ՀՀ ԿՐԹՈՒԹՅԱՆ ԵՎ ԳԻՏՈՒԹՅԱՆ ՆԱԽԱՐԱՐՈՒԹՅՈՒՆ ԵՐԵՎԱՆԻ ՊԵՏԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

Սիմոնյան Արփինե Կորյունի

A³B⁵ դասի և Si-Ge-C կիսահաղորդչային համակարգերում նանոկառուցվածքների ձևավորման օրինաչափությունները

Ա.04.10 – "Կիսահաղորդիչների ֆիզիկա" մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիձանի հայցման ատենախոսության

ՍԵՂՄԱԳԻՐ

ԵՐԵՎԱՆ – 2013

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РА ЕРЕВАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

СИМОНЯН АРПИНЕ КОРЮНОВНА

ЗАКОНАМЕРНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР В СИСТЕМЕ А³В⁵ И В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СОЕДИНЕНИЯХ Si-Ge-C

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – "Физика полупроводников"

EPEBAH - 2013

1

Ատենախոսության թեման հաստատվել է Երևանի պետական համալսարանում (ԵՊՀ)

Գիտական ղեկավար՝	ֆիզմաթ. գիտ. թեկնածու, դոցենտ Կ. Մ. Ղամբարյան ՀՀ ԳԱԱ թղթակից անդամ, ֆիզ մաթ. գիտ. դոկտոր, պրոֆեսոր Ա. Ա. Կիրակոսյան տեխ. գիտ. թեկնածու, դոցենտ Ժ. Դոխոլյան		
Պաշտոնական ընդդիմախոսներ՝			
Առաջատար կազմակերպություն՝	ՀՀ ԳԱԱ Ռադիոֆիզիկայի և Էլեկտրոնիկայի ինստիտուտ		

Ատենախոսության պաշտպանությունը կայանալու է 2013թ. Հոկտեմբերի 5-ին, ժամը 12⁰⁰ Երևանի պետական համալսարանի 049 ֆիզիկայի մասնագիտական խորհրդի նիստում (հասցեն՝ 0025, ք. Երևան, Ա. Մանուկյան փ., 1)։

Ատենախոսությանը կարելի է ծանոթանալ ԵՊՀ գրադարանում։ Սեղմագիրն առաքված է 2013թ. սեպտեմբերի 5-ին։

Մասնագիտական խորհրդի	affector	ֆիզմաթ.	գիտ.
գիտական քարտուղար՝	ar	Վ. Պ. Քալանթարյան	

Тема диссертации утверждена в Ереванском государственном университете (ЕГУ)

Научный руководитель: кандидат физ.-мат. наук, доцент К. М. Гамбарян Официальные оппоненты: Член-корреспондент НАН РА, доктор физ.-мат. наук, профессор А. А. Киракосян кандидат физ.-мат. наук, доцент, Ж. Дохолян

Ведущая организация:

Институт Радиофизики и электроники НАН РА

Защита диссертации состоится 5 Окября 2013 г. в 12⁰⁰ часов на заседании специализированного совета 049 по физике при Ереванском государственном университете (адрес: 0025, г. Ереван, ул. А. Манукяна, 1).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЕГУ. Автореферат разослан 5 сентября 2013 г.

Ученый секретарь специализированного совета:

кандидат физ.-мат. наук, доцент В. П. Калантарян 2

ԱՇԽԱՏԱՆՔԻ ԸՆԴՀԱՆՈՒՐ ՆԿԱՐԱԳԻՐԸ

<u>Թեմայի արդիականությունը</u>

Նանոչափային կառուցվածքները, ինչպիսիք են կիսահաղորդչային քվանտային կետերը, ունեն էլեկտրոնային և օպտիկական հատկություններ, որոնք հատուկ են ինչպես մակրո և միկրոչափային ծավալային կիսահաղորդչալին բյուրեղներին, ալնպես էլ ատոմներին և մոլեկուլներին։ Այսպիսի նյութերի ուսումնասիրությունները հաձախ դիտարկվում են որպես անցում գիտության նոր ուղղության՝ նանոգիտության մեջ, որտեղ մինչ այդ քիմիայի, ֆիզիկայի, կենսաբանության և Ճարտարագիտության միջև այդ կապակցվածությունը առանձնացված չէր։ Քվանտային կետերով կիսահաղորդչային սարքերը մեծ տեղ են գտել ոչ միայն կենցաղային էլեկտրոնիկայում, այլ նաև կարևոր դեր ունեն բժկության զարգացման մեջ։ Օրինակ, քվանտային կետերը գործիք են հանդիսանում ուռուցքածին բջիջները հայտնաբերելու, արյան մեջ գլյուկոզայի չափը որոշելու և այլնի համար։ Դրանք կիրառվում են արեգակնային մարտկոցներում և այլ ֆոտովոլտայիկ համակարգերում։ Երրորդ սերնդի արեգակնային մարտկոցներում քվանտային կետերի օգտագործումը էլկտրաէներգիայի արտադրության էֆեկտիվությունը հասցրել է 60%։ Քվանտային կետերը, որպես "արհեստական ատոմներ" լայն կիրառություն ունեն նաև նոր զարգացող քվանտային համակարգերում։ Դրանք կարող են ծառայել որպես քվանտային բիթեր, այսպես կոչված քյուբիթներ՝ "qubit", քվանտային համակարգիչներում կիրառելու համար։

<u>Աշխատանքի հիմնական նպատակները</u>

- Տեսականորեն բացատրել և հաշվել հեղուկային էպիտաքսիայի եղանակով *InAs*(100) տակդիրի վրա *InAsSbP* ձևավորված կղզյակների հատած բուրգից կիսագնդի անցման կրիտիկական չափը։
- Լուծել InAs-InSb-InP և GaAs-GaSb-GaP եռաաբաղադրիչ համակարգերի համար անհամատեղելիության խնդիրը։
- Ուսումնասիրել Si-Ge-C համակարգում քվանտային կետերի, նանոխոռոչների և քվանտային կետ-խոռոչ զույգավորված կառուցվածքների աՃման և սաղմնառաջացման մեխանիզմները։
- 4. Տեսականորեն ուսումնասիրել փորձնականորեն ստացված InAs(100) տակդիրի վրա InAsSbP քվանտային կետերի ըստ չափսերի բաշխումները՝ ժամանակի տարբեր պահերին։

Աշխատանքում առաջադրվել և լուծվել են հետևյալ խնդիրները

- Կիրառելով հոծ առաձգականության տեսությունը՝ ուսումնասիրել հեղուկային էպիտաքսիայի եղանակով *InAs*(100) տակդիրի վրա *InAsSbP* քվանտային կետերի ձևավորման օրինաչափությունները և գտնել այն կրիտիկական չափը, որից տեղի է ունենում կղզյակի ձևի փոփոխությունը։
- InAsSbP և GaAsSbP համակարգերի համար լուծել առաջադրված էներգետիկ խնդիրը և ուսումնասիրել տարբեր ջերմաստիձաններում բաղադրությունների այն տիրույթները, որտեղ հնարավոր կլինի կղզյակների ձևավորումը։
- Կիրառելով առաձգականության հոծ մոդելը՝ քանակապես ուսումնասիրել Si-Ge-C եռաաբաղադրիչ համակարգում քվանտային կետերի և նանոխոռոչների աձման և սաղմնառաջացման մեխանիզմները։
- Որոշել հեղուկային էպիտաքսիայի եղանակով *InAs*(100) տակդիրի վրա աձեցված *InAsSbP* բաղադրության քվանտային կետերի ըստ չափսերի բաշխման ֆունկցիաների տեսքերը և սաղմնառաջացման մեխանիզմները։

<u>Ստացված արդյունքների գիտական նորույթը</u>

- Կիրառելով կղզյակների էներգիայի փոքրագույն արժեքի սկզբունքը, քանակապես հաշվարկվել է *InAs* (100) տակդիրի վրա աձեցված *InAsSbP* բաղադրության, ինչպես նաև *Si* (001) դակդիրի վրա աձեցված SiGe բաղադրության կղզյակների կրիտիկական չափսերը, երբ դրանք ձնափոխվում են կիսագնդի։
- 2. Օգտագործելով հոծ (կոնտինուումային) առաձգականության մոդելը կատարվել է քվանտային կետերի և նանոխոռոչների մրցակցային սաղմնառաջացման պրոցեսի քանակական ուսումնասիրություն երեք՝ $InAs_{1-x-y}Sb_xP_y$ և $GaAs_{1-x-y}Sb_xP_y$ քվազիեռաաբաղադրիչ ու $Si_{1-x-y}Ge_xC_y$ եռաաբաղադրիչ նյութական համակարգերում։ Հաշվարկվել են նանոկղզյակների լրիվ էներգիաների և չափերի կախվածությունները є լարվածությունից՝ $\varepsilon=\Delta a/a$ թրջող շերտի և տակդիրի ցանցի հաստատունների հարաբերական տարբերությունից և պինդ լուծույթի բաղադրությունից (*x*-ից և *y*-ից)։
- 3. Ի տարբերություն ավանդական մոտեցմանը, ուսումնասիրվել և հաշվարկների ընթացքում հաշվի է առնվել թրջող շերտի հաստության կախվածությունը ցանցի հաստատունների տարբերության պատՃառով առաջացած լարվածությունից։

well as the stable, metastable and unstable (immiscibility) regions were defined at different temperatures.

- An isoenergetic contours of the free energy of mixing and concentration triangle of InAsSbP material system are studied and presented. It was shown, that immiscibility gaps strongly depend on temperature and with increasing the temperature they decrease.
- 8. Above-mentioned studies are realized also for quasiternary GaAsSbP and binary GaAs GaSb, GaAs GaP and GaSb GaP material systems.
- 9. The physical and technological processes during nucleation of nanostructures in SiGeC ternary system are also studied. As for InAsSbP and GaAsSbP systems, the same studies are performed also for SiGeC material system and the analogue physical results are obtained. In particular, it is clear theoretically, that increasing of carbon concentration in SiC system and germanium concentration in SiGeC system results in decrease of the critical size of QDs. Quantitative calculations have also shown that incorporation of carbon into Si and Ge up to the background impurity concentration is advantageous energetically, which explains experimentally detected carbon "contamination" of silicon and germanium crystals during their growth from graphite crucible.
- 10. In order to explain the experimental distribution functions of InAsSbP QDs and physical processes during nucleation, the Lifshiz–Slezov and Wagner theories have been applied. Comparing the experimental results with theoretically calculated, some technological parameters have been evaluated, which describe nucleation and ripening processes of InAsSbP QDs. In particular, it was shown, that at small growth times (below 10 minutes) QDs distribution in InAsSbP system qualitatively corresponds to the Wagner distribution, which means that growth process is controlled by reaction rate on the matrix surface (surface diffusion). At longer growth times, QDs distribution corresponds to Lifshiz–Slezov distribution, which means that the process is controlled by volume diffusion. We assume that at intermediate growth time of InAsSbP QDs the nucleation and Ostwald ripening processes occur at both mass transport mechanisms. By comparison of experimental and theoretical results, numerical values of the reaction rate and diffusion coefficient are evaluated.

SUMMARY

The main purpose of the thesis is the study and investigation of nucleation mechanisms of III-V semiconductor compounds and in *Si-Ge-C* material system.

The key results of thesis are given below:

- 1. Providing the small values of lattice constant mismatch between InAs(100) substrate and InAsSbP wetting layer sub-micrometrical islands were grown by liquid phase epitaxy. It was shown that at decreasing of islands volume the following succession of shape transitions of islands have been detected: truncated pyramid, facetted pyramid, pre-pyramid and semiglobe.
- 2. For the InAsSbP and SiGe islands grown on InAs(100) and Si(001) substrates respectively, a critical size of their shape transformation from pre-pyramid to semiglobe are theoretically calculated. It was shown that both for InAsSbP material system and for SiGe ones the theoretically calculated values of the critical size well coincide with the experimentally obtained data.
- 3. Quantitative study of QD and nanopit nucleation mechanism was performed for InAs_{1-x-y}Sb_xP_y and GaAs_{1-x-y}Sb_xP_y quasiternary and Si_{1-x-y}Ge_xC_y ternary material systems using continuum elasticity model (proposed by J. Tersoff, IBM Research Center). The dependences of total energy and volume on the strain (lattice constants relative mismatch between the substrate and wetting layer) and solid solution composition of nanoislands were calculated.
- 4. Unlike the classical approach, during study and calculations we take into account the dependence of wetting layer thickness on the lattice mismatch. According to experimental data and using mathematical approximations, the empiric formulas for strains have been obtained. It was shown that depending on sign and value of strain the wetting layer thickness follows the exponential or power law.
- 5. The dependence of total energy on the volume of QDs in InAsSbP material system, as well as dependences the critical energy and volume on the strain or composition of solid solution are calculated and plotted. Based on these results the nucleation mechanism of QD pit are investigated. In particular, it was shown that at some critical strain, which corresponds to some concentration of solid solution, the growth mechanism is changed from QD nucleation to pit formation. It was shown, that inclusion of third component into the solid solution allows controlling both wetting layer thickness and sizes of QDs and nanopits.
- Free energy of mixing of InAsSbP quasiternary as well as InAs InSb, InAs InP and InSb – InP quasibinary solid solutions were calculated. 2D and 3D schematic patterns are plotted. Spinodal and bimodal transitional regions were calculated, as

- 4. Հաշվարկվել է GaAs_{1-x-y}Sb_xP_y և Si_{1-x-y}Ge_xC_y պինդ լուծույթների խառնման ազատ էներգիաները ու կառուցվել են դրանց 2D և 3D սխեմատիկ պատկերները։ Հետազոտվել են դրանց սպինոդալ և բինոդալ անցումային տիրույթները, ինչպես նաև որոշվել են պինդ լուծույթների բաղադրությունների կայուն, մետակայուն և ոչ կայուն (անհամատեղելիության) միջակայքերը տարբեր ջերմաստիՃանների դեպքում։
- Հաշվարկվել է InAs (100) տակդիրի վրա InAsSbP բաղադրության քվանտային կետերի ձևավորման ընթացքում ադատոմների ծավալային դիֆուզիայի գործակիցը և մակերևութի վրա ռեակցիայի արագությունը։

<u>Ներկայացված հետազոտությունների կիրառական նշանակությունը</u>

- Ներկայացված արդյունքները կարելի է կիրառել նանոկառուցվածքների, ծավալային բյուրեղների, ինչպես նաև էպիտաքսիալ թաղանթների աձի տեխնոլոգիական ռեժիմներ ընտրելու համար։
- 2. Մտացված արդյունքները և ադատոմների ծավալային դիֆուզիայի գործակցի ու մակերևույթի վրա ռեակցիայի արագության համար գնահատված թվային արժեքները գործնականում կարևոր նշանակություն ունեն, քանի որ կարող են կիրառվել հետագայում քվանտային կետերի աձման տեխնոլոգիական ռեժիմները ավելի կատարելագործելու համար։
- 3. Կատարված տեսական հետազոտությունները թույլ են տալիս ընտրել տեխնոլոգիական այնպեսի պայմաններ, որոնք ապահովում են քվանտային կետերի ըստ դրանց չափսերի ավելի համասեռ բաշխում, որը շատ կարևոր է մի շարք ժամանակակից կիսահաղորդչային սարքեր ստեղծելու համար։

<u>Պաշտպանությանը ներկայացված հիմնական դրույթները</u>

 InAs (100) տակդիրի վրա ինքնաձևավորվող InAsSbP բաղադրության լարված կղզյակների ծավալի փոքրացմանը զուգնթաց տեղի է ունենում դրանց երկրաչափական տեսքի փոփոխության հետևյալ հաջորդականությունը. հատած բուրգ, բուրգ, համալրային մակերեսով բուրգ և կիսագունդ։ Բրգաձևից դեպի կիսագունգ տեսքի անցման տեսականորեն հաշվարկված կրիտիկական չափսը կազմում է ~500 նմ, որը համընկնում է փորձարարական տվյալի հետ։

- 2. Si(001) տակդիրի վրա ինքնաձևավորվող $Si_{1-x}Ge_x$ բաղադրության լարված կղզյակների բրգաձևից դեպի կիսագունգ տեսքի անցման տեսականորեն հաշվարկված կրիտիկական չափսը կազմում է ~70 նմ (x=0.3) և ~40 նմ (x=0.5), որոնք ևս համապատասխանում են փորձարարական տվյալի հետ։
- 3. InAsSbP, GaAsSbP և SiGeC պինդ լուծույթների քվանտային կետերի ստեղծման ընթացքում ցանցի անհամաձայնեցման պարամետրի ինչպես նշանը, այնպես էլ արժեքը էապես ազդում են սաղմնառաջացման պրոցեսի վրա։ Մասնավորապես, բոլոր երեք նյութական համակարգերում գոյություն ունեն ցանցի լարվածության կրիտիկական արժեք, որի դեպքում տեղի է ունենում սաղմնառաջացման մեխանիզմի փոփոխություն՝ քվանտային կետերի աՃը փոխվում է նանոխոռոչների ձևավորման։
- 4. InAsSbP, GaAsSbP և SiGeC պինդ լուծույթներում առկա են բաղադրությունների անհամատեղելիության տիրույթներ, որոնք խիստ կախված են ջերմաստիՃանից և փոքրանում են դրա մեծացմանը զուգընթաց։
- Ածխածնի կոնցենտրացիայի մեծացումը SiC պինդ լուծույթում և գերմանիումինը SiGeC համակարգում, հանգեցնում է քվանտային կետի կրիտիկական չափի փոքրացման։
- 6. Ամի փոքր՝ մինչն 10 րոպե ժամանակներում *InAsSbP* համակարգում ՔԿ-ի բաշխումը որակապես համապատասխանում է Վագների բաշխմանը, այսինքն՝ ամի պրոցեսը ղեկավարվում է մակերևույթի վրա ռեակցիայի արագությամբ (մակերևույթային դիֆուզիայով), որի գնահատված թվային արժեքն է $B \cong 2.65 \cdot 10^{-7}$ սմ/վ։ Մեծ ժամանակների դեպքում (30 րոպե և ավել) ՔԿ-ի բաշխումը որակապես համապատասխանում է Լիֆշից– Սլեզով բաշխմանը, այսինքն՝ պրոցեսը ղեկավարվում է արդեն ծավալային դիֆուզիայով, որի գործակցի հաշվարկված թվային արժեքը՝ $D \cong 3.17 \cdot 10^{-12}$ սմ²/վ է։ Իսկ *InAsSbP* ՔԿ-ի Օստվալդյան հասունացման միջանկյալ ժամանակներում զանգվածի տեղափոխման այդ երկու մեխանիզմներն գործում են միաժամանակ։

<u>Աշխատանքի ներկայացումները</u>

определенном критическом значении напряжения, соотвествующем определенному критическому значению состава твердого раствора, механизм роста трансформируется от зародышеобразования квантовой точки к формированию нанопоры. Показано, что введение третьей компоненты в твердый раствор позволяет контролировать как толщину смачивающего слоя так и размеры квантовой точки и нанопоры.

- 6. Вычислены свободнаяые энергии смешения (free energy of mixing) квазитрехкомпонентной InAsSbP и двухкомпонентных InAs-InSb, InAs-InP, InSb-InP систем. Построены их 2D и 3D схематические картины. Вычислены области спинодальных и бинодальных переходов, определены также стабильная, метастабильная и нестабильная (несовместимая) области составов при разных температурах.
- Для системы InAsSbP исследованы и представлены изоэнергетические сечения свободной энергии смешения, а также концентрационный треугольник. Показано, что область несмешиваемости твердого раствора существенно зависит от температуры и уменьшается по мере увеличении температуры.
- Вышеуказанные исследования проведены и представлены для квазитрехкомпонентной GaAsSbP и двухкомпонентных GaAs-GaSb, GaAs-GaP, GaSb-GaP твердых растворов.
- Подробно исследован процесс зародышеобразования наноструктур также в системе трехкомпонентного SiGeC твердого раствора. Для этой системы проведены аналитические исследования, как для систем InAsSbP, GaAsSbP и получены схожие физические результаты.
- 10. В рамках теории Лифшица-Слезова-Вагнера объяснена экспериментально полученная трасформация формы функции распределения по размерам КТ в системе InAsSbP. Показано, что при малых временах роста функция распределения соотвествует распределению Вагнера, т.е. процесс роста контролируется реакцией на поверхности, а при больших временах – распределению Лифшица-Слезова, т.е. процесс контролируется уже объемной диффузией. Оценены численные значения скорости реакции на поверхности матрицы и коэффициент диффузии. Предполагается, что в промежуточных временах роста оба механизма массопереноса действуют одновременно.

АННОТАЦИЯ

Диссертация посвящена исследованию механизмов зародышеобразования наноструктур в полупроводниковых соединениях АзВ5 и в системе Si-Ge-C.

Основные выводы и результаты, полученные в диссертации, следующие:

- Методом жидкофазной эпитаксии при обеспечении относительной разности постоянных решеток (напряжения) подложки InAs(100) и смачиваемого слоя InAsSbP до 1%, выращены островки субмикрометрических размеров. Показано, что по мере уменьшения объема островков, происходит изменение их геометрических форм в следующей последовательности: усеченная пирамида, пирамида, пирамида с более высокими индексами и полусфера.
- 2. Экспериментально измерен и теоретически вычислен критическии размер островков в системе InAsSbP, при котором происходит переход островка от пирамидальной формы в полусферу. Аналогичные расчеты проведены также для твердого раствора SiGe, выращенного на подложке Si(001). Для обоих систем теоретически вычисленные значения с довольно большой точностью совпадают с экспериментальными данными.
- 3. Используя сплошную (континумиальную) модель эластичности (J. Tersoff, IBM Research center), проведен количественный анализ конкурентности процесса зародышеобразования квантовых точек и нанопор в квазитрехкомпонентных InAs1-x-ySbxPy, GaAs1-x-ySbxPy и трехкомпонентной Si1x-yGexCy системах. Вычислены зависимости полных энергий и размеров наноостровков от напряжения и от состава твердого раствора.
- 4. В отличие от классической теории, при расчетах нами учтена зависимость толщины смачивающегося слоя от напряжения. Методом математической аппроксимации экпериментальных данных получены эмпирические выражения для соответствующих напряженностей. Показано, что в зависимости от знака и величины напряжения, толщина смачиваемого слоя хорошо описывается или экспоненцальным или степенным законом.
- 5. Вычислены и графически изображены зависимости как полной энергии от объема квантовой точки системы InAsSbP, так и критической энергии и объема от напряжения и состава твердого раствора. С помощью полученных результатов интерпретирован механизм зародышеобразования сдвоенной структуры квантовая точка-нанопора. В частности, показано, что при

- Joint ICTP-FANAS Conference on "TRENDS IN NANOTRIBOLOGY", Abdus Salam International Center for Theoretical Physics (ICTP), 12 – 16 September 2011, Miramare, Trieste, Italy:
- Չ. Կիսահաղորդչային միկրո և նանոէլեկտրոնիկայի իններորդ միջազգային գիտայողով, Երևան, 24 – 26 մայիսի, 2013։
- Գիսահաղորդչային միկրո և նանոէլեկտրոնիկայի ութերորդ միջազգային գիտայողով, Երևան, 1 – 3 հուլիսի, 2011։
- Կիսահաղորդչային միկրո և նանոէլեկտրոնիկայի յոթերորդ միջազգային գիտայողով, Ծաղկաձոր, 3 – 5 հուլիսի, 2009:

<u>Տպագրությունները</u>

Ատենախոսության հիմնական արդյունքները տպագրվել են 8 գիտական հոդվածներում։

<u>Աշխատանքի կառուցվածքը և ծավալը</u>

Ատենախոսությունը բաղկացած է ներածությունից, չորս գլուխներից, եզրակացություններից և հղումների 114 անուն պարունակող գրականության ցանկից։ Աշխատանքում առկա են 40 նկար և 5 աղյուսակ, իսկ աշխատանքի ընդհանուր ծավալը 122 էջ է։

<u>Աշխատանքի բովանդակությունը</u>

<u>Ներածական մասում</u> ներկայացված է թեմայի արդիականությունը, ձևակերպված են աշխատանքի նպատակը և առաջադրված ու լուծված խնդիրները, ցույց է տրված ստացված արդյունքների գիտական նորույթը և գործնական արժեքը, ինչպես նաև բերված են պաշտպանությանը ներկայացված հիմնական դրույթները։

<u>Առաջին գլխում</u> ներկայացված են *A³B*⁵ և *A⁴B*⁴ դասի կիսահաղորդիչների ու դրանց պինդ լուծույթների հատկությունները, ինչպես նաև նկարագրված է այդ նյութերի միջոցով նանոկառուցվածքների և բարակ թաղանթների ա∡եցման համար կիրառվող տեխնոլոգիական մեթոդները։

<u>Երկրորդ գլխում</u> ներկայացված է *A³B⁵* դասի կիսահաղորդիչների և դրանց պինդ լուծույթների համակարգում քվանտային կետերի և նանոխոռոչների ձևավորման օրինաչափությունները։ Դիտարկված է հեղուկային էպիտաքսիայի պայմաններում InAs(100) տակդիրի վրա ինքնաձևավորվող InAsSbP քվանտային կետերի և նանոխոռոչների առաջացման մեխամիզմները։ Ինչպես նաև կատարվել են այդ կղզյակների երկրաչափական տեսքի ձևափոխությունների փորձնական և տեսական ուսումնասիրությունները։ Հարված կղզյակներ ստանայու հիմքում ընկած է եղել Ստրանսկի-Կրաստանով մեթոդը, իսկ InAs տակդիրի և InAsSbP թրջող շերտի միջև եղել է մինչև 2% ցանցային անհամատեղելիություն։ Կատարված հետազոտությունների արդյունքում պարզվել է, որ InAs1-x-ySbxPy քառաբաղադրիչ բուրգերի բաղադրության միջինացված արժեքներն են x < 4 % և y < 2% ։ Կատարված հետազոտությունները ցույց են տվել, որ, InAsSbP կղզյակների չափսերը գնալով փոքրանում են, և ենթարկվում են ձևափոխությունների։ Կղզյակների ծավայի փոքրազմանը զուգընթազ, նկատվել են հետևալ ձևափոխությունները (նկ.1). հատած բուրգ, {111} նիստերով բուրգ, {111} և {105} մասնակի նիստերով բուրգ, ամբողջական նիստեր չունեցող բուրգանման կղզյակ, որը աստիձանաբար վերածվում է կիսագնդի։ Սքանավորող էլեկտրոնային մանրադիտակի (SEM) միջոցով փորձնականորեն որոշվել է InAsSbP քառաբաղադրիչ կղզյակների տեսքի ձևափոխման կրիտիկական չափր, որը մոտավորապես 550 նմ է, և դա տեսականորեն բացատրվել և հաշվարկվել է։ Այս խնդիրը լուծելու համար կիրառվել է Տերսոֆֆի կողմից առաջադրված հոծ առաձգականության տեսությունը։ Համաձայն այդ տեսության, Էներգիայի համար կատարվել է ակնհայտ մոտավորություն, ինչը տայիս է բավարար բացատրություն կղզյակների ձևափոխության համար։ Կղզյակի ընդհանուր էներգիան կարելի է գրել հետևայ կերպ՝

$$E = E_s + E_R + E_V \tag{1}$$

որտեղ E_s -ը միջմակերևույթային էներգիան է, E_R -ը առաձգականությամբ պայմանավորված էներգիայի փոփոխությունն է, իսկ E_v -ն՝ ծավալային էներգիան։



Նկ.1. Հեղուկային էպիտաքսիայի մեթոդով InAs(100) տակդիրի վրա աձեցված ինքնաձևավորվող InAsSbP կղզյակների ձևափոխությունը հատած բուրգից կիսագնդի։ <u>Ատենախոսության հիմնական արդյունքները տպագրված են հետևյալ</u> աշխատանքներում

- K.M. Gambaryan, V.M. Aroutiounian, <u>A.K. Simonyan</u> and T. Boeck. Shape Transition of Strain-Induced InAsSbP Islands at Liquid-Phase Epitaxy on InAs(100) Substrate: From Pyramid to Semi-globe. – Armenian Journal of Physics vol. 1, issue 3, 2008, p.p. 208-218:
- V.M. Aroutiounian, K. M. Gambaryan, N.G. Alaverdyan and <u>A.K. Simonyan</u>. Nucleation mechanism of strain-induced InAsSbP quantum dots and pits at liquid phase epitaxy on InAs(100) substrate. – Armenian Journal of Physics, 2009, vol. 2, issue 4, p.p. 268-273:
- V.M. Aroutiounian, K. M. Gambaryan, N.G. Alaverdyan and <u>A.K. Simonyan</u>. Nucleation mechanism of strain-induced InAsSbP quantum dots and pits at liquid phase epitaxy on InAs(100) substrate. – Semiconductor Micro- and Nanoelectronics, International Conference, Tsakhcadzor, Armenia 2009, p.p. 164-167:
- <u>A.K. Simonyan</u>, L.G. Movsesyan and K. M. Gambaryan. Growth Features and Competing Nucleation of Quantum Dots-Nanopits Cooperative Structures in SiGeC Ternary System. – International Conference of Semiconductor Micro- and Nanoelectronics, Yerevan, Armenia, 2011, p.p. 201-204:
- K.M. Gambaryan, V.M. Aroutiounian, <u>A.K. Simonyan</u>, L.G. Movsesyan. Growth Features and Competing Nucleation of Quantum Dots-Nanopits Cooperative Structures in SiGeC Ternary System. Journal of Contemporary Physics, vol. 47, No 4, 2012, p.p. 173-180:
- K.M. Gambaryan, <u>A.K. Simonyan</u>, V.M. Aroutiounian. GaAsSbP Quasiternary Material System: Nanostructures Growth Features and Immiscibility Analysis. Armenian Journal of Physics, vol. 5, issue 3, 2012,pp 156-163.
- A.K. Simonyan, K.M. Gambaryan. Quantitative Analysing of InAsSbP Quantum Dots Size Distribution at Ostwald Ripening on InAs(100) substrate. International Conference of Semiconductor Micro- and Nanoelectronics, Yerevan, Armenia, 2013, p.p. 120-122:
- 8. <u>А.К. Симонян</u>. Теоретический анализ процесса зародышеобразавания и функции распределения квантовых точек в системе InAsSbP при их оствальдовском созревании. Известия НАН, т.48, вып. 5, 2013, с. 330-335.

սաղմնառաջացման ընթացքում տեղի ունեցող ֆիզիկական և տեխնոլոգիական պրոցեսները։ SiGeC նյութական համակարգի համար կատարվել են նմանատիպ հետազոտություններ, ինչ InAsSbP և GaAsSbP դեպքում և ստացվել են ֆիզիկորեն համանման արդյունքներ։ Մասնավորապես տեսականորեն պարզվել է, որ ածխածնի կոնցենտրացիայի մեծացնելը SiC համակարգում և գերմանիումինը՝ SiGeC համակարգում, հանգեցնում է քվանտային կետի կրիտիկական չափի փոքրացմանը։ Քանակական հաշվարկները նաև ցույց են տվել, որ ածխածնի խառնուրդային կոնցենտրացիայի չափով ներմուծումը սիլիցիումի և գերմանիումի մեջ էներգետիկ տեսանկյունից շահավետ է, ինչը բացատրում է փորձնականորեն դիտված այն փաստը, որ գրաֆիտե տարայի մեջ աձեցված չլեգերացված սիլիցիումի և գերմանիումի

- 11. Կիրառելով Լիֆշից–Սլեզով-Վագների տեսությունը բացատրվել է InAsSbP ՔԿ-ի փորձնականորեն ստացված բաշխման ֆունկցիայի տեսքի ձևափոխումը և սաղմնառաջացման ընթացքում տեղի ունեցող ֆիզիկական պրոցեսները։ Համեմատելով փորձնական տվյալները տեսական հաշվարկների արդյունքների հետ հաշվարկվել են որոշ տեխնոլոգիական պարամետրեր, որոնք բնութագրում են InAsSbP ՔԿ-ի սաղմնառաջացման և հասունացման պրոցեսները։
- 12. Մասնավորապես ցույց է տրվել, որ ամի փոքր (մինչև 10 րոպե) InAsSbP համակարգում ՔԿ-ի ժամանակներում բաշխումը համապատասխանում է Վագների բաշխմանը, այսինքն՝ աձի պրոցեսը ղեկավարվում է մակերևույթի վրա ռեակցիայի արագությամբ (մակերևույթային դիֆուզիայով), որի մեր կողմից գնահատված թվային արժեքն է $B \cong 2.65 \cdot 10^{-7}$ uմ/վ։ Մեծ ժամանակների դեպքում (30 րոպե և ավել) ՔԿ-ի բաշխումը համապատասխանում է Լիֆշից–Սլեզով բաշխմանը, այսինքն՝ պրոցեսը ղեկավարվում է արդեն ծավայային գործակցի հաշվարկված դիֆուզիայով, որի թվային արժեքը՝ $D \cong 3.17 \cdot 10^{-12}$ սմ²/վ է։ Իսկ *InAsSbP* ՔԿ-ի Օստվայդյան հասունացման միջանկյալ ժամանակներում զանգվածի տեղափոխման այդ երկու մեխանիզմները գործում են միաժամանակ։

Ստանալով և կիրառելով

$$-\frac{c}{2}(b_{1}-b_{2})^{2}(b_{1}+b_{2})T_{g}^{2}\theta_{P}\left(\ln\frac{b_{1}+b_{2}}{b_{1}-b_{2}}+\frac{3}{2}\right)+\left(b_{1}^{2}-b_{2}^{2}\right)\left(\frac{1}{Cos\theta_{P}}\gamma_{e}-\gamma_{S}\right)=$$
$$=-cD_{cr}^{3}\left(\frac{3}{2}-\ln\frac{Ctg\theta_{G}}{2}\right)+\frac{\sigma\pi D_{cr}^{2}}{2}$$
(2)

բանաձևը, որտեղ D_{cr} -ը կղզյակից կիսագունդ ձևափոփոխման կրիտիկական արժեքն է, կրիտիկական արժեքի համար ստացվել է $d_{cr} \approx 550\,nm$, ինչը բավականի լավ համընկնում է փորձնական տվյալների հետ։

Այս գլխում քննարկվել է նաև այդ նույն համակարգում քվանտային կետերի և նանոխոռոչների սաղմնառաջացման մրցակցային մեխանիզմները, ինչպես նաև ուսումնասիրվել է InAs-InSb-InP եռաբաղադրիչ հանակարգի անհամատեղելիության խնդիրը։ Հաշվարկվել է ինքնաձևավորվող InAsSbP կետերի և խոռոչների ընդհանուր էներգիայի կախվածությունը ծավալից, որոնք ցուց են տրված նկ. 2-ում։ Նկ.2 (A)-ում այդ կախվածությունը բերված է ցանցի լարվածության տարբեր արժեքների դեպքում։ Որպեսզի կղզյակը կայուն երկրաչափական տեսք ընդունի, այն պետք է նախ և առաջ հաղթահարի E^* շեմային էներգիան, որը առաջանում է V^* ծավալի դեպքում։ Հաշվարկված է կրիտիկական էներգիայի և ծավալի կախվածությունները ցանցի

լարվածությունից, որոնք համապատասխանաբար ցույց է տրված նկ.2 (B)-ում և 2 (C)-ում։



Նկ.2. (A) - ինքնաձևավորվող InAsSbP կղզյակների էներգիայի կախվածությունը ծավալից լարվածության տարբեր արժեքների դեպքում (1- $\varepsilon = 0.002$, 2- $\varepsilon = 0.004$, 3-

 $\varepsilon = 0.006$, 4- $\varepsilon = 0.007$), (B) - կրիտիկական էներգիայի, (C) կրիտիկական ծավալի, (D) հեղուկ ֆազի հագեցման մակարդակի կախվածությունը ցանցի լարվածությունից։

Ինչպես երևում է գրաֆիկներից E^* -ը և V^* -ը էապես կախված են ցանցի լարվածություններից, ընդ որում, դրանք կտրուկ նվազում են լարվածությանների աձմանը զուգընթաց, ինչպես նաև լարվածության որոշակի $\varepsilon^* = 0.0105$ կրիտիկական արժեքի դեպքում տեղի է ունենում նշանի փոփոխություն։ Ենթադրվում է, որ այդ արժեքի դեպքում տեղի է ունենում սաղմնառաջացման մեխանիզմի փոփոխություն՝ քվանտային կետերի աձի մեխանիզմը փոխվում է նանոխոռոչների ձևավորման մեխանիզմի։

InAs-InSb-InP եռաբաղադրիչ հանակարգի միացության համար մեկ մոլի ազատ էներգիայի կախվածությունը բաղադրություններից և ջերմաստիձանից տրվում է հետևյալ արտահայտությամբ՝

$$F(x, y, T) = \omega_{InAs}(1 - x - y) + \omega_{InSb}x + \omega_{InP}y + \alpha_{InAs-InP}(1 - x - y)x + \alpha_{InSb-InP}xy + \alpha_{InAs-InP}(1 - x - y)x + \alpha_{InSb-InP}xy + \alpha_{InAs-InP}(1 - x - y)y + RT[(1 - x - y)\ln(1 - x - y) + x\ln x + y\ln y], (3)$$

որտեղ ω -երը երկբաղադրիչ միացույունների համար առաջին և երկրորդ իրար մոտ գտնվող հարևան ատոմների միջև փոխազդեցության էներգիաների գումարն է, α -երը համապատասխան նյութերի պսևդոերկակի պարամետրերն են, T -ն բացարձակ ջերմաստիձանը, իսկ R -ը՝ գազային հաստատունը։ Ազատ էներգիայի հաշվարկների արդյունքները բերված են նկ.3-ում՝ T = 573 - 1073 K ջերմաստիձանային տիրույթի համար։



Նկ.3. InAs-InSb (a), InAs-InP (b) և InSb-InP (c) եռաաբաղադրիչ միացությունների ազատ էներգիանների կախվածությունները բաղադրություններից տարբեր ջերմաստիձանների դեպքում` 1- T= 573 K, 2- T= 673 K, 3- T= 773 K, 4- T= 873 K, 5- T= 973 K:

Ինչպես երևում է նկ.3(c)-ից, ի տարբերություն InAs-InSb և InAs-InP միացությունների, InSb-InP համակարգում նկատվում են անհամատեղելիության գոտիներ։ կառավարել ինչպես թրջող շերտի հաստությունը, այնպես էլ քվանտային կետի և նանոխոռոչների չափսերը։

- 7. Հաշվարկվել են ինչպես InAsSbP քվազիեռաբաղադրիչ, այնպես էլ InAs – InSb, InAs – InP և InSb – InP քվազիերկբաղադրիչ պինդ լուծույթների խառնման ազատ էներգիաները (free energy of mixing)։ Կառուցվել են դրանց 2D և 3D սխեմատիկ պատկերները։ Հաշվարկվել են սպինոդալ և բինոդալ անցումային տիրույթները, ինչպես նաև որոշվել են պինդ լուծույթների բաղադրությունների կայուն, մետակայուն և ոչ կայուն (անհամատեղելիության) միջակայքերը տարբեր ջերմաստիՃանների դեպքում։
- 8. Հետազոտվել և ներկայացվել է նաև InAsSbP նյութական համակարգերի խառնման ազատ էներգիայի իզոէներգետիկ կտրվածքները և կոնցենտրացիոն եռանկյունը։ Յույց է տրվել, որ անհամատեղելիության տիրույթները խիստ կախված են ջերմաստիձանից և որ դրանք փոքրանում են ջերմաստիձանի մեծացմանը զուգընթաց։
- 9. Վերը նշված հետազոտությունները իրականացվել են նաև GaAsSbP նյութական համակարգի համար։ Հաշվարկվել և գրաֆիկորեն պատկերվել են այդ պինդ լուծույթի ՔԿ-ի ինչպես լրիվ էներգիայի կախվածությունը այնպես էլ կրիտիկական էներգիայի և ծավալի ծավալից, կախվածությունները լարվածությունից։ Ցույց է տրվել, որ այստեղ ևս որոշակի $\varepsilon = \varepsilon^*$ կրիտիկական լարվածության դեպքում, աձման մեխանիզմը փոխվում է քվանտային կետի սաղմնառաջացումից նանոխոռոչի ձևավորմանը։ Հաշվարկվել են ինչպես GaAsSbP քվազիեռաբաղադրիչ, այնպես էլ GaAs-GaSb, GaAs-GaP և GaSb-GaP քվազիերկբաղադրիչ պինդ լուծույթների խառնման ազատ էներգիաները և կառուցվել են դրանց 2D և 3D սխեմատիկ պատկերները։ Նմանատիպ հաշվարկվել են սպինոդալ և բինոդալ անցումային տիրույթները, ինչպես նաև որոշվել են բաղադրությունների կայուն, մետակայուն և ոչ կայուն միջակայքերը տարբեր ջերմաստիձանների դեպքում։ Ցույց է տրվել, որ անհամատեղելիության տիրույթները խիստ կախված են ջերմաստիձաններից և որ դրանք փոքրանում են ջերմաստիձանի մեծացմանը զուգընթաց։
- 10. Մանրամասն ուսումնասիրվել է նաև SiGeC եռաբաղադրիչ պինդ լուծույթը և դրա հիման վրա ստեղծված նանոկառուցվածքների

ինչպես InAsSbP, այնպես էլ SiGe նյութական համակարգերի դեպքում էլ կրիտիկական արժեքների համար տեսականորեն հաշվարկված արժեքները բավականաչափ մեծ Ճշտությամբ համապատասխանում են փորձնական տվյալներին։

- Օգտագործելով հոծ (կոնտինուումային) առաձգական մոդեյր (J. Tershof, IBM Research Center) կատարվել է քվանտային կետերի և նանոխորոչների պրոցեսի մրցակցային սաղմնառաջացման քանակական InAs1-x-ySbxPy ուսումնասիրություն երեք՝ GaAs1-x-ySbxPy lı քվազիեռաաբաղադրիչ ու Si1-x-yGexCy եռաբաղադրիչ նյութական համակարգերում։ Հաշվարկվել են նանոկղզյակների լրիվ էներգիաների և չափերի կախվածությունները ε լարվածությունից՝ ε=∆a/a – թրջող 2երտի և տակդիրի ցանցի հաստատունների հարաբերական տարբերությունից և պինդ լուծույթի բաղադրությունից (x-ից և y-ից)։
- 5. Ի տարբերություն Ջ. Տերսհոֆի մոտեցմանը, մեր կողմից ուսումնասիրվել և հաշվարկների ընթացքում հաշվի է առնվել թրջող շերտի հաստության կախվածությունը ցանցի հաստատունների տարբերության պատձառով առաջացած լարվածությունից։ Փորձարարական տվյալների մաթեմատիկական մոտարկման միջոցով դուրս են բերվել էմպիրիկ բանաձևեր համապատասխան լարվածությունների համար։ Յույց է տրվել, որ կախված լարվածության նշանից և արժեքից, թրջող շերտի հաստության կախվածությունը տրվում է կա՝մ էքսպոնենտային, կա՝մ աստիձանային օրենքով։
- 6. Հաշվարկվել և գրաֆիկորեն պատկերվել են *InAsSbP* նյութական համակարգում ՔԿ-ի ինչպես լրիվ էներգիայի կախվածությունը ծավալից, այնպես էլ կրիտիկական էներգիայի և ծավալի կախվածությունները լարվածությունից կամ պինդ լուծույթի բաղադրությունից։ Ստացված արդյունքների միջոցով մեկնաբանվել է քվանտային կետ նանոխոռոչ զույգերի սաղմնառաջացման մեխանիզմը։ Մասնավորապես, ցույց է տրվել, որ որոշակի ε=ε^{*} կրիտիկական լարվածության դեպքում, որը համապատասխանում է պինդ լուծույթի որոշակի կրիտիկական կոնցենտրացիային, աձման մեխանիզմը փոխվում է քվանտային կետի սաղմնառաջացումից նանոխոռոչի ձևավորմանը։ Ցույց է տրվել, որ երրորդ բաղադրիչի ներմուծումը պինդ լուծույթ հնարավորություն է տալիս



Նկ. 4. Մեկ մոլ InAsSbP համակարգի ազատ էներգիայի 3D սխեմատիկ պատկերները. (ա)-T=773K, (բ)-T=973K և (q)-T=1073K ջերմաստիձաններում։

Նկ.4-ում բերված են InAsSbP քառաբաղադրիչ միացության համար ազատ էներգիայի 3D պատկերները համապատասխանաբար 773 K, 973 K և 1073 K ջերմաստիձաններում։

Վերը նշված խնդիրները դիտարկվել են նաև GaAs-GaSb-GaP քառաբաղադրիչ համակարգի համար ջերմաստիձանների *T* = 800 – 1200*K* տիրույթում, որի արդյունքները բերված են համապատասխանաբար նկ.5-ում և նկ.6-ում։



Նկ.5. GaAsSbP ինքնաձևավորվող կղզյակների համար a) էներգիայի կախվածությունը ծավալից՝ ցանցի լարվածության տարբեր արժեքների դեպքում. 1)- $\varepsilon_1 = 0.0042$, 2)- $\varepsilon_2 = 0.01$, 3)- $\varepsilon_3 = 0.016$; b)- ն՝ ծավալի կախվածությունը լարվածությունից, c)-ն՝ էներգիայի կախվածությունը լարվածությունից։



Նկ.6. GaAs-GaP (a), GaAs-GaSb (b) և GaSb-GaP (c) երկբաղադրիչ համակարգերի համար մեկ մոլի ազատ էներգիայի կախվածությունները բաղադրություններից. (Tı) 800 K, (T₂) 900 K, (T₃) 1000 K, (T₄) 1100 K, (T₅) 1200 K ջերմաստիձաններում:

Համաձայն նկ.5-ի, մենք ենթադրում ենք, որ $\varepsilon = 0.03$ արժեքը կրիտիկական լարվածության այն արժեքն է, որի դեպքում տեղի է ունենում սաղմնառաջացման մեխանիզմի փոփոխություն։ Այսինքն՝ քվանտային կետերի սաղմնառաջացման փոխարեն տեղի է ունենում խոռոչների ձևավորում։ Իսկ ինչպես երևում է նկ.6-ից, GaAs-GaP, GaAs-GaSb և GaSb-GaP երկբաղադրիչ համակարգերում ակնհայտ անհամատեղելիության գոտիներ ի հայտ են գալիս միայն GaSb-GaP համակարգում։



Անհամատեղելիության գոտի առաջանում է նաև GaAs-GaSb համակարգում, սակայն այս դեպքում համեմատաբար ցածր ջերմաստիձաններում։ Ինչպես



Նկ.13 Տեսական (հոծ գիծ) և փորձարարական (կետեր) բաշխման կորերը ըստ Լիֆշից-Սլեզովի աձի տարբեր ժամանակի դեպքում. a), b) և c) համապատասխանաբար tı=10 ր, t2=20 ր և t3=30 ր։

Մեր կողմից գնահատվել են նաև InAsSbP համակարգում քվանտային կետերի աձման դեպքում ադատոմների մակերևութի վրա ռեակցիայի արագություն և ծավալային դիֆուզիայի գործակցի թվային արժեքները, որոնք համապատասխանաբար հավասար են՝ $B \cong 2.65 \cdot 10^{-7}$ սմ/վ (նկ. 12 a)) և $D \cong 3.17 \cdot 10^{-12}$ uմ²/վ (նկ. 13 b)):

<u>Եզրակացությունների</u> մասում ամփոփված են ատենախոսության գլխավոր եզրահանգումները և արդյունքները։

- Ապահովելով InAs (100) տակդիրի և InAsSbP թրջող շերտի ցանցի հաստատունների հարաբերական տարբերության փոքր (մինչև 1%) արժեքներ, հեղուկային էպիտաքսիայի եղանակով աձեցվել են ենթամիկրոմետրական կղզյակներ։ ծույց է տրվել, որ կղզյակների ծավալի փոքրացմանը զուգնթաց տեղի է ունենում դրանց երկրաչափական տեսքի փոփոխության հետևյալ հաջորդականությունը. հատած բուրգ, բուրգ, համալրային մակերեսով (ավելի բարձր ինդեքսներով) բուրգ և կիսագունդ։ Փորձնականորեն ցույց է տրվել, որ InAsSbP բաղադրության կղզյակների բրգաձնից դեպի կիսագունգ տեսքի անցման կրիտիկական չափսը կազմել է ≈500 նմ։
- Օգտագործելով կղզյակների էներգիայի փոքրագույն արժեքի սկզբունքը, քանակապես հաշվարկվել է InAsSbP բաղադրության կղզյակների կրիտիկական չափսը, երբ դրանք ձևափոխվում են կիսագնդի։
- Առաջարկված տեսական մոտեցումը կիրառվել է նաև Si (001) տակդիրի վրա աձեցված SiGe կղզյակների համակարգի համար։ Ցույց է տրվել, որ 17



Նկ. 12. Տեսական (հոծ գիծ) և փորձարարական (կետեր) բաշխման կորերը ըստ Վագների աձի տարբեր ժամանակի դեպքում. a), b) և c) համապատասխանաբար tı=10 p, t₂=20 p և t₃=30 p:

Ինչպես երևում է նկ. 12 a)-ից, ըստ շառավիղի քվանտային կետերի փորձնական կետերի բաշխվածությունը որակապես ավելի լավ նկարագրվում է Վագների տեսությամբ, իսկ նկ. 13 b)-ն` Լիֆշից-Սլեզովի։ Սա նշանակում է, որ քվանտային կետերի աձը փոքր ժամանականերում ղեկավարվում է ադատոմների մակերևույթային ռեակցիայի արագությամբ, իսկ համեմատաբար մեծ ժամանակներում գերիշխում է ծավալային դիֆուզիան։ Նկ. 12 b)-ում և նկ. 13 b)-ում բերված արդյունքների ուսումնասիրություններից կարելի է ենթադրել, որ միջանկյալ ժամանակներում միաժամանակ գործում են աձի երկու մեխանիզմները, ընդ որում, մեծ չափերի դեպքում գերիշխում է մակերևույթի վրա ռեակցիայի արագությունը (նկ. 12 b)), իսկ փոքր չափերի դեպքում` ծավալային դիֆուզիան (նկ. 13 b))։



InAsSbP համակարգի համար, GaAsSbP համակարգի համար համատեղելիության գոտիները նույնպես կառուցված են։

Si-Ge-C համակարգում <u>Երրորդ գլխում</u> ներկայացված են կետերի և լարերի ձևավորման նանոկառուցվածքների, քվանտային մեխանիզմները, որոնք պարզաբանելու համար նույնպես կիրառված է գյուխ 2ում նկարագրված, Տերսոֆֆի կողմից առաջադրված, հոծ առաձգականության Համակարգի րնդհանուր էներգիայի կախվածությունը մոդելը։ յարվածությունից ($\epsilon=\Delta a/a$) ուսումնասիրեյու համար օգտվել ենք գյուխ 2-ում նկարագրված բանաձևերից, իսկ Si-C և Si-Ge-C համակարգերի համար կրիտիկական էներգիայի և կրիտիկական ծավայի կախվածությունները յարվածությունից համապատասխանաբար ցույց են տրված նկ.8-ում և նկ.9ում։





Նկ. 8. Էներգիաների կախվածությունները բաղադրությունների դեպքում. 1) x=0.01, 2) x=0.05, 3) x=0.08, 4) x=0.085; b) Sil-x-yGe_xC_y, 1) y=0.05, 2) y=0.045, 3) y=0.04:

Նկ. 9. Կրիտիկական ծավալի կախվածությունը ածխածնի բաղադրությունից. a) Si1-xCx և b) Si1-x-yGexCy համակարգերի համար։

Արդյունքում, հաշվարկվեց, որ ածխածնի կրիտիկական բաղադրությունը x=0.08 է Si_{1-x}- $_x$ համակարգի համար և y=0.033 Si_{1-x-y}Ge_xC_y համակարգերի համար՝ գերմանիումի x=0.467 բաղադրության դեպքում։



Նկ. 10. a) Si-Ge, b) Si-C և c) Ge-C համակարգերի համար մեկ մոլի ազատ էներգիայի կախվածությունը բաղադրություններից, տարբեր ջերմաստիձանների դեպքում` 1) 700 K, 2) 900 K, 3) 1100 K, 4)1300 K, 5) 1500 K:

Ընդունելով, որ եռաաբաղադրիչ միացությունների համար մեկ մոլի խառման ազատ էներգիան նկարագրվում է գլուխ 2-ում նկարագրված (3) բանաձևով՝ ազատ էներգիայի համար կստանանք նկ. 10-ում ցույց տրված կախվածությունները 700-1500 K ջերմաստիՃանային տիրույթում։

Նկ.10-ից ակնհայտ երևում է, որ ի տարբերություն Si-Ge համակարգի, Si-C և Ge-C համակարգերում ի հայտ է գալիս անհամատեղելիության գոտիներ։ Այդ գոտիները ի հայտ են գալիս այն դեպքում, երբ տվյալ պինդ լուծույթում ածխածնի կոնցենտրացիան մեծանում է, որն էլ պատձառ է հանդիսանում, որպեսզի տվյալ համակարգի ազատ էներգիան մեծանա։



Նկ. 11. SiGeC համակարգի համատեղելիության գոտիները. a) 1100 K, b) 1500 K և c) 1600 K ջերմաստիձաններում։

Մակայն, մեր հաշվարկները ցույց են տվել, որ ածխածնի ներմուծումը խատնուրդային կոնցենտրացիայի մակարդակով Si-ի և Ge-ի մեջ էներգետիկ տեսանկյունից շահավետ է, այսինքն՝ համակարգի ազատ էներգիան նվազում է, ինչը հաստատված է նաև փորձնականորեն։ Ինչ վերաբերվում է համատեղելիության գոտիներին, ապա դրանք ցույց են տրված նկ.11-ում՝700-1500 K ջերմաստիձանային տիրույթում։ Ինչպես երևում է, 40 կՋ և 50 կՋ էներգիաների արժեքների դեպքում ջերմաստիձանի մեծ արժեքների դեպքում, այդ տիրույթները մեծանում են։

<u>Չորրորդ գլխում</u> ներկայացված են InAsSbP համակարգում Օստվայդյան հասունացման դեպքում քվանտային կետերի սաղմնառաջացման երևույթների տեսական ուսումնասիրությունները և բաշխման ֆունկցիաները։ InAs(100) տակդիրի վրա Ստրանսկի-Կրաստանով սկզբունքով հեղուկային էպիտաքսիայի մեթոդով ամեցվել են InAsSbP ոսպնյակաձև և էլիպսոիդալ քվանտային կետեր։ Ամեցված նանոկառուցվածքների Օստվալդյան հասունացման պրոցեսը հետազոտվել է ատոմա-ուժային և սկանավորող էլեկտրոնային մանրադիտակների միջոզով։ Այդ քվանտային կետերի ամը իրականացվել է երեք տարբեր ռեժիմներում. t1=10 p, t2=20 p և t3=30 p: InAsSbP համակարգում քվանտային կետերի սաղմնառաջացման պրոցեսները և բաշխման ֆունկցիաների տեսքերը կառուցելու համար կիրառվել են Վագների (4) և Լիֆշից-Սլեզովի (5) բաշխման ֆունկցիաները

$$P_1(u) = \frac{3}{2}e^3u(1-u)^{-5} \cdot \exp\left(-\frac{3}{1-u}\right)$$
(4)

$$P_2(u) = \frac{2^4 e}{2^{5/3}} u^2 (u+2)^{-7/3} (1-u)^{-11/3} \cdot \exp\left(-\frac{1}{1-u}\right):$$
(5)

Նկ.12-ում և նկ.13-ում անընդհատ կորերով բերված են տրված քվանտային կետերի, ըստ շառավղի, համապատասխանաբար Վագների և Լիֆշից-Սլեզովի նորմավորված բաշխումները, իսկ կետերով՝ փորձնական տվյալները։ a), b) և c) նկարները համապատասխանում են քվանտային կետի աՃի ժամանակային տարբեր ռեժիմներին՝ ti=10 p, t2=20 p և t3=30 p համապատասխանաբար։

