

## НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРУЕМОЕ СОСТОЯНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$

Лунин Л. С., Нефёдов В. В.

STRESS-STRAIN STATE OF THE HETEROSTRUCTURE  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$

L. S. Lunin<sup>1</sup>, V. V. Nefedov<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Southern Scientific Center of Russian Academy of Science, Novocherkassk, Russia

<sup>2</sup> Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novocherkassk, Russia  
e-mail: lunin\_ls@mail.ru

*Abstract.* There are no models in use that would take into account the influence of internal deformations in strained structures on the key parameters of heterojunctions depending on the concentration of layer's components and thickness. The aim of the present paper is to determine the dependence of elastic strains and deformations and define changes in zone diagram of  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  structure depending of the concentration of components and thicknesses of layer and substrate. The paper features calculation of strains in  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  heterostructure at different correlations between the thicknesses of contacting semiconductors. The calculated values of conduction band edge shift and valence-band splitting in substrate and layer allow the authors to define the dependence between the alteration of band gap width in presence of deformation produced by the change of the thicknesses of layer and substrate and concentration of components.

The authors arrive at the definition, according to which the stress-strained state of  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  heterojunction leads to remarkable changes in its energy band structure. The paper includes equation of the dependence of main parameters of the energy band zone diagram of heterojunction on concentrations of components and proportion of thicknesses. The selection of correlations between substrate and layer thicknesses gives possibilities for a forecast and, further, management of parameters of the zone diagram and, consequently, of electronic properties of  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  heterojunctions. As a result of the research, the calculation formula of band gap width changes can be seen as a basis for analysis of changes being subject to alterations in concentration of components and correlation between layer and substrate thicknesses in elastically strained heterostructure.

*Keywords:* stresses, deformation, strained heterostructure, gallium arsenide, gallium indium arsenide.

### Введение

Возможность управлять рядом физических свойств посредством изменения величины деформации, напряжений, концентраций компонентов и соотношений толщин контактирующих слоя и подложки напряженных гетероструктур на основе соединений  $\text{A}^3\text{B}^5$  представляет интерес для исследователей. Вопрос влияния деформаций на отдельно взятый полупроводник широко освещен в литературе, есть и экспериментальные, и теоретические исследования [1–3]. В литературе рассмотрены деформации и построена каче-

ственная картина смещения энергетических уровней в полупроводниковых кристаллах  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  [4]. Однако отсутствует модель, учитывающая влияние внутренних деформаций в напряженных структурах в зависимости от концентрации компонент и толщин слоя и подложки на основные параметры гетеропереходов. Цель данной работы — установление зависимости упругих напряжений и деформаций, а также изменения зонной диаграммы структуры  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  в зависимости от концентрации компонентов и толщин слоя и подложки.

Лунин Леонид Сергеевич, д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий лабораторией нанотехнологий и солнечной энергетики Южного научного центра РАН; e-mail: lunin\_ls@mail.ru.

Нефёдов Виктор Викторович, канд. техн. наук, доцент, доцент кафедры «Общественные дисциплины» Южно-Российского государственного политехнического университета (НПИ); e-mail: nvnpn@gmail.com.

Публикация подготовлена в рамках реализации ГЗ ЮНЦ РАН на 2019 г. (проект 01201354240).

## 1. Теория

При наличии деформации симметрия полупроводника понижается, что влияет на изменение спектра электронов [5]. В случае малых деформаций тензор деформации  $\varepsilon_{ik}$  равен

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{du_i}{dx_k} + \frac{du_k}{dx_i} \right),$$

где  $u_i, u_k$  — составляющие вектора смещения точки кристаллической решетки при деформации.

Допустим, что гетероструктура образуется путем сращивания по направлению [001]. Несоответствие постоянных решеток слоя и подложки вызывает механические напряжения, причем постоянная решетки слоя  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  зависит от концентраций In и Ga по правилу Вегарда, а постоянная решетки подложки GaAs неизменна. Из-за понижения симметрии слоя и подложки необходимо ввести постоянные решетки по направлениям [100], [010] —  $a$ , [001] —  $a_{\perp}$  и использовать идеализацию об однородности деформаций в подложке и слое. Как известно из теории упругости [6], величины механического напряжения в подложке и слое можно выразить через постоянные решетки  $a_s, a_l$  и толщины подложки и слоя  $h_s, h_l$

$$\tau_{s,l} = \frac{E_{s,l}(a - a_{s,l})}{(1 - \nu_{s,l})} h_{s,l},$$

где  $E_{s,l}$  и  $\nu_{s,l}$  — модули Юнга и коэффициенты Пуассона подложки ( $s$ ) и слоя ( $l$ ) соответственно. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона для слоя определяются в зависимости от концентрации  $x$  линейной интерполяцией значений для соответствующих бинарных соединений. Постоянные решетки подложки и слоя вдоль контактной плоскости  $a$  и в перпендикулярном направлении  $a_{\perp s,l}$  получаем из условия равновесия механических напряжений  $\tau_s = \tau_l = 0$ :

$$a = \frac{\frac{E_s}{1 - \nu_s} h_s + \frac{E_l}{1 - \nu_l} h_l}{\frac{E_s}{1 - \nu_s} h_s + \frac{E_l}{1 - \nu_l} h_l} = \frac{a_s}{a_l} \frac{h_s}{h_l} + \frac{h_l}{h_s} \frac{a_l}{a_s},$$

$$a_{\perp s,l} = a_{s,l} + \frac{2\nu_{s,l}}{1 - \nu_{s,l}} (a_{s,l} - a),$$

тогда компоненты тензора деформаций можно определить [7]

$$(\varepsilon_{s,l})_{11} = (\varepsilon_{s,l})_{22} = \frac{(-1 + \nu_{s,l})E_{l,s}(a_{s,l} - a_{l,s})}{E_{l,s}(-1 + \nu_{s,l})a_{s,l} + h^{\text{sign}} E_{s,l}(-1 + \nu_{l,s})a_{s,l}},$$

$$(\varepsilon_{s,l})_{33} = \frac{\nu_{s,l}E_{l,s}(a_{l,s} - a_{s,l})}{E_{l,s}(-1 + \nu_{s,l})a_{s,l} + h^{\text{sign}} E_{s,l}(-1 + \nu_{l,s})a_{l,s}},$$

где

$$\text{sign} = \begin{cases} 1, & \text{если } l, \\ -1, & \text{если } s. \end{cases}$$

где индексы 11, 22, 33 определяют направления [100], [010], [001], соответственно.

Зная компоненты тензора деформаций, можно определить возникающие напряжения слоя ( $l$ ) и подложки ( $s$ ) по соответствующим направлениям [100], [010], [001] (соответствует индексам 11, 22, 33) и в зависимости от отношения толщин подложки и слоя  $h = h_l/h_s$  на основании обобщённого закона Гука и закона упругого изменения объема [8]

$$(\sigma_{s,l})_{cp} = \frac{E_{s,l}}{3(1 - 2\nu_{s,l})} ((\varepsilon_{s,l})_{11} + (\varepsilon_{s,l})_{22} + (\varepsilon_{s,l})_{33}),$$

где  $i = k = 1, 2, 3$ .

Зная значения компонентов тензора деформации, можно определить смещение уровней энергии в деформированных подложке и слое. В  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  и в GaAs простое сжатие или растяжение приводит к одинаковому смещению энергетических минимумов зоны проводимости в эквивалентных направлениях  $\langle 111 \rangle$   $\Delta E_c = a_c(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33})$  [4]. Изменение валентной зоны под действием деформации представляется в виде [4]  $\Delta E_v = a_v(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) \pm b_v|\varepsilon_{11} - \varepsilon_{33}|$ , знак «+» соответствует легким дыркам, знак «-» — тяжелым.

Расчитанные величины смещения краев зоны проводимости и расщепления валентной зоны подложки и слоя позволяют определить зависимость изменения ширины запрещенной зоны  $\Delta E_g$  подложки ( $s$ ) и слоя ( $l$ ) при наличии деформации от соотношения  $h$  и концен-

Таблица 1. Значения параметров уравнений

Соединение	$a$ , Å	$E$ (GPa)	$\nu$	$(a_c - a_v)$ (eV)	$b_v$ (eV)
InAs	6,06	28,2	0,35	-4,08	-1,8
GaAs	5,65	37,14	0,31	-6	-2

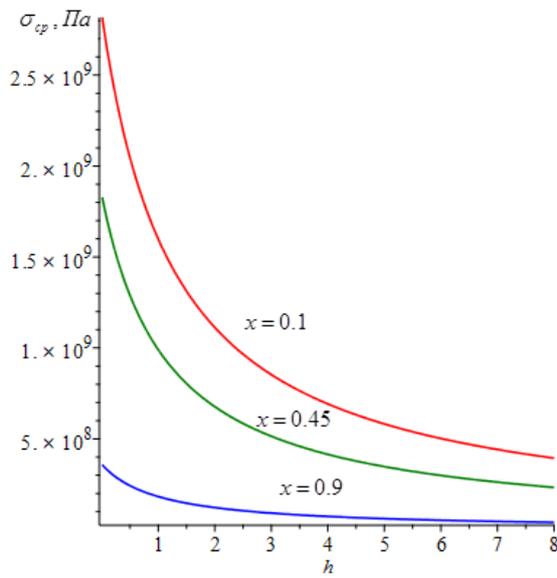


Рис. 1. Зависимости величин напряжений слоя от отношения толщин подложки и слоя

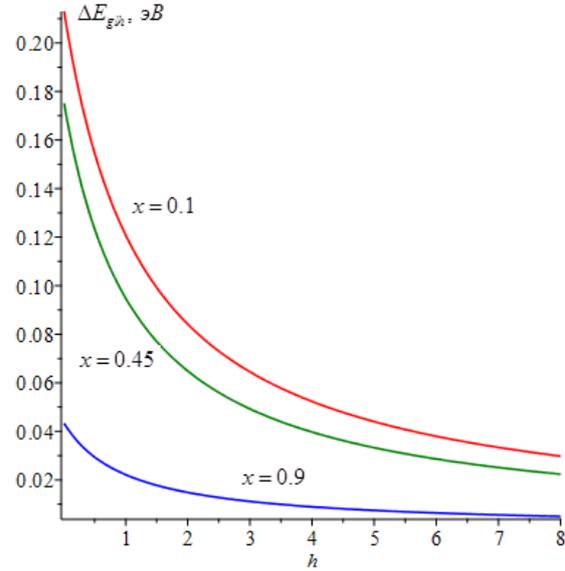


Рис. 2. Изменение ширины запрещенной зоны для тяжелых дырок в слое от отношения толщин подложки и слоя

трации  $x$ :

$$\begin{aligned} \Delta E_{gs}(x, h) &= \Delta E_{cs}(x, h) - \Delta E_{vs}(x, h) = \\ &= (a_{cs} - a_{vs})((\varepsilon_s)_{11}(x, h) + \\ &+ (\varepsilon_s)_{22}(x, h) + (\varepsilon_s)_{33}(x, h)) \mp \\ &\mp b_v |(\varepsilon_s)_{11}(x, h) - (\varepsilon_s)_{33}(x, h)|. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{gl}(x, h) &= \Delta E_{cl}(x, h) - \Delta E_{vl}(x, h) = \\ &= (a_{cl}(x) - a_{vl}(x))((\varepsilon_l)_{11}(x, h) + \\ &+ (\varepsilon_l)_{22}(x, h) + (\varepsilon_l)_{33}(x, h)) \mp \\ &\mp b_v(x) |(\varepsilon_l)_{11}(x, h) - (\varepsilon_l)_{33}(x, h)|. \end{aligned}$$

## 2. Результаты и их обсуждение

Значения параметров уравнений при  $T = 300$  К [9–12] приведены в табл. 1.

На рис. 1 показаны зависимости величин напряжений слоя от отношения толщин подложки и слоя  $h = h_l/h_s$ . Видно, что с увеличением толщины слоя по отношению к подложке напряжения уменьшаются, а наибольшие напряжения наблюдаются при соотношениях  $0,01 < h < 4$ .

На рис. 2 приведены зависимости  $\Delta E_{glh}$  от  $h$  ( $\Delta E_{glh}$  — изменение ширины запрещенной зоны для тяжелых дырок в слое). Из рис. 2 видно, что в слое при увеличении напряжений изменение ширины запрещенной зоны по модулю увеличивается.

На рис. 3 приведены зависимости  $\Delta E_{gll}$  от  $h$  ( $\Delta E_{gll}$  — изменение ширины запрещенной зоны для легких дырок в слое). Результаты показывают, что в слое при увеличении напряжений изменение ширины запрещенной зоны по модулю увеличивается.

Возникающие напряжения приводят не только к количественным, но и к качественным изменениям в зонной структуре, что должно привести, в свою очередь, к существенному изменению электронных свойств напряженного гетероперехода  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ .

## Заключение

Таким образом, напряженно-деформированное состояние гетероперехода  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  заметно влияет на характеристики в энергетической зонной структуре.

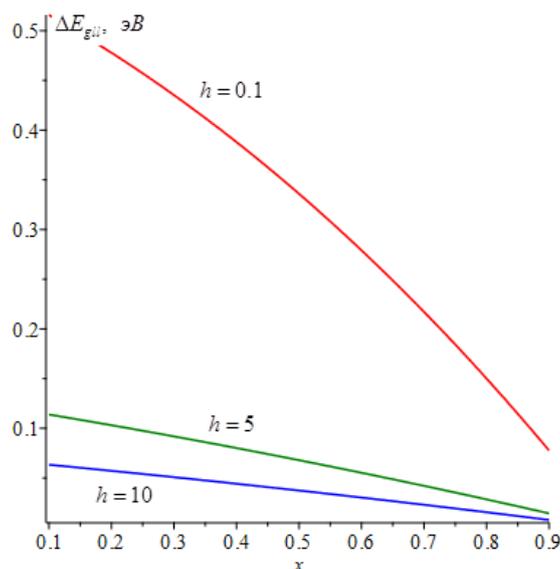


Рис. 3. Изменение ширины запрещенной зоны для легких дырок в слое от отношения толщин подложки и слоя

Подбор соотношений толщин подложки и слоя позволяет прогнозировать, а затем и управлять параметрами зонной диаграммы, следовательно, электронными свойствами гетеропереходов  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ . Выведенная в работе формула для  $\Delta E_g$  позволяет проанализировать изменение ширины запрещенной зоны в зависимости от концентрации компонентов и соотношения толщин слоя и подложки упругонапряженной гетероструктуры.

### Литература

1. Чеботарев С.Н., Лунина М.Л., Алфимова Д.Л., Еримеев Г.А., Гончарова Л.М., Мохамед А.А.А. Индуцированные механические напряжения и электрические поля в наногетероструктурах с квантовыми нитями // Наука Юга России. 2017. Т. 13. № 3. С. 18–26.
2. Курило И.В., Губа С.К. Дислокации несоответствия и напряжения в гетероструктурах  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  // Неорганические материалы. 2011. Т. 47. № 8. С. 911–915.
3. Kazuo Nakajima Calculation of compositional dependence of stresses in  $\text{GaInAs}/\text{GaAs}$  strained multilayer heterostructures // J. of Crystal Growth. 1993. Vol. 126. P. 511–524.
4. Полякова А.Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов. М.: Энергия, 1979. 168 с.
5. Бир Г.А., Пикус Г.Е. Теории деформационного потенциала для полупроводников со сложной зонной структурой // ФТТ. 1960. Т. 2, № 9. С. 2237–2301.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007. 264 с.
7. Филиппов В.В., Власов А.Н., Бормонтов Е.Н. Моделирование деформаций и зонной диаграммы гетероструктуры кремний-германий // Конденсированные среды и межфазные границы. 2010. Т. 12. № 3. С. 282–287.
8. Безухов Н.И. Теория упругости и пластичности. М.: ГИТТЛ, 1953. 420 с.
9. Yu P.Y., Cardona M. Fundamentals of Semiconductors: physics and materials properties. Berlin: Springer, 2010. 775 p.
10. Manel Souaf, Mourad Baira, Olfa Nasr, Mohamed Helmi Hadj Alouane, Hassen Maaref, Larbi Sfaxi and Bouraoui Pahi Investigation of the  $\text{InAs}/\text{GaAs}$  Quantum Dots' Size: Dependence on the Strain Reducing Layer's Position // Materials. 2015. Vol. 8. P. 4699–4709.
11. Vurgaftman I., Meyer J.R., Ram-Mohan L.R. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys // Journal of Applied Physics. 2001. Vol. 89, P. 5815.
12. Новиков Б.В., Зегря Г.Г., Пелещак Р.М., Данькив О.О., Гайсин В.А., Талалаев В.Г., Штром И.В. Барические свойства квантовых точек  $\text{InAs}$  // Физика и техника полупроводников. 2008. Т. 42. Вып. 9. С. 1094–1101.

### References

1. Chebotarev, S.N., Lunina, M.L., Alfimova, D.L., Erimeev, G.A., Goncharova, L.M., Mohamed, A.A.A. Inducirovannye mehanicheskie naprjazhenija i jelektricheskie polja v

- nanoheterostrukturah s kvantovymi nitjami [Induced mechanical stresses and electric fields in nanoheterostructures with quantum threads]. *Nauka Juga Rossii* [Science of the South of Russia], 2017, vol. 13, no. 3, pp. 18–26. (In Russian)
2. Kurilo, I.V., Guba, S.K. Dislokacii neootvetstvija i naprjazhenija v geterostrukturah  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  [Dislocation mismatches and stresses in heterostructures  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ ]. *Neorganicheskie materialy* [Inorganic materials], 2011, vol. 47, iss. 8, pp. 911–915. (In Russian)
  3. Nakajima, K. Calculation of compositional dependence of stresses in  $\text{GaInAs}/\text{GaAs}$  strained multilayer heterostructures. *Journal of Crystal Growth*, 1993, vol. 126, pp. 511–524.
  4. Poljakova, A.L. *Deformacija poluprovodnikov i poluprovodnikovyh priborov* [Deformation of semiconductors and semiconductor devices]. Energiya, Moscow, 1979. (In Russian)
  5. Bir, G.A., Pikus, G.E. Teorii deformacionnogo potenciala dlja poluprovodnikov so slozhnoj zonoj strukturoj [Theories of the deformation potential for semiconductors with a complex band structure]. *FTT* [Solid state physics], 1960, vol. 2, no. 9, pp. 2237–2301. (In Russian)
  6. Landau, L.D., Lifshic, E.M. *Teoreticheskaja fizika. Teorija uprugosti* [Theoretical physics. Theory of elasticity]. Vol. VII, Fizmatlit, Moscow, 2007. (In Russian)
  7. Filippov, V.V., Vlasov, A.N., Bormontov, E.N. Modelirovanie deformacij i zonoj diagrammy geterostruktur kremnij-germanij [Simulation of deformations and band diagrams of the silicon-germanium heterostructure]. *Kondensirovannye sredy i mezhfaznye granicy* [Condensed Matter and Interfaces], 2010, vol. 12, no. 3, pp. 282–287.
  8. Bezuhov, N.I. *Teorija uprugosti i plastichnosti* [Theory of elasticity and plasticity]. GITTL, Moscow, 1953.
  9. Yu, P.Y., Cardon, M. *Fundamentals of Semiconductors: physics and materials properties*. Berlin, Springer, 2010.
  10. Souaf, M., Baira, M., Nasr, O., Alouane, M., Helmi Hadj, Maaref, H., Sfaxi, L., Ilahi, B. Investigation of the  $\text{InAs}/\text{GaAs}$  quantum dots' size: dependence on the strain reducing layer's position. *Materials*, 2015, vol. 8, pp. 4699–4709. DOI: 10.3390/ma8084699
  11. Vurgaftman, I., Meyer, J.R., Ram-Mohan, L.R. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 89, p. 5815. DOI: 10.1063/1.1368156
  12. Novikov, B.V., Zegrja, G.G., Peleshhak, R.M., Dan'kiv, O.O., Gajsin, V.A., Talalaev, V.G., Shtrom, I.V. Baricheskie svojstva kvantovyh toček InAS [Barometric properties of InAS quantum dots]. *Fizika i tehnika poluprovodnikov* [Semiconductor Physics and Technology], 2008, vol. 42, iss. 9, pp. 1094–1101. (In Russian)