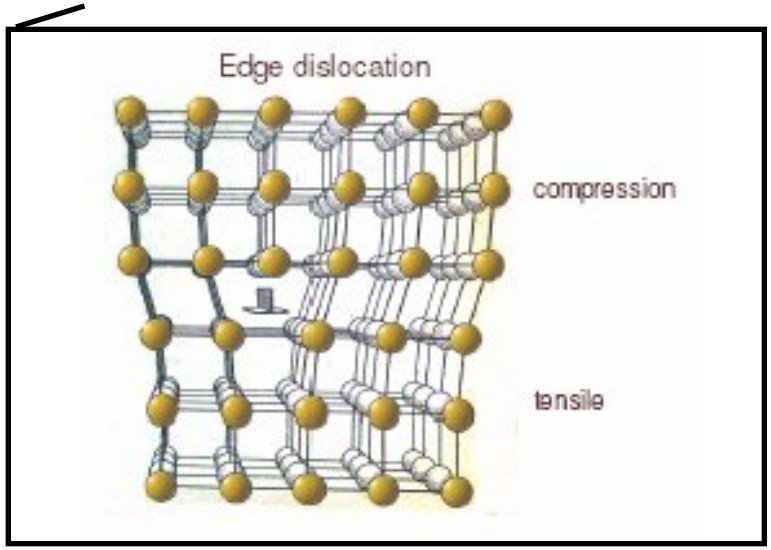
Модель Matthews-Blakeslee

Энергия деформации решетки на единицу длины дислокации:
[см., напр., Hirth J., Lothe J., Theory of dislocations, 1982]

$$E_1 = \frac{Gb^2\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{4\pi\left(1-\nu\right)}\left[\ln\left(\frac{R}{r_c}\right)+1\right]$$

G – модуль сдвига, ν - коэффициент Пуассона (отношение относительной поперечной деформации элемента тела к его относительной продольной деформации), ϕ - угол между вектором Бюргерса и осью дислокации, b – вектор Бюргерса, R – кратчайшее расстояние от оси дислокации до свободной поверхности (параметр обрезания) - ограничивает радиус, за которым можно пренебречь влиянием упругого потенциала, r_c – размер ядра дислокации





Энергия на единицу длины краевой дислокации: $E_1 = \frac{Gb^2}{4\pi\left(1-\nu\right)}\left[\ln\left(\frac{R}{r_c}\right)+1\right]$

Энергия на единицу длины винтовой дислокации: $E_1 = \frac{Gb^2}{4\pi}\left[\ln\left(\frac{R}{r_c}\right)+1\right]$

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

В приближении изотропного кристалла $\nu_{(100)} = \dfrac{c_{12}}{c_{11}+c_{12}} \sim 0.33;$

В первом приближении $R = h;\ \ r_c = b\sin\vartheta;\ \ \vartheta -$ угол между плоскостью скольжения и межфазной границей

Если плоскость гетерограницы ориентирована по грани (100), то ϑ=54,74°

В $A^{III}B^{V}$ устранение дилатационного несоответствия осуществляется за счет образования 60° (ϕ=60°) дислокаций, ориентированных в направлении [110] с вектором Бюргерса $b = \dfrac{a}{2}[110] = a/\sqrt{2}$

В частично релаксированном состоянии гетероструктуры часть несоответствия f_D аккомодируется дислокациями и одновременно в эпитаксиальном слое присутствует однородная упругая деформация ε_r

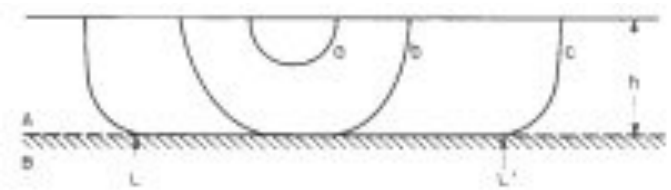
Остаточная упругая деформация уменьшается пропорционально числу дислокаций и проекции краевой компоненты вектора Бюргерса на плоскость границы раздела

Если принять, что дислокации вводятся в границу раздела путем скольжения полупетель с поверхности роста, то для линейной плотности ДН получим:

$$N_D = f_D/\left(b\sin\varphi\cos\vartheta\right) = \frac{f-\varepsilon_r}{b\sin\varphi\cos\vartheta}$$

Для случая, когда релаксация напряжений сопровождается образованием ортогональной сетки, энергия дислокаций на единицу площади:

$E_D = E_1 2N_D$ *множитель «2» учитывает две скрещенные системы из параллельных ДН*



Стадии нуклеации и роста дислокационных полупетель: кривая (a) представляет докритическую дислокационную полупетлю, (b) представляет полупетлю, которая стабильна под действием напряжений несоответствия, (c) изображает проросшую петлю, с генерацией сегмента LL/ дислокации несоответствия, h - толщина слоя.

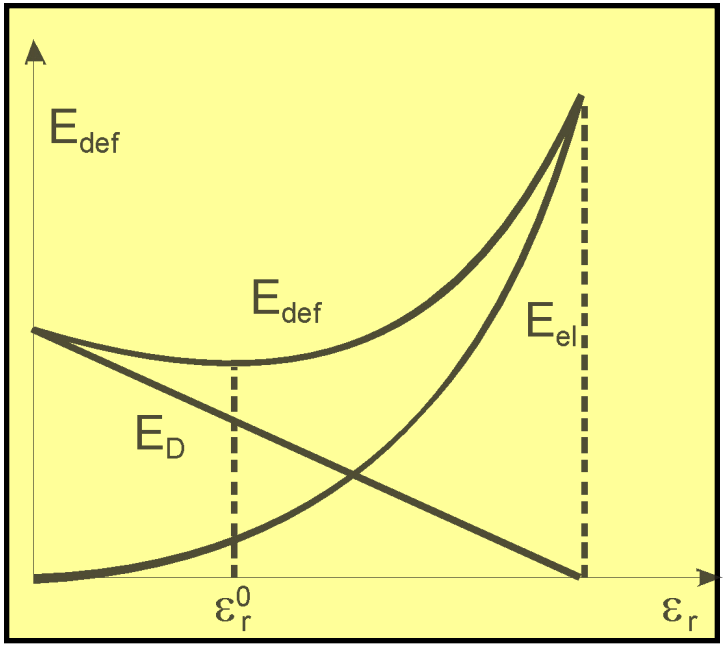
Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

$$E_{def} = E_D + E_{el}$$

Степень релаксации упругих напряжений определяется минимумом суммарной энергии остаточной упругой деформации и энергии образования ДН

Упругая энергия однородно деформированного эпитаксиального слоя единичной площади толщиной h в изотропном приближении $E_{el} = \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)}\varepsilon_r^2 h$

$$E_{def} = E_D + E_{el} = 2\frac{(f-\varepsilon_r)}{b\sin\varphi\cos\vartheta}\frac{Gb^2\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{4\pi(1-\nu)}\left[\ln\left(\frac{h}{b\sin\vartheta}\right)+1\right]+\frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)}\varepsilon_r^2 h$$



Устойчивому состоянию отвечает минимум энергии деформации:

$$\frac{dE_{def}}{d\varepsilon_r} = 0 \Rightarrow \frac{Gb\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{2\pi(1-\nu)\sin\varphi\cos\vartheta}\left[\ln\left(\frac{h}{b\sin\vartheta}\right)+1\right] = \frac{4G(1+\nu)}{(1-\nu)}\varepsilon_r h$$

Равновесное значение упругой остаточной деформации:

$$\varepsilon_r^0 = \frac{b\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{8\pi(1+\nu)\sin\varphi\cos\vartheta h}\left[\ln\left(\frac{h}{b\sin\vartheta}\right)+1\right]$$

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

$$\varepsilon_r^0 = \frac{b\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{8\pi(1+\nu)\sin\varphi\cos\vartheta h}\left[\ln\left(\frac{h}{b\sin\vartheta}\right)+1\right] \qquad (*)$$

Наибольшее значение упругой деформации $\varepsilon_r^0 = f$ реализуется при псевдоморфном росте.
Уравнение (*) теряет свой смысл, если толщина эпитаксиального слоя меньше критического значения.
В предельном случае:

$$h_c = \frac{b\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{8\pi f(1+\nu)\sin\varphi\cos\vartheta}\left[\ln\left(\frac{h_c}{b\sin\vartheta}\right)+1\right]$$

Уравнение **Мэттьюза-Блэксли**. Получено на основе деформационного равновесия гетероструктур. Не содержит модулей сдвига и в этом смысле является универсальным, т. к. применимо для описания любых гетеросистем

В структуре сфалерита при малых рассогласованиях решеток на гетерогранице энергетически выгодно образование полных 60-градусных (ϕ=60°) дислокаций несоответствия, ориентированных в направлении [110] с вектором Бюргерса $b = \frac{a}{2}[110] = a/\sqrt{2}$

Пример:

При осаждения слоя на подложку (100), ϑ =54,74° получим

$h_c =$ 170 нм для f = 0 (a = 0,6 нм)

На практике часто пользуются упрощенным уравнением

$$h_c = \frac{b}{2f}$$

Для рассмотренного выше примера $h_c =$ 215

Даже в структурах с закритическими толщинами существенная часть несоответствия аккомодируется за счет упругих искажений

$h =$ 500 нм, f = 0 , a = 0,6 нм ⟹ $\varepsilon_r^0 = 1.39 \cdot 10^{-3}$

Пример расчета критической толщины по модели М-Б для системы ZnCdSe/GaAs(001)

ZnCdSe

CdSe ZnSe

$a1 := 6.077$ $a2 := 5.668$ $agaas := 5.65326$

$c11_1 := 6.67$ $c12_1 := 4.63$

$c11_2 := 8.26$ $c12_2 := 4.98$

$x := 0.4$ состав твердого раствора (содержание Cd)

$as := agaas$

$a := a1 \cdot x + a2 \cdot (1 - x)$ период решетки слоя (в ангстремах)

$a = 5.8316$

$f := \frac{(a - as)}{a}$

$f = 0.0306$ расссогласование слоя с подложкой GaAs

$c11 := c11_1 x + c11_2 \cdot (1 - x)$

$c12 := c12_1 x + c12_2 \cdot (1 - x)$

$\upsilon := \frac{c12}{c11 + c12}$ $\upsilon = 0.3883$

$b := \frac{a}{\sqrt{2}}$ $b = 4.1236$

$\phi := 60deg$ $\theta := 54.74deg$ $\sin(\theta) = 0.8165$ $\cos(\theta) = 0.5773$

$A := \frac{b \cdot \left(1 - \upsilon \cdot \cos(\phi)^2\right)}{8\pi \cdot \cos(\theta) \sin(\phi) (1 + \upsilon) f}$ $A = 6.9793$

Нахождение критической толщины по стандартной модели Мэттьюза-Блексли

$B := \frac{1}{b \cdot \sin(\theta)}$ $B = 0.2949$

$h := 1000$ начальное приближение (в ангстремах)!!!

Given

$h = A \cdot (\ln(B \cdot h) + 1)$ критическая толщина по стандартной модели МБ (в ангстремах) !!!

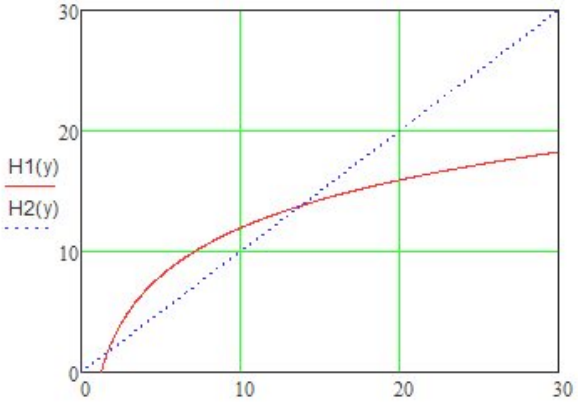
$Find(h) = 13.7879$

break

Графическое решение

$H1(y) := A \cdot (\ln(B \cdot y) + 1)$

$H2(y) := y$



Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

- Формула МБ приводит к заниженным значениям критической толщины, что обусловлено замедленностью процесса пластической деформации. Образование ДН носит статистический характер и является термически активированным процессом. При низкой температуре эпитаксии кинетика процесса оказывается замедленной, и осаждаемая структура не успевает прийти к равновесному состоянию.

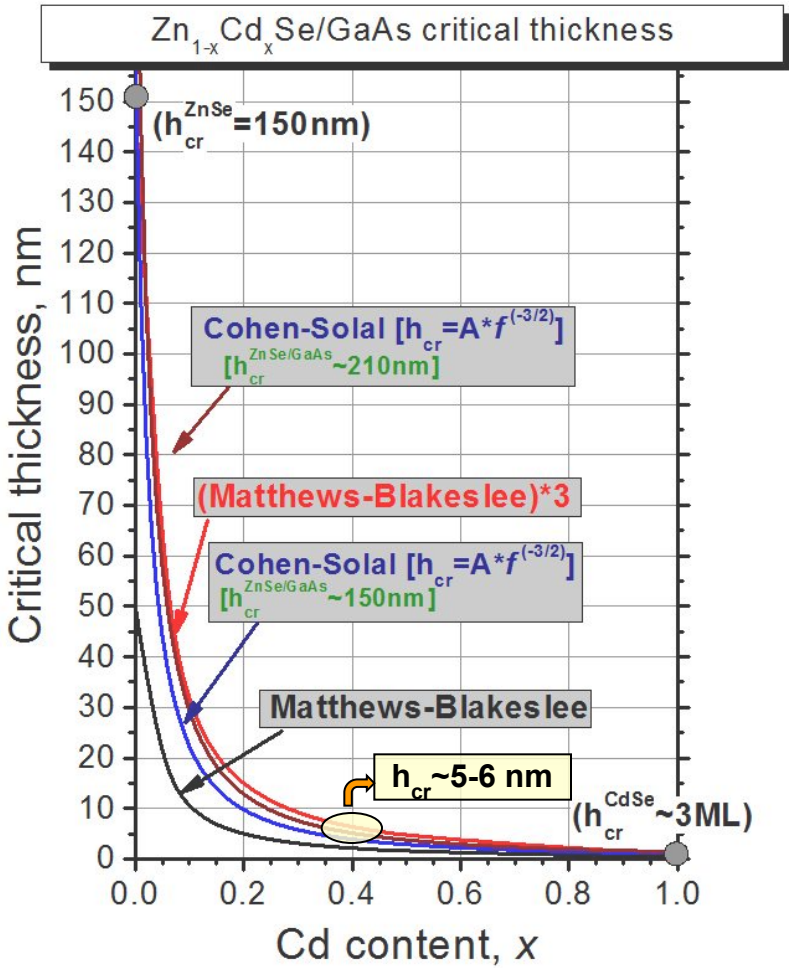
Гетероструктуры с КЯ CdZnSe/ZnSe

Реальные значения h_c обычно в несколько раз превышают расчетные значения

Неопределенность в определении h_{cr} (разброс экспериментальных данных для системы ZnSe/GaAs)

$h_{cr}^{ZnSe/GaAs}$

~ 150 nm [T. Yao, Jpn. J. Appl. Phys. 25 (1986) L544]
~ 150 nm [C.D. Lee et al., JAP 76, 928 (1994)]
~ 170 nm [M.E. Constantino et al., JCG 194, 301 (1998)]
~ 210 nm [A. Benkert et al., APL 90, 162105 (2007)]



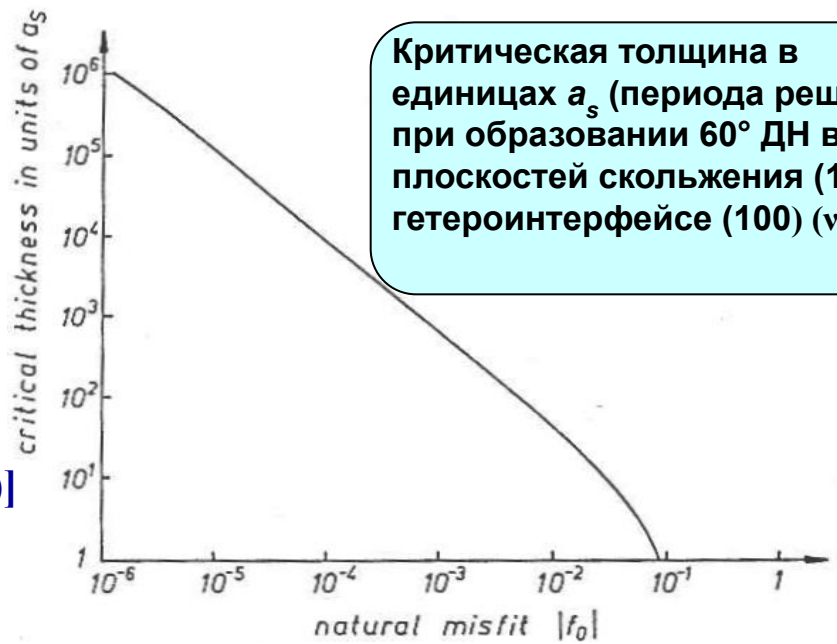
Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

Модификация модели MB

$$h_c = \frac{b\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{8\pi f\left(1+\nu\right)\sin\varphi\cos\vartheta}\left[\ln\left(\frac{\rho h_c}{b}\right)\right]$$

(ρ – численный фактор, учитывающий энергию ядра дислокации)

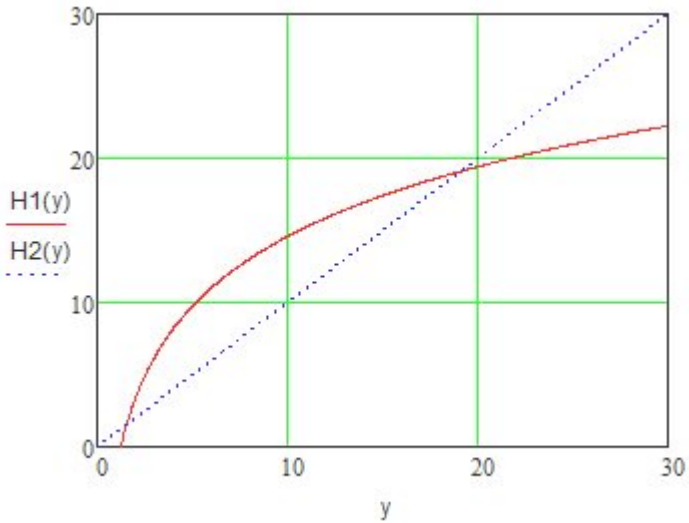
[C.A.B. Ball, J.H. van der Merwe (1983)]



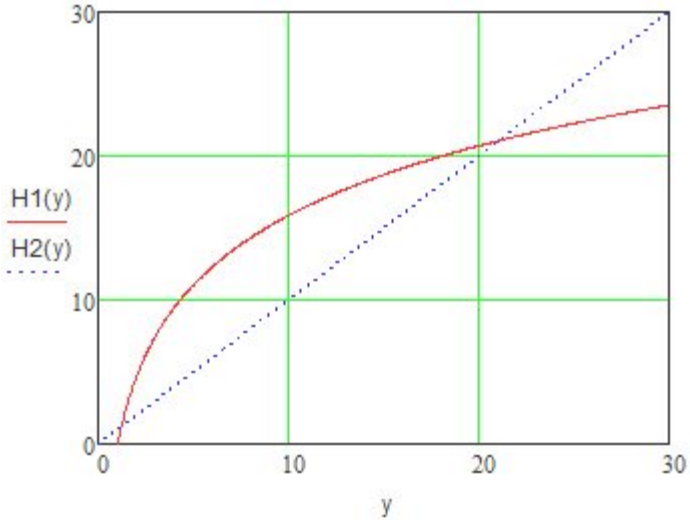
Критическая толщина в единицах a_s (периода решетки) при образовании 60° ДН вдоль плоскостей скольжения (111) на гетероинтерфейсе (100) (ν=0.25)

Для $Zn_{0.6}Cd_{0.4}Se/GaAs$: $f \sim 0.03$

Классическая MB модель



Модифицированная MB модель



Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

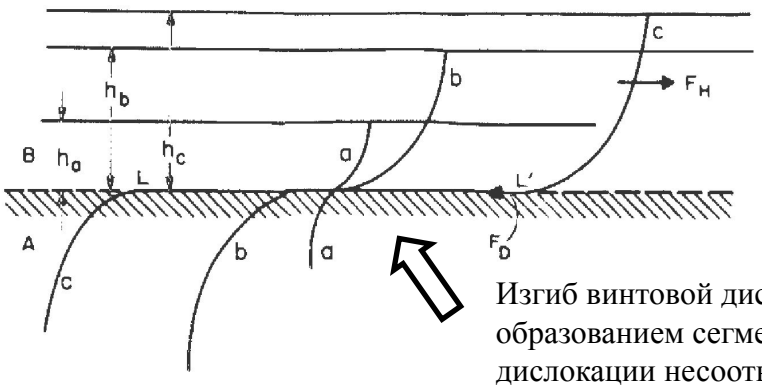
Модель People-Bean (1985)

[R. People and J.C. Bean, Appl. Phys. Lett. 47, 322 (1985)]
[R. People and J.C. Bean, Appl. Phys. Lett. 49, 229 (1986)]

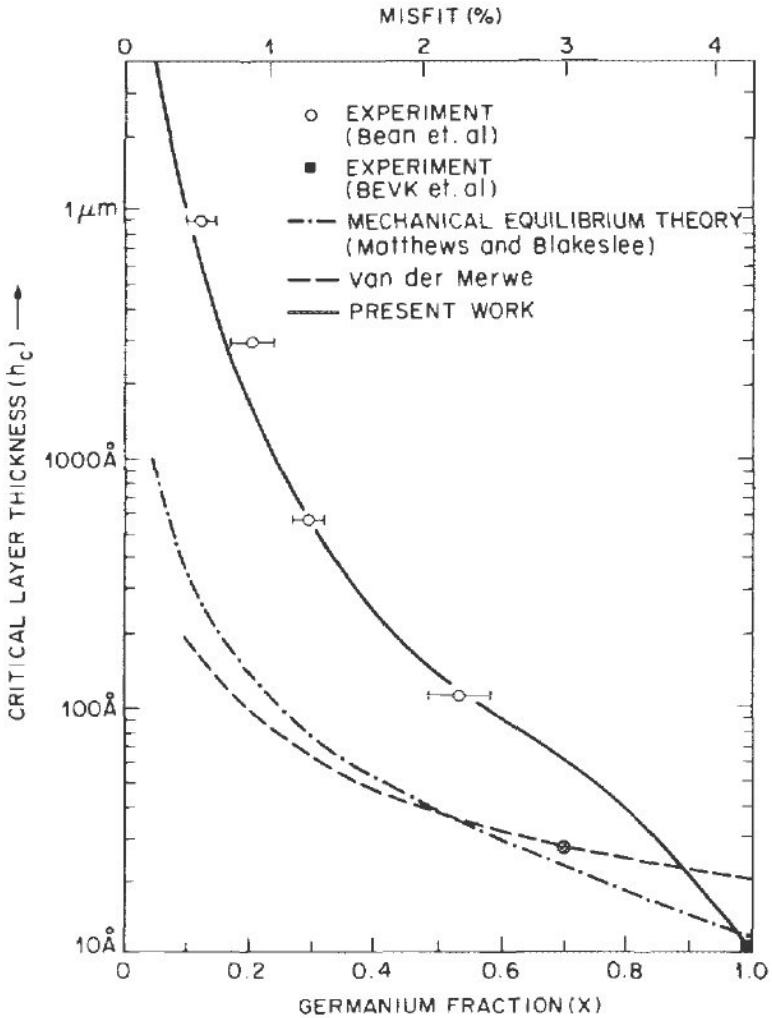
! **Модель Пипла-Бина строится на балансе энергий**. Предположено, что ДН возникают в плоскости гетерограницы лишь в том случае, когда плотность упругой энергии превысит плотность энергии изолированной дислокации.

Постулат Пипла: $E_{el} = E_D$

Плотность энергии краевой дислокации превышает плотность энергии винтовой дислокации на фактор $\beta = 1/(1-\nu)$. При достижении критической толщины слоя винтовая дислокация в подложке изгибается в плоскости гетерограницы и вытягивается с образованием сегмента ДН.



Изгиб винтовой дислокации с образованием сегмента LL/ дислокации несоответствия



Энергия на единицу длины винтовой дислокации: $$E_b = \frac{Gb^2}{4\pi}\left[\ln\left(\frac{R}{r_c}\right)+1\right]$$

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

$$E_{el} = E_D$$

Поверхностная плотность упругой энергии: $E_{el} = \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)} f^2 h$

Трудно оценить плотность энергии, связанной с изолированной винтовой дислокацией

Поверхностная плотность энергии, связанная с изолированной винтовой дислокацией для слоя толщиной h: $E_D = \frac{E_b}{w} = \frac{Gb^2}{4\pi w}\left[\ln\left(\frac{h}{b}\right)+1\right]$

w – протяженность области деформации вдоль плоскости скольжения для изолированной дислокации.
В модели Пипла-Бина для соответствия эксперименту в систему $Si_{1-x}Ge_x/Si$ - ***w=5b***. $b = a/\sqrt{2}$

$$h_c = \left(\frac{1-\nu}{1+\nu}\right)\left(\frac{b}{40\pi}\right)\left(\frac{1}{f^2}\right)\left[\ln\left(\frac{h_c}{b}\right)+1\right]$$

Формула Пипла

для системы $Si_{1-x}Ge_x/Si$

$$h_c \cong \left(\frac{1.9\times 10^{-2}\ \text{Å}}{f^2}\right)\ln\left(\frac{h_c}{4\ \text{Å}}\right)$$

Пример:

для $f = 10^{-3}$, $a = 0.6$ нм $\Longrightarrow$ $h_c \sim 18$ мкм

Значения h_c сильно возрастают по сравнению с МБ. Модель МБ более обоснована, но на практике деформационное равновесие не реализуется, т.к. образование дислокаций – термически активированный процесс и может характеризоваться замедленной кинетикой. Замедленность процессов зарождения и перемещения ДН в условиях достаточно высокой скорости осаждения слоев приводит к «замораживанию» упруго-напряженного состояния гетероструктуры. Реально **распределение дислокаций почти всегда оказывается неравновесным**.

Важно обеспечить согласование периодов решеток при температуре эпитаксии (пластическая деформация маловероятна при охлаждении гетероструктуры, так как экспоненциально возрастает предел текучести). При охлаждении изопериодной гетероструктуры – термоупругие напряжения (как правило, не релаксируют).

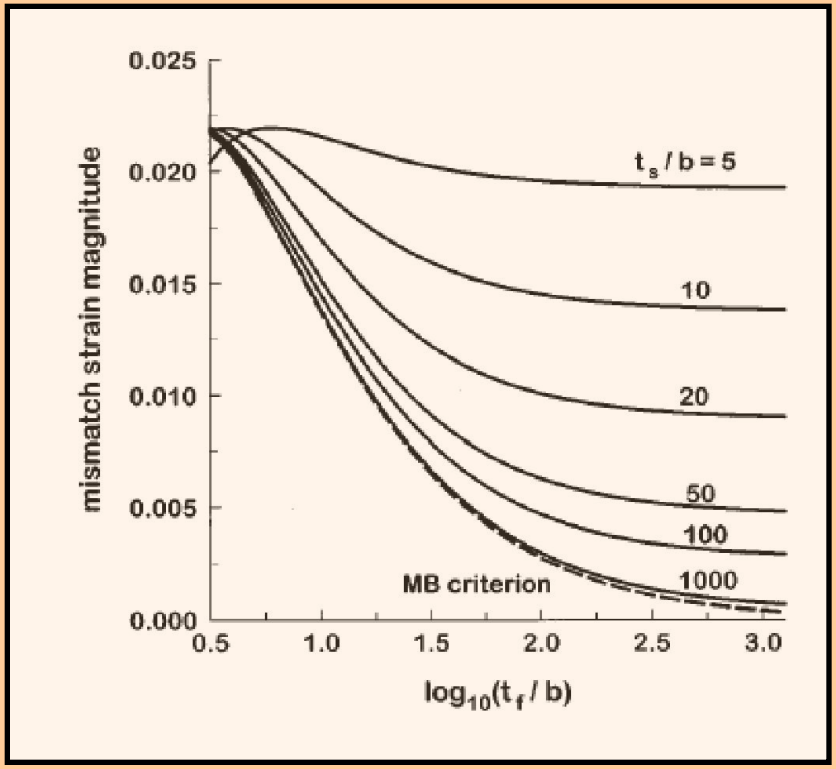
Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

В случае, **когда подложка имеет небольшую толщину и не является абсолютно жесткой, в ней также происходит упругая деформация**. В таких структурах упругая энергия также возрастает с увеличением толщины пленки. **Поскольку часть несоответствия аккомодируется подложкой, критическая толщина псевдоморфного слоя может оказаться существенно больше**.

Уравнение деформационного равновесия с учетом влияния подложки :

$$\frac{h_c h_s\left(h_c^2 - h_c h_s + h_s^2\right)}{\left(h_c + h_s\right)^3} = \frac{b\left(1-\nu\cos^2\varphi\right)}{8\pi f\left(1+\nu\right)\sin\varphi\cos\vartheta}\left[\ln\left(\frac{h_c}{b\sin\vartheta}\right)+1\right]$$

Пример: для $f = 10^{-3}$ имеем $h_s \approx h_c$ 20 нм ($h_c = 0.6$ нм) $a =$



[L.B. Freund , W.D. Nix, A critical thickness condition for a strained compliant substrate/epitaxial film system, Appl. Phys. Lett. **69**(2), 173(1996)]

Зависимость критической толщины для случая релаксации кубического материала с интерфейсом (100) посредством формирования 60° ДН путем скольжения в плоскости {111}.

На рисунке показана **зависимость рассогласования** ε_m, соответствующее условию критической толщины, от нормализованной толщины слоя (t_f/b) (b – вектор Бюргерса) при различной толщине подложки (t_s/b=5,10,20,50,100,1000). Пунктиром показан критерий MB для случая, когда подложка много толще слоя. Во всех случаях ν~1/4.

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

В многослойных гетероструктурах критическую толщину можно оценить по эквивалентной деформации структуры

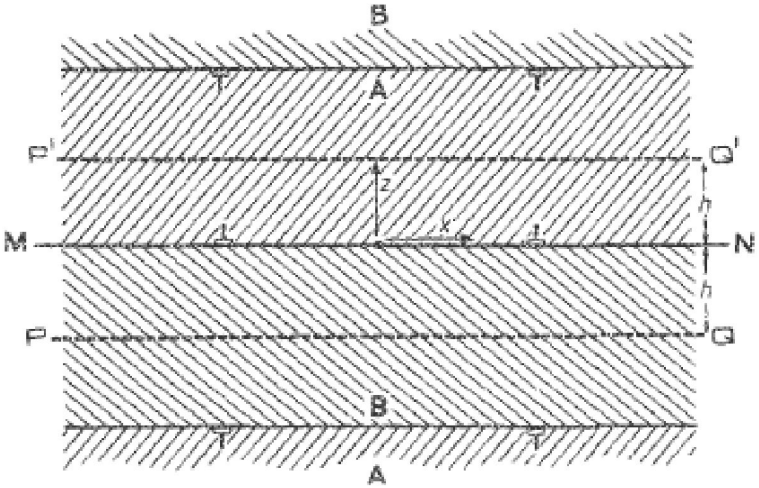
$$\varepsilon_{экв} = \left(\varepsilon_1 d_1 + \varepsilon_2 d_2 + ... + \varepsilon_n d_n\right) \Big/ \sum_n d_n$$

[Jan H. van dar Merwe and W. A. Jesser, Appl. Phys. Lett. 63 (5), 1509 (1988)]

Рассмотрен случай эпитаксиальных сверхрешеток со слоями равной толщины и одинаковыми упругими свойствами. Проведено сравнение энергии ДН в СР по сравнению с толстым одиночным слоем при малых толщинах слоёв СР и малых f.

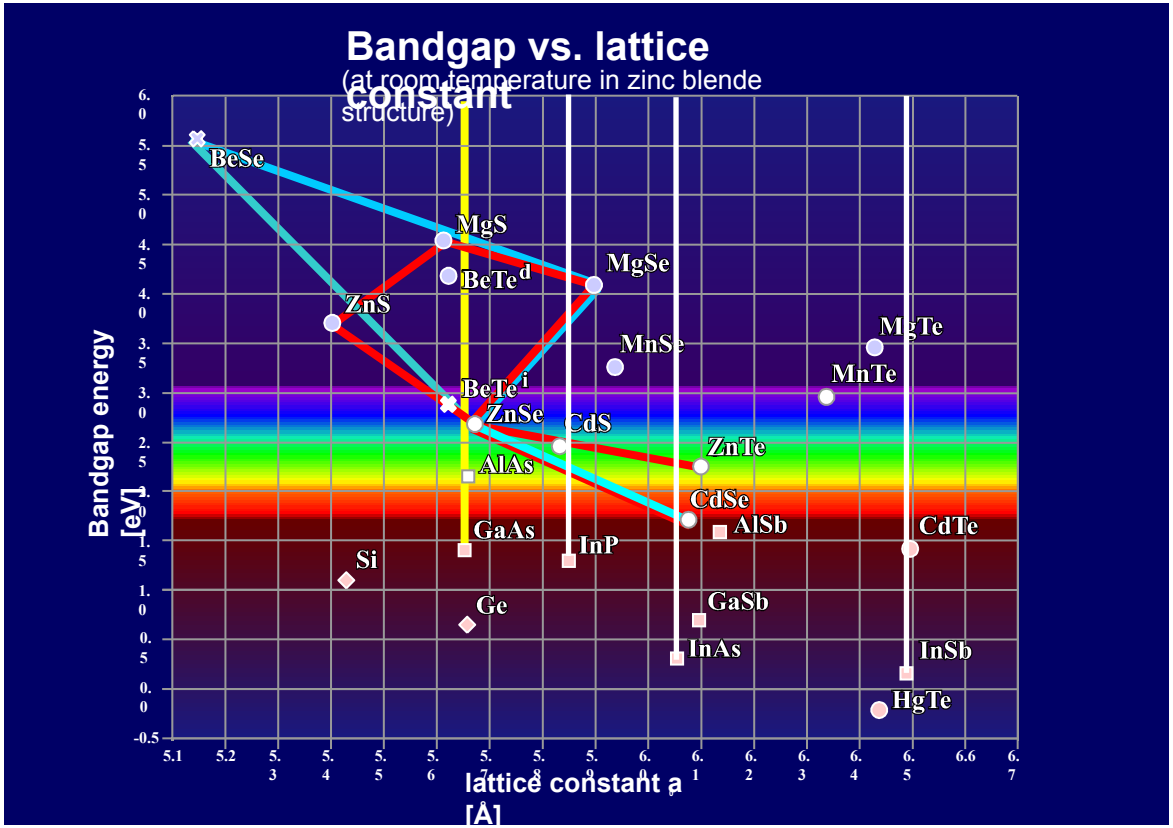
Основной вывод:

Показано, что энергия образования ДН уменьшается на ~20% в случае монослойной СР с малым f по сравнению со случаем роста одиночного монослоя на толстой подложке.



Критическая толщина в случае СР в 4-5 раз превышает h_c для одиночного слоя

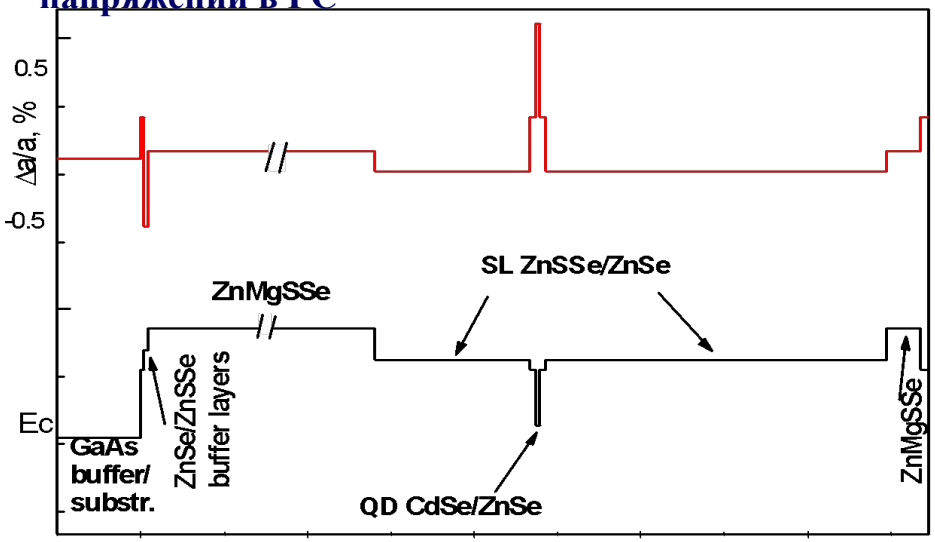
МПЭ широкозонных соединений A^2B^6

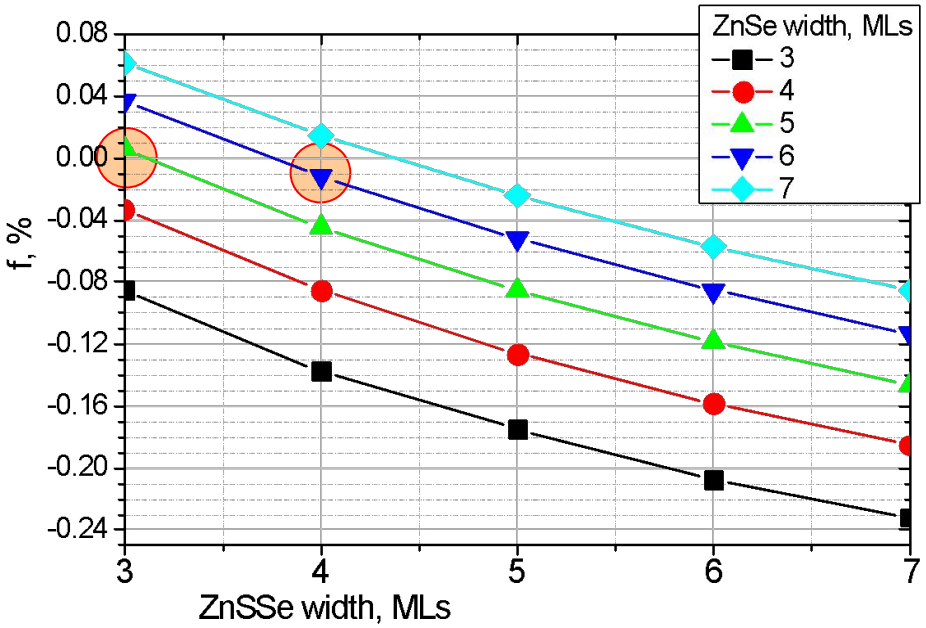


Параметр (*zb*)	GaAs	ZnSe	ZnS	ZnTe	MgSe	MgTe	MgS	CdS	CdSe	BeSe	BeTe
a, Å (300K)	5.653	5.6692	5.410	6.1037	5.91	6.42	5.62	5.825	6.077	5.137	5.617
α_T, 10^{-6} K^{-1}	6.03	7.8	6.71	8.33					6.26*		7.66
E_g^{Γ}, эВ (300K)	1.43	2.721	3.726	2.27	4.0	3.4	4.45	2.46	1.675	5.6	4.1
$c_{11}\cdot10^{-10}$, Па	11.88	8.57	10.2	7.15	7.58*	5.28*	8.88*	7.70	6.67	11.0*	8.87*
$c_{12}\cdot10^{-10}$, Па	5.38	5.07	6.46	4.08	4.86*	3.66*	5.53*	5.39	4.63	6.66*	5.54*
$c_{44}\cdot10^{-10}$, Па	5.94	4.05	4.46	3.11	3.17*	1.93*	3.87*	2.36	2.23	5.03*	3.86*

Концепция компенсации упругих напряжений и применение переменно-напряженных сверхрешеток при конструировании лазерных ГС A^2B^6

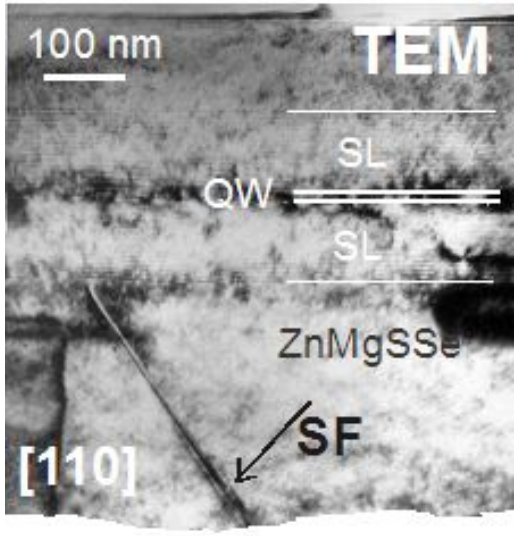
Схематическая зонная диаграмма лазерной ГС с сверхрешеточным волноводом и профиль напряжений в ГС



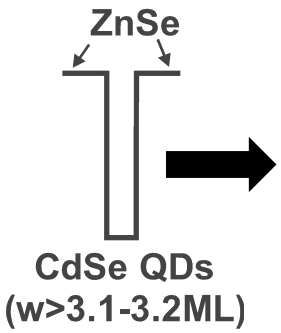


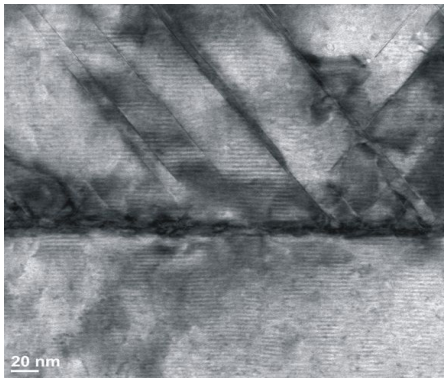
Применение переменно-напряженных СР типа $ZnS_{0.15}Se/ZnSe$, согласованных по периоду решетки с GaAs обеспечивает:

- ✔ *Безостановочный режим роста без изменения потоков элементов и температуры подложки*
- ✔ *Дополнительную защиту активной области от проникновения и распространения протяженных и точечных дефектов*
- ✔ *Эффективный транспорт носителей к активной области лазерной гетероструктуры*
- ✔ *Большую критическую толщину по сравнению с объемными слоями с тем же рассогласованием периода решетки с подложкой [van der Merwe et. al., J.Appl. Phys. 63, 1509 (1988)]*



Гетероструктуры с КТ CdSe/CdZnSe/ZnSe, излучающие в желтом спектральном диапазоне

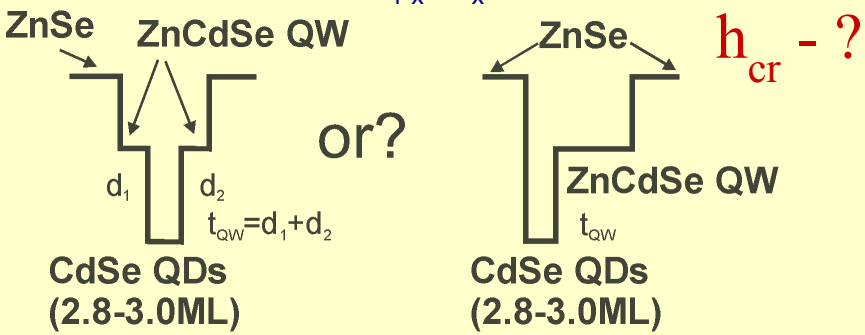




- ✔ высокая плотность дефектов
- ✔ низкая эффективность ФЛ

Наш подход:

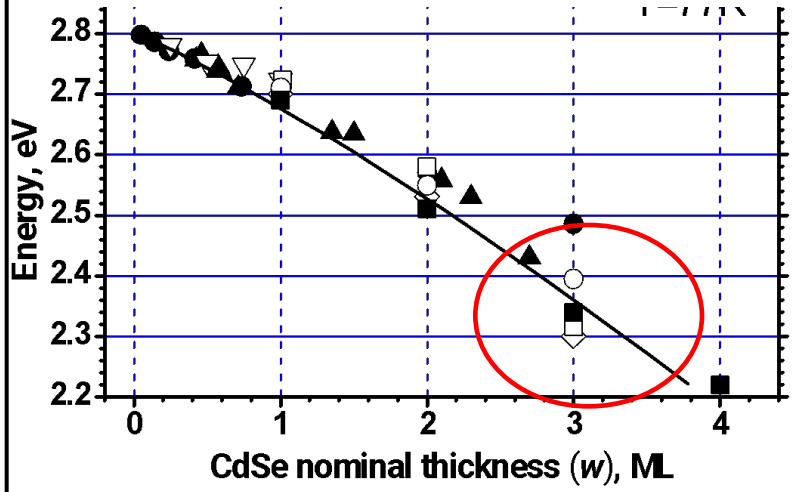
Формирование слоя КТ CdSe (*w* = 2.8-3.0 МС) в напряженной КЯ $Zn_{1-x}Cd_xSe/ZnSe$



x=0.3-0.5

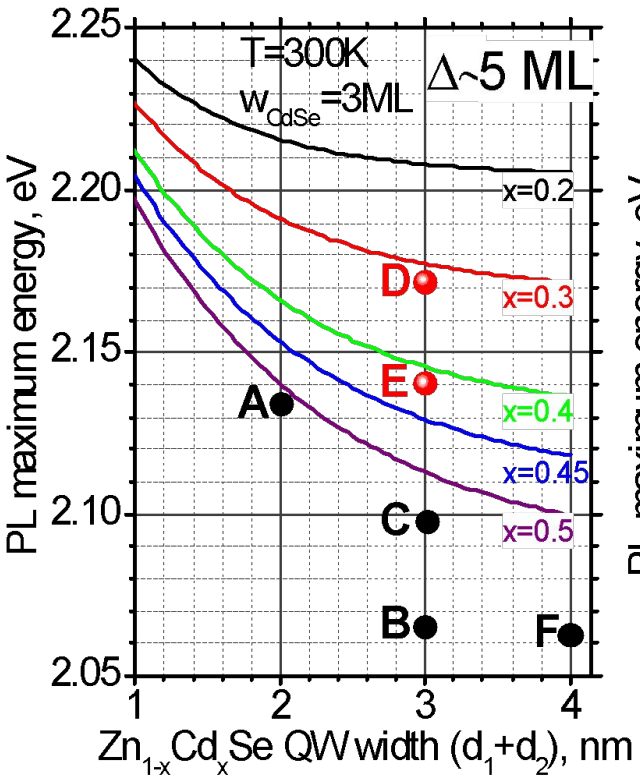
$t_{QW}=d_1+d_2$=2-4 нм

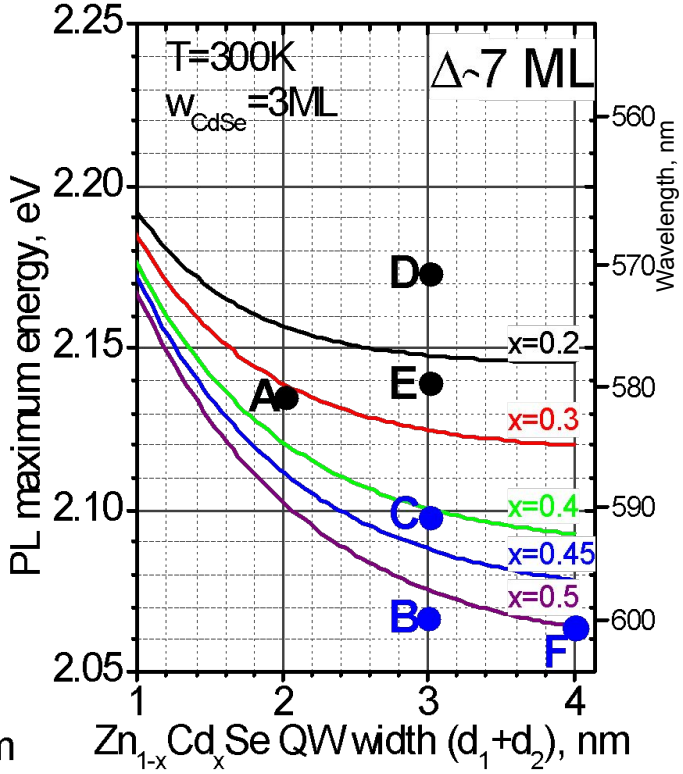
Зависимость положения максимума в спектре ФЛ при T=77K для наноструктур CdSe/ZnSe с одиночными вставками CdSe от номинальной толщины слоя CdSe (*w*)

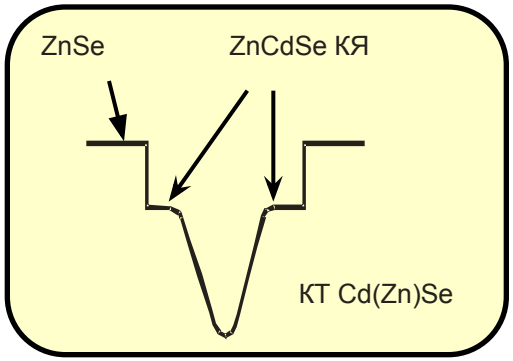


Необходима компенсация сильных напряжений сжатия, индуцированных дополнительной КЯ $Zn_{1-x}Cd_xSe/ZnSe$

Гетероструктуры с КТ CdSe/CdZnSe/ZnSe, излучающие в желтом спектральном диапазоне. Расчеты энергии ФЛ в системе CdSe/ZnCdSe/ZnSe КТ и эксперимент

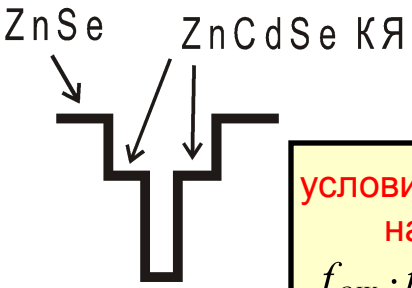






Sample	E_{PL}, eV (300K)	E_{PL}, eV (77K)	Cd content (*x*) in $Zn_{1-x}Cd_xSe$ QW	ZnCdSe QW width, nm
A	2.134	2.183	0.37	2
B	2.065	2.116	0.44	3
C	2.097	2.144	0.42	3
D	2.169	2.220	0.35	3
E	2.139	2.187	0.38	3
F	2.052	2.105	0.44	4

Гетероструктуры с КТ CdSe/CdZnSe/ZnSe, излучающие в желтом спектральном диапазоне. Компенсационные СР

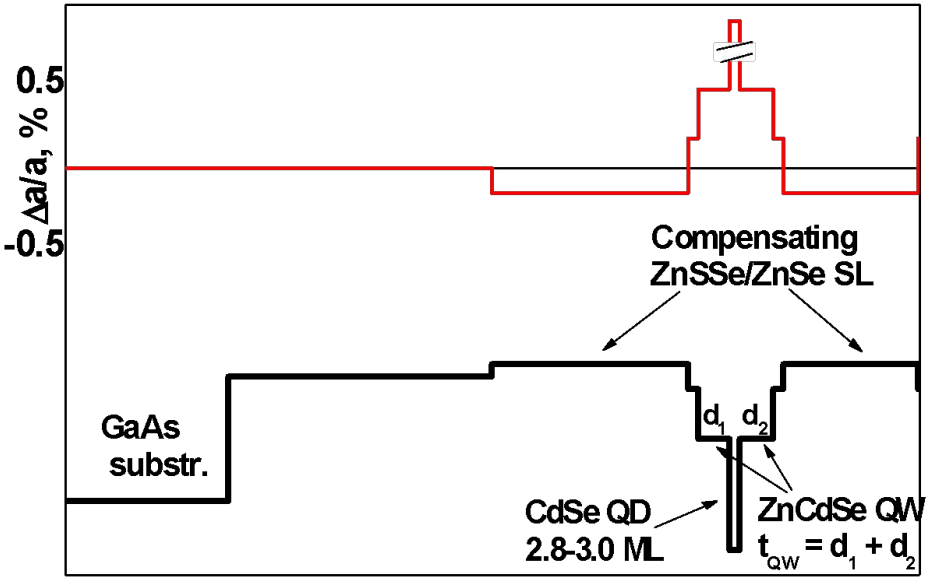


x=0.3-0.5
$t_{QW}=d_1+d_2$=2-4 нм

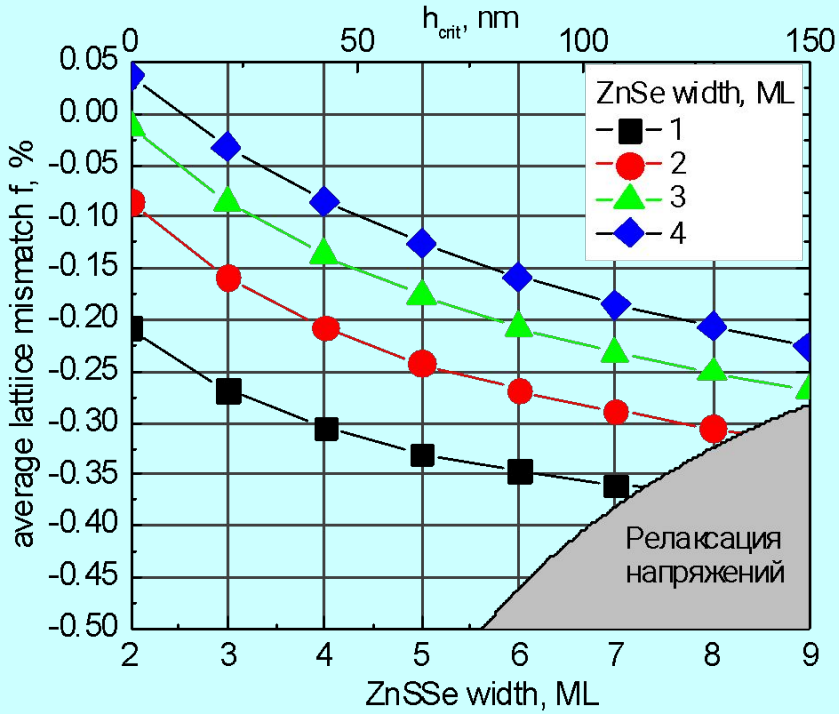
условие компенсации напряжений

$$f_{QW} \cdot t_{QW} + f_{SL} \cdot t_{SL} = 0$$

Необходимо введение в конструкцию структур переменно-напряженных СР типа $ZnS_{0.15}Se_{0.85}/ZnSe$, обладающих напряжениями растяжения относительно подложки GaAs

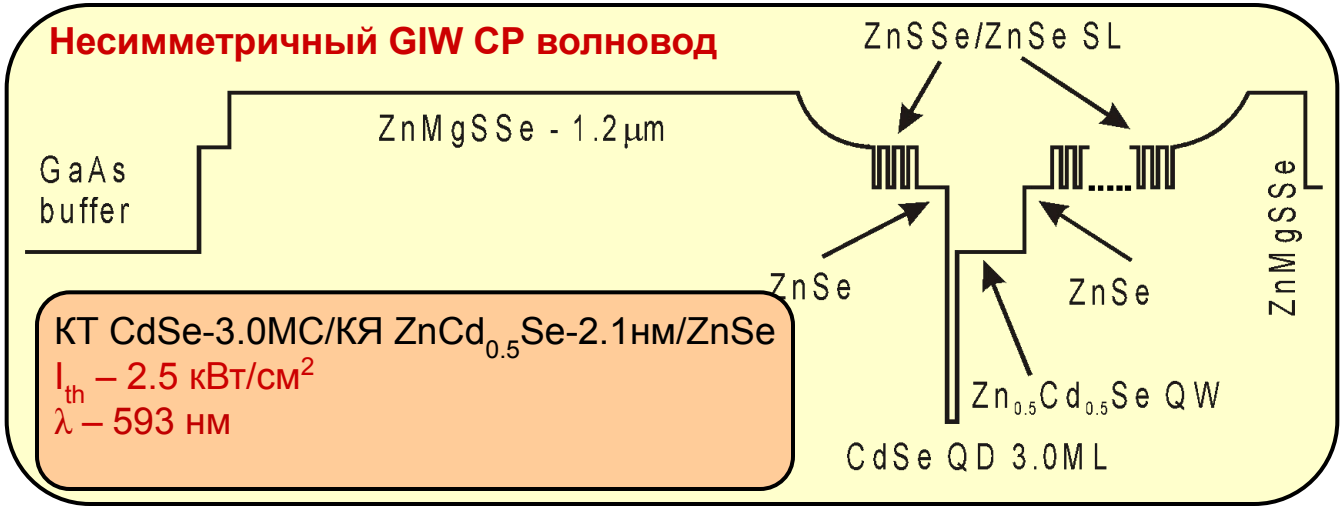


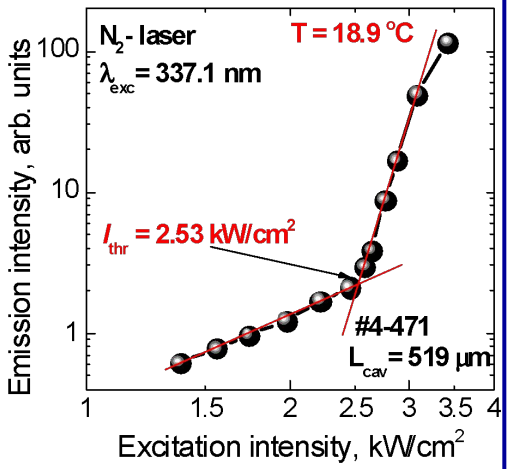
Зависимость среднего рассогласования по периоду решетки с подложкой GaAs для различных СР типа $ZnS_{0.15}Se_{0.85}/ZnSe$



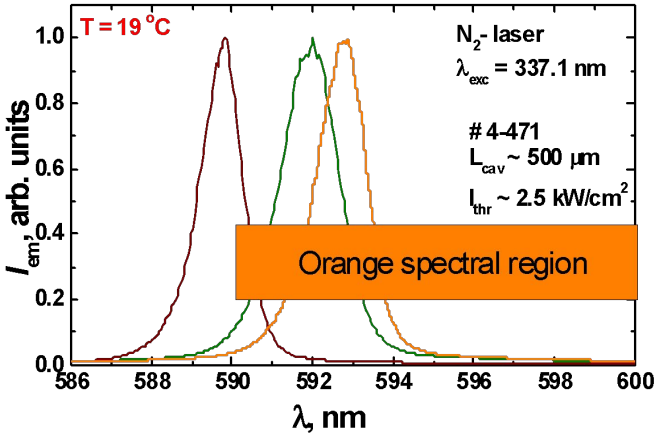
С.В. Сорокин и др., ФТП 49(3), 342 (2015)
S.V. Gronin et al., Acta Physica Polonica A 126(5), 1096 (2014)

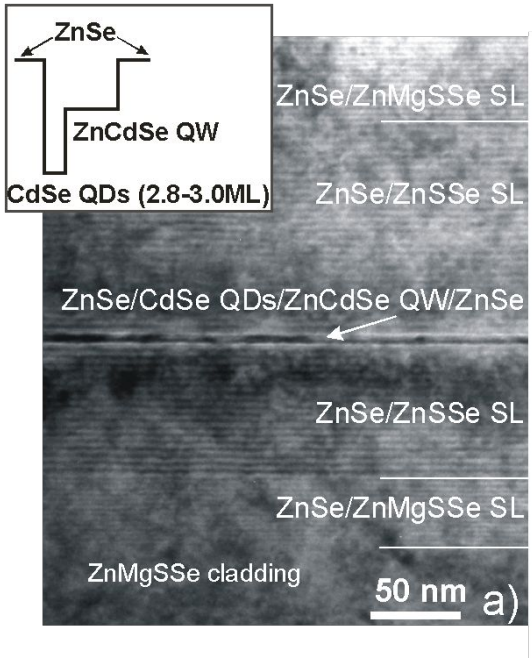
A^2B^6 лазеры, излучающие в желтом и оранжевом диапазонах спектра

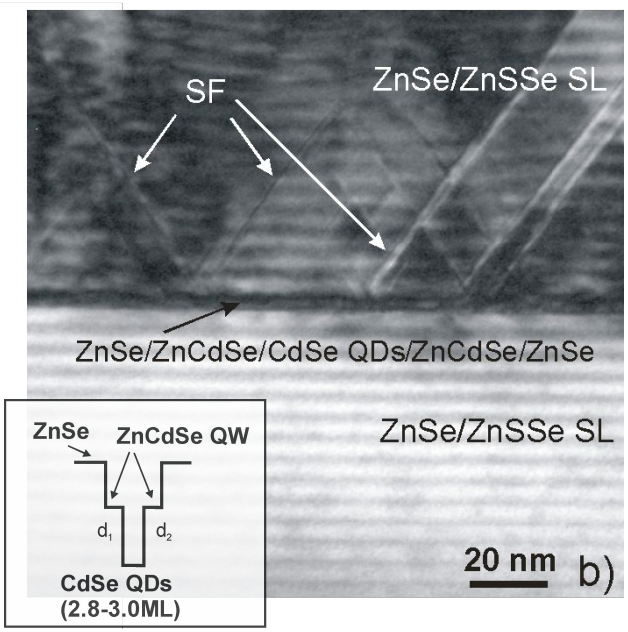




Спектры излучения с торца резонатора





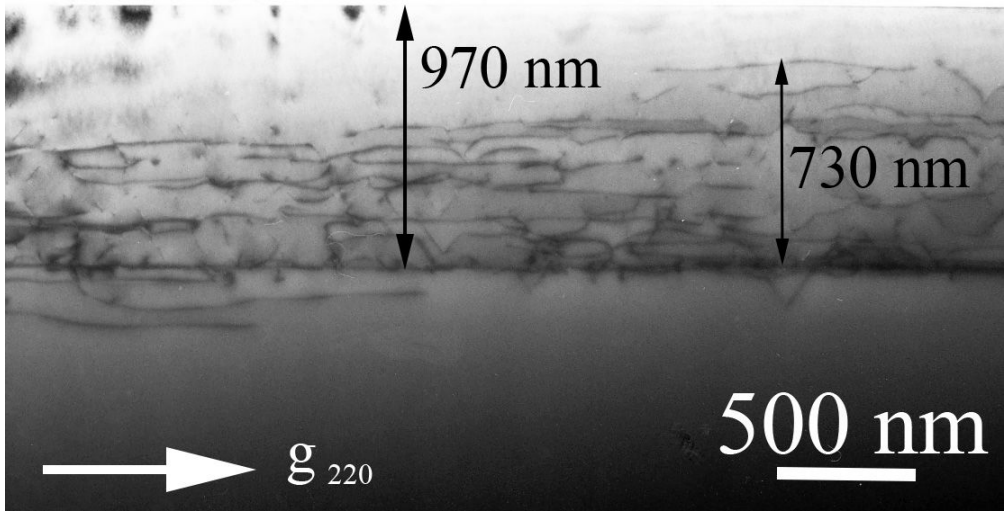


Пластическая релаксация в градиентных слоях (на примере системы $In_xGa_{1-x}As$)

Дислокационная структура может формироваться и в градиентных слоях. **Градиент состава и обусловленный им градиент рассогласования решеток не снижает общего числа ДН, однако способствует их более равномерному распределению в структуре. Сетка ДН имеет многоэтажный характер**.

Применение **концепции метаморфного роста** позволяет значительно улучшить характеристики гетероструктур, выращиваемых на рассогласованных подложках, а также расширить функциональные возможности полупроводниковых приборов, выращиваемых на подложках GaAs методом молекулярно-пучковой эпитаксии.

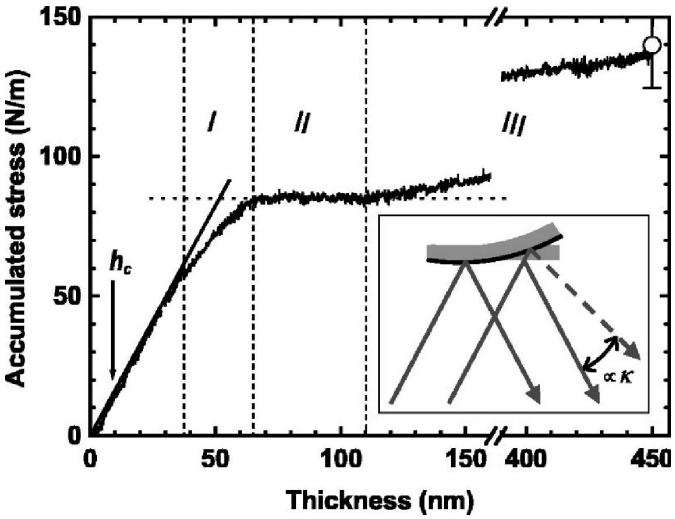
Стандартный подход заключается в выращивании буферного слоя материала с требуемой постоянной решетки и при этом достаточной толщины, для того чтобы снять напряжения несоответствия посредством образования дислокаций и их «захоронения» в глубине структуры ниже слоя совершенного материала.



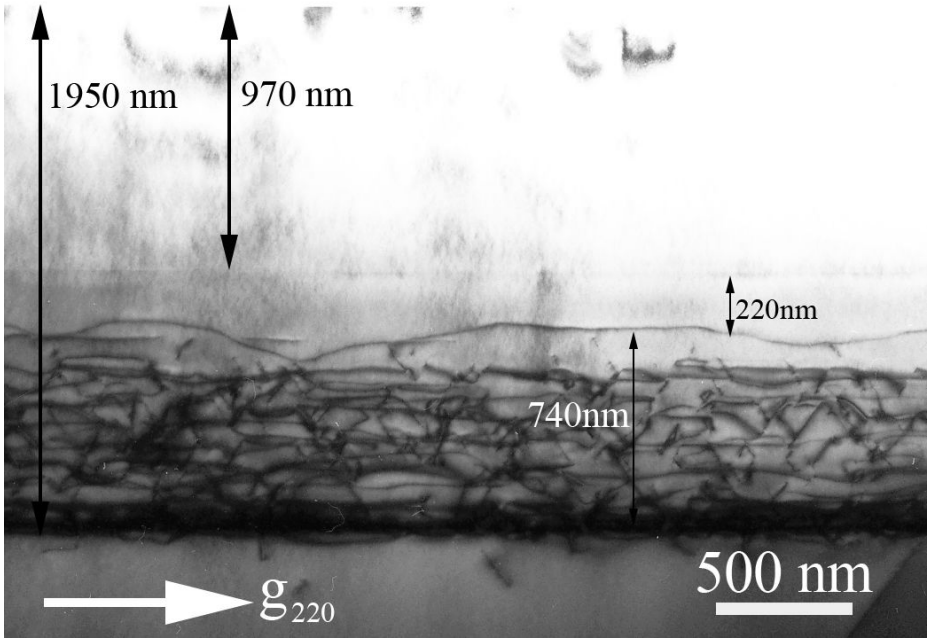
Изображение, полученное методом просвечивающей электронной микроскопии в геометрии поперечного сечения, структуры с 1μm-$In_xGa_{1-x}As$ метаморфным буферным слоем с линейным профилем изменения состава

В слоях с линейным градиентом состава не происходит полной релаксации упругих напряжений. Остаточная деформация в этих структурах приводит к образованию вблизи поверхности МБС напряженной области, свободной от дислокаций (или, корректнее, области с низкой плотностью ПД), в то время как в остальной части метаморфного буфера наблюдается практически полная релаксация напряжений посредством образования ДН

Пластическая релаксация в градиентных слоях (на примере системы $In_xGa_{1-x}As$)



In situ измерения аккомодированных напряжений при МПЭ $In_xGa_{1-x}As$ (x=0.2) толщиной 450 нм, скорость роста 0.5 МС/с. Прямая линия показывает зону псевдоморфного роста.
[M. U. González et al., Appl. Phys. Lett. 81, 4162 (2002).



ПЭМ изображение в геометрии поперечного сечения структуры с 1μm-$In_{0.3}Ga_{0.7}As$ слоем, выращенном на поверхности МБС

Остаточная деформация в МБС слоях должна быть учтена при последующем росте структуры. Эта задача решается посредством согласования периода решетки последующей структуры с латеральным периодом решетки буферного слоя. Другими словами, необходимо уменьшить состав верхнего слоя на такую величину (так называемая обратная ступень (Δx) – step-back), чтобы латеральный период решетки у поверхности напряженного градиентного слоя был равен равновесному (ненапряженному) периоду решетки верхнего слоя

Пластическая релаксация в градиентных слоях (на примере системы $In_xGa_{1-x}As$)

[J. Tersoff, Dislocations and strain relief in compositionally graded layers, Applied Physics Letters 62, 693-5 (1993)]

[D. J. Dunstan, Strain and strain relaxation in semiconductors, J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 8, 337–75 (1997)]

[F. Romanato, E. Napolitani, A. Carnera, A.V. Drigo, L. Lazzarini, G. Salviati, C. Ferrari, A. Bosacchi, and S. Franchi, Strain relaxation in graded composition $In_xGa_{1-x}As$/GaAs buffer layers, J. Appl. Phys. 86, 4748-55 (1999)]

Согласно модели Данстана [Appl. Phys. Lett. 72, 1875 (1998)]
для слоев с линейным градиентом состава деформация вблизи поверхности ГБС не зависит от толщины градиентного слоя или от достигнутого максимального состава, а толщина напряженной свободной от дислокаций области равна

$$\varepsilon_s = [2K\nu]^{1/2}$$

$$d_c = [2K/\nu]^{1/2}$$

ν - скорость изменения состава градиентного слоя, выраженная в виде эквивалентного напряжения/единицу длины

K - константа релаксации, которая для системы $In_xGa_{1-x}As$/GaAs составляет $K = 0.8 \pm 0.1$ нм

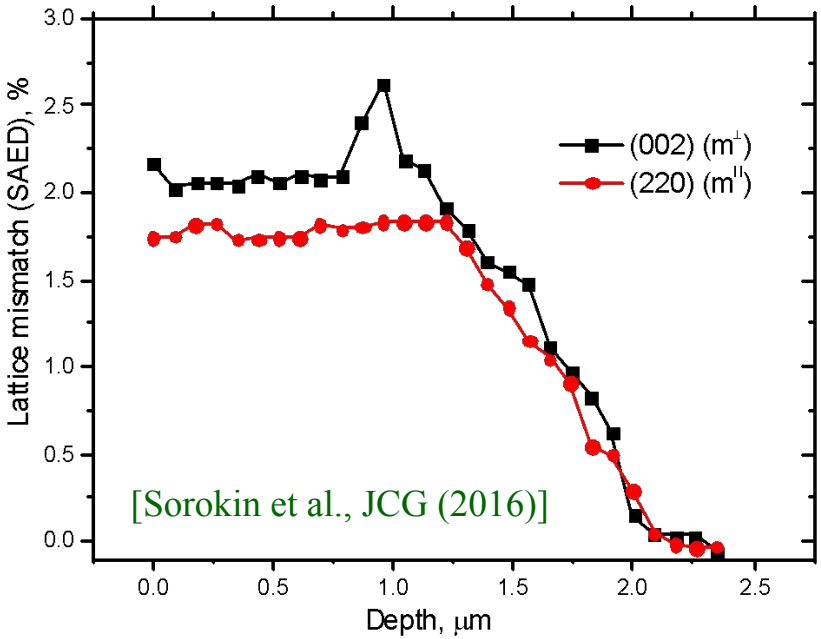
Для того, чтобы в верхнем слое структуры с метаморфным буфером с линейным градиентом состава отсутствовали напряжения

$$\varepsilon_s = \Delta\varepsilon \sim 0.07\Delta x_0$$

$$(0.07 \cdot \Delta x_0)^2 = 2K$$

При скорости изменения состава **30% In/µm** в МБС $In_xGa_{1-x}As$/GaAs

$$\nu = (0.07 \cdot 0.3)/10^3 = 2.1 \cdot 10^{-5}\ нм^{-1} \qquad \Delta x_0 \approx 0.083$$



Метод двухкристальной ренгеновской дифрактометрии

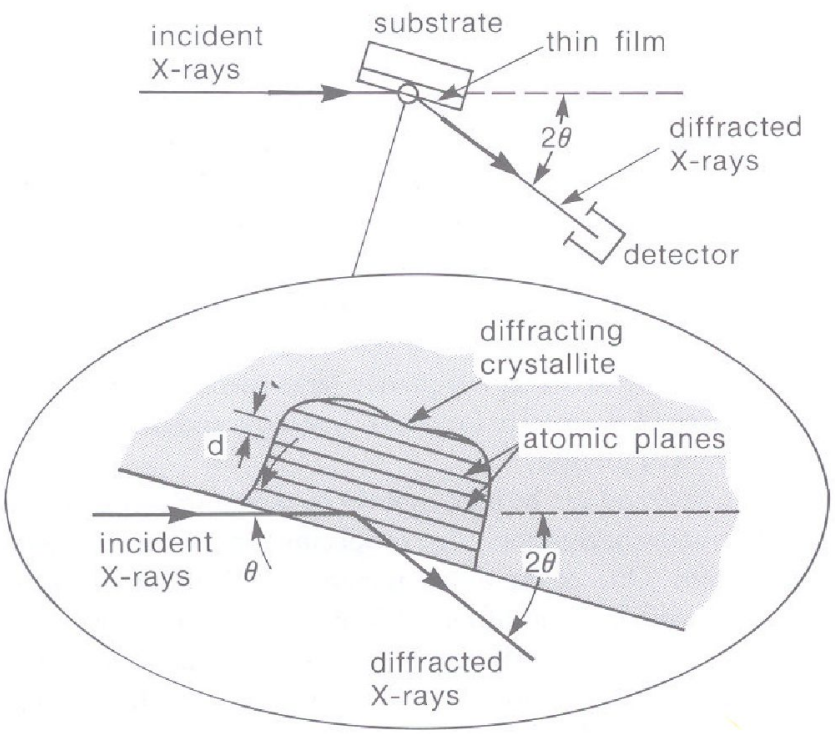
Взаимодействие пучка рентгеновского излучения с веществом сводится к рассеянию излучения на электронных оболочках атомов. Длина волны рентгеновского излучения $10^{-11} \div 10^{-6}$ см близка к расстоянию между атомами в твердом теле (порядка 1 Å), благодаря чему в эксперименте наблюдаются дифракционные эффекты (впервые их зарегистрировал Лауэ, получивший за это Нобелевскую премию).

Дифракция рентгеновских лучей описывается законом Брэгга, задающим угловое положение максимумов дифракции,

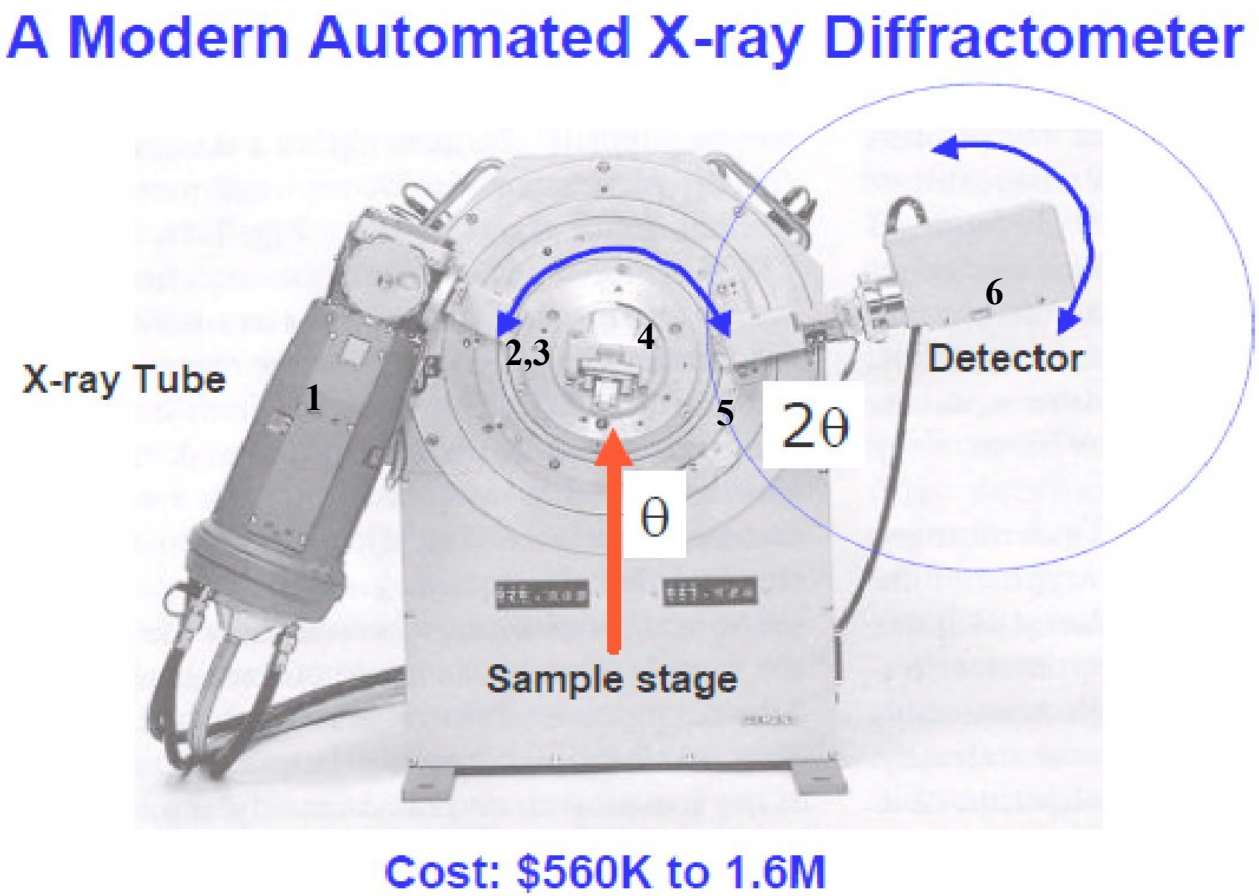
$$\frac{2\sin\Theta_B}{\lambda} = \frac{1}{d_{hkl}}$$

где Θ_B — Брэгговский угол (положение дифракционного максимума), λ — длина волны рентгеновского излучения, h, k, l — индексы Миллера, задающие семейство кристаллических плоскостей, образующих дифракционную решетку, d_{hkl} — расстояние между плоскостями этого семейства.

Таким образом, измерение углового положения максимумов дифракции дает возможность определить расстояние между атомными плоскостями и, следовательно, параметры кристаллической решетки исследуемых образцов

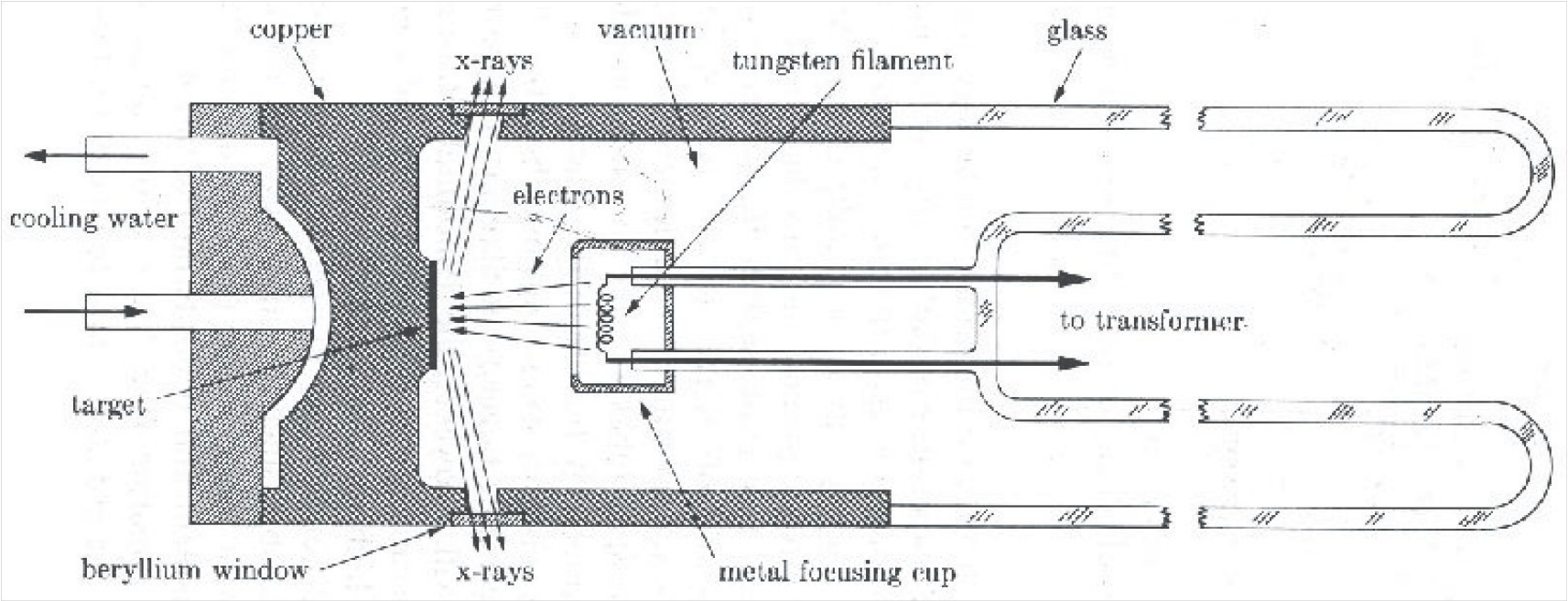


Метод двухкристальной ренгеновской дифрактометрии



<u>Схема дифракционного эксперимента:</u>
1 — трубка, 2 — окно, 3 — монохроматор, 4 — образец, 5 — поворотный столик, 6 — детектор

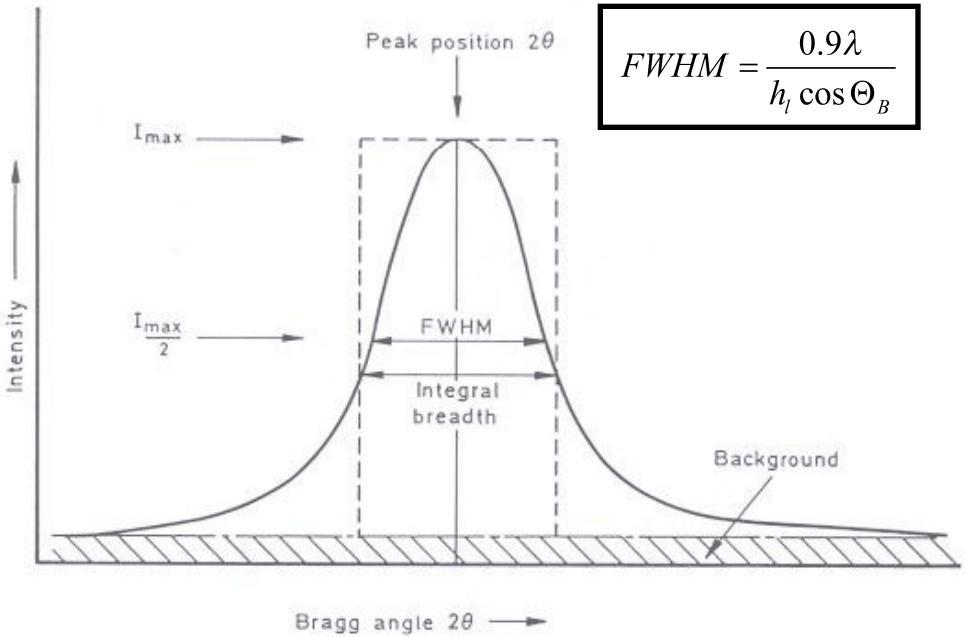
Метод двухкристальной ренгеновской дифрактометрии



Поперечное сечение рентгеновской трубки

Х-лучи образуются при столкновении электронов высокой энергии с металлической мишенью. Источник электронов – нагретая вольфрамовая нить, высокое ускоряющее напряжение между катодом (W) и анодом и металлической мишенью (*Cu*, Al, Mo, Mg). Анод – охлаждаемый водой Cu блок, содержащий металлическую мишень

Интерпретация кривых качания ренгеновской дифрактометрии

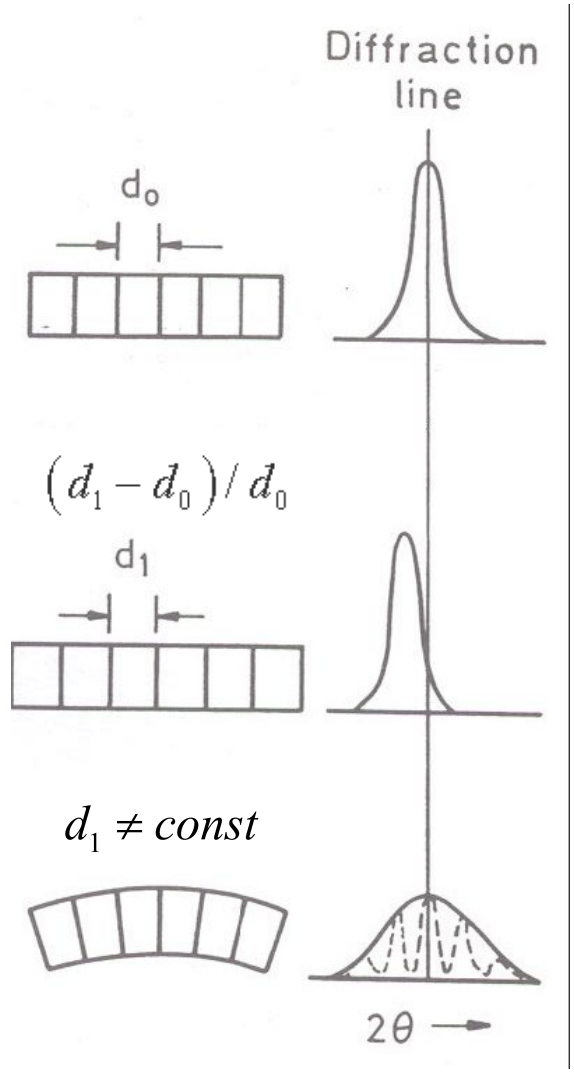


$$FWHM = \frac{0.9\lambda}{h_l \cos\Theta_B}$$

$$\frac{2\sin\Theta_B}{\lambda} = \frac{1}{d_{hkl}}$$

Увеличение FWHM пика может быть вызвано:

- **мозаичностью**
- **неоднородной деформацией**
- **ограниченной толщиной слоя**



Отсутствие деформаций

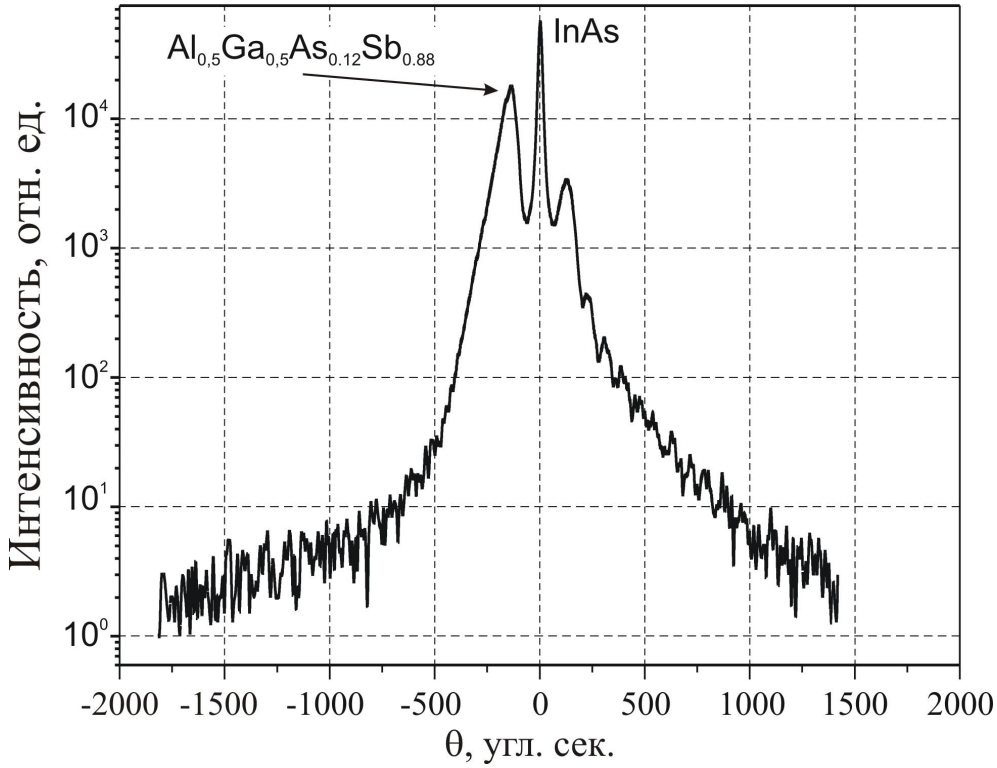
$$(d_1 - d_0)/d_0$$

Однородная деформация. Пик сдвигается без изменения формы.

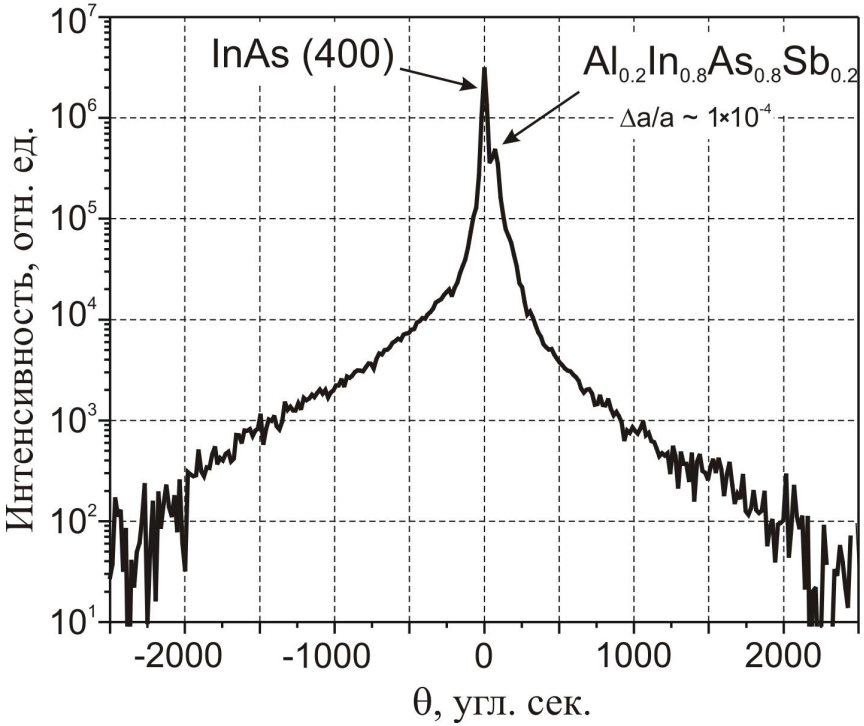
$$d_1 \neq const$$

Неоднородная деформация. Пик уширяется.

Метод двухкристальной ренгеновской дифрактометрии (на примере толстого эпитаксиального слоя)

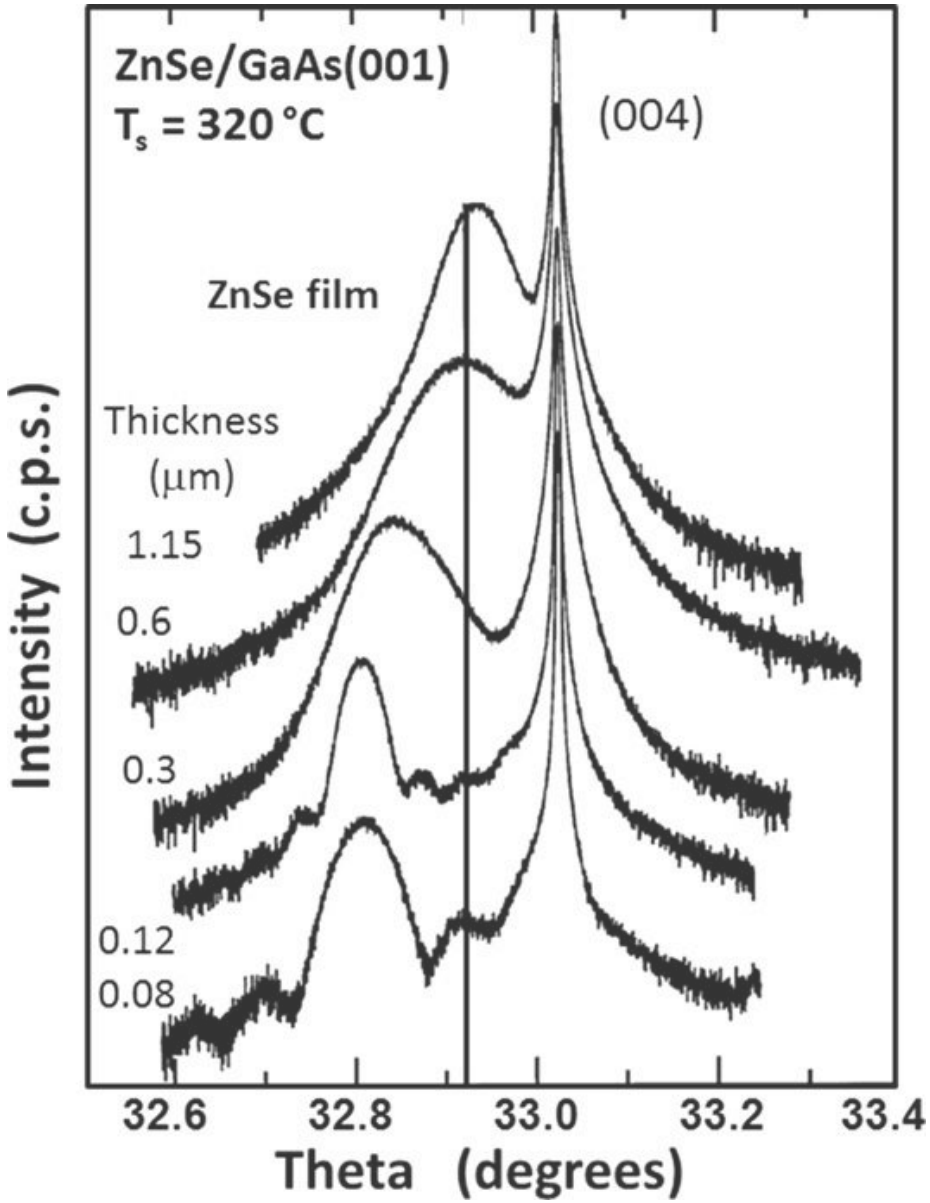


Кривая РД для слоя $Al_{0.5}Ga_{0.5}As_{0.12}Sb_{0.88}$, выращенного на подложке InAs (100) при температуре 480ºС



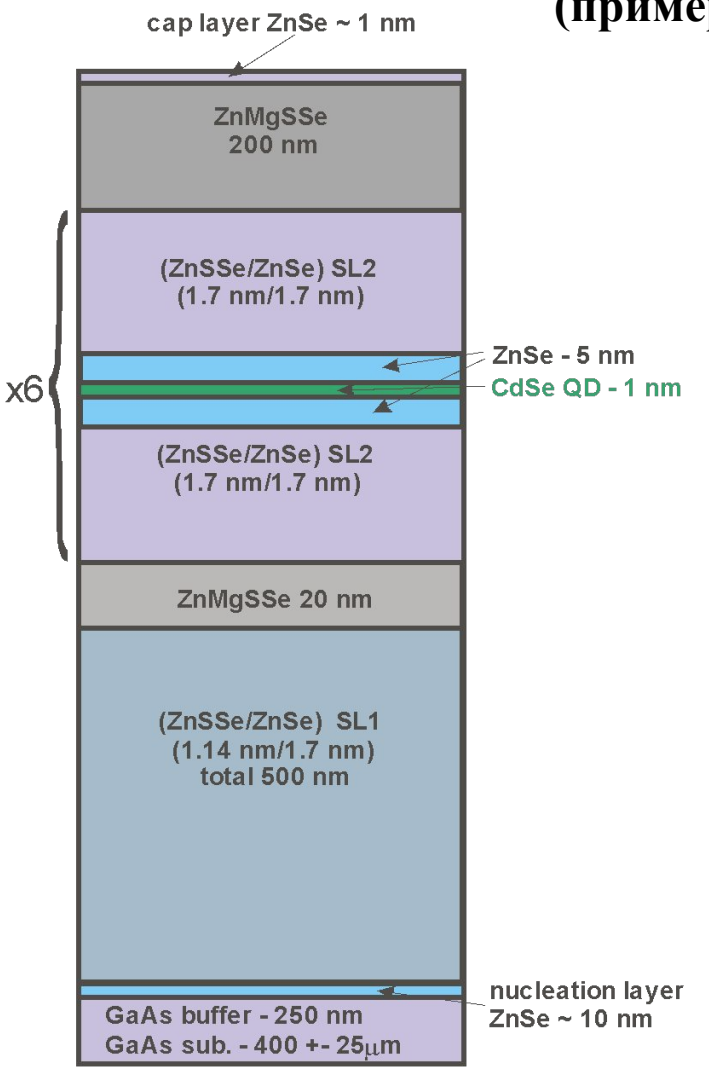
Кривая РД для слоя $Al_{0.2}In_{0.8}As_{0.8}Sb_{0.2}$, выращенного на подложке InAs

Пластическая релаксация и критические параметры гетероструктур

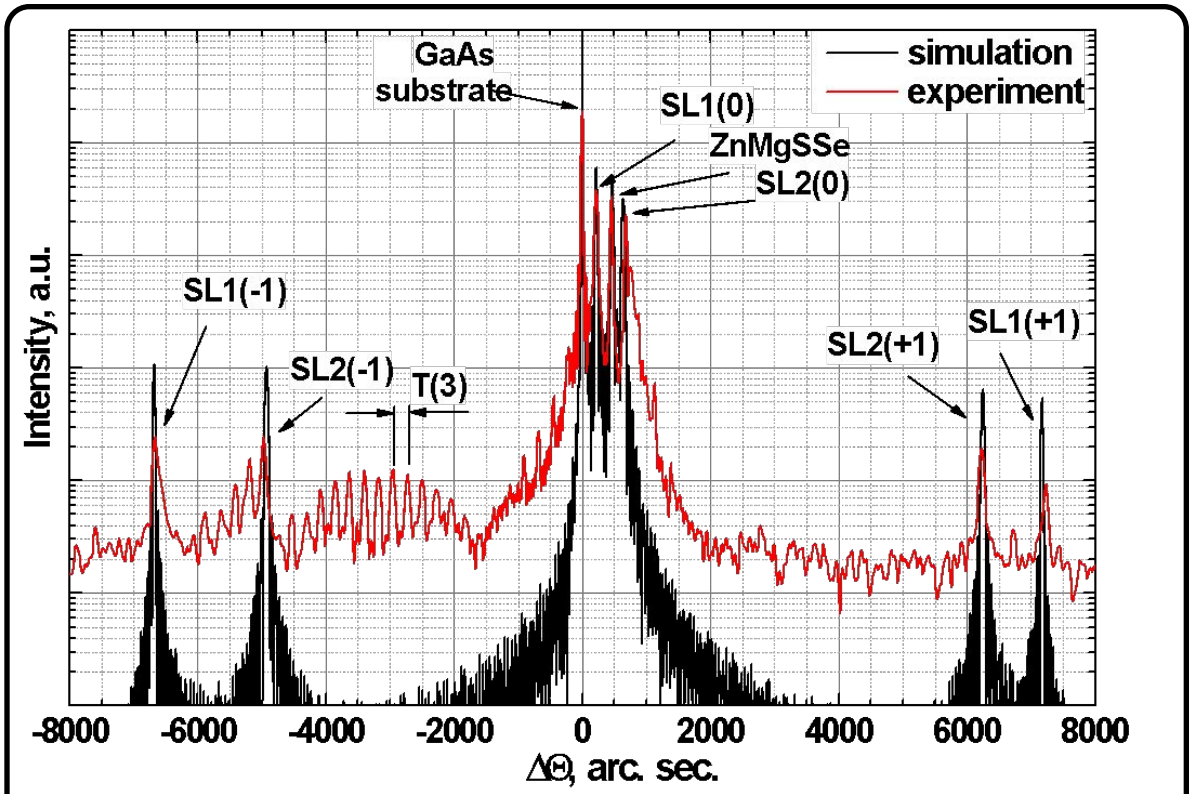


HRXRD дифракционные кривые вблизи рефлекса GaAs (004) для слоёв ZnSe различной толщины. Хорошо видна эволюция напряжений от сжимающих (compressive) до растягивающих (tensile) (за счет большего коэффициента термического расширения ZnSe относительно GaAs) при увеличении толщины слоя ZnSe. Вертикальной линией показано положение для ненапряженного слоя.

Метод двухкристальной ренгеновской дифрактометрии (пример структуры со сверхрешетками)



T(SL1)	2.74 нм
T(SL2)	3.4 нм
T(3)	84 нм



$$t = \frac{\lambda}{2\left(\sin\Theta_1 - \sin\Theta_2\right)} = \frac{\lambda}{4\sin\left(\Delta\Theta/2\right)\cos\left(\frac{\Theta_1+\Theta_2}{2}\right)} = \frac{\lambda}{2\Delta\Theta\cos\left(\Theta_{Br}\right)}$$

Θ_2 и Θ_1 - угловые положения соседних сателлитов

Θ_{Br} - угол Брэгга

$\lambda = 1.54A$ - длина волны ренгеновского излучения

Метод поляризации фотолюминесценции

Плосконапряженное состояние эпитаксиального слоя эквивалентно одноосной деформации, которая вызывает снятие вырождения валентной зоны в точке k=0. **Это проявляется в разделении подзон легких и тяжелых дырок**. При сжатии эпитаксиального слоя вдоль направления роста ближе ко дну зоны проводимости находится подзона легких дырок, а при растяжении подзона тяжелых дырок. При люминесценции реализуются переходы в обе подзоны. Различная поляризация позволяет экспериментально определить энергетический сдвиг между подзонами легких и тяжелых дырок Δ.

Несоответствие периодов решеток связано с расщеплением подзон простыми соотношениями:

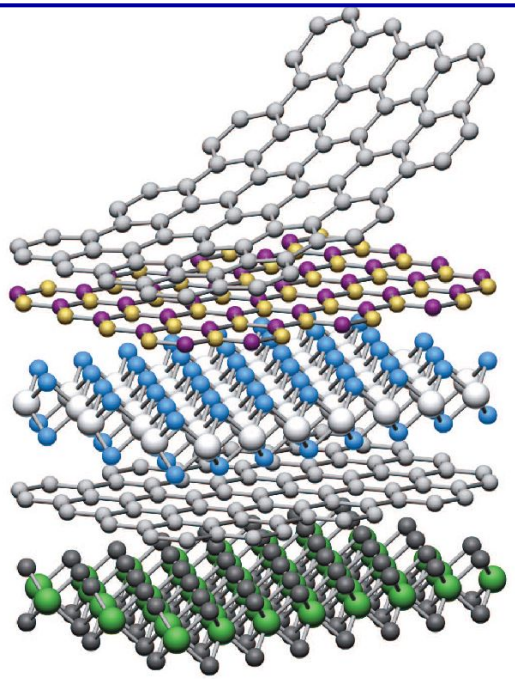
$$f_{\perp} = \left(\frac{\Delta d}{d}\right)_{\perp} = \frac{\Delta_{100}}{2b};$$

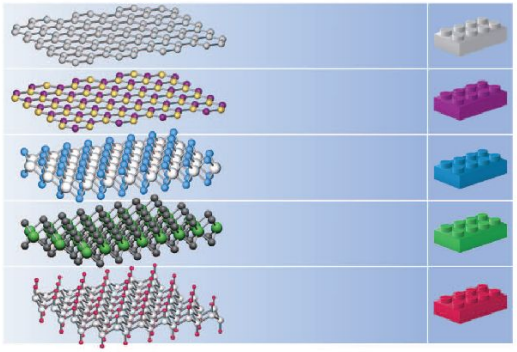
$$f_{\perp} = \left(\frac{\Delta d}{d}\right)_{\perp} = \frac{\Delta_{111}\sqrt{3}}{2d}.$$

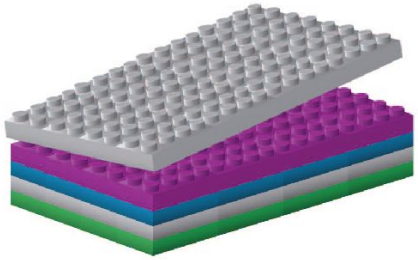
b и *d* –экспериментально определяемые сдвиговые константы деформационного потенциала

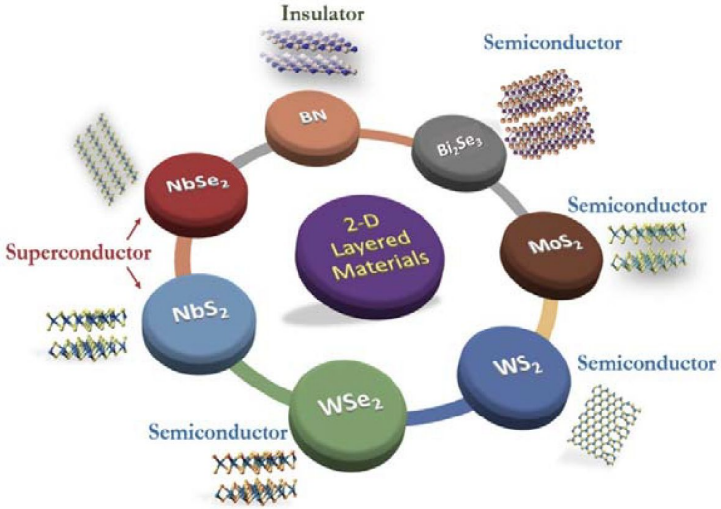
Δ – порядка единиц мэВ

2D слоистые материалы









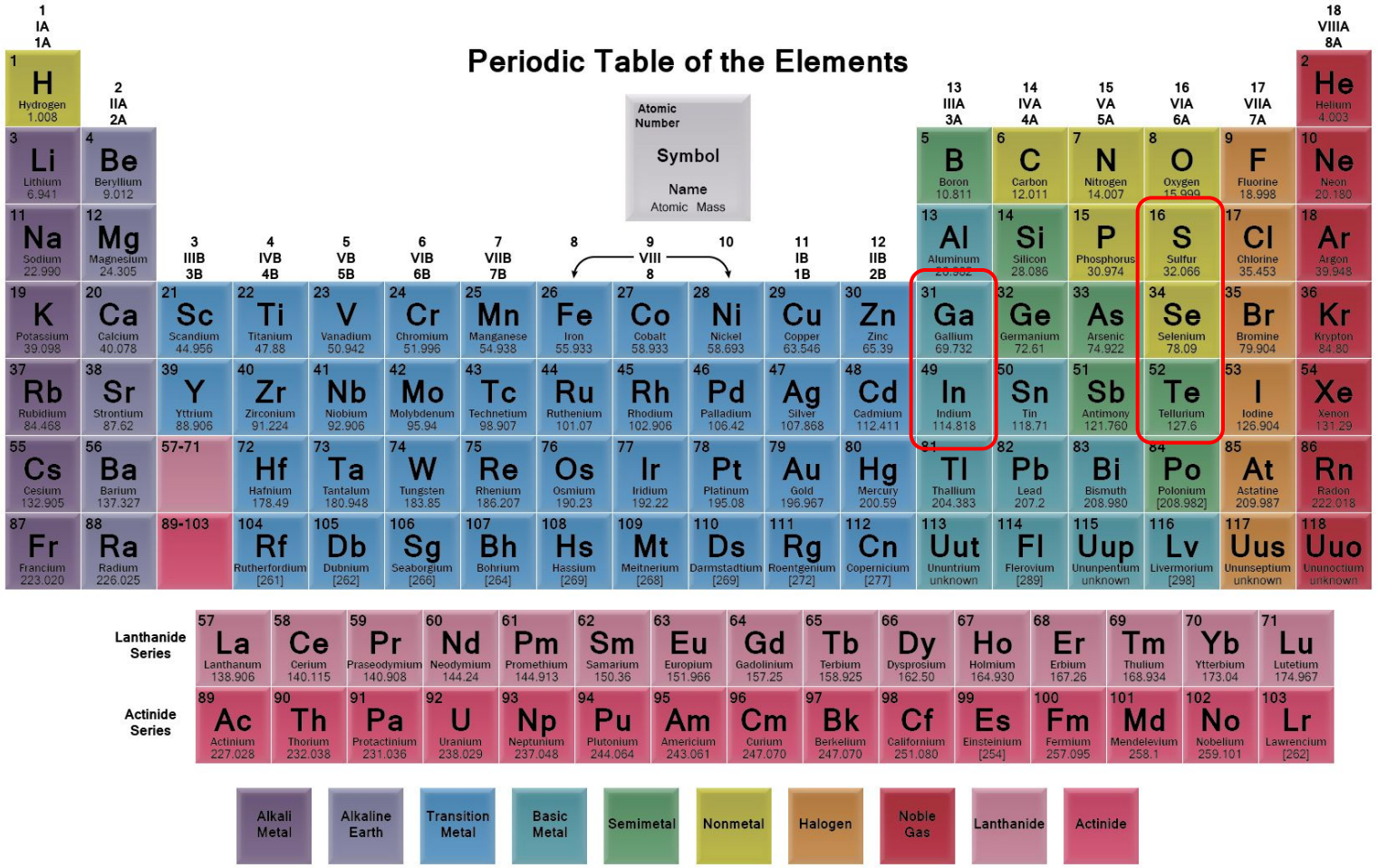
❖ **Взаимодействие через силы Ван-дер-Ваальса позволяет производить сопряжение различных материалов без необходимости образования химических связей между ними**

Graphene family	Graphene	hBN 'white graphene'	BCN	Fluorographene	Graphene oxide
2D chalcogenides	MoS_2, WS_2, $MoSe_2$, WSe_2	Semiconducting dichalcogenides: $MoTe_2$, WTe_2, ZrS_2, $ZrSe_2$ and so on	Metallic dichalcogenides: $NbSe_2$, NbS_2, TaS_2, TiS_2, $NiSe_2$ and so on	Layered semiconductors: GaSe, GaTe, InSe, Bi_2Se_3 and so on	
2D oxides	Micas, BSCCO	MoO_3, WO_3	Perovskite-type: $LaNb_2O_7$, $(Ca,Sr)_2Nb_3O_{10}$, $Bi_4Ti_3O_{12}$, $Ca_2Ta_2TiO_{10}$ and so on	Hydroxides: $Ni(OH)_2$, $Eu(OH)_2$ and so on	
	Layered Cu oxides	TiO_2, MnO_2, V_2O_5, TaO_3, RuO_2 and so on		Others	

Blue – stable under ambient conditions;
Green – probably stable in air;
Pink – unstable in air but may be stable in inert atmosphere.

[A.K. Geim & I.V. Grigorieva, Van der Waals heterostructures, Nature 499, 419–425 (2013)]

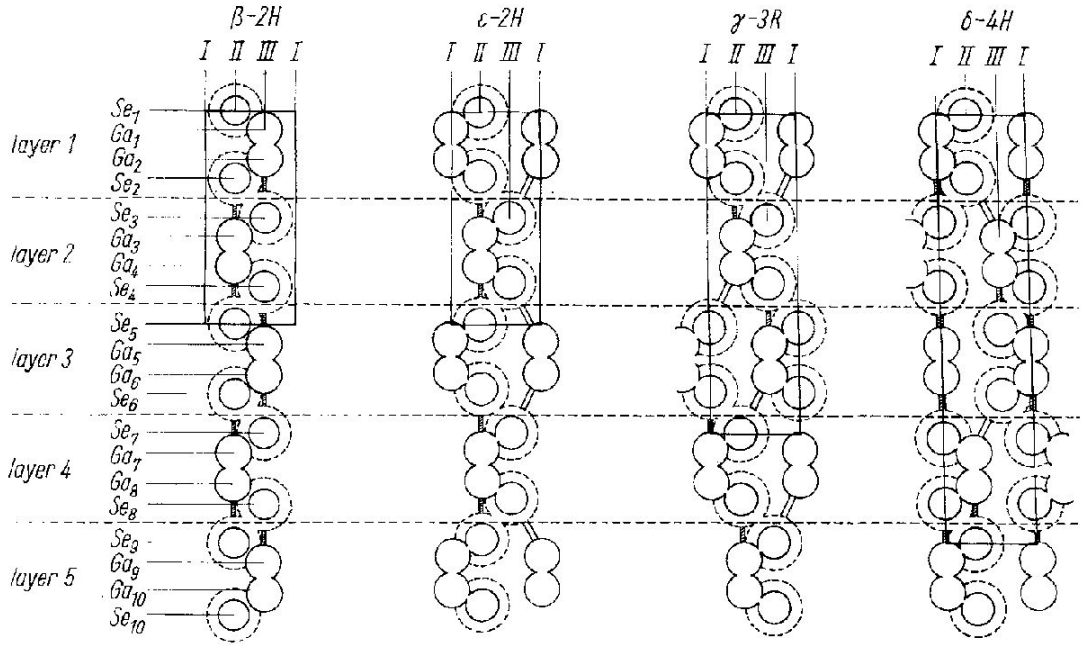
2D слоистые материалы

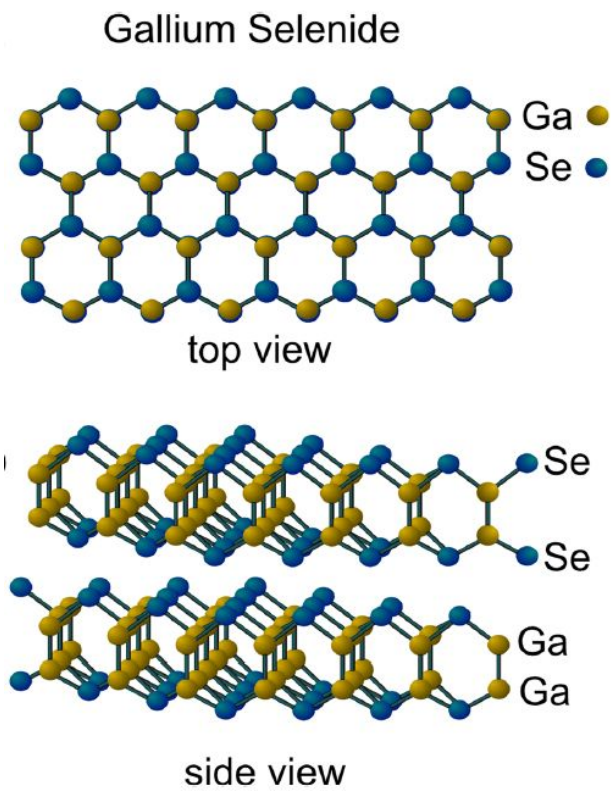


Халькогениды металлов группы IIIA:

- Соединения типа MX (InS, **InSe**, InTe, **GaS**, **GaSe** и **GaTe**)
- Соединения типа M_aX_b (In_2S_3, **In_2Se_3**, In_3Se_4, In_4Se_3, In_2Te_3, Ga_2Se_3 и др.)
- Халькогениды металлов группы IIIA образуют широкий спектр политипов.

2D слоистые материалы



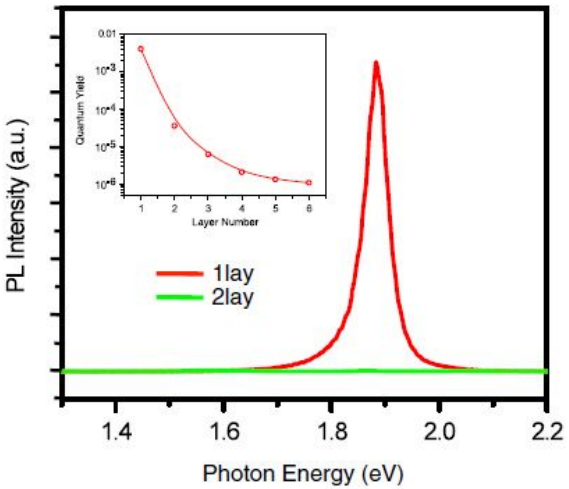


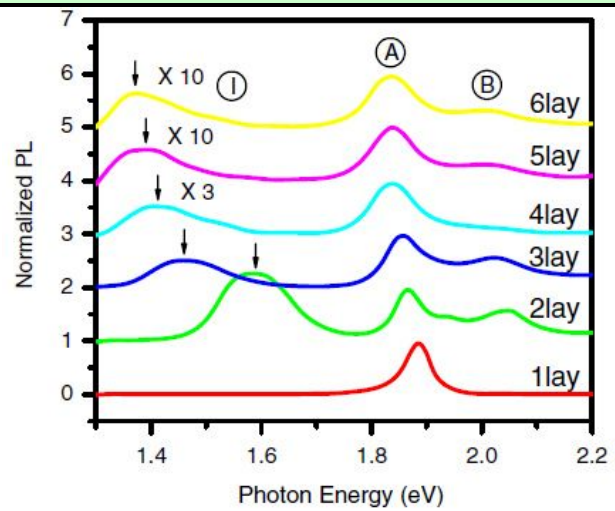
- **Объемные кристаллы GaSe состоят из вертикально упорядоченных слоев, которые удерживаются вместе силами Ван-дер-Ваальса. Различные варианты упаковки слоев приводят к возникновению различных объемных кристаллических структур (β, ε, γ, и δ).**

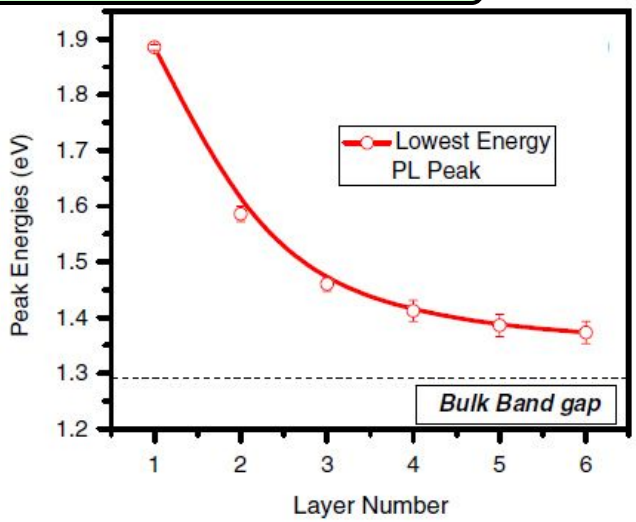
2D LM	Crystal Structure	Lattice parameters	Distance, nm
β-GaSe	Hexagonal (2H)	a=3.750Å, c=15.94Å	~0.8
ε-GaSe	Hexagonal (2H)	a=3.750Å, c=15.94Å	~0.8
γ-GaSe	Rhombohedral (3R)	a=3.755Å, c=23.92Å	~0.8
δ-GaSe	Hexagonal (4H)	a=3.755Å, c=31.99Å	~0.8

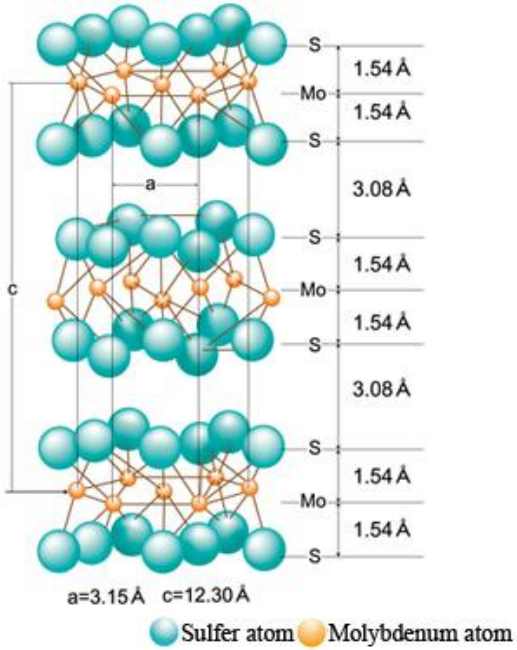
Переход от непрямозонного к прямозонному полупроводнику в 55 монослойных пленках MoS_2

The physical properties of 2D materials strongly depends on the number of layers

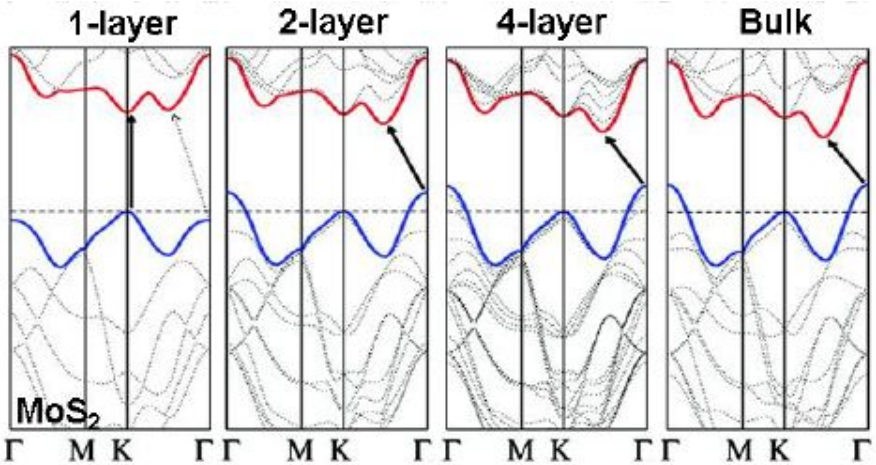








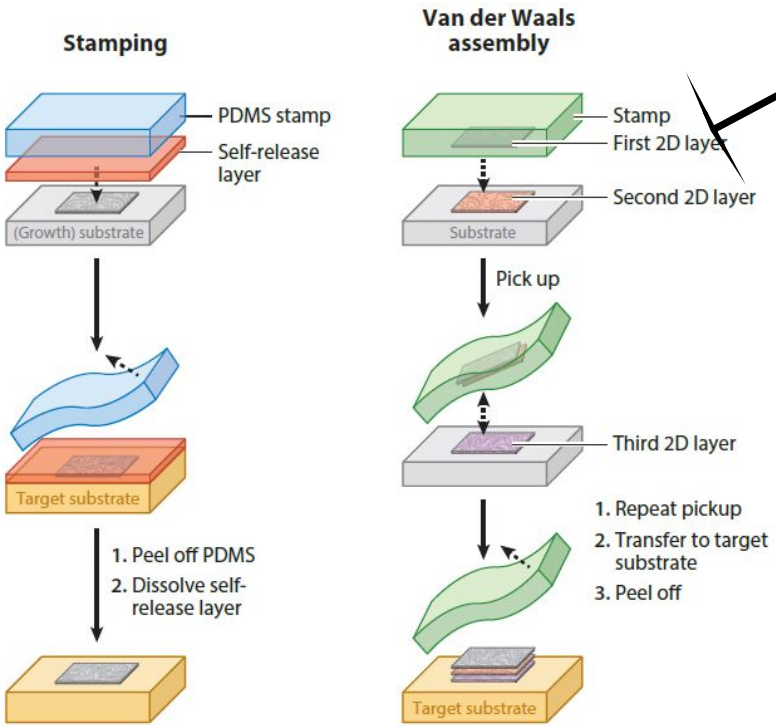
[K.F. Mak et al., Atomically Thin MoS_2: A New Direct-Gap Semiconductor, Phys. Rev. Lett. 105, 136805 (2010)]

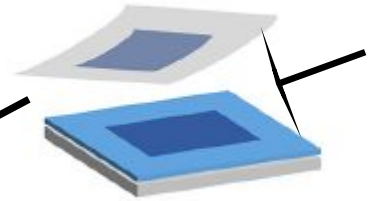


[A. Splendiani et al., Emerging Photoluminescence in Monolayer MoS_2, Nano Lett. 10(4), 1271–1275 (2010)]

Elastomer stamp technique

PDMS (polydimethylsiloxane)



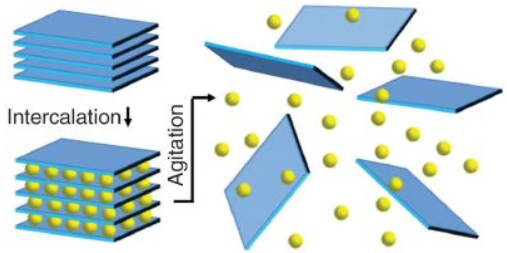


top-down methods

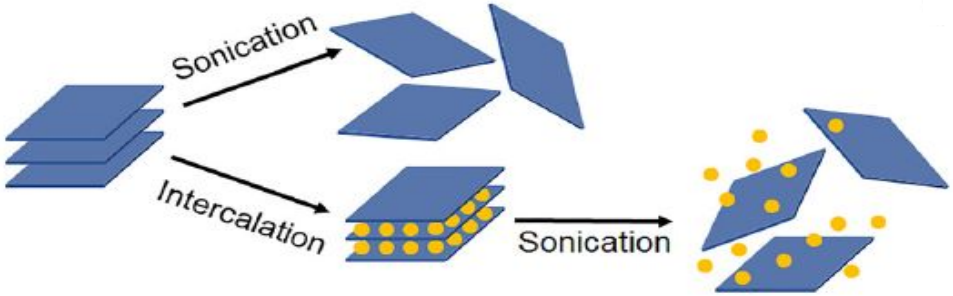
- ✔ mechanical exfoliation
- ✔ chemical exfoliation
- ✔ molecule/atom intercalation in the liquid phase

Ions are intercalated between the layers in a liquid environment, swelling the crystal and weakening the interlayer attraction. Then, agitation (such as shear, ultrasonication, or thermal) can completely separate the layers.

Ion intercalation



Sonication assisted exfoliation



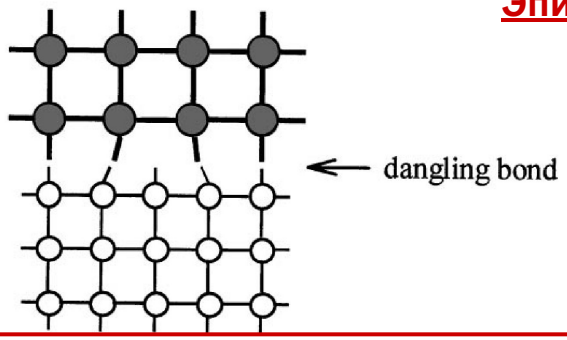
bottom-up methods

- ✔ CVD (chemical vapor deposition)
- ✔ PVD (physical vapor deposition)
- ✔ PVT (physical vapor transport)
- ✔ VMT (vapor phase mass transport)
- ✔ PLD (pulse layer deposition)
- ✔ MOCVD, MBE

–

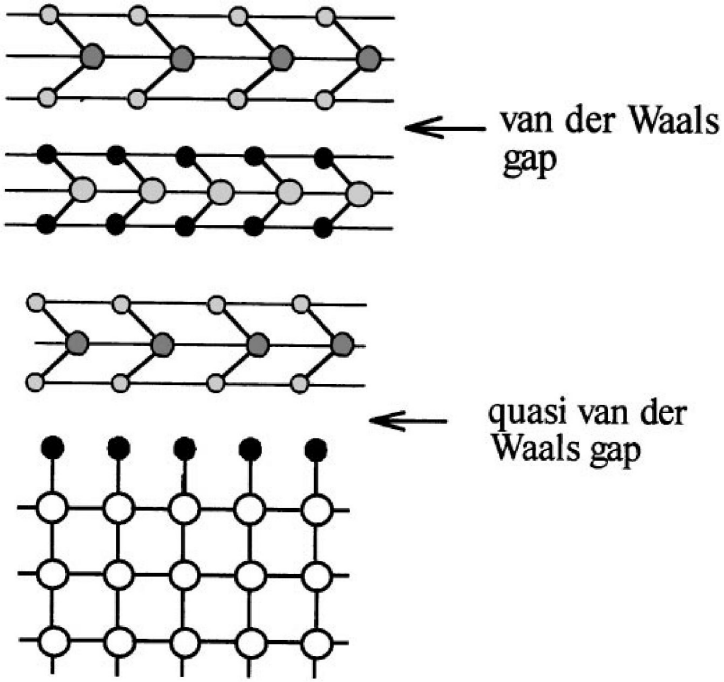
- ✔difficulty in large-area scaling
- ✔low production yield

Эпитаксия Ван-дер-Ваальса (vdW)



Отсутствие требования согласования по периоду решетки

Эпитаксиальный рост слоистого материала на поверхности без оборванных связей протекает при помощи сил Ван-дер-Ваальса, что приводит к хорошему гетероэпитаксиальному росту даже при большом рассогласовании параметров решетки между выращенным слоем и подложкой (до 30%)



[A. Koma, K. Sunouchi, T. Miyajima, Fabrication and characterization of heterostructures with subnanometer thickness, Microelectronic Engineering 2, 129 (1984)]

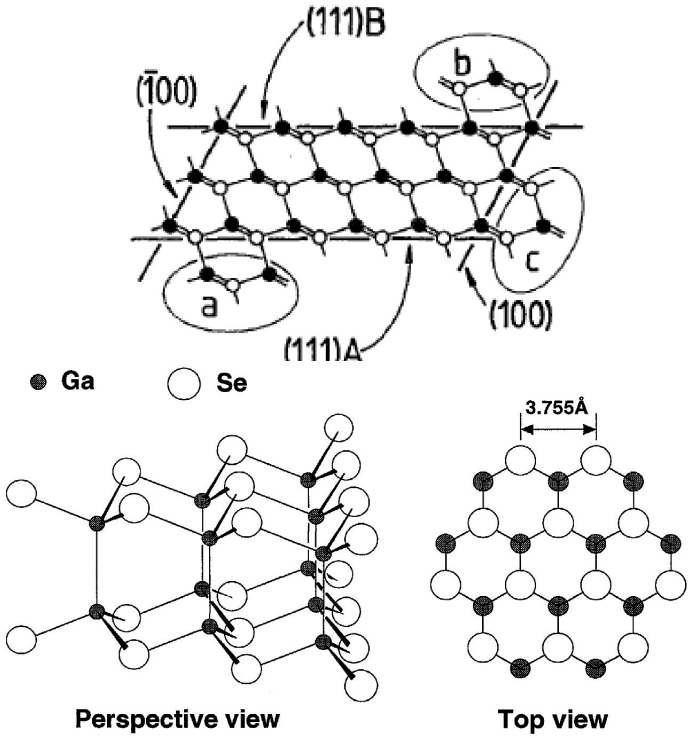
Первая публикация по эпитаксии vdWE. Выращены сверхтонкие пленки Se на сколотой поверхности Te и сверхтонкие пленки $NbSe_2$ на сколотой поверхности 2H-MoS_2

Применяемые подложки:

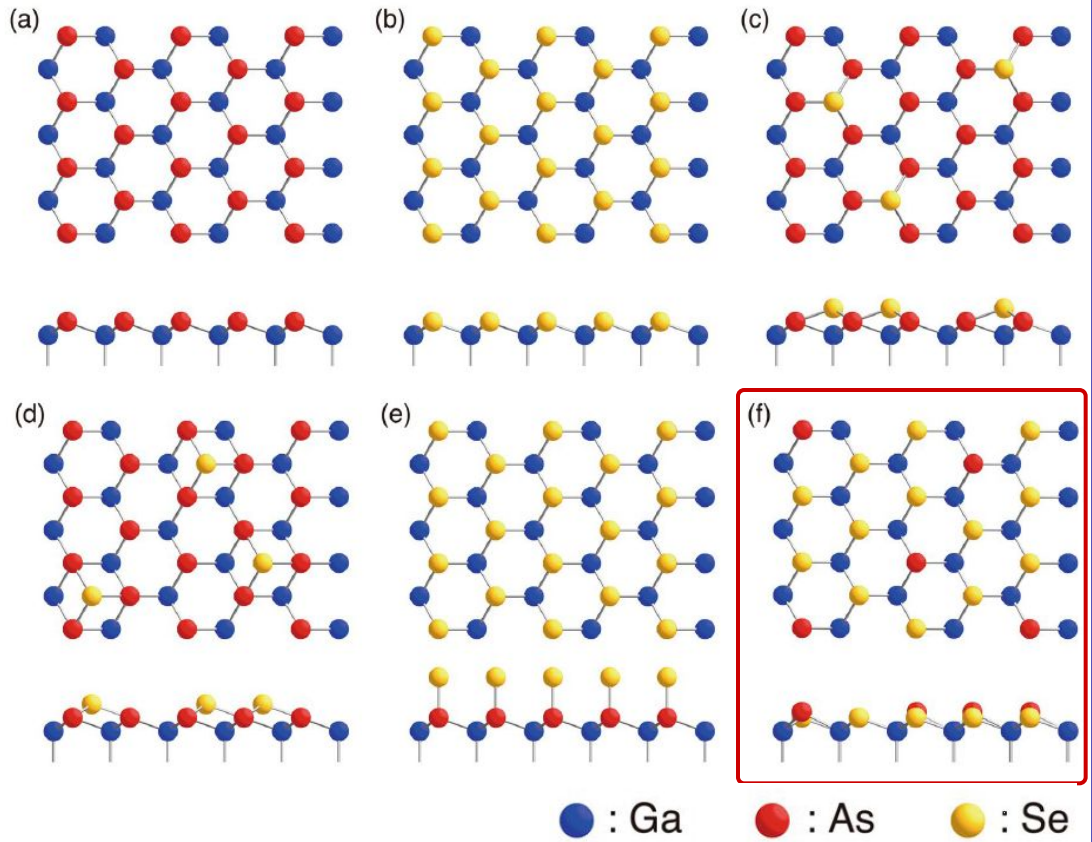
Слюда (mica)
MoS_2
($GaSe/MoS_2$ - [K. Ueno et al., Appl. Surf. Sci. 113–114, 38–42 (1997)])
Si(111), Si(001)
GaAs(111)
GaAs(001)
GaAs (110), GaAs (112)
c-сапфир (c-Al_2O_3), c-сапфир/GaN
Графен
GaSe/graphene - [ACS Nano 10(10), 9679 (2016)]

[A. Koma, Van der Waals epitaxy for highly lattice-mismatched systems, Journal of Crystal Growth 201/202, 236-241 (1999)]

vdW Epitaxy of GaSe on GaAs(111)



Top and side view of structure models for the Se-treated GaAs(111)B-(1×1) surface



Se-Se length in GaSe is 0.3755 nm,
As-As length on the top hexagonal layer of GaAs(111)B surface is 0.3998 нм.
The lattice mismatch is as high as ~6%.

The Se atoms substitute the ¾ monolayer (ML) of As atoms at the outermost layer of GaAs(111)B. The remaining As atoms (0.25 ML) are located at the vertical position 0.28 Å higher than that of the substitutional Se atoms. This atomic geometry promotes the charge transfer from Se to As, eliminating all of unsaturated dangling bonds. The resultant surface is electronically passivated with no surface states in the mid-gap region.

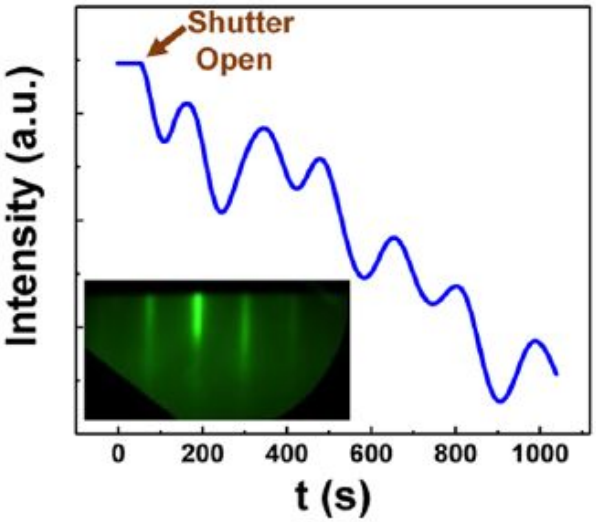
(**a**) ideal As terminated model, (**b**) Se-terminated model,
(**c**) T_4-site model, (**d**) H_3-site model,
(**e**) on-top site model, and (**f**) **mixed Se/As-terminated model**

[A. Ohtake, Sh. Goto, J. Nakamura, Atomic structure and passivated nature of the Se-treated GaAs(111)B surface, Scientific Reports 8, 1220 (2018)]

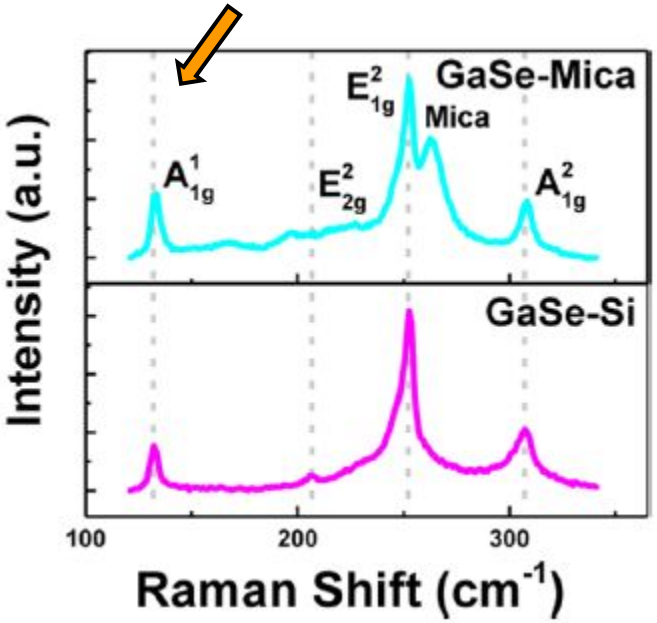
vdW Epitaxy of GaSe on Si(100) and mica substrates

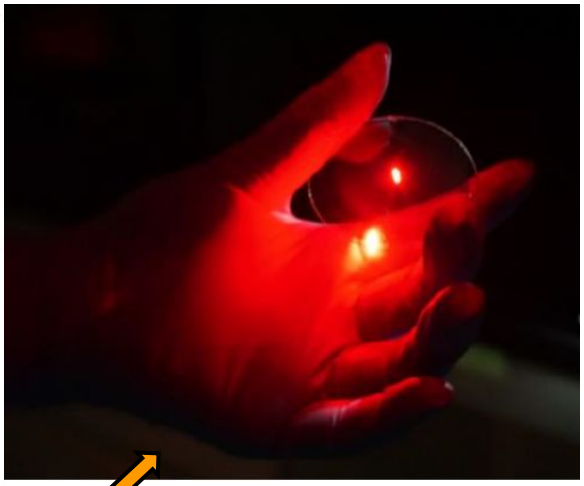
[X. Yuan et al., Arrayed van der Waals Vertical Heterostructures Based on 2D GaSe Grown by Molecular Beam Epitaxy, Nano Lett. 15(5), 3571–3577 (2015)]

✔ **Пленки GaSe были выращены при T_S=580°C при отношении потоков Se/Ga (BEPs) ~ 10. Типичная скорость роста ~0.3 нм/мин.**

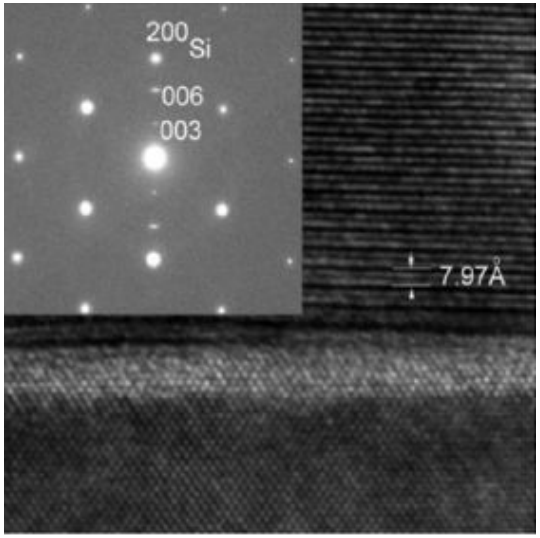


Raman spectra of GaSe grown on mica (upper panel) and Si (lower panel). The characteristic peaks are exactly the same, indicating substrate-independent growth with similar crystal quality owing to the van der Waals nature of 2D materials.





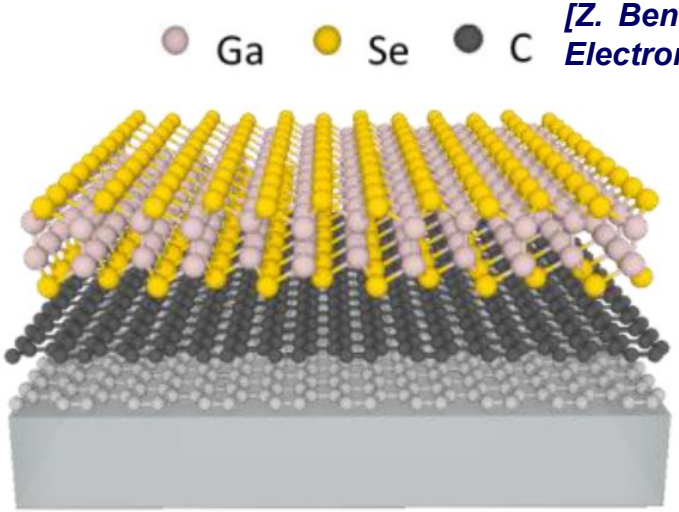
The picture of wafer-scale 8-layer GaSe film grown on mica. It is transparent and flexible.

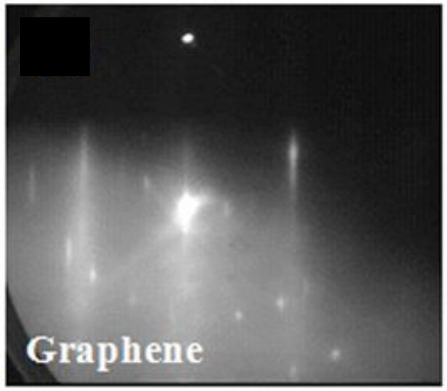


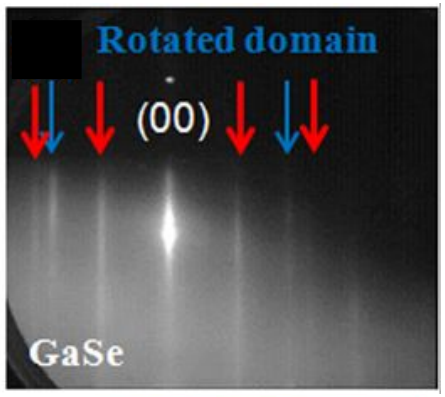
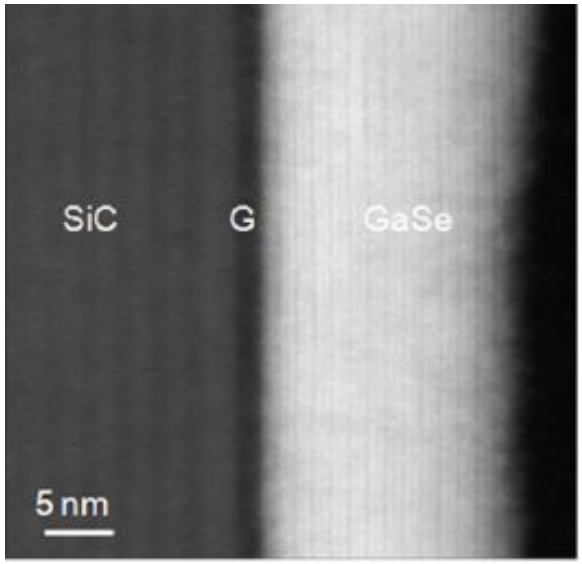
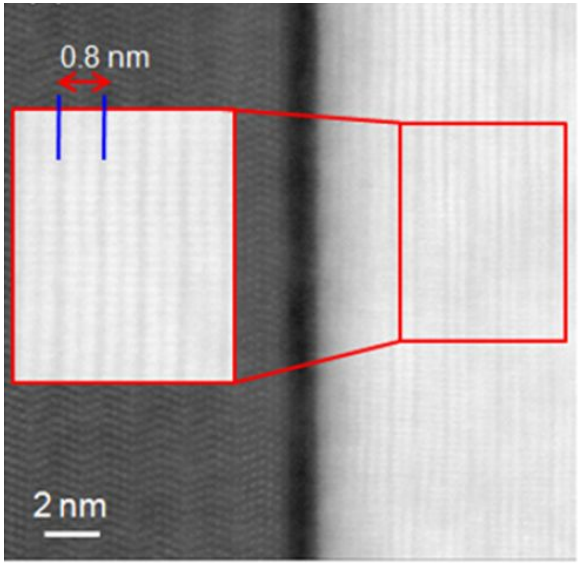
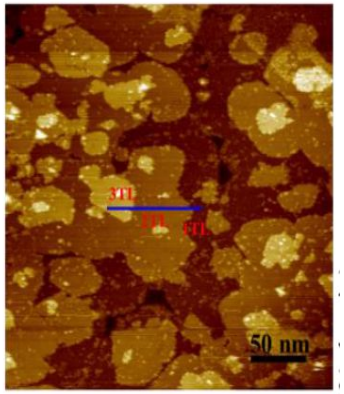
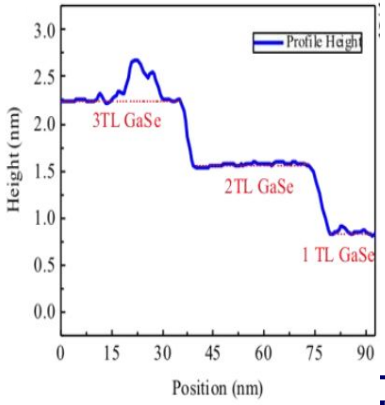
HRTEM cross-section image of 20-layer GaSe/Si and the SAED pattern (inset).

vdW Epitaxy of GaSe on graphene/SiC(0001)

[Z. Ben Aziza et al., van der Waals Epitaxy of GaSe/Graphene Heterostructure: Electronic and Interfacial Properties, ACS Nano 10, 9679−9686 (2016)]







Few GaSe TLs were grown on bilayer graphene/SiC(0001) by MBE using elemental Ga and Se sources at T_S~350-400°C under Se-rich conditions. Growth rate ~1.5 nm/min