

АПНН 2022

Школа молодых учёных «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем»



ТЕЗИСЫ

12 – 13 декабря

www.isp.nsc.ru/appn_2022/

Новосибирск 2022

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**Школа молодых ученых
«Актуальные проблемы полупроводниковых
наносистем»**

12–13 декабря, Новосибирск

**Новосибирск
2022**

УДК 53

Тезисы докладов Школы молодых учёных «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем» — Новосибирск, ФГБУН Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН : Типография ООО «ДигитПро», 2022. — 82 с.

Школа проведена при поддержке Российского научного фонда, грант № 19-72-30023.

© ФГБУН Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, 2022

Подписано в печать 05.12.2022. Формат В5
Усл. печ. 5,125 л. Тираж 50 экз. Заказ №1228.

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель

Латышев Александр Васильевич

Секретарь

Родякина Екатерина Евгеньевна

Члены организационного комитета

Федина Людмила Ивановна

Щеглов Дмитрий Владимирович

Рогило Дмитрий Игоревич

Адрес и контакты организационного комитета:

ФГБУН Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН

630090 Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева 13

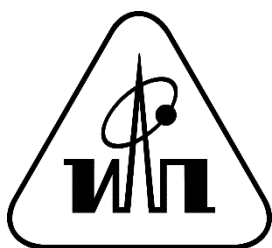
appnschool@yandex.ru

Родякина Екатерина Евгеньевна

Тел. +7-(383)-330-90-82

ОРГАНИЗАТОР

ФИ-



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
www.isp.nsc.ru

ФИНАНСОВАЯ ПОДДЕРЖКА



Российский научный фонд
www.rscf.ru

СОДЕРЖАНИЕ

ПРИГЛАШЁННЫЕ ДОКЛАДЫ.....	8
Электрооптические модуляторы для телекоммуникаций и радиофотоники.....	9
<i>Гуляев Д.В.</i>	
Приемники инфракрасного и терагерцового излучения на основе квантовых ям и микроболометров	11
<i>Демьяненко М.А.</i>	
Проблемы и задачи на пути внедрения FRAM на основе HfO_2	13
<i>Исламов Д.Р.</i>	
Процессы химического осаждения из газовой фазы в современных технологиях формирования материалов электронной техники.....	15
<i>Косинова М.Л.</i>	
Кремний в современной электронике	17
<i>Наумова О.В.</i>	
Процессы на поверхности кремния: от исследования диффузии атомов до управления макрорельефом	18
<i>Рогило Д.И., Ситников С.В., Петров А.С., Пономарев С.А., Родякина Е.Е., Федина Л.И., Щеглов Д.В., Латышев А.В.</i>	
Гибридные полупроводниковые перовскиты для солнечных элементов	20
<i>Семенова О.И.</i>	
Новая наноструктурная форма гексагонального Si в плоскости {113} дефектов как результат кластеризации дивакансий и междоузельных атомов	22
<i>Федина Л.И., Жачук Р.А., Гутаковский А.К.</i>	
Кремниевая нанометрология.....	24
<i>Щеглов Д.В., Федина Л.И., Ситников С.В., Родякина Е.Е., Рогило Д.И., Кожухов А.С., Латышев А.В.</i>	
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	25
Структурные и магнетотранспортные свойства пленок топологического изолятора на основе халькогенидов висмута и сурьмы $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Te,Se})_3$	26
<i>Баженов А.О., Стетина Н.П., Шумилин А.В., Кунцевич А.Ю., Кириенко В.В., Ищенко Д.В., Терещенко О.Е.</i>	
Влияние отжига на неоднородность параметров металл/InAlAs барьеров Шоттки	28
<i>Гензе И.Ю., Аксенов М.С., Чистохин И.Б., Дмитриев Д.В.</i>	

Изучение отклика сверхизоляционного состояния в плёнках NbTiN под действием прямоугольных импульсов напряжения	29
<i>Дураков Д.Е., Миронов А.Ю.</i>	
Высокотемпературный отжиг полупроводниковых гетероструктур: влияние распределения термически генерируемых носителей заряда	30
<i>Жилицкий В.Е., Шамирзаев Т.С.</i>	
Влияние материала электродов МСМ структур на сегнетоэлектрические свойства пленок $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$	32
<i>Залялов Т.М., Исламов Д.Р.</i>	
Ван-дер-ваальсовый гетероэпитаксиальный рост SnSe_2 на поверхностях $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$	34
<i>Захожев К.Е., Пономарев С.А., Роголо Д.И., Курусь Н.Н., Щеглов Д.В., Милехин А.Г., Латышев А.В.</i>	
Детекторы УФ излучения на основе структур $\text{Ga}_2\text{O}_3\text{-GaAs}$	36
<i>Киселева О.С., Копьев В.В., Кушнарёв Б.О., Олейник В.Л.</i>	
Атомная и электронная структура вакансий кислорода в оксиде гафния, легированном Al, Y и La	38
<i>Ковзик В.М., Перевалов Т.В., Исламов Д.Р.</i>	
Формирование островков InAs в процессе удаления окисного слоя с подложки $\text{InP}(001)$ в потоке As_4	40
<i>Колосовский Д.А., Дмитриев Д.В., Пономарев С.А., Торопов А.И., Журавлев К.С.</i>	
Эволюция поверхности $\text{InP}(001)$ в потоке мышьяка	42
<i>Колосовский Д.А., Дмитриев Д.В., Голяшов В.А., Гаврилова Т.А., Торопов А.И., Журавлев К.С.</i>	
Исследование параметров роста HfO_2	44
<i>Краснова И.А., Горшков Д.В., Сидоров Г.Ю., Марин Д.В., Сабина И.В.</i>	
Влияние температуры на характеристики движения капель Au-Si по поверхности $\text{Si}(111)$	46
<i>Кудрич С.В., Шварц Н.Л.</i>	
Изменения сверхструктуры $2\times N$ при гетероэпитаксиальном росте Ge на $\text{Si}(100)$	48
<i>Кукенов О.И., Соколов А.С.</i>	
Газочувствительные свойства пленок твердого раствора $\text{In}_2\text{O}_3\text{-Ga}_2\text{O}_3$	49
<i>Алмаев А.В., Кушнарёв Б.О., Николаев В.И., Черников Е.В.</i>	

Моделирование формирования нанокластеров GaN на кремниевых подложках методом капельной эпитаксии	51
<i>Литвиненко М.А., Настовьяк А.Г.</i>	
Кинетика золото-индуцированной кристаллизации тонких плёнок нестехиометрического оксида кремния	53
<i>Лунев Н.А., Замчий А.О., Воробьев Ю.В., Константинов В.О., Баранов Е.А.</i>	
Влияние условий атомно-слоевого осаждения плёнок VO _x и последующего отжига на их морфологию	55
<i>Лысенко Н.И., Мутилин С.В., Волошин Б.В., Селезнев В.А., Кичай В.Н.</i>	
Свойства двумерного вигнеровского кластера: структура, вращение и спиновое упорядочение	57
<i>Махмудиан М.М., Энтин М.В.</i>	
Изучение спинового транспорта и электронной структуры PbSnTe вблизи точки инверсии зон	59
<i>Микаева А.С., Голяшов В.А., Климов А.Э., Тарасов А.С., Ищенко Д.В., Супрун С.П., Кавеев А.К., Терещенко О.Е.</i>	
Двумерные структуры Si, выращенные молекулярно-лучевой эпитаксией на подложках CaF ₂ /Si(111)	61
<i>Муратов В.И., Зиновьева А.Ф., Зиновьев В.А., Володин В.А., Крупин А.Ю., Двуреченский А.В.</i>	
Гистерезис фазового перехода $\beta \Leftrightarrow \beta'$ в пленках In ₂ Se ₃	63
<i>Пономарев С.А., Роголо Д.И., Миронов А.Ю., Курусь Н.Н., Милехин А.Г., Щеглов Д.В., Латышев А.В.</i>	
Баллистический электронный транспорт в квантовых точечных контактах траншейного типа	65
<i>Сарыпов Д.И., Похабов Д.А., Погосов А.Г., Жданов Е.Ю., Бакаров А.К.</i>	
Долинный эффект холла, индуцированный электронной диффузией, и нелинейный гальванодиффузионный транспорт в гексагональных дираковских 2D монослойных материалах	67
<i>Снегирев А.В., Ковалев В.М., Энтин М.В.</i>	
Температурная зависимость сверхструктурных переходов при гетероэпитаксиальном росте Ge на Si(111)	68
<i>Соколов А.С., Кукенов О.И.</i>	
Исследование тонких плёнок Bi на поверхности InAs(111)A(2x2)	69
<i>Соловова Н.Ю., Голяшов В.А., Терещенко О.Е.</i>	
Моделирование конструкций лавинного фотодиода на основе Ge/Si	71
<i>Хомякова К.И., Диб Х.</i>	

Пленение излучения в p -GaAs(Cs,O)-фотокатодах: эксперимент и расчет	73
<i>Хорошилов В.С., Протопопов Д.Е.</i>	
Влияние ловушек на фотоэлектрические характеристики детекторов на основе тонких пленок оксида галлия	75
<i>Цымбалов А.В., Калыгина В.М., Олейник В.Л., Кушнарёв Б.О.</i>	
Структура тонких пленок GeO стехиометрического состава.....	77
<i>Чжан Фань, Азаров И.А., Астанкова К.Н., Просвирин И.П., Володин В.А.</i>	
Влияние ионной имплантации на газочувствительные свойства $\epsilon(\kappa)$ -Ga ₂ O ₃	79
<i>Яковлев Н.Н., Алмаев А.В.</i>	
Авторский указатель	81

ПРИГЛАШЁННЫЕ ДОКЛАДЫ

Электрооптические модуляторы для телекоммуникаций и радиофотоники

Гуляев Д.В.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Оптический модулятор - это ключевой элемент волоконно-оптической линии связи и приборов радиофотоники, используемый для кодирования электрических сигналов и данных в световой сигнал перед его передачей по оптическому волокну. На заре оптической связи оптическая модуляция достигалась просто путем прямой токовой модуляции полупроводникового лазера. Однако, по мере развития технологий и увеличения скорости передачи данных исследователи стали сталкиваться с фундаментальными проблемами характерными для токовой модуляции лазера. Основная проблема таких передатчиков - чирп эффект: изменение частоты (длины волны) источника излучения во время нарастания и спада импульса цифрового сигнала, модулирующего ток накачки лазера [1]. Лазерный чирп уширяет спектр оптического сигнала, что ведет к искажению оптического сигнала, вызванного дисперсией и нелинейностью оптоволокна.

В результате, наиболее распространенным подходом для модуляции оптического сигнала является внешняя модуляция с использованием электрооптических модуляторов. На сегодняшний день все широкополосные волоконно-оптические линии связи используют оптические модуляторы в своих передатчиках. При этом, из-за продолжающейся тенденции к постоянному увеличению ширины полосы пропускания в волоконно-оптической связи роль модуляторов в системах передачи информации только возрастает. В системах радиофотоники, для аналоговых волоконно-оптических линий связи, внешние модуляторы также являются ключевым элементом из-за требований к линейности и динамического диапазона.

В данной лекции подробно рассмотрены физические эффекты, лежащие в основе различных типов модуляторов, такие как электрооптические эффекты в нелинейных кристаллах и полупроводниках, квантово-размерный эффект Штарка в полупроводниковых структурах с множественными квантовыми ямами. Приведены описания оптических и электрооптических свойств монокристаллических полупроводниковых материалов из ниобата лития и соединений III–V обычно используемых для создания модуляторов, а также новых перспективных материалов, подходящих для создания модуляторов с широкой полосой пропускания и низким напряжением возбуждения, таких как кремний, электрооптические полимеры, прозрачные сегнетоэлектрические оксиды и органические нелинейно-оптические кристаллы [1-4]. Для каждого типа модулятора подробно обсуждаются основные факторы, важные для производительности модулятора, типичные конструкции модуляторов, технологии изготовления и современные характеристики. Представлены методы измерения ключевых параметров

производительности. Также рассматриваются области применения высокоскоростных оптических модуляторов, помимо наиболее актуальных для телекоммуникационной отрасли, таких как аналоговые волоконно-оптические радиочастотные линии, волоконно-оптические гироскопы, оптоэлектронные генераторы и визуализация на миллиметровых волнах.

- [1] “*BROADBAND OPTICAL MODULATORS Science, Technology, and Applications*”, ed. by Antao Chen Edmond J. Murphy, CRC Press (2012).
- [2] Jialei Liu et al., *RSC Adv.* **5**, 15784 (2015).
- [3] Taro Arakawa et al., *Japanese Journal of Applied Physics* **50**, 032204 (2011).
- [4] Christian Haffner¹ et al., *Nature* **556**, 483 (2018).

Приемники инфракрасного и терагерцового излучения на основе квантовых ям и микроболометров

Демьяненко М.А.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

На примере двух типов приемников, разрабатываемых в ИФП СО РАН: охлаждаемых – на основе одномерных квантовых ям GaAs/AlGaAs и неохлаждаемых – микроболометров на основе VO_x , рассматриваются физические принципы работы матричных приемников инфракрасного (ИК) и терагерцового (ТГ) излучения, а также их основные технические параметры. Обсуждаются некоторые современные тенденции их развития.

Зонная диаграмма многослойной структуры квантовых ям (МСКЯ) GaAs/AlGaAs изображена на рисунке 1. Состояния электронов в зоне проводимости GaAs описываются волновой функцией, которая в направлении вдоль слоев имеет вид плоской волны, а в перпендикулярном направлении – вид стоячей волны, соответствующей основному квантовому состоянию с энергией ε_0 .

В случае поляризации излучения вдоль слоев МСКЯ его поглощение происходит на свободных носителях и является достаточно слабым. Для поляризации света перпендикулярной слоям МСКЯ, разрешенными являются переходы между основным состоянием ε_0 и следующим квантовым уровнем, расположенным вблизи края энергетического барьера V_b , поскольку они обладают различной четностью. Требуемый поворот поляризации обеспечивают с помощью дифракционной решетки, изготавливаемой на каждом пикселе матричного приемника. Электрический ток в такой структуре обеспечивается носителями, возбужденными с основного уровня в состояния квазинепрерывного спектра над барьером, либо туннелированием сквозь барьер.

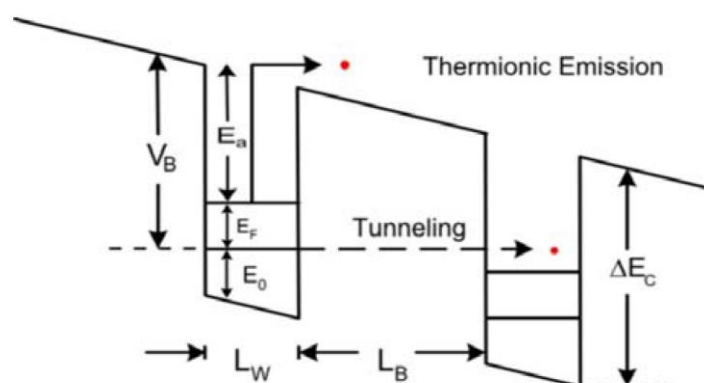


Рис.1. Энергетическая диаграмма МСКЯ. ε_0 , ε_F , E_a – энергии квантования, уровня Ферми и активации. L_W и L_B – толщины квантовой ямы и барьера.

Действие болометра основано на изменении величины какого-либо измеряемого физического параметра приемника при его нагревании поглощенным потоком излучения. В качестве измеряемого физического параметра удобно выбирать тот, который можно наиболее просто и эффективно превратить в электрический сигнал для дальнейшей обработки. Обычно используют следующие физические явления – пирозлектрический и терморезистивный эффекты (рис. 2), термо-ЭДС.

Болометрические ИК приемники имеют ряд преимуществ по сравнению с фотонными приемниками. Болометры не требуют охлаждения и могут работать при комнатной температуре, что существенно упрощает конструкцию тепловизионной системы, делает ее более надежной, удобной в использовании и менее дорогой. Болометр не имеет длинноволнового предела – он может успешно детектировать терагерцовое излучение.

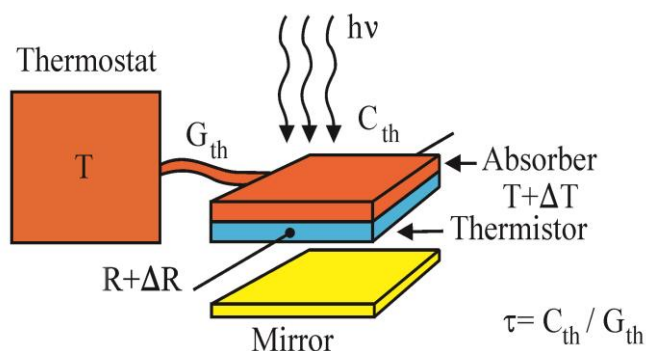


Рис.3. Принципиальная конструкция болометра. C_{th} , G_{th} , τ и R – теплоемкость, теплопроводность, время тепловой релаксации и сопротивление болометра.

В настоящее время неохлаждаемые тепловизионные системы позволяют получать ИК изображения в диапазоне 8–14 мкм форматом 640x512 и больше, с температурным разрешением менее 50 мК, при частоте кадров 50 Гц и относительном отверстии оптики $F/D=1$. Охлаждаемые тепловизионные системы позволяют получать ИК изображения в диапазоне 8–10 мкм форматом 640x512 и больше, с температурным разрешением менее 35 мК, при частоте кадров до 100 Гц и $F/D=2$, что позволяет значительно повысить дальность обнаружения и распознавания.

Проблемы и задачи на пути внедрения FRAM на основе HfO_2

Исламов Д.Р.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Открытие сегнетоэлектрического эффекта в нанометровых слоях HfO_2 вызвало взрывной интерес к изучению физических свойств этих материалов, в связи с перспективой разработки памяти на основе сегнетоэлектрического переключения (Ferroelectric Random Access Memory, FRAM) терабитного масштаба. Сегнетоэлектрические свойства тонких легированных плёнок HfO_2 были обнаружены в 2007 году научной группой в компании Qimonda совместно с RWTH Aachen при поиске материалов с высокой диэлектрической проницаемостью для использования в конденсаторах ДОЗУ. Авторами была обнаружена ранее не наблюдавшаяся в нормальных условиях нецентросимметричная (полярная) орторомбическая фаза (о-фаза) между моноклинной (m-) и тетрагональной (t-) фазами в легированных слоях HfO_2 толщиной от 5 до 50 нм [1, 2]. Для более толстых плёнок доля m- фазы увеличивается по отношению к о- фазе, что приводит к снижению сегнетоэлектрических свойств. Поляризация плёнки происходит внутри элементарных ячеек о- фазы, перемещая четыре атома кислорода между двумя зеркально-симметричными положениями, определяемыми двумя локальными минимумами, разделёнными энергетическим барьером.

Была выдвинута гипотеза, что факторами, влияющими на образование сегнетоэлектрической фазы, помимо уровня легирования, могут являться: концентрация вакансий кислорода, механические напряжения, поверхностная и межфазная энергия зёрен. Кроме того, был обнаружен индуцированный полем фазовый переход полярная-неполярная фазы при циклировании [3-6]. При отдельном рассмотрении этих факторов было установлено, что одной из основных причин существования сегнетоэлектрических свойств HfO_2 является легирование. При переборе легирующих примесей выявлено, что окно уровня легирования для формирования сегнетоэлектрической фазы увеличивается с атомным радиусом примеси. До сих пор неясно, что больше влияет на формирование сегнетоэлектрической фазы легированного слоя HfO_2 : ионный радиус примеси или связанная с ней повышенная концентрация вакансий кислорода в HfO_2 . Для разных концентраций вакансий кислорода была обнаружена прямая корреляция с долей фазы беспримесного HfO_2 в структуре легированной плёнки [7, 8]. Повышение парциального давления кислорода при PVD-осаждении HfO_2 уменьшает концентрацию вакансий кислорода, а также долю сегнетоэлектрической о-фазы с замещением её на неполярную m-фазу. Соответственно, вакансии кислорода однозначно стабилизируют сегнетоэлектрические свойства. Было установлено увеличение остаточной поляризации при повышенных механических напряжениях,

создаваемых более толстым верхним TiN электродом [9]. Поскольку осаждение верхнего электрода может изменить стехиометрию HfO_2 путём вытягивания О из слоя оксида, эффект механического напряжения также может быть связан с наличием кислородных вакансий.

Проблема нестабильности о-фазы, а значит сегнетоэлектрического отклика и окна памяти, во время перезаписи информации (рис. 1), является одной из ключевых, которая стоит на пути внедрения FRAM в массовое производство. Для решения этой задачи предлагаются различные методики, такие как вариация примеси легирования и её концентрация [5, 10], подбор металлических электродов [11], а также предварительная подготовка поверхности металла перед осаждением сегнетоэлектрической плёнки на основе HfO_2 [12]. Вариация этих подходов позволяет получить структуры на основе сегнетоэлектрических слоёв HfO_2 , выдерживающих до 10^{12} циклов перезаписи, что, в свою очередь, выдвигает FRAM на роль универсальной памяти.

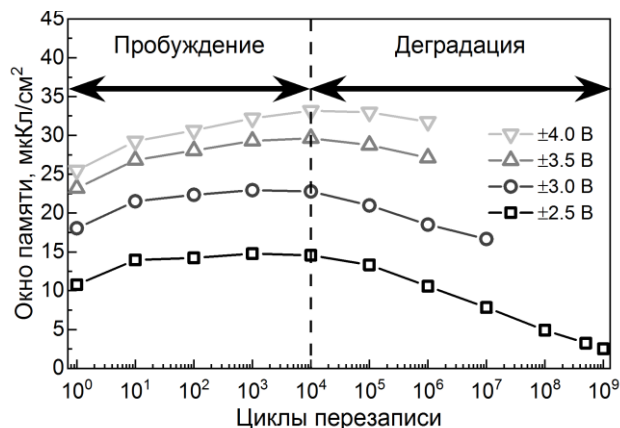


Рис. 1. Эволюция окна памяти при циклировании при различных рабочих напряжениях. Адаптировано из [10].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №20-57-12003 ННИО_a).

- [1] T. Böske et al., *Appl. Phys. Lett.* **99**, 10, 102903 (2011) and **99**, 112904 (2011).
- [2] X. Sang et al., *Appl. Phys. Lett.* **106**, 162905 (2015).
- [3] M. Pešić et al., *Adv. Funct. Mater.* **26**, 4601 (2016).
- [4] E. Grimley et al., *Adv. Electron. Mat.* **2**, 1600173 (2016).
- [5] U. Schroeder et al., *Jap. J. of Appl. Phys.* **53**, 08LE02 (2014)
- [6] M.H. Park, U. Schroeder, *Root causes for Ferroelectricity in Doped HfO_2 in “Ferroelectricity in Doped HfO_2 ”, Elsevier (2019).*
- [7] A. Pal et al., *Appl. Phys. Lett.* **110**, 022903 (2017).
- [8] T. Mittmann et al., *Adv. Mater. Interfaces* **6**, 1900042 (2019).
- [9] S. Kim et al., *Appl. Phys. Lett.* **111**, 242901 (2017).
- [10] T.M. Zalyalov, D.R. Islamov, 2022 IEEE 23rd International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM), 48.
- [11] D. Islamov, T. Zalyalov, *Appl. Phys. Lett.* (under review).
- [12] S. Shi et al., *Nature Comm.* (under review).

Процессы химического осаждения из газовой фазы в современных технологиях формирования материалов электронной техники

Косинова М.Л.

ИНХ СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Акад. Лаврентьева, 3

В докладе представлен круг проблем, связанных со становлением, развитием и практической реализацией научных исследований в области разработки процессов синтеза пленок аморфного карбонитрида кремния на основе комплексного физико-химического изучения каждой стадии приготовления материала: от предшественника к готовому элементу устройства.

В последние десятилетия разделы химии материалов, ориентированные на проблемы технологии функциональных материалов, получили значительное развитие в части расширения использования процессов осаждения из газовой фазы. Новые результаты касаются методологии получения особочистых веществ, синтеза разнообразных летучих соединений многих элементов Периодической системы, понимания особенностей формирования твердых материалов из газовой фазы, содержащей сложные молекулы летучих веществ. Активно проводятся исследования различных вариантов химического осаждения из газовой фазы - CVD - термо- и плазмо-стимулированных процессов. Особое внимание уделяется использованию в качестве исходных веществ новых нетрадиционных летучих элементоорганических и комплексных соединений.

Прогресс в этой области будет продемонстрирован на примере пленок аморфного карбонитрида кремния, материала, сочетающего в себе широкий спектр уникальных свойств, позволяющих применять его в различных областях техники. Известно, что пленки SiC_xN_y обладают такими функциональными характеристиками, как высокая твердость, по некоторым данным, сравнимая с твердостью кубического нитрида бора, и химическая устойчивость к окислению при высоких температурах. Кроме того, они являются прозрачными в инфракрасной и видимой областях спектра и обладают шириной оптической запрещенной зоны, варьирующейся от 2,0 до 5,0 эВ в зависимости от состава осаждаемой пленки [1]. Плазмохимическое осаждение из газовой фазы с использованием кремнийорганических предшественников является наиболее привлекательным методом синтеза слоев SiC_xN_y различного состава. Использование кремнийорганических соединений различного состава и структуры, а также дополнительных газов (He , H_2 , NH_3 , O_2) дает возможность значительно варьировать химический и фазовый состав и структуру пленок, а значит, их физико-химические свойства и функциональные характеристики. Программа исследований в целом включает следующие разделы:

1. Выбор летучих соединений, пригодных для использования в процессах

CVD.

2. Разработка эффективных методов синтеза и очистки выбранных соединений.

3. Исследование физико-химических свойств прекурсоров и процессов их преобразования в условиях термической и нетермической активации.

4. Термодинамическое моделирование и исследование процессов CVD с использованием выбранных исходных летучих соединений.

5. Исследование физико-химических свойств и функциональных характеристик синтезированных пленок, установление связи «состав – структура – свойства», изучение их стабильности и процессов деградации при старении.

6. Определение областей использования материалов.

В работе рассмотрены особенности строения и свойств следующих кремнийорганических соединений: Me_3SiPh , аминосианов общей формулы $\text{R}_x\text{Si}(\text{NR}^1\text{R}^2)_{4-x}$, $x = 1-3$, где $\text{R} = \text{Me}, \text{H}$; $\text{R}^1 = \text{Et}, \text{Ph}, \text{AlI}, \text{Bz}$; $\text{R}^2 = \text{Et}$; N-органил-N,N-бис(триметилсилил)аминов $\text{R}_x\text{N}(\text{SiR}^1\text{R}^2)_{3-x}$, где $\text{R} = \text{Me}, \text{Et}, \text{Ph}, \text{PhCH}_2$. Проведена характеристика синтезированных веществ физико-химическими методами и подтверждена их индивидуальность. На основании данных КТА и тензиметрии установлены ряды летучести и термической устойчивости в зависимости от типа заместителя при атомах кремния и азота. Показано, что изученные соединения обладают летучестью и термической устойчивостью, достаточными для их использования в качестве реагентов при получении пленок методом CVD. Разработаны процессы PECVD, синтезированы пленки SiC_xN_y различного состава. Проведено изучение зависимостей состава и химического строения пленок от условий синтеза с использованием ИК-спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния света, энергодисперсионного анализа, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, определение толщины пленок методом эллипсометрии, морфологии поверхности пленок с использованием методов сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии, а также структуры – методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения; исследование зависимости функциональных характеристик пленок – электрофизических, оптических и механических свойств от параметров синтеза, строения и состава пленок; изучение стабильности свойств пленок SiC_xN_y во времени.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации, проект №121031700314-5.

[1] Ermakova E., Kosinova M., *J. Organomet. Chem.* **958**, 122183 (2022).

Кремний в современной электронике

Наумова О.В.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Современная полупроводниковая электроника является самой динамичной отраслью экономики. Для сравнения, рынок нефти и газа в среднем ежегодно увеличивается на 12,3%. В то же время, объем мирового рынка полупроводниковых приборов с 2020 г. по 2021 г., несмотря на пандемию, увеличился на 26,2%. В ряде стран электроника является стратегической отраслью. “Экономическое чудо” Тайваня, Южной Кореи, Японии, Сингапура стало основанием называть полупроводники еще “новой нефтью”. В настоящее время ведущими производителями полупроводниковых приборов являются тайваньская компания TSMC (Taiwan Semiconductor Manufacturing Company - 54% мирового рынка) и южнокорейская Samsung (17%).

Около 30% в общем рынке полупроводниковых приборов занимает процессорно-ориентированный сегмент. Основным материалом полупроводниковой микроэлектроники является кремний (~70% от используемых материалов). Основным конструктивным блоком современных процессоров является полевой МОП-транзистор. Масштабирование элементов МОП-транзистора остается основной тенденцией развития технологии микропроцессоров с целью увеличения их быстродействия, увеличения плотности упаковки элементов на кристалле. При этом проблемы, связанные с появлением коротко-канальных эффектов при уменьшении размеров МОП-транзисторов, стали одним из стимулов для развития в начале 2000-х годов технологии структур кремний-на изоляторе (КНИ). Переход от объемного кремния к тонким пленкам КНИ стал революционным, позволившим наряду с планарной реализовать и трехмерную архитектуру МОП-транзисторов. Это позволяет эффективно управлять индуцированными носителями заряда в транзисторе и реализовать в настоящее время 7 и 5 нм проектные нормы при изготовлении КМОП-интегральных схем (компании TSMC, Samsung). С масштабированием уже не транзистор, а металлическая разводка ограничивает быстродействие интегральных схем. Эта проблема с развитием технологии КНИ решается за счет интегрирования фотонных волноводных линий в КМОП-микросхемы. При этом оптический модулятор становится основным интерфейсом для преобразования электрического сигнала с электронной части схемы в оптический сигнал. Разработанные на тонких пленках КНИ полевые транзисторы с открытой для доступа биочастиц (белков, РНК, ДНК, вирусов и др.) поверхностью, становятся универсальной платформой для высокочувствительных систем молекулярной диагностики.

В докладе представлен краткий исторический обзор и анализ современных тенденций развития 1) микропроцессоров, 2) технологии изготовления структур КНИ и 3) приборов для опто- и биосенсорной электроники на их основе.

Процессы на поверхности кремния: от исследования диффузии атомов до управления макрорельефом

Роголо Д.И.¹, Ситников С.В.¹, Петров А.С.^{1,2}, Пономарев С.А.¹, Родякина Е.Е.¹, Федина Л.И.¹, Щеглов Д.В.¹, Латышев А.В.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Кремний является одной из важнейших подложек для выращивания полупроводниковых наноструктур, критические размеры которых приближаются к 1 нм. В связи с этим возрастает важность совершенства структуры и морфологии поверхности и границ раздела, а атомные ступени и поверхностные фазы становятся существенными объектами инженерии поверхности. Кроме того, принятие в 2019 году постоянной решётки кремния в качестве вторичной реализации эталона метра СИ усиливает актуальность исследования физики атомных процессов на поверхности кремния с целью разработки методов создания на его основе материальных образцов (тест-объектов) для калибровки измерительных приборов, особенно востребованной в нано- и субнанометровом диапазоне [1].

В докладе представлены результаты недавних исследований структурно-морфологических трансформаций поверхностей Si(111) и Si(100) с использованием метода *in situ* сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии при высокотемпературном отжиге образцов с сингулярной и вицинальной поверхностью [2]. Рассматриваются процессы поверхностной диффузии и сублимации кремния, эшелонирования атомных ступеней и формирования экстремально широких террас. Показано, что коэффициент поверхностной диффузии на поверхности Si(111) существенно зависит от концентрации атомов в адсорбционном слое [3]. Продemonстрировано, что осаждение кремния на поверхность Si(111) с системой концентрических атомных ступеней со скоростью, компенсирующей сублимационный поток кремния, позволяет создавать экстремально широкие террасы диаметром более 200 мкм, применимые в качестве мер плоскостности ангстремного диапазона и зеркал с субангстремной шероховатостью [4]. Высокотемпературный отжиг образцов, содержащих в пределах таких экстремально широких террас вытравленное углубление с вертикальными стенками, позволил за счёт поверхностной электромиграции сформировать макроступени, состоящие из счётного количества моноатомных ступеней и разделяющие широкие (>10 мкм) параллельные террасы, пригодные для проведения измерений не только зондовыми, но и оптическими методами. Показано, что такие образцы применимы в качестве мер высоты, точность которых привязана к кремниевому стандарту линейных размеров [5].

Исследованы процессы, происходящие на поверхности Si(111) при осаждении кремния, германия, олова, кислорода и селена. Обсуждаются процессы диф-

фузии примесно-индуцированных кластеров и молекул, электромиграции примесных атомов, формирования доменов поверхностных фаз, а также существенное влияние данных процессов на поверхностный массоперенос и трансформацию морфологии поверхности. Показано, что германий-кремниевые и кремниевые нанокластеры являются доминирующими частицами, обеспечивающими массоперенос на поверхности Si(111)-7×7 при эпитаксиальном росте соответственно Ge (при $T > 500^\circ\text{C}$) и Si (при $T > 600^\circ\text{C}$) с энергиями активации 1,3–1,4 эВ и 2 эВ [6,7]. В результате *in situ* экспериментов визуализированы структурные переходы, сопровождающие перераспределение олова на поверхности Si(111), обусловленное действием электрического поля на адсорбированные атомы Sn, для которых получена оценка величины положительного эффективного заряда ($\geq 0,001 \cdot e$) [8]. Обнаружено, что рост Si на широких террасах поверхности Si(111)-7×7 происходит по многослойному механизму [9]. Показано, что энергетические барьеры для удаления сверхструктуры 7×7 являются причиной развития трёх типов морфологической неустойчивости сингулярной поверхности Si(111) в процессе роста Si [10]. Обнаружено, что травление сингулярной поверхности Si(111) кислородом приводит к медленному развитию многослойной морфологии, однако травление селеном сохраняет планарную морфологию поверхности [10]. Показано, что эффективная поверхностная диффузия адатомов травителя (селена, в отличие от кислорода) обеспечивает высокую морфологическую стабильность сингулярной поверхности Si(111) в процессе травления. В то же время, диффузия селена к эшелонам ступеней ступенчато-эшелонированной поверхности Si(111) при травлении селеном приводит к формированию долинообразных морфологических структур, чего не наблюдается при травлении кислородом [11].

Работа выполнена на оборудовании ЦКП «Наноструктуры».

- [1] A. Yacoot, H. Bosse, R. Dixon, *Meas. Sci. Technol.*, **31**, 121001 (2020).
- [2] Д. И. Рогило и др., *Кристаллография*, **66**, 530 (2021).
- [3] Е. О. Соловьёва и др., *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*, **21**, 686 (2021).
- [4] Д. В. Щеглов и др., *Автометрия*, **56**, 98 (2020).
- [5] Д. В. Щеглов, Л. И. Федина, А. В. Латышев, *Кремниевая метрология в развитии нанотехнологий*, Параллель, Новосибирск, 184 с. (2018).
- [6] D. I. Rogilo et al., *Surf. Sci.*, **667**, 1 (2018).
- [7] A. S. Petrov et al., *J. Cryst. Growth*, **531**, 125347 (2020).
- [8] A. S. Petrov et al., *Appl. Surf. Sci.*, **609**, 155367 (2023).
- [9] D. I. Rogilo et al., *J. Cryst. Growth*, **457**, 188 (2017).
- [10] D. Rogilo et al., *Appl. Surf. Sci.*, **540**, 148269 (2021).
- [11] D. I. Rogilo et al., *J. Cryst. Growth*, **529**, 125273 (2020).

Гибридные полупроводниковые перовскиты для солнечных элементов

Семенова О.И.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Гибридные перовскиты – класс новых синтетических полупроводников с общей формулой ABX_3 , где $A = CH_3NH_3$ (метил аммоний); $M = Pb$ (свинец), Sn (олово); и $X = Cl$ (хлор), Br (бром), I (йод). Главным преимуществом гибридных перовскитов является простота получения пленок: осаждением из растворов при температурах вблизи комнатной, методом струйной печати и специальных чернил, использование стеклянных и гибких пластиковых подложек. На рис.1 представлена кристаллическая структура гибридного перовскита. Такие свойства этих материалов, как малая энергия связи экситонов, оптимальная ширина запрещенной зоны и длительное время жизни фото генерированных носителей заряда сделали их перспективными при разработке солнечных элементов, фотодетекторов, лазеров. В настоящее время наиболее изученным перовскитом является $CH_3NH_3PbI_3$ - метиламмония трийодид свинца. При использования этого гибридного материала эффективность конверсии солнечной энергии в электрическую для лабораторных однопереходных солнечных элементов (СЭ) возросла с 3,5% в 2009 году [1] до 25,2% в 2020 году [2], что подтверждено измерениями NREL - Национальной лаборатории возобновляемых источников энергии (США).

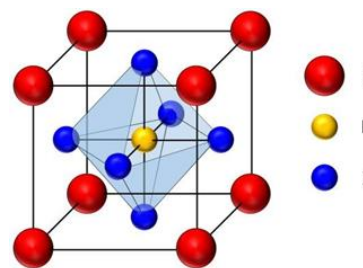


Рис.1. Структура кристалла гибридного перовскита.

Настоящим прорывом в фотовольтаике в последние годы стали исследования и разработки перовскитных tandemных солнечных элементов с кремнием. Рекордным значением эффективности такого СЭ является 29,1% [2]. В данной технологии перовскитный элемент формируется на поверхности кремниевого солнечного элемента, что позволяет увеличить КПД кремниевых элементов и использовать имеющиеся производственные линии без существенных изменений. По оценкам аналитиков перовскитные солнечные элементы при законченной, разработанной технологии их производства будут примерно в два - три раза дешевле, чем кремниевые, что позволит солнечной энергетике перешагнуть экономически целесообразный порог стоимости. Также большим преимуществом перовскитных тонкопленочных элементов является их высокая удельная мощность на единицу массы активного слоя, не считая подложки. По удельной мощности это самые эффективные в мире солнечные элементы среди всех тонкопленочных.

Основные компании, работающие над коммерческим внедрением СЭ из перовскитов:

Oxford PV создана в 2010 году профессором Генри Снайт и является одним из крупнейших проектов, работающих над коммерциализацией солнечных элементов на основе перовскита;

Hunt Perovskite Technologies, Даллас, США с 2013 года создает свой эффективный перовскитный солнечный элемент и процесс производства чернил;

китайский Microquanta Semiconductor разработал солнечный модуль большой площади ($200 \times 800 \text{ см}^2$) и запустил пилотную линию мощностью 20 МВт в городе Цюйчжоу, Китай.

Energy Materials, Рочестер, США разработали высокоскоростную печать перовскитных элементов на гибких подложках и получили от Департамента энергетики \$4 млн финансирования на создание стабильных перовскитных солнечных модулей.

[1] A. Kojima et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, 6050 (2009).

[2] National Renewable Energy Laboratory. Best Research-Cell Efficiency Chart.
<https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency>.

Новая наноструктурная форма гексагонального Si в плоскости {113} дефектов как результат кластеризации дивакансий и междоузельных атомов

Федина Л.И., Жачук Р.А., Гутаковский А.К.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Повышенный в последнее время интерес к аллотропам IV группы (Si, Ge) с гексагональной (2H, 4H и др.) [1] и клатратной структурой (Si_{24} , Si_{46} , и т.д.) [2]), переходящей в 2H-тип [3], связан с ожидаемым в них усилением поглощения/излучения света за счет трансформации зонной структуры в прямозонную [4]. Однако все аллотропы являются фазами высокого давления и развитые на сегодняшний день методы их получения (нановискеры диаметром до 10 нм [5]) не совместимы с Si технологией. Поэтому идея получения светодиодов на Si с помощью ионной имплантации является очень востребованной и некоторые успехи в получении комнатной (T_k) люминесценции GeSi-KT, облученных ионами Ge^+ , уже достигнуты [6], хотя природа излучающих центров не установлена.

Как известно, высокодозная имплантация ионов O^+ в Si при 575°C сопровождается локальным ($\sim 2 \times 2 \text{ нм}^2$) образованием 2H-фазы, которая чередуется со структурой неизвестного типа в плоскости {113} [7]. Этим дефектам междоузельного I-типа в виде тонких ($\sim 80 \text{ нм}$) наностержней, возникающим в условиях больших пересыщений по I_s , было уделено много внимания в начале 90-х годов, но достоверно структура установлена лишь для дефектов при 450°C облучении электронами [8]. Расшифровать их структуру при имплантации примесей в области малых и средних доз до сих пор не удается.

Ранее с использованием *in situ* ВРЭМ облучения Si электронами с энергией 400 КэВ нами было показано, что при T_k визуализируется более сложный процесс кластеризации точечных дефектов ($TД$) в плоскости {113}, включающий совместную кластеризацию вакансий (V_s) и I_s [9]. При смене типа пересыщения по $TД$ с междоузельного на вакансионное за счет изменения типа покрытия на поверхности облучаемого образца, изменяется тип кластеров на начальной стадии накопления $TД$ с I - V пар на V_2 - I_s , соответственно. В первом случае при трансформации плотно упорядоченных I - V пар формируется каркас {113} дефекта (клатратная структура), состоящий из открытых 8-звенных каналов в направлении [110], которые служат местом для встраивания I_s в виде [110]-цепочек. Эта структура соответствует известному {113} дефекту I-типа [8]. Во втором случае, как показали наши недавно выполненные DFT расчеты, V_2 - $2I$ кластеры трансформируются в {113} дефект «нулевого» типа, в котором H-области с размером

0,4 нм чередуются с 6-звенными не алмазными кольцами (рис. 1). Расчеты ВРЭМ изображений для DFT модели показывают хорошее согласие с экспериментальными. Однако *in situ* ВРЭМ эксперименты показывают, что дальнейшее взаимодействие I_s с V_2-2I структурой приводит к ее сильной трансформации, не поддающейся расшифровке. Наши результаты впервые проливают свет на проблему идентификации структуры $\{113\}$ дефектов при ионной имплантации. Сравнение расчетных ВРЭМ изображений с известными экспериментальными, представленными в литературе и имеющимися в нашем распоряжении [9–12], показывают удовлетворительное соответствие для ионов He^+ , O^+ , Ge^+ , Er^+ .

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 19-72-30023) с использованием оборудования ЦКП «Наноструктуры».

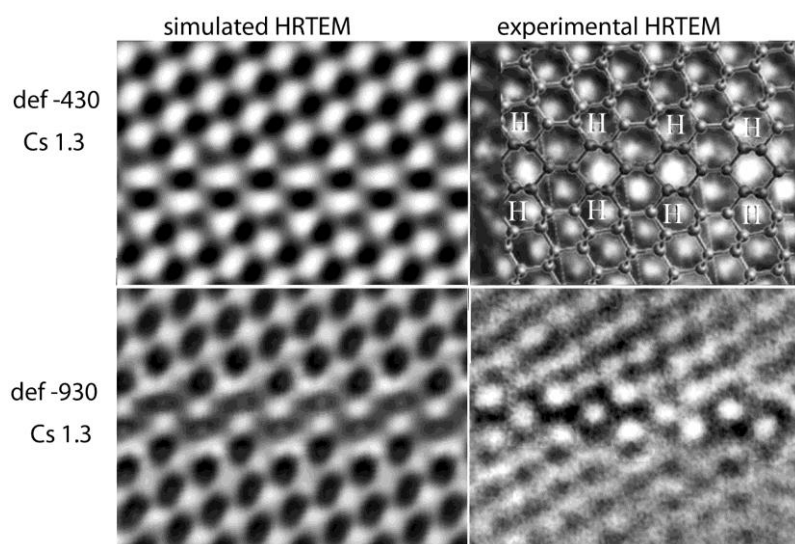


Рис.1. Сравнение расчетных $[110]$ -ВРЭМ изображений «нулевого» типа $\{113\}$ дефекта и экспериментальных, полученных при T_k облучении электронами в микроскопе JEM4000EX с ускоряющим напряжением 400 КэВ. DFT модель наложена на экспериментальное изображение справа. Буквами H обозначены гексагональные области Si.

- [1] Fan L. et al., *Materials*, **14**, 3964 (2021).
- [2] Kim D.Y. et al., *Nat. Mater.*, **14**, 169 (2015).
- [3] Shiell T.B. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **126**, 215701 (2021).
- [4] Fadaly E.M.T. et al., *Nature*, **580**, 205 (2020).
- [5] Fabbri F. et al., *Nano Lett.*, **13**, 5900 (2013).
- [6] Grydlik M. et al., *ACS Photonics*, **3**, 298 (2016)
- [7] Visitserngtrakul S. et al., *J. Mater. Res.*, **6**(4), 792 (1991).
- [8] Takeda S., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **30**, L639 (1991).
- [9] Fedina L.I. et al., in: *Advances in Semiconductor Nanostructures, Growth, Characterization, Properties and Applications*, Elsevier, ch. 16, 383 (2016).
- [10] W.T. Han et al., *Appl. Surf. Sci.*, **455**, 433, (2018).
- [11] N.A. Sobolev et al., *Phys. Stat. Sol. (a)*, **214**, 1700317 (2017).
- [12] V.A. Zinovyev et al., *J. Appl. Phys.*, **130**, 153101 (2021).

Кремниевая нанометрология

Щеглов Д.В., Федина Л.И., Ситников С.В., Родякина Е.Е.,
Рогило Д.И., Кожухов А.С., Латышев А.В.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Демонстрируется, каким образом понимание фундаментальных процессов самоорганизации и морфологических перестроек на атомно-чистой поверхности кремния может быть использовано для создания мер вертикальных размеров в нанометровом и субнанометровом диапазоне с точностью не хуже 0,05 нм. Такое понимание базируется на комплексных исследованиях, проводимых в авторском коллективе ИФП СО РАН с использованием уникальной *in situ* сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии (СВВ ОЭМ), атомно-силовой микроскопии (АСМ), высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии (ВРЭМ) с корректором сферической аберрации и других современных методов диагностики поверхности. Технические показатели качества мер высоты ангстремного диапазона (МВА) и мер плоскостности ангстремного (МПА) диапазона, серийно выпускаемых в ИФП СО РАН (на оборудовании ЦКП «Наноструктуры»), соответствуют требованиям к Государственным вторичным эталонам и соответствующим Государственным поверочным схемам. Было подтверждено, что технические характеристики МВА и МПА, являются уникальными и превышают параметры отечественных и известных иностранных аналогов.

В работе также показаны примеры использования зонда АСМ для проведения прецизионных исследований механизма локального анодного окисления (ЛАО) на ультрашироких атомно-гладких террасах (до 230 мкм), когда относительная точность измерений высоты оксидных линий от известной из литературы для вицинальной поверхности 20–50% повышается до 1%. При изучении начальных стадий процесса ЛАО на поверхности Si(111) с шероховатостью менее 0,07 нм обнаружен ступенчато-бислойный характер роста оксида (с толщиной каждого слоя $0,7 \pm 0,1$ нм) при увеличении напряжения в интервале 1–12 В. Впервые показано, что для роста каждого бислоя необходимо приложение потенциала в ~ 3 В, связанного с разницей в высоте зон проводимости оксида и кремния на границе раздела. Это указывает на важную роль лимитирующего механизма Мотта на начальных стадиях ЛАО, связанного с туннелированием заряда через оксид. Выявленные свойства естественного бислоя оксида толщиной 0,7 нм служить барьером для переноса носителей заряда в процессе ЛАО предполагает возможность уменьшения современной технологической нормы при использовании оксида с 7 нм до 0,7 нм.

СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ

Структурные и магнетотранспортные свойства пленок топологического изолятора на основе халькогенидов висмута и сурьмы $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Te,Se})_3$

Баженов А.О.^{1,2}, Степина Н.П.¹, Шумилин А.В.³, Кунцевич А.Ю.⁴, Кириенко В.В.¹, Ищенко Д.В.¹, Терещенко О.Е.¹

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

³ ФТИ им Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

⁴ ФИАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 53

Проявление уникальных, отличных от других материалов свойств трехмерных (3D) топологических изоляторов (ТИ) привлекает большое внимание научного сообщества. Сочетание симметрии обращения времени и сильного спин-орбитального взаимодействия приводит к образованию поверхностных состояний на границе раздела данных материалов, которые описываются нечетным числом конусов Дирака с направлением спина, ортогональным волновому вектору, и однозначно с ним связанным. При этом поверхностные состояния устойчивы к рассеянию на немагнитных примесях и дефектах. Благодаря данным свойствам ТИ являются перспективными материалами для их использования в будущем в качестве основы для спин-зависимых устройств.

В данной работе тонкие пленки $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Te,Se})_3$ 3D топологического изолятора были выращены с использованием методов молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке Si(111).

Оптимизация параметров роста происходила с помощью контроля качества пленок методами атомно-силовой микроскопии (АСМ), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и сканирующей электронной микроскопии. По данным АСМ, поверхность оптимизированных пленок представляет собой сросшиеся многослойные островки с огранкой треугольной формы с расстоянием между слоями, соответствующим толщине квинтислоя. С целью изучения транспортных свойств были проведены измерения магнетосопротивления (МС), эффект Холла и температурной зависимости проводимости исследуемых образцов. Вопреки теоретическим ожиданиям, для тонких пленок, выращенных на Si(111), амплитуда САЛ, характерная для поверхностных состояний, увеличена и одновременно эффект Холла не является линейным в области слабых магнитных полей, где наблюдается САЛ. Увеличение коэффициента Холла в области малых магнитных полей по отношению к значениям в сильных магнитных полях может

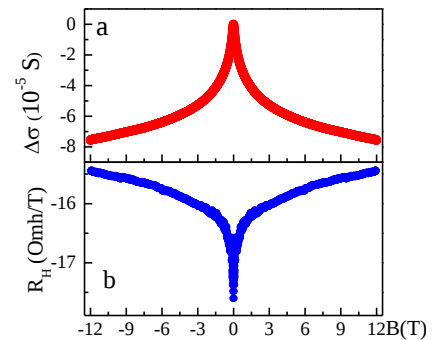


Рис. 1. а - Магнетопроводимость и b - константа Холла для пленки $(\text{Bi,Sb})_2(\text{Te,Se})_3$. $T=1.64$ К.

достигать более 10%. Положительное магнетосопротивление не насыщается вплоть до полей 12 Т.

Предполагается, что наблюдаемые явления описываются в рамках двухжидкостной модели, где учитывается проводимость как по поверхностным, так и по объемным состояниям. Для объяснения явления оказывается важным учет сопоставимости Зеемановской энергии в сильных полях и энергии Ферми поверхностных состояний, отсчитанной от точки Дирака. Подавление проводимости поверхностных состояний за счет антилокализации и открытия щели в дираковском конусе приводит к сильной зависимости коэффициента Холла от магнитного поля.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 22-22-20074, <https://rscf.ru/project/22-22-20074/>.

Влияние отжига на неоднородность параметров металл/InAlAs барьеров Шоттки

Гензе И.Ю.^{1,2}, Аксенов М.С.¹, Чистохин И.Б.¹, Дмитриев Д.В.¹

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Барьер Шоттки (БШ) металл/InAlAs является важным функциональным элементом, определяющим как характеристики работы, так и долговременную стабильность и надёжность СВЧ транзисторов и фотодетекторов микроволнового диапазона. Особое внимание уделяется созданию однородной границы раздела с воспроизводимыми параметрами (высота барьера ϕ_b , коэффициент идеальности n) [1].

Использование Ti, за счёт его хороших адгезионных свойств, широко распространено при создании металлизации БШ на основе InAlAs. Типичное значение ϕ_b свежесформированных БШ составляет 0,65-0,7 эВ. При необходимости увеличения значений ϕ_b используются барьерные слои металлов с большей работой выхода (Pt, Ir, Pd). Вне зависимости от используемого состава металлизации, однородность распределения параметров уменьшается различными загрязнениями, кристаллическими дефектами, неравномерным легированием, слоем естественного оксида и наличием металлических зёрен. Это приводит к возникновению существенных температурных зависимостей параметров БШ, что в рамках модели Танга [2] связывается с влиянием локальных областей с отличными от основной площади границы раздела характеристиками. В этой связи, отжиг, применяемый для увеличения идентичности состава и структуры границы раздела, может приводить к изменению неоднородности параметров БШ.

В данной работе изучены температурные зависимости вольт-амперных характеристик (ВАХ) БШ в диапазоне от 77 до 350 К. Проведена корреляция между барьерными параметрами, строением и химическим составом границы раздела Ti/InAlAs и Pt/InAlAs в зависимости от условий отжига в атмосфере формовочного газа (5% H₂, 95% N₂).

Проанализировав ВАХ были определены условия отжига для увеличения значения ϕ_b по сравнению с исходным при сохранении n близком к единице (1,1). При этом, как показывают данные просвечивающей электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии, начинается сегрегация атомов InAlAs, что выражается в образовании кластеров In и перемешивании As с Ti. Показано, согласно модели Танга, что при этом происходит уменьшение влияния локальных неоднородных областей на границе раздела, что тем самым улучшает гомогенность высоты барьера.

[1] Родерик Э. Х. *Контакты металл-полупроводник. Радио и связь* (1982).

[2] R.T. Tung, *Phys. Rev.*, **45**, 13509 (1992).

Изучение отклика сверхизоляторного состояния в плёнках NbTiN под действием прямоугольных импульсов напряжения

Дураков Д.Е.^{1,2}, Миронов А.Ю.¹

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Изучение эволюции сверхпроводимости тонких плёнок при увеличении беспорядка привели к обнаружению перехода сверхпроводник-сверхизолятор, причём оба состояния обладают своими особенностями. При изучении сверхизоляторного состояния ранее нами было обнаружено, что при подачи периодических прямоугольных сигналов на образец разрушение данного состояния осуществляется не моментально, а через некоторое время задержки переднего фронта сигнала, неизученное на сегодняшний день. При этом это время слабо зависит от температуры, однако быстро уменьшается при увеличении амплитуды напряжения. Закономерности изменения временной зависимости тока от геометрических параметров образцов, сопротивления на квадрат и критического напряжения пока неясны и требуют дальнейших исследований.

В настоящей работе были взяты три плёнки $\text{Nb}_{0,67}\text{Ti}_{0,33}\text{N}$ толщиной 7-8 нм шириной 50 мкм, выращенные методом атомарно-слоевого осаждения при температуре 350°C в виде холловского мостика. Все измерения проводились в криостате растворения $^3\text{He}/^4\text{He}$. На плёнки с помощью генератора сигналов подавалось напряжение прямоугольной формы. Ток, протекающий через образец, проходил через токовый преусилитель, в результате чего конвертировался в напряжение и измерялся с помощью осциллографа по двухточечной схеме при температуре 20 мК.

В ходе проведенных исследований отклика сверхизоляторных систем на импульсное напряжение обнаружено, что образцы с высоким сопротивлением на квадрат имеют временную зависимость тока в виде нескольких скачкообразных увеличений тока и окончательного его насыщения в образце. Такая зависимость тока от времени появляется в следствии неоднородности образца, в котором последовательно при увеличении напряжения появляются новые каналы проводимости. Каждый канал проводимости имеет своё значение критического напряжения. Зависимость времени задержки каждого канала от разницы между напряжением, поданным на образец, и критическим напряжением канала ведёт себя степенным образом. Замечено, что при увеличении сопротивления на квадрат у образцов увеличивается максимальное время задержки переднего фронта сигнала. Также была исследована зависимость ёмкости сверхизоляторного состояния от значения максимального напряжения импульсного сигнала.

Высокотемпературный отжиг полупроводниковых гетероструктур: влияние распределения термически генерируемых носителей заряда

Жилицкий В.Е., Шамирзаев Т.С.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Высокотемпературный отжиг гетероструктур после выращивания широко применяется при создании полупроводниковых приборов, поскольку позволяет модифицировать структуру запрещенной зоны, управлять силой осциллятора оптических переходов [1], контролировать сверхтонкую структуру экситонных состояний [2] и уменьшать деформационные градиенты. Для полупроводниковых гетероструктур АЗ-В5 перемешивание атомов при отжиге происходит по вакансионному механизму [3]. Таким образом, темп генерации вакансий и их коэффициент диффузии играют ключевую роль в перемешивании атомов в гетероструктурах при отжиге. Вакансии являются заряженными дефектами, а значит, темп их генерации может зависеть от концентрации носителей заряда в структуре. Влияние термически генерируемых равновесных носителей на генерацию и диффузию вакансий, хорошо изучено в объемных кристаллах или толстых полупроводниковых слоях [4]. Однако в гетероструктурах, содержащих слои материалов с разной шириной запрещенной зоны, распределение носителей зарядов неоднородно по объему, и нам неизвестны публикации, посвященные изучению влияния этого распределения на процессы генерации и диффузии вакансий.

В данной работе изучалось влияние распределения термически генерированных носителей заряда на вероятность генерации и рекомбинации, а также диффузии нейтральных и заряженных вакансий в нелегированных гетероструктурах с квантовыми ямами (КЯ). Процессы формирования и диффузии вакансий изучались теоретически и посредством компьютерного моделирования. Показано, что изменение темпа генерации и рекомбинации вакансий в области КЯ при фиксированной температуре может происходить в результате увеличения или уменьшения концентрации термически генерируемых электронов из-за изменения ширины запрещенной зоны и формы КЯ в процессе диффузии. Для упрощения расчетов мы пренебрегали образованием комплексов дефектов с участием вакансий.

Моделирование выполнено для описания диффузии индия в модельной гетероструктуре с (In,Ga)As/GaAs. Данный выбор связан с тем, что по этим типам полупроводников имеются наиболее точные данные с важными для расчетов энергетическими параметрами [6].

Было показано, что даже простая модель диффузии индия в GaAs, рассматривающая генерацию и рекомбинацию вакансий по механизму Френкеля и их

диффузию, показывает существенное изменение коэффициента диффузии в процессе размытия КЯ в отжигаемой гетероструктуре. Таким образом, использование постоянного коэффициента диффузии при расчете распределения материала в гетероструктурах с КЯ в процессе отжига некорректно. Нами показано, что коэффициент диффузии может сильно изменяться в процессе отжига.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ проект № 22-12-00022.

- [1] Li E. H., *Semiconductor Quantum Wells Intermixing*, Gordon and Breach, Amsterdam (2000).
- [2] Langbein W., Borri P., Woggon U., Stavarache V., Reuter D., Wieck A. D., *Phys. Rev. B*, **70**, 033301 (2004).
- [3] Marsh J. H., *Quantum well intermixing*, *Semicond. Sci. Technol.*, **8**, 1136 (1993).
- [4] *Diffusion Processes in Advanced Technological Materials* edited by Devendra Gupta, Springer-Verlag, New York (2005).
- [5] *Point defects in solids. Vol. 2 Semiconductors and Molecular Crystals*, ed. by Crawford J.H. Jr. and Slifkin L.M., Plenum Press, New York (1975).
- [6] Baraff G.A., Schliiter M., *Phys. Rev. Lett.*, **55**, 1327 (1985).

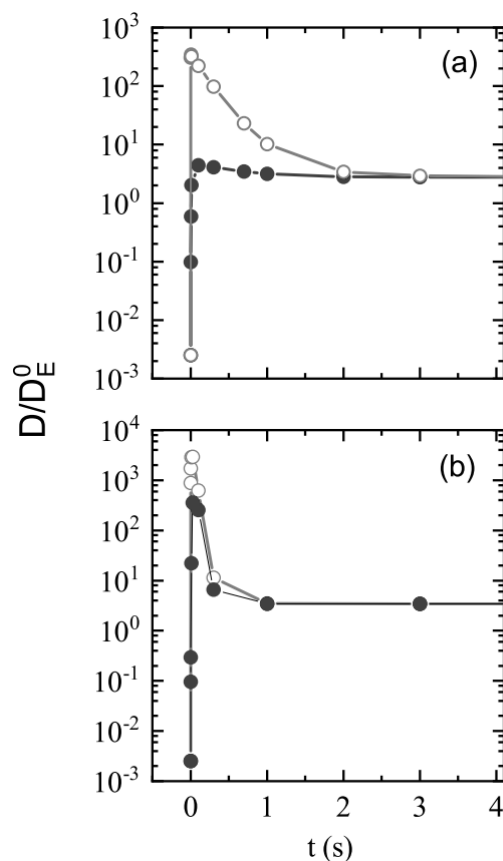


Рис.1. Расчет динамики коэффициента диффузии в процессе отжига гетероструктуры с КЯ при $T=1200$ К.

○-на границе КЯ
 ●-на расстоянии 30 атомных слоев от границы КЯ
 (а) – диффузия межузельных атомов сравнима с диффузией вакансий
 (б) – диффузия межузельных атомов существенно выше диффузии вакансий

Влияние материала электродов МСМ структур на сегнетоэлектрические свойства пленок $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$

Залялов Т.М.¹, Исламов Д.Р.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Сегнетоэлектрическая память – один из видов энергонезависимой памяти, отличающийся высокой скоростью чтения/записи, ультра малым энергопотреблением и практически неограниченным числом циклов перезаписи информации в ячейку. Ключевым недостатком используемого в настоящее время сегнетоэлектрика цирконата-титаната свинца $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ является невозможность уменьшения технологического процесса и как следствие, малый информационный объем одного чипа. Эта проблема решается заменой $\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$ на основанные на оксиде гафния HfO_2 пленки, позволяющие перейти к более современному технологическому процессу [1].

Переход к оксиду гафния еще не совершен, и в настоящее время научное сообщество решает проблемы нестабильности остаточной поляризации при циклической перезаписи информации в ячейку, малой величины остаточной поляризации и малого числа циклов перезаписи до выхода ячейки памяти из строя. На перечисленные характеристики оказывает влияние множество факторов, среди них сорт атомов примеси и уровень легирования ими [2], концентрация ловушек в сегнетоэлектрике [3], условия, связанные с технологией синтеза структур [4] и материалы электродов конденсаторов металл-сегнетоэлектрик-металл [5].

В данной работе проводилось исследование сегнетоэлектрических свойств структур $\text{BE}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{TE}$ с различными парами металлических электродов (BE, Bottom Electrode – нижний электрод, TE, Top Electrode – верхний электрод). Всего было исследовано 7 структур, их описание представлено в таблице 1.

Структуры были подвергнуты циклированию трапециевидными импульсами напряжения амплитудой 3,0 В, подаваемого до пробоя структуры или до

Таблица 1 – Исследуемые структуры

Структура	Нижний электрод BE	Верхний электрод TE
$\text{Si}/\text{W}/\text{TiN}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{TiN}/\text{Ti}/\text{Pt}$	TiN	TiN
$\text{Si}/\text{W}/\text{TiN}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{RuO}_x/\text{Ti}/\text{Pt}$	TiN	RuO_x
$\text{Si}/\text{W}/\text{TiN}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{TiAlN}/\text{Ti}/\text{Pt}$	TiN	TiAlN
$\text{Si}/\text{W}/\text{TiN}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{NbN}/\text{Ti}/\text{Pt}$	TiN	NbN
$\text{Si}/\text{W}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{TiN}/\text{Ti}/\text{Pt}$	W	TiN
$\text{Si}/\text{W}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{W}/\text{Ti}/\text{Pt}$	W	W
$\text{Si}/\text{W}/\text{TiN}/\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2/\text{W}/\text{Ti}/\text{Pt}$	TiN	W

исчезновения сегнетоэлектрического отклика. Величина остаточной поляризации была получена из проводимых на некоторых циклах измерениях вольт-амперных характеристик методом PUND. Измерение тока утечки производилось отдельно после каждой PUND развертки. Из моделирования токов утечек были получены средние расстояния между ловушками в сегнетоэлектрике. В результате для всех структур были получены зависимости остаточной поляризации (рис. 1(а)), плотности тока утечки (рис. 1(б)) и среднего расстояния между ловушками (рис. 1(в)) от числа циклов переключения поля. Показано, что при вариации электродов наибольшее и наименьшее значение остаточной поляризации пленок $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ в рабочем режиме отличаются в более чем 3 раза, а продолжительность циклирования меняется на 5 порядков. Также, для различных электродов наблюдаются разные величины токов утечек и среднего расстояния между ловушками и их изменение при циклировании.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 20-57-12003 ННИО_а).

- [1] Trentzsch M. et al., 2016 *IEEE IEDM.*, 11.5.1-11.5.4 (2016).
- [2] Schroeder U. et al., *Jpn. J. Appl. Phys*, **53**, 08LE02 (2014).
- [3] Lee J. et al. *Adv Materials Inter*, **9**, 2101647 (2022).
- [4] Kozodaev M. et al., *J. Appl. Phys*, **125**, 034101 (2019).
- [5] Goh Y. et al., *Nanoscale*, **12**, 9024-9031 (2020).

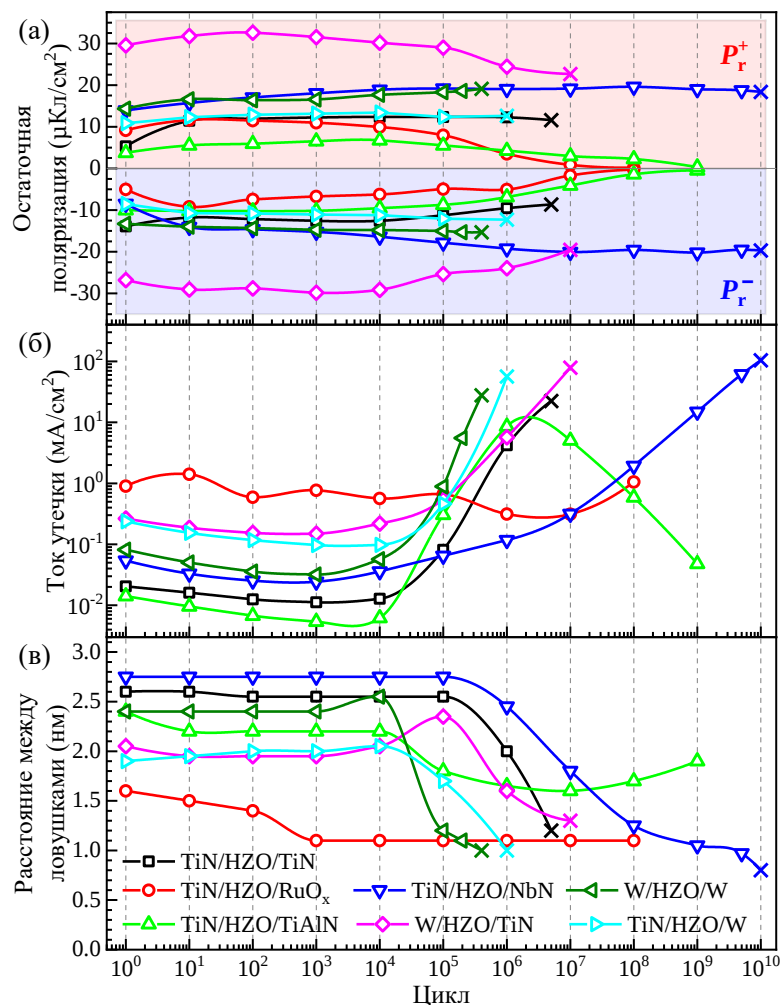


Рис.1. Зависимости (а) остаточной поляризации, (б) плотности тока утечки и (в) среднего расстояния между ловушками в сегнетоэлектрической пленке от числа циклов переполаризации исследуемых структур $\text{BE}/\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2/\text{TE}$.

Ван-дер-ваальсовый гетероэпитаксиальный рост SnSe_2 на поверхностях $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$

Захожев К.Е.^{1,2}, Пономарев С.А.^{1,2}, Роголо Д.И.¹, Курусь Н.Н.¹,
Щеглов Д.В.¹, Милехин А.Г.¹, Латышев А.В.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Оптические ширины запрещенных зон известных слоистых двумерных материалов обеспечивают поглощение в диапазоне от ближнего ИК (1,25 эВ) до УФ (3,5 эВ), что определяет перспективность их применения в оптоэлектронике и фотовольтаике, а отсутствие оборванных связей на поверхности и слабые ван-дер-ваальсовы связи между слоями делают слоистые материалы, в частности SnSe_2 [1], перспективными в создании на их основе устройств гибкой электроники [2]. Однако, на данный момент существует проблема выращивания эпитаксиальных слоев SnSe_2 высокого структурного совершенства как на слоистых, так и на классических полупроводниковых подложках [3]. В частности, механизмы ван-дер-ваальсового гетероэпитаксиального роста слоистого SnSe_2 на поверхностях $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$ изучены слабо.

Методом *in situ* отражательной электронной микроскопии (ОЭМ) реализован рост слоистого SnSe_2 на поверхностях $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$. На поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ получена пленка SnSe_2 толщиной ~ 30 нм. Рост SnSe_2 начинался по двумерно-островковому механизму. Методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) получены изображения морфологии поверхности, на которых показано наличие трехмерных ориентированных шестиугольных островков высотой 10–20 нм (рис. 1а) двух типов: (1) с гладкими террасами на их вершине со среднеквадратичной шероховатостью 0,16 нм, (2) образованные выходами на поверхность дислокаций с винтовой компонентой. Высота атомных ступеней на поверхности пленки составляет $\sim 0,6$ нм (рис. 1в), что согласуется с литературными данными о высоте молекулярного слоя SnSe_2 [4].

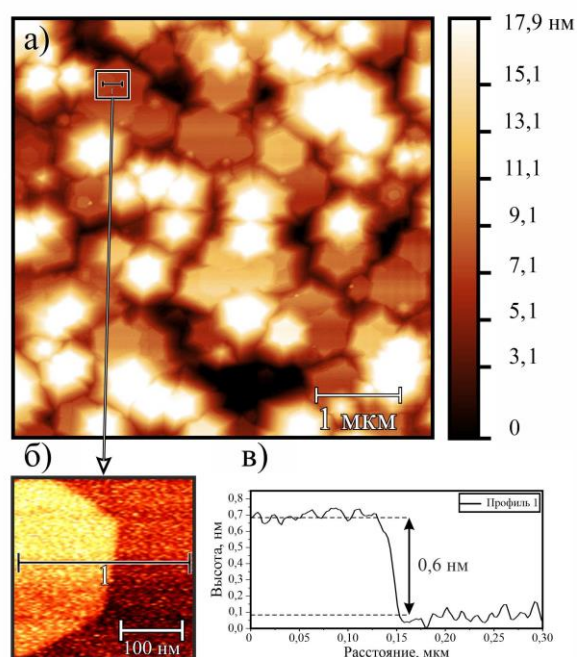


Рис.1. АСМ-изображение поверхности пленки SnSe_2 на поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$.

Рост пленки SnSe_2 на поверхности $\text{Si}(111)$ начинался по двумерно-островковому механизму. На АСМ-изображении поверхности полученной пленки наблюдались слои двумерного SnSe_2 , а также 3D островки, образованные как в областях выходов на поверхность дислокаций с винтовой компонентой (рис. 2а), так и 3D островки с гладкой террасой на вершине. Высота атомных ступеней на поверхности пленки составляет $\sim 0,6$ нм, что согласуется с высотой слоя SnSe_2 [4] (рис. 2в). На АСМ-изображении поверхности также показано наличие мест срастания границ доменов с разной ориентацией относительно подложки (рис. 3).

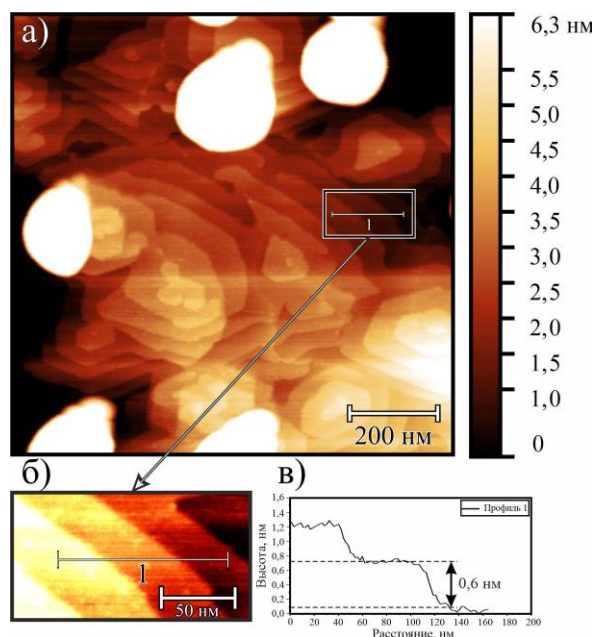


Рис.2. АСМ-изображение поверхности пленки SnSe_2 на поверхности $\text{Si}(111)$.

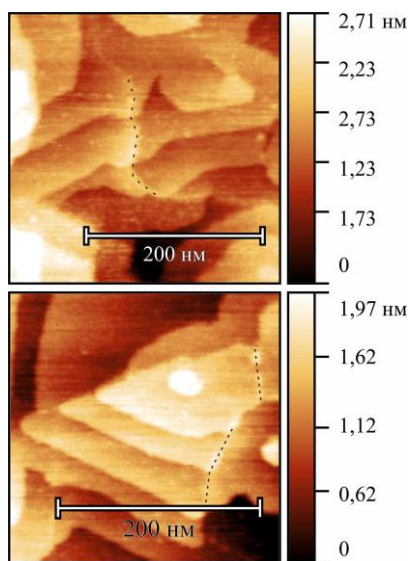


Рис.3. АСМ-изображение мест срастания границ доменов SnSe_2 на поверхности $\text{Si}(111)$.

Для пленок на поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ и $\text{Si}(111)$ проведены измерения спектра КРС и выявлен набор колебательных мод, соответствующих объемному слоистому SnSe_2 .

Эксперименты на поверхности $\text{Si}(111)$ выполнены при поддержке Государственного задания (проект № FWGW-2021-0007), эксперименты на поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ выполнены при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-72-10124).

[1] Aretouli K.E. et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **35**, 23222–23229 (2016).

[2] Yang Z. et al., *Adv. Mater. Technol.*, **8**, 1900108 (2019).

[3] Пономарев С.А. и др., *Автометрия*, (принята в печать).

[4] Luo S. et al., *J. Phys. Chem.*, **8**, 4674 (2017).

Детекторы УФ излучения на основе структур $\text{Ga}_2\text{O}_3\text{-GaAs}$

Киселева О.С., Копьев В.В., Кушнарёв Б.О., Олейник В.Л.

Томский государственный университет, 634050, Томск, пр. Ленина, 36

Одним из перспективных направлений разработки детекторов коротковолнового излучения являются устройства, способные работать в автономном режиме. Фотодетекторы с автономным питанием обладают рядом преимуществ перед другими устройствами на основе широкозонных материалов, способных обнаруживать ультрафиолетовое излучение. Такие фотодетекторы имеют простое устройство и, что особо важно, предполагают прямую интеграцию с технологией изготовления структур металл-диэлектрик-полупроводник (МДП) [1].

В данной работе исследованы электрические и фотоэлектрические характеристики структур $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{GaAs}$. Пленку оксида галлия получали ВЧ магнетронным напылением на подложки n-GaAs с концентрацией $N_d = 9,5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, либо p-GaAs с $N_a = 9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Толщина оксидной пленки равнялась 120 нм. Для измерений электрических характеристик на поверхность Ga_2O_3 и тыловую сторону полупроводниковой подложки наносили платиновые контакты. Контакт к полупроводнику напыляли в виде сплошной металлической пленки, а контакт к оксиду галлия создавали напылением металла через маски диаметром 1 мм. Площадь электрода к Ga_2O_3 (затвор) составляла $1,04 \text{ мм}^2$. Часть образцов аналогичным способом получена на пластинах GaAs:Cr.

Измерения на частоте 10^6 Гц показали, что вольт-фарадные и вольт-сименсные зависимости образцов на основе n-GaAs описываются кривыми, характерными для структур металл-диэлектрик-полупроводник и обнаруживают слабую чувствительность к излучению с $\lambda = 254 \text{ нм}$. При включении УФ излучения наблюдается лишь небольшой рост проводимости G в режиме обеднения, емкостные свойства структуры практически не изменяются.

Темновые вольт-амперные характеристики (ВАХ) и ВАХ при воздействии ультрафиолетового излучения исследовали при комнатной температуре с помощью источника-измерителя Keithley 2611В. В качестве источника УФ-излучения использовалась лампа VL-6 с фильтром на 254 нм. Измерения проводили при мощности УФИ равной $0,78 \text{ мВт/см}^2$.

При работе на постоянном сигнале образцы проявляют свойства фотодиода и способны работать в автономном режиме. Наибольшие изменения прямых и обратных токов во время УФИ наблюдаются при первом опросе детектора (I_{L1}) и незначительно снижаются при последующих измерениях ВАХ во время непрерывного действия УФ излучения (рис. 1, кривые I_{L2} – I_{L5}). Средние значения напряжения холостого хода U_{xx} структур $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{n-GaAs}$ составляют 0,4 В; ток короткого замыкания $I_{kз} = 1 \cdot 10^{-6} \text{ А}$ (рис. 1а). Если при прочих равных условиях

Ga_2O_3 наносится на пластину GaAs:Cr , то U_{xx} повышается до 0,8 В, а $I_{\text{кз}} = 6 \cdot 10^{-9}$ А (рис. 1б).

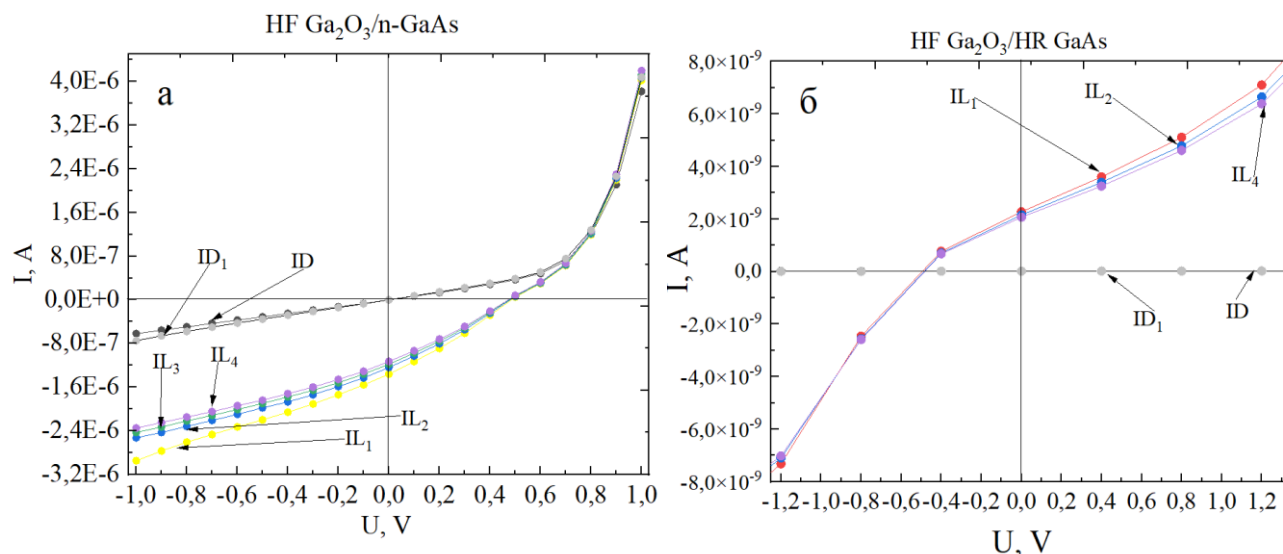


Рис.1. Вольт-амперные характеристики образцов (а – $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{n-GaAs}$; б – $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{GaAs:Cr}$) при положительных и отрицательных потенциалах на затворе: темновые (I_{D}) и при воздействии излучения с $\lambda = 254$ нм (I_{L}).

Подобно многим детекторам УФИ на основе пленок оксида галлия структуры $\text{M}/\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{n-GaAs}$, исследованные в данной работе, обнаруживают остаточные токи, обозначенные на рисунке 1 как кривые I_{D1} . Фотоэлектрические характеристики детекторов во время непрерывного действия излучения с $\lambda = 254$ нм и наличие остаточных токов определяются высокой плотностью ловушек на границе $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{GaAs}$ и в объеме оксидной пленки.

В отличие от выше приведенных данных анизатипные гетероструктуры $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{p-GaAs}$ не обладают “self-powered” эффектом и обнаруживают низкую чувствительность к УФ излучению с $\lambda = 254$ нм. При воздействии коротковолнового излучения наблюдается рост токов при положительных и отрицательных потенциалах на затворе.

[1] Bae J., Park Ji-H., Jeon D.-W., Kim J., *APL Mater.*, **9**, 101108 (2021).

Атомная и электронная структура вакансий кислорода в оксиде гафния, легированном Al, Y и La

Ковзик В.М.^{1,2}, Перевалов Т.В.¹, Исламов Д.Р.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Легирование плёнок оксида гафния металлами третьей группы, такими как Al, Y, La и др., является одним из экспериментально подтверждённых способов улучшения электрофизических характеристик этих плёнок. В частности, легирование приводит к уменьшению токов утечки через плёнки HfO_2 , а также к уменьшению напряжения первого переключения МДМ структуры из исходного состояния в низкоомное (так называемой формовки) элементов резистивной памяти (RRAM) на основе HfO_2 [1-3]. Известно, что ключевую роль в транспорте заряда, а также в формовке мемристоров на основе HfO_2 играют вакансии кислорода. Механизмы влияния легирующей примеси на электрофизические свойства HfO_2 , и, в частности, на характеристики вакансий кислорода (V_O) в HfO_2 в настоящее время не установлены. Целью настоящей работы является изучение атомной и электронной структуры вакансий кислорода в HfO_2 , легированном Al, Y и La. Данная задача включает в себя поиск оптимальной с энергетической точки зрения и потому наиболее вероятной структуры легированного HfO_2 .

Исследования осуществляются с помощью первопринципного моделирования в рамках спинполяризованной теории функционала плотности. Расчёты проводятся в программном пакете Quantum ESPRESSO в 3D периодической модели с гибридным функционалом B3LYP. Используется 96-атомная суперячейка моноклинной фазы HfO_2 , как наиболее стабильная в нормальных условиях и близкая по свойствам к аморфному оксиду. В суперячейке пара четырёхвалентных атомов Hf замещается на трёхвалентные атомы примеси (Al, La, Y) и для зарядовой компенсации системы добавляется одна вакансия кислорода. Оптимальная структура легированного HfO_2 находится перебором всех возможных положений пары атомов примеси при фиксированном положении V_O (структуры $\text{HfO}_2 + 2$ атома примеси + V_O). Для найденных структур также путём прямого перебора определяется наиболее энергетически выгодное положение дополнительной вакансии кислорода (структуры $\text{HfO}_2 + 2$ атома примеси + $2V_O$).

Установлено, что в оптимальной структуре $\text{HfO}_2:\text{Al}$ атомы Al замещают пару близкорасположенных атомов Hf (удалены друг от друга на 3,9 Å), а V_O находится между ними. В структурах $\text{HfO}_2:\text{La}$ и $\text{HfO}_2:\text{Y}$ атомы примеси удалены друг от друга на 5,8 Å, а V_O находится вблизи одного из них.

Для найденных структур $\text{HfO}_2:\text{Al}$ и $\text{HfO}_2:\text{La}$ запрещённая зона свободна от дефектных уровней, а у $\text{HfO}_2:\text{Y}$ имеется пустой уровень вблизи дна зоны проводимости, как видно из расчётного спектра полной плотности электронных состо-

ний (TDOS) (рис.1, б). Данный уровень формируется преимущественно электронными состояниями атома Y, ближайшего к вакансии кислорода. Вакансия O имеет заряд +2 в результате зарядовой компенсации пары трёхвалентных атомов примеси. Добавление электрона в суперячейку легированного (Al, La, Y) оксида приводит к формированию в запрещённой зоне глубокого однократно заполненного уровня. Добавленный электрон локализуется на вакансии кислорода. Энергия локализации электрона на вакансии O вблизи легирующей примеси около 2 эВ, в то время как энергия локализации электрона на вакансии в нелегированном HfO_2 около 1 эВ. Таким образом, данный тип вакансий кислорода способен выступать в роли центра локализации электронов и участвовать в транспорте заряда, однако перенос заряда по ним существенно затруднён ввиду большой глубины потенциальной ямы для электрона. Это согласуется с экспериментальными данными, демонстрирующими уменьшение проводимости плёнок HfO_2 в результате легирования [3].

Добавление в структуру $\text{HfO}_2\text{:La}$, $\text{HfO}_2\text{:Y}$ и $\text{HfO}_2\text{:Al}$ дополнительной нейтральной V_O даёт такой же глубокий заполненный уровень в запрещённой зоне (рис.1, в), как и V_O в нелегированном оксиде (рис.1, а). Энергия формирования (E_{form}) такой вакансии примерно на 0,5 эВ меньше, чем $E_{\text{form}} V_O$ в нелегированном HfO_2 . Таким образом, легирование оксида гафния Al, La, Y облегчает процесс генерации вакансий кислорода, что в свою очередь может способствовать уменьшению напряжения формовки мемристоров на основе HfO_2 [1, 2].

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 22-22-00634.

[1] Gao B. et al., *IEEE Trans. Electr. Dev.*, **60**, 1379 (2013).

[2] Mahapatra R. et al., *J. Electr. Mater.*, **41**, 656 (2012).

[3] Song T. et al., *ACS Appl. Electr. Mater.*, **3**, 4809 (2021).

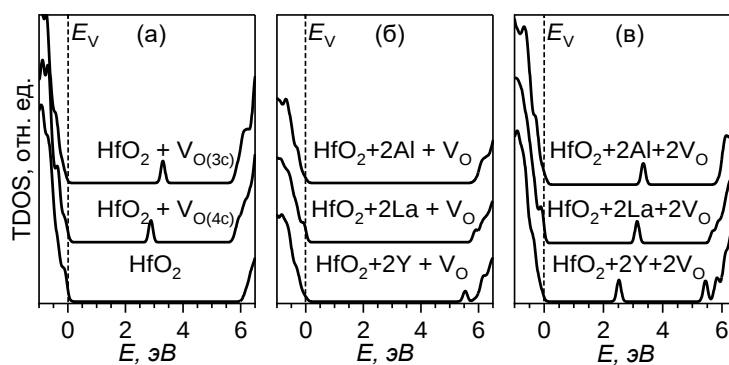


Рис.1. Спектры TDOS: а — бездефектный HfO_2 и HfO_2 с 3-х и 4-х-координированной V_O ; б — легированный (Al, La, Y) HfO_2 с оптимальной структурой; в — оптимальные структуры $\text{HfO}_2\text{:Al}$, $\text{HfO}_2\text{:La}$ и $\text{HfO}_2\text{:Y}$ с V_O .

Формирование островков InAs в процессе удаления окисного слоя с подложки InP(001) в потоке As₄

Колосовский Д.А., Дмитриев Д.В., Пономарев С.А.,
Торопов А.И., Журавлев К.С.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Подложки InP(001) используют в технологиях молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и газофазной эпитаксии для роста гетероэпитаксиальных структур (ГЭС), на основе которых изготавливают приборы для высокоскоростной электроники и радиофоники [1]. Перед началом роста ГЭС с подложки необходимо удалить аморфный окисный слой высокотемпературным отжигом в вакууме в потоке Р или As. Отжиг в потоке As предпочтительнее, поскольку приборы, изготовленные на основе ГЭС, содержащих в себе только As в качестве элемента V группы, обладают более широким диапазоном рабочих температур [1]. Однако при взаимодействии потока As с атомарно-чистой поверхностью InP происходит обменное взаимодействие между Р и As, в результате чего формируется слой InAs и возникают дефекты в ГЭС, поскольку решеточное рассогласование между InAs и InP составляет 3,2%. Наличие окисного слоя на поверхности InP влияет на процессы обменного взаимодействия и приводит к другому состоянию поверхности. На поверхности образуется твердый раствор InPAs с InAs островками [2]. В данной работе экспериментально исследована морфология поверхности InP(001) после высокотемпературного отжига в потоке As и изучен процесс формирования островков InAs.

В работе использовались *epi-ready* подложки InP фирмы АХТ. Отжиг образцов проводился в установке МЛЭ Riber Compact 21Т. Морфология поверхности была изучена методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на микроскопе Bruker Multimode 8. Отжиг образцов завершался при формировании структуры (4×2) на дифракционной картине, что свидетельствовало об атомарно-чистой поверхности InP [2]. Температура отжига (*T*) варьировалась от 480 до 540 °С, что соответствует типичным температурам отжига InP. Для каждого образца в зависимости от *T* подбирался поток As необходимый для формирования структуры (4×2) [2].

На рис. 1 представлено 1×1 мкм² АСМ изображение поверхности InP после отжига, на котором наблюдаются InAs островки, расположенные на краях атомных ступеней. Плотность островков, их

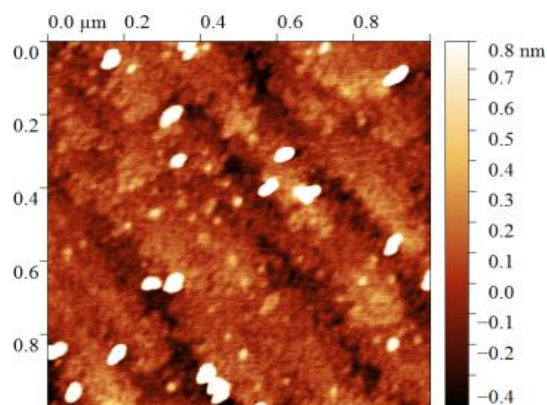


Рис.1. 1×1 мкм² АСМ изображение поверхности InP после высокотемпературного отжига в потоке As.

площадь и высота увеличиваются с повышением температуры отжига. Причиной появления этих островков является сегрегация индия, которая приводит к избыточной концентрации адатомов индия на краях ступеней. В изломе атомной ступени наименьшая энергия связи, поэтому встраивание в излом адатомов, находящихся на расстоянии длины диффузии, наиболее вероятно. Это приводит к встраиванию в излом адатомов In и As, в то время как Р десорбирует с поверхности, поскольку T выше температуры диссоциации поверхности InP. В результате образуется InAs зародыш, который разрастается. Повышение температуры отжига приводит к увеличению сегрегирующего In, что приводит к увеличению концентрации адатомов In на поверхности для разрастания островков.

- [1] *Chen A., Murphy E.J., Broadband optical modulators: Science, Technology, and Applications, CRC Press, Boca Raton (2012).*
- [2] *Dmitriev D.V. et al., Surf. Sci., 710, 121861 (2021).*

Эволюция поверхности InP(001) в потоке мышьяка

Колосовский Д.А., Дмитриев Д.В., Голяшов В.А., Гаврилова Т.А.,
Торопов А.И., Журавлев К.С.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Для создания приборов опто-, микроэлектроники и радиофотоники активно используются под-ложки InP(001) [1-3]. Эпитаксиальный рост начинается с получения атомарно-чистой поверхности InP подложки путем термической очистки [4]. Для предотвращения неконгруэнтного разложения InP, отжиг осуществляют в потоке мышьяка или фосфора. Отжиг в потоке мышьяка, позволяет получить резкую гетерограницу слой/подложка и избежать неконтролируемого встраивания фосфора в мышьяк-содержащие слои InAlAs/InGaAs, согласованные по параметру кристаллической решетки с подложкой InP(001). В работе методами дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) и сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) определены толщина и состав оксида на поверхности *epi-ready* InP(001), изучен процесс термического удаления оксида, изменение структуры и элементного состава приповерхностного слоя в потоке мышьяка в сверхвысоком вакууме.

Исследования поверхности *epi-ready* InP(001) проводились в установке молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) Riber Compact-21T. Процесс удаления оксида регистрировался и анализировался с помощью системы анализа картин ДБЭО kSA 400 k-Space Associates. Определение толщины и анализ состава оксидного слоя проводился в установке Specs ProvenX-ARPES. Характеризация морфологии и состава поверхностного слоя проводилась с помощью СЭМ Hitachi SU8220, который оснащен энергодисперсионным детектором EDX Bruker для определения элементного состава.

Установлено, что толщина оксидного слоя составляет $0,5 \pm 0,1$ нм, состоит преимущественно из оксидов и гидроксидов индия. При отжиге в потоке мышьяка экспериментально показано, что оксидный слой состоит из оксидов двух типов, один из которых активно взаимодействует с мышьяком, а второй разлагается преимущественно термически [5] и полностью удаляется при температуре 420 ± 10 °С.

При взаимодействии мышьяка с окисленной поверхностью InP, в процессе отжига, последовательно наблюдаются сверхструктуры $(1 \times 1)/(2 \times 1) \rightarrow (2 \times 3) \rightarrow (2 \times 6) \rightarrow (4 \times 2)$ указывающие на процессы замещения фосфора мышьяком [6]. В процессе удаления оксида формируется твердый раствор $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$ толщиной 2-3 бислоя, состав которого зависит от температуры отжига и потока мышьяка [7]. Задавая условия отжига, можно варьировать состав и параметр решетки a_0 поверхностного слоя, для роста рассогласованных с подложкой InP слоев с повышенным содержанием In [8]. В процессе отжига на поверхности формируются

локальные неоднородности - островки InAs, размер и плотность которых увеличивается с увеличением температуры отжига и может достигать 1,5% площади поверхности [7]. Такие неоднородности могут стать центрами зарождения дефектов в эпитаксиальных слоях и ухудшения приборных характеристик [9]. Поэтому изучение механизмов удаления оксидного слоя и трансформации поверхности подложки, является приоритетной задачей МЛЭ.

- [1] Чиж А.Л. и др., *Письма в ЖТФ*, **45**(14), с.52 (2019).
- [2] Журавлев К.С. и др., *ЖТФ*, **91**(7), с.1158 (2021).
- [3] Zhuravlev K.S. et al., *J. Semicond.*, **43**, 012302 (2022).
- [4] Dmitriev D.V., et. al., *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, **475**, 012022 (2019).
- [5] Дмугреев Д.В. и др., *Автометрия*, **57**, 5 (2021).
- [6] Dmitriev D.V., et. al., *PIERS Proceedings*, **1**, 430 (2015).
- [7] Dmitriev D.V., et. al., *Surface Science*, **710**, 121861 (2021).
- [8] Дмугреев Д.В. и др., *ФТП*, **55**, 877 (2021).
- [9] Aksenov M.S. et. al., *Appl. Phys. Lett.* **114**, 221602 (2019).

Исследование параметров роста HfO_2

Краснова И.А., Горшков Д.В., Сидоров Г.Ю., Марин Д.В.,
Сабина И.В.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Твердый раствор кадмий-ртуть-теллур $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ (КРТ) широко применяется при разработке и изготовлении лазеров, матричных фотоприемников для инфракрасного спектрального диапазона [1], а также для исследования свойств топологических изоляторов. Для любых применений необходима пассивация поверхности КРТ. Из литературы [2] известно, что Al_2O_3 , выращенный методом плазменно-индуцированного атомно-слоевого осаждения (ПАСО) при 120°C , является хорошим пассивирующим покрытием для КРТ. В работах по пассивации узкозонных полупроводников группы A_3B_5 диэлектрик HfO_2 показал более высокое качество границы раздела, чем Al_2O_3 . Однако стандартное окно температур $160\text{--}340^\circ\text{C}$ для роста HfO_2 превышает допустимую для КРТ температуру нагрева в вакууме [3]. В данной работе исследуется влияние параметров режима ПАСО на качество формируемых пленок при различных температурах роста.

Пленки HfO_2 выращивались на установке FlexAL (Oxford Instruments) с использованием прекурсора тетраakis(этилметиламин) гафния (ТЕМАН), подогреваемого до 75°C и подаваемого в ростовую камеру с потоком Ar величиной 250 sccm (время подачи 1 s). Такой же поток Ar подавался через объем ростовой камеры на фазах откачки остатков прекурсора (время подачи 3 s) и постплазменной откачки (ППО) продуктов реакции после фазы окисления. В фазе окисления давление O_2 в камере составляло 15 mTorr, мощность генератора индуктивно связанной плазмы — 250 W (время его работы 3 s). Длительность фазы ППО варьировалась с целью поиска времени выхода СРЦ на насыщение. Для всех образцов осуществлялось 100 циклов осаждения при температуре подложки 80, 120 и 160°C . Эллипсометрические углы после роста HfO_2 на Si измерялись с помощью спектрального эллипсометра. Далее в модели Коши и с учетом измеренной до роста толщины собственного оксида кремния определялись толщины и коэффициенты преломления пленок. Химический состав анализировался методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на установке ProvenX-ARPES. Также были изготовлены образцы металл- HfO_2 -металл и металл- HfO_2 - $\text{Cd}_{0,22}\text{Hg}_{0,78}\text{Te}$, на которых измерялись вольт-фарадные характеристики (ВФХ) и вольт-амперные характеристики с использованием прибора B1500A компании Agilent. Из измеренных характеристик определялись диэлектрическая проницаемость и величина встроенного заряда.

В качестве эталонного образца была выращена пленка HfO_2 при температуре 290°C и длительностью фазы ППО 2 с. Скорость роста за один цикл составила $1,06\text{ \AA}$ за цикл и $n = 2,00$. Получено, что на образцах с различными температурами роста при увеличении времени ППО толщина пленки и, следовательно,

скорость роста за один цикл уменьшаются. Уменьшение толщины пленки с увеличением времени может быть связано с уменьшением примесей в пленке, которые образуются при реакции ТЕМАН и кислородной плазмы. Для образца с температурой роста 80°C и временем постплазменной продувки 16 с, СРЦ составила 1,16Å за цикл. Таким образом, СРЦ, полученная при 80°C, больше, чем СРЦ, полученная при температуре 290 °C, менее чем на 10%. Для температур 120 и 160°C СРЦ равны 1,14 и 1,10Å за цикл, а время ППО 8 и 6 с соответственно.

Для пленок, выращенных при температуре 120°C, проводились исследования РФЭС спектра для анализа химического состава. Получено, что отношение атомных концентраций [O]/[Hf] остается постоянным, а отношения [N/Hf] и [C]/[Hf] уменьшаются на 5 и 20 % соответственно при увеличении времени откачки с 2 до 8с. Эти данные подтверждают предположение о том, что уменьшение скорости роста с увеличением времени ППО связано с уменьшением концентрации примесей в пленках.

Установлено, что с изменением температуры роста изменяется емкость структуры металл-HfO₂-металл. Изменение емкости частично связано с изменением толщины диэлектрической пленки: 11,4 нм и 11,0 нм для 120 и 160°C, соответственно. Но основной вклад в изменение емкости вносит изменение диэлектрической проницаемости пленки HfO₂ при изменении температуры роста. По минимумам ВФХ определено, что диэлектрическая проницаемость HfO₂ составляет 10,8 и 11,8 для 120 и 160°C, соответственно. Расчетные значения плотности встроенного заряда составляют 2,92 и 2,08·10⁻⁷ Кл/см² для 120 и 160°C, соответственно.

Для МДП структур с HfO₂, выращенным при температуре 120°C, были измерены ВФХ в зависимости от частоты и напряжения пробного сигнала. Получено, что разброс емкости диэлектрика в области обогащения не превышает 1%. Плотность поверхностных состояний вблизи уровня Ферми равна 6·10¹² eV⁻¹·см⁻². После 40 циклов охлаждения и нагрева образца не наблюдается растрескивания пленки HfO₂, что свидетельствует о ее хорошей адгезии к поверхности КРТ.

Таким образом, установлены оптимальные времена ППО для температур роста 80, 120 и 160°C. Определено, что увеличение времени ППО снижает содержание таких примесей, как азот и углерод. Были измерены емкости, диэлектрические проницаемости и плотности тока утечки пленок HfO₂, выращенных при 120°C и 160°C с оптимальными временами ППО. Полученные пленки HfO₂ обладают хорошей адгезией к КРТ.

[1] Zverev A.V. et al., *J. Commun. Technol. Electron.*, **64**, 1024 (2019).

[2] Gorshkov D.V. et al., *Tech. Phys. Lett.*, **46**, 741 (2020).

[3] Zakirov E.R. et al., *Semicond. Sci. Technol.*, **34**, 065007 (2019).

Влияние температуры на характеристики движения капель Au-Si по поверхности Si(111)

Кудрич С.В., Шварц Н.Л.

*ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13
Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск,
просп. К. Маркса, 20*

Кремниевые наноструктуры вызывают большой интерес в области опто- и наноэлектроники [1]. Одним из распространённых методов получения кремниевых нанопроволок является механизм пар-жидкость-кристалл с использованием золотых капель катализаторов роста [2]. Экспериментально было показано, что осаждение золота при различной температуре влияет на морфологию поверхности Si(111). Осаждение золота на поверхность кремния при температурах выше 1000 К приводит к формированию кремниевых островков [3]. В более низком температурном диапазоне 650-850 К наблюдается формирование золотых капель [4]. При осаждении золота на вицинальную поверхность Si(111) было обнаружено движение капель в направлениях $\langle 110 \rangle$. Однако вопрос о том, как влияет температура на характеристики движения капель, до сих пор остается открытым.

В данной работе с помощью Монте-Карло моделирования проведен анализ преобразования морфологии поверхности Si(111) в процессе осаждения золота в зависимости от температуры. Показано, что субмонослойное осаждение золота при температурах 1200 К на сингулярную поверхность Si(111) приводит к формированию двумерных кремниевых островков. А при осаждении золота на вицинальную поверхность при той же температуре наблюдалось изменение формы краев ступеней. Формирование кремниевых островков и изменение формы ступени связано с диффузией атомов золота в объем подложки и выходом атомов Si на поверхность. В температурном диапазоне 650-850 К на поверхности Si(111) наблюдалось формирование и движение капель, представляющих собой расплав Au-Si. Исследовано влияние температуры на характеристики движения капель расплава Au-Si. Рассматривалась вицинальная поверхность Si(111). Показано, что зарождение капель происходит преимущественно на ступенях вицинальной поверхности. Движение капель направлено в сторону вышележащих ступеней в направлении $[1-10]$ и вызвано растворением подложки кремния в стремлении достичь равновесной концентрации кремния в капле. В процессе растворения подложки каплей формируется латеральная граница раздела капля-кристалл. Направленность движения связана с асимметрией этой границей раздела, вызванной наличием ступеней на вицинальной поверхности Si(111). Растворяя вы-

шележащую ступень, капля оставляет позади себя след. Скорость движения капель, как и скорость растворения капель подложки, увеличивается при возрастании температуры. На рис. 1 представлена зависимость пройденного каплями пути от времени осаждения золота при разных температурах. За точку отсчета был принят момент времени, соответствующий началу движения капель. При температуре 750 К капля движется без значительного изменения скорости. Однако с течением времени скорость капли замедляется. Снижение скорости связано с зарастанием следа позади капли при кристаллизации атомов жидкого кремния на поверхности кремния. Ширина следа постепенно уменьшается, а площадь контакта капли и вышележащей ступени увеличивается. В этом случае асимметрия латеральной границы раздела капля-кристалл становится незначительной и направленное движение капли замедляется. Движение капли прекращается в тот момент, когда след полностью зарастает и граница раздела капля-кристалл становится симметричной. Остановка движения капли при 800 К соответствует моменту времени 120 с, а при 850 К моменту времени 60 с (рис. 1). При высокой температуре с течением времени движение капли может возобновиться, когда она достигнет таких размеров, что сможет коснуться следующей ступени.

Работа выполнена при поддержке программы Минобрнауки РФ (№ 0242-2021-0008).

[1] Yu P. et al., *Nano Today*, **11**, 704 (2016).

[2] Гиваргизов Е.И., *Кристаллография*, **51**(5), 947, (2006).

[3] Kosolobov S. et al., *Surface Science*, **687**, 25 (2019).

[4] Curiotto S. et al., *Scientific Reports*, **7**, 902 (2017).

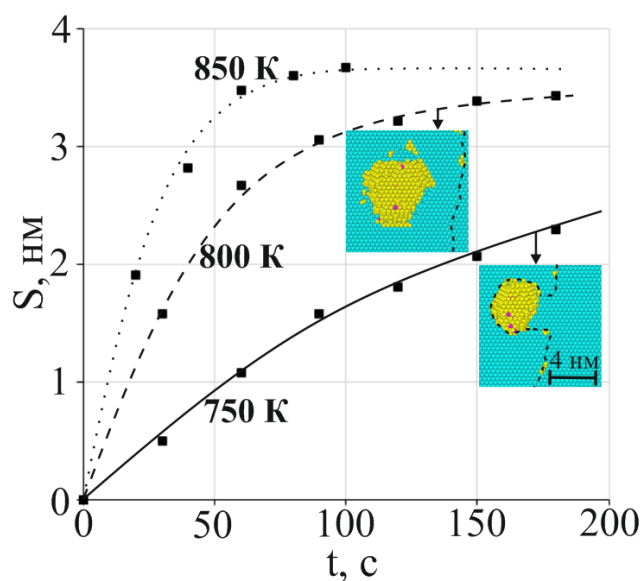


Рис.1. Зависимости пройденного каплями пути от времени осаждения золота при разных температурах по поверхности Si(111) с углом разориентации поверхности 1.2° . На вставках фрагменты модельной поверхности с каплей (пунктирной линией обозначена ступень).

Изменения сверхструктуры $2 \times N$ при гетероэпитаксиальном росте Ge на Si(100)

Кукенов О.И., Соколов А.С.

Национальный исследовательский Томский государственный университет. 634050,
Томск, пр. Ленина, 36

Одним из главных направлений развития современной наноэлектроники являются полупроводниковые наноструктуры. Кремний является самым распространённым полупроводником, поэтому структурам на его основе уделяют большое внимание. На данный момент, при синтезе на кремний германиевая технология является наиболее развитой. Метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) благодаря сверхвысокому вакууму, позволяет синтезировать чистые, наноструктуры с минимальным количеством дефектов. Используя метод дифракции быстрых отражённых электронов (ДБОЭ), при отражении потока высокоэнергетичных электронов от поверхности образца формируются дифракционные картины на флуоресцентном экране, по которым можно определять морфологию выращиваемой наноструктуры [1-2].

Рост квантовых точек германия на кремнии начинается с возникновения сверхструктуры $2 \times N$. Изменение величины $2 \times N$ можно детектировать по картине дифракции вблизи рефлексов 01 (рис. 1). Так, по относительному расстоянию X рефлексов 01, $1/N$ и 00 судят о числе N [3].

В результате экспериментального исследования методом ДБОЭ при молекулярно-лучевой эпитаксии германия на кремнии (100), получена зависимость величины N в температурном диапазоне 250–740 °С.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-72-10031.

[1] David T. et al., *Scientific reports*, **8**, 2891 (2018).

[2] Dirko V.V. et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 19318 (2020).

[3] Voigtlaender B., *Surf. Sci. Rep.*, **43**, 127 (2001).

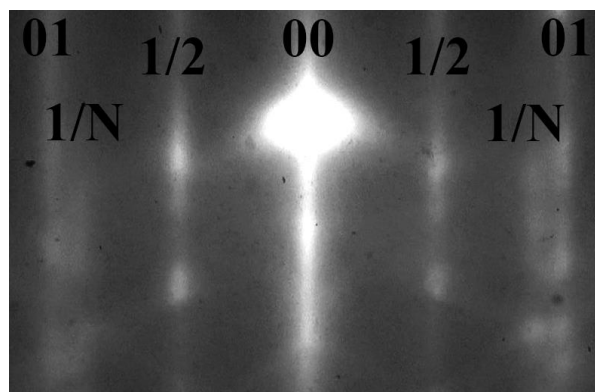


Рис.1. Картина дифракции быстрых электронов с обозначениями рефлексов.

Газочувствительные свойства пленок твердого раствора $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$

Алмаев А.В.¹, Кушнарёв Б.О.¹, Николаев В.И.², Черников Е.В.^{1,2}

¹ Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск, Россия, ул. Ленина, 36

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, Россия, ул. Политехническая, 26

Пленки полупроводниковых оксидов металлов широко применяются в газовых сенсорах [1,2]. Традиционно используются оксиды как *n*-типа проводимости (SnO_2 , ZnO , TiO_2), так и *p*-типа (CuO , Cr_2O_3). Ранее мы сообщали о газовых сенсорах на основе Ga_2O_3 [3].

Твердые растворы $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ представляют интерес для применения в газовых сенсорах ввиду возможности управления химическими и электрофизическими свойствами путем изменения компонентного состава. В настоящей работе сообщается об исследовании чувствительности электросопротивления пленок $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ к различным газам в интервале температур $T = 30\text{--}550^\circ\text{C}$.

Пленки $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ толщиной $0,5\text{ }\mu\text{m}$ были получены методом хлоридной эпитаксии (HVPE) на подложках сапфира. В качестве прекурсоров использовались InCl_3 , GaCl и O_2 . Температура роста пленок составляла 625°C . Номинальная концентрация Ga при данных условиях роста составляла около 10 at.%. На поверхности пленок формировались Pt-контакты на расстоянии $150\text{ }\mu\text{m}$ друг от друга. Далее пластины разрезались на чипы размером $1,2\times 1,3\text{ mm}$. Измерение временных зависимостей сопротивления образцов проводились в атмосфере чистого воздуха и в газовой смеси чистый воздух–целевой газ. Исследовалась чувствительность пленок к H_2 , NH_3 , CO , NO_2 и CH_4 . Пленки $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ характеризуются низким сопротивлением в чистом сухом воздухе $R_{\text{air}} \approx 2,80 \cdot 10^{-5} \Omega \cdot \text{cm}$.

Воздействие восстановительных газов (H_2 , NH_3 , CO и CH_4) приводило к обратимому уменьшению сопротивления R пленок $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$. Напротив, воздействие окислительного газа (NO_2) приводило к обратимому увеличению сопротивления R . В качестве отклика было выбрано отношение $(\Delta R/R_g) \cdot 100\%$, где, R_g — сопротивление пленки базовой смеси чистого сухого воздуха и целевого газа $\Delta R = |R_{\text{air}} - R_g|$. При повышении T отклик сначала растет, достигая максимума при температуре T_{max} , а затем снижается (рис. 1). Значения T_{max} при воздействии H_2 , NH_3 и CO 400°C , а при воздействии CH_4 и NO_2 — 450 и 250°C соответственно. Наиболее высокие отклики наблюдались для H_2 , NH_3 и CO .

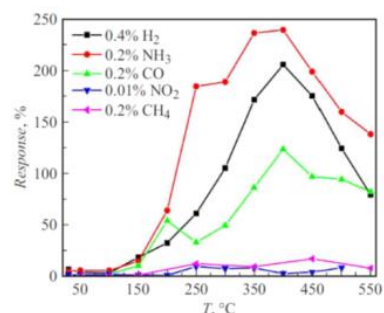


Рис. 1. Температурные зависимости сопротивления пленок $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$.

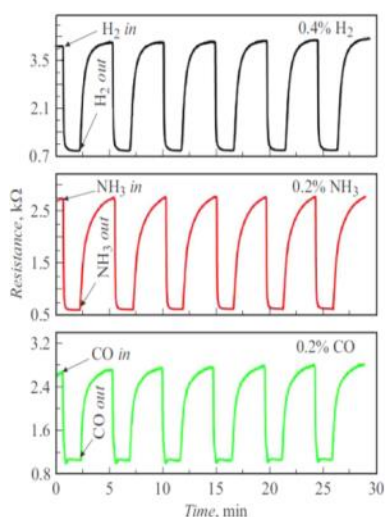


Рис.2. Временные зависимости сопротивлений пленок $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ при 400°C .

На рис.2 показаны временные зависимости сопротивления пленок $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ при $T = 400^\circ\text{C}$ и циклическом шестикратном воздействии H_2 , NH_3 и CO . Отклонения R_{air} и R_g от средних значений не превышали 1,5, 0,2 и 6% при воздействии H_2 , NH_3 и CO соответственно. Биэкспоненциальный характер временных зависимостей сопротивления пленок свидетельствует о существовании двух процессов при адсорбции газовых молекул на поверхности $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$. Первый (быстрый) процесс обусловлен хемосорбцией газовых молекул на поверхности полупроводника, а второй, обусловлен взаимодействием газовых молекул с кислородом кристаллической решетки в приповерхностной части полупроводника (O_{lat}^s). В таблице 1 представлены значения t_{res} и t_{rec} при $T = 400^\circ\text{C}$ и фиксированных концентрациях газов. При воздействии NH_3 и CO пленки характеризуются короткими временами отклика t_{res} и длительными временами восстановления t_{rec} . Наиболее высокое быстродействие наблюдалось при воздействии на пленки H_2 .

Таблица 1 – Времена отклика и восстановления пленок $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$

Время	Газ		
	H_2 (0,4%)	NH_3 (0,2%)	CO (0,2%)
t_{res}, s	21	15,5	17
t_{rec}, s	58,8	90	90

Пленки $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ в сравнении с ранее исследованными пленками $\varepsilon(\kappa)\text{-Ga}_2\text{O}_3$ [3], характеризуется более высокими откликами на H_2 , NH_3 и CO . Кроме того, в отличие от других резистивных сенсоров на основе металлооксидных полупроводников пленки $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ обладают низким базовым сопротивлением R_{air} , что является привлекательным для разработки дешевых и надежных систем съема и обработки информации с сенсоров на основе этого материала.

Сопротивления пленок $\text{In}_2\text{O}_3\text{--Ga}_2\text{O}_3$ в воздухе и при воздействии газов отличаются низким дрейфом при многократном воздействии газов.

Исследования выполнены при поддержке гранта по Постановлению Правительства Российской Федерации № 220 от 09 апреля 2010 г. (Соглашение № 075-15-2022-1132 от 01.07.2022 г.).

[1] Nikolic M.V. et al., *Sensors*, **20**, 6694 (2020).

[2] Vorobyeva N. et al., *Nanomaterials*, **11**, 2938 (2021).

[3] Almaev A. et al., *Phys. Status Solidi B*, **259**, 2100306 (2022).

Моделирование формирования нанокластеров GaN на кремниевых подложках методом капельной эпитаксии

Литвиненко М.А.², Настовьяк А.Г.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск, пр. Карла Маркса, 20

В последние годы была продемонстрирована возможность использования нульмерных объектов (нанокластеров или квантовых точек) на основе нитрида галлия (GaN) для широкого спектра приложений, таких как солнечные элементы, светодиоды, лазеры и однофотонные излучатели. Нанокластеры можно сформировать с помощью МЛЭ несколькими способами. Одним из них является рост по механизму Странского–Крастанова, когда материал наноточек отличается от подложки параметром решетки. Другой способ – метод капельной эпитаксии (КЭ). Этот метод заключается в последовательном осаждении элементов III и V группы. На первом этапе осаждается металл III группы, который собирается в капли. На втором этапе производится кристаллизация капель в потоке элемента V группы, что приводит к формированию различных нанообъектов A^3B^5 . С практической точки зрения большой интерес представляют нанокластеры GaN, полученные на подложках Si. В процессе капельной эпитаксии в такой системе наблюдалась интересная особенность – плотность кластеров GaN при некоторых условиях оказывалась выше, чем плотность исходных капель Ga [1,2]. Для объяснения этого были предложены различные гипотезы. Существенную помощь в проверке этих гипотез может оказать моделирование. Целью настоящей работы была реализация Монте-Карло модели капельной эпитаксии наноточек GaN на подложке Si(111).

Для анализа процессов роста GaN/Si(111) методом КЭ была реализована атомарная кинетическая Монте-Карло модель, в основу которой были положены механизм пар-жидкость-кристалл и эпитаксиальный рост по технологии молекулярно-лучевой эпитаксии. Моделирование проводилось на основе решеточной модели в программном комплексе SilSim3D [3]. Каждый узел решетки мог быть либо свободен, либо занят частицей. С частицами могли происходить различные события: акты адсорбции, десорбции, диффузии и химические превращения. Вероятность этих событий и их последовательность задавались энергиями активации, которые являлись входными параметрами модели. В латеральных направлениях использовались циклические граничные условия.

Была рассмотрена 5-и компонентная модельная система: Ga(s), Ga(l), Si, N, N₂ – галлий в твердой и жидкой фазах, кремний, атомарный и молекулярный азот соответственно. Исходная модельная система представляла собой подложку Si(111) с четырьмя каплями жидкого галлия полусферической формы диаметром

16 и 20 нм (рис. 1(а)). Нитридизация капель проводилась в потоке азота $F_N = 1$ МС/с при температуре 823 К. Азот осаждался на поверхность подложки в атомарном виде аналогично процессу плазменной МЛЭ, а испарение азота происходило в виде молекул N_2 . При взаимодействии атомов галлия и азота на подложке происходила кристаллизация твердой фазы GaN. Было также возможно растворение азота в капле Ga(l) с последующей кристаллизацией на границе раздела капля-кристалл.

На рис. 1(б) представлены результаты моделирования процесса нитридизации. Видно, что плотность точек GaN оказалась выше, чем плотность исходных капель Ga. Это связано с тем, что кристаллизация GaN происходит вне капель за счет взаимодействия атомов галлия, диффундирующих из капель, и осаждаемых атомов азота. Видно, что исходная капля не кристаллизуется.

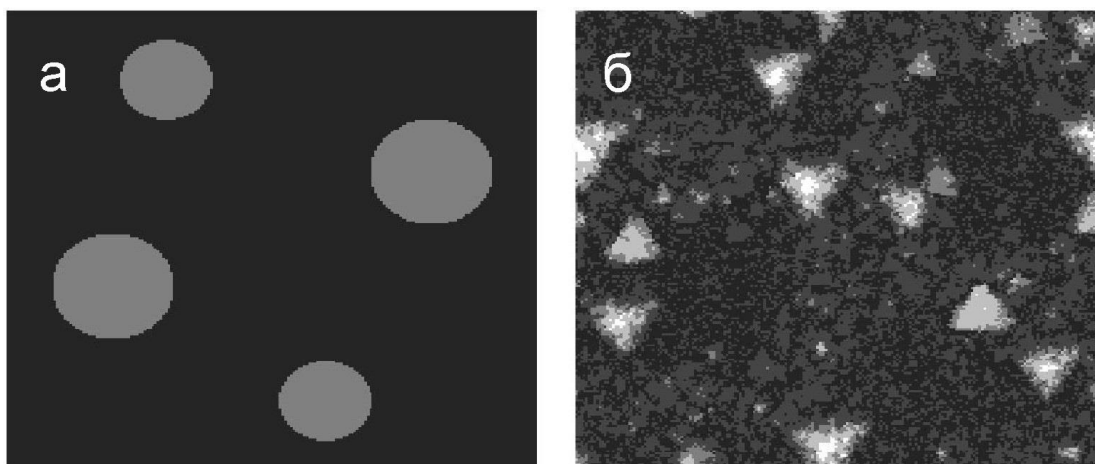


Рис.1. а) Изображение исходной модельной подложки Si(111) с каплями Ga плотностью $7 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$; б) Изображение подложки после нитридизации, плотность наноточек GaN $2,6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Более темный цвет соответствует нижележащим слоям. Размер поверхности $70 \times 80 \text{ нм}$.

Работа подготовлена при поддержке программы Минобрнауки РФ (№ 0242-2021-0008).

- [1] Lu H. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **116**, 062107 (2020).
- [2] Debnatha R.K. et al., *Journal of Crystal Growth*, **311**, 3389 (2009).
- [3] Карпов А.Н. и др., *Выч. методы и программирование: новые вычислительные технологии*, **15**, 388 (2014).

Кинетика золото-индуцированной кристаллизации тонких пленок нестехиометрического оксида кремния

Лунев Н.А.^{1,2}, Замчий А.О.¹, Воробьев Ю.В.³, Константинов В.О.¹,
Баранов Е.А.¹

¹ ИТ СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 1

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

³ Рязанский государственный радиотехнический университет, 390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1

Тонкие пленки поликристаллического кремния (poly-Si), полученные на недорогих и нетугоплавких подложках (например, на стекле), находят свое применение в современной фотовольтаике и электронике. Метод металлоиндуцированной кристаллизации (МИК) аморфных кремнийсодержащих пленок, в число которых входит аморфный кремний и его нестехиометрический оксид ($\alpha\text{-SiO}_x$, $0 < x < 2$), является одним из перспективных методов производства пленок poly-Si. В качестве катализаторов в процессе МИК могут быть использованы различные металлы, в том числе никель, золото и алюминий. В свою очередь золото позволяет значительно снизить температуру получения poly-Si по сравнению с другими металлами, используемыми в МИК [1]. Исследование и управление кинетикой нуклеации и роста кристаллов в процессе МИК позволяет контролировать структурные характеристики получаемых пленок poly-Si. В данной работе изучалась кинетика процесса золото-индуцированной кристаллизации (ЗИК) пленок $\alpha\text{-SiO}_{0,2}$ при температурном диапазоне процесса от 220 до 250 °С.

Тонкие пленки золота толщиной 30 нм были нанесены на подложки из кварца методом термовакuumного напыления. Далее на полученные структуры были осаждены тонкие пленки $\alpha\text{-SiO}_x$ толщиной 150 нм методом магнетронного распыления. Величина стехиометрического коэффициента была определена методом ИК-Фурье спектроскопии и составила 0,2 [2]. Отжиг протекал в вакуумной камере при давлении 5×10^{-4} Па и температурах 220, 230, 240 и 250 °С в течение 9 – 70 часов. Камера отжига была оборудована оптической системой *in situ* наблюдения, что позволило изучить кинетические параметры процесса ЗИК.

Полученные с помощью метода *in situ* оптические снимки были использованы для построения временных зависимостей степени покрытия (рис. 1) и плотности зародышеобразования вместе с результатами моделирования, выполненного на базе теории Колмогорова-Джонсона-Мела-Аврами, позволили определить энергии активации процессов нуклеации и роста кристаллических структур, а также энергию активации ЗИК $\alpha\text{-SiO}_{0,2}$ в целом, которые составили $2,51 \pm 0,80$, $0,31 \pm 0,10$ и $1,62 \pm 0,15$ эВ, соответственно.

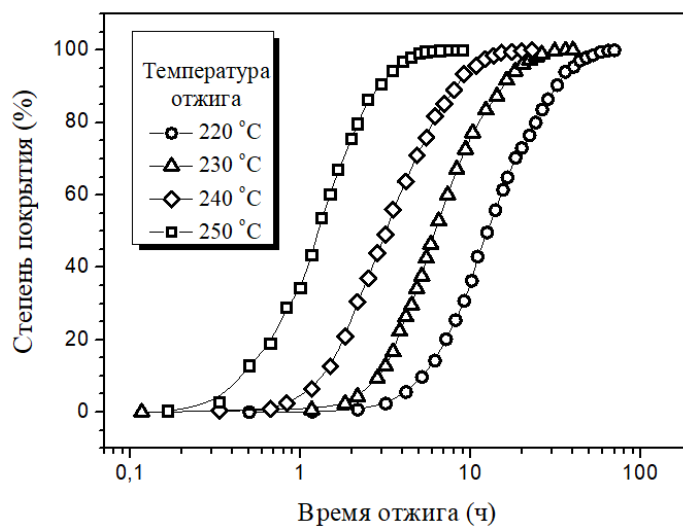


Рис.1. Зависимость степени покрытия от времени отжига образцов, отожженных при 220 – 250 °C.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-79-10079).

[1] Toko K., Suemasu T., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **53**, 373002 (2020).

[2] Zamchiy A.O. et al., *Vacuum*, **192**, 110462 (2021).

Влияние условий атомно-слоевого осаждения плёнок VO_x и последующего отжига на их морфологию

**Лысенко Н.И.¹, Мутилин С.В.¹, Волошин Б.В.¹, Селезнев В.А.¹,
Кичай В.Н.²**

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² ИНХ СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 3

Диоксид ванадия (VO_2) рассматривается как один из функциональных материалов, перспективных для электроники нового поколения. VO_2 претерпевает фазовый переход (ФП) первого рода при температурах близких комнатной ($\sim 68^\circ\text{C}$), при этом существенно изменяются электрические, оптические, механические свойства материала [1]. Широкое применение этого материала ограничено из-за деградации характеристик плёнок VO_2 при многократных ФП, т.к. параметры кристаллической решётки изменяется на величину $\sim 1\%$ и возникающие механические напряжения приводят к формированию дефектов. Решением этой проблемы является переход к нанокристаллам VO_2 , которые более устойчивы к механическим напряжениям по сравнению с плёнками VO_2 [2]. Поэтому формирование массивов нанокристаллов (НК) VO_2 является актуальной задачей.

В данной работе представлены результаты анализа морфологии пленок VO_x , состоящих из смеси VO_2 и V_2O_5 (содержание VO_2 в пленке варьировалось от 0% до 60%), которые отжигались в вакууме при температурах от 550 до 700°C. Тонкие пленки VO_x толщиной ~ 30 нм осаждались на подложках SiO_2/Si методом плазменно-стимулированного атомно-слоевого осаждения (ПС-АСО) с чередующимися импульсами TEMAV в качестве прекурсора ванадия и плазмы Ar/O_2 в качестве прекурсора кислорода. Процесс осаждения проводился при температуре подложки 170°C и давлении 30 Па в реакторе SI ALD LL (SENTECH, Германия). Морфология поверхности образцов исследовалась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на сканирующем зондовом микроскопе NT MDT SolverPro.

На рисунке 1 представлены изображения морфологии поверхности образцов VO_x после отжига при температурах от 550°C до 700°C. Во время отжига плёнка VO_x превращается в плёнку VO_2 . Это подтверждается исследованиями комбинационного рассеяния света и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. При температурах отжига выше 600°C, плёнка VO_2 разбивается на одиночные нанокристаллы. На рисунке 2 представлена зависимость средней высоты НК от относительного содержания VO_2 в плёнке VO_x . Видно, что при увеличении содержания VO_2 в плёнке с 0% до 60% средняя высота НК уменьшается примерно в 2 раза.

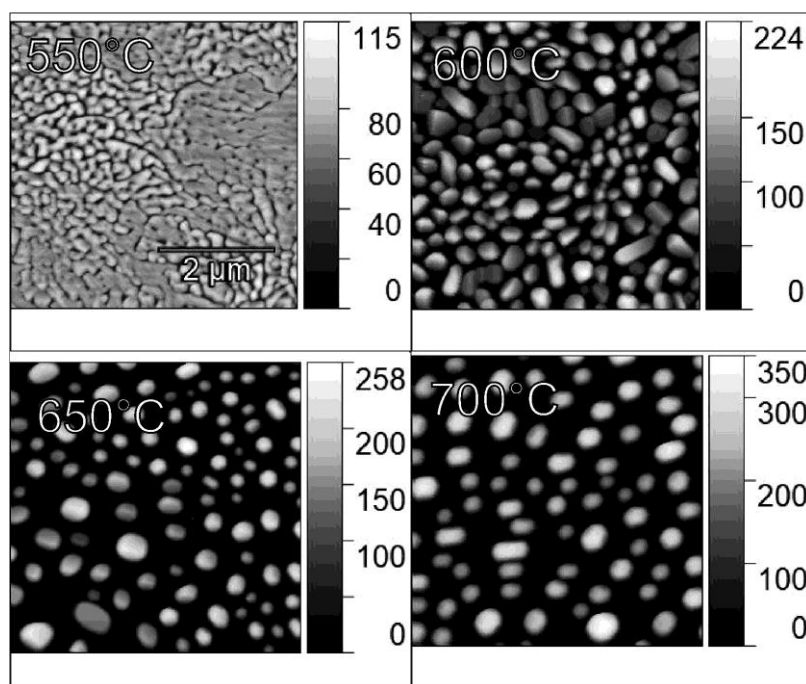


Рис.1. АСМ изображения поверхности образцов с VO_x после отжига при различных температурах. Исходная пленка, выращенная ПС-АСО была из кристаллического 100% V_2O_5 . Все АСМ изображения представлены в одном масштабе. Цветовая шкала высоты представлена в нанометрах.

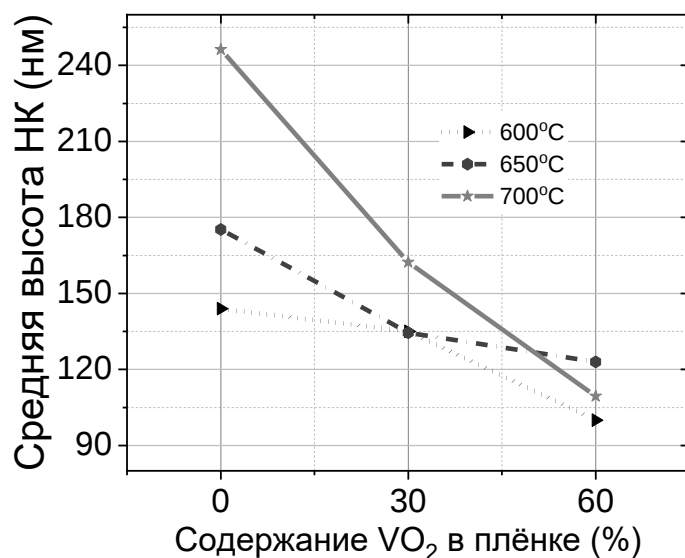


Рис.2. Зависимость средней высоты нанокристаллов VO_2 от состава плёнки VO_x , синтезированной ПС-АСО.

В результате анализа морфологии плёнок после отжигов обнаружено, что размеры НК VO_2 не зависят от температуры отжига в исследуемом диапазоне температур и материала подложки, на которой выращена плёнка VO_x . Однако с ростом концентрации VO_2 в составе плёнки VO_x , размер НК уменьшается.

Полученные результаты важны для дальнейшего формирования массивов НК VO_2 с возможностью

контролировать их размер и плотность распределения.

Работа выполнена при поддержке РНФ (грант № 21-19-00873).

[1] Zhang Y. et al., *Nanomaterials*, **11**(1) (2021).

[2] Prinz V.Y. et al., *Nanoscale*, **12**, 3443 (2020).

Свойства двумерного вигнеровского кластера: структура, вращение и спиновое упорядочение

Махмудиан М.М.^{1,2}, Энтин М.В.¹

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Вигнеровский кристалл, то есть система сильновзаимодействующих электронов, которые упорядочиваются в периодическую решетку во внешнем удерживающем потенциале, был впервые предложен в [1]. В то время как трёхмерный вигнеровский кристалл является только теоретической моделью твердого тела, двумерный вигнеровский кристалл, в котором положительные и отрицательные заряды пространственно разнесены, потенциально возможен [2-3]. К вопросу о двумерном вигнеровском кристалле примыкает задача о переходе струна-зигзаг в бесконечной системе электронов, помещенных в одномерный удерживающий потенциал [4].

В данном докладе представлены результаты моделирования двумерного вигнеровского кластера (ДВК), конечной системы взаимодействующих электронов, помещенных при нулевой температуре во внешний потенциал $U(x, y) = k(x^2 + \beta y^2)$, ограничивающий их движение в плоскости (x, y) [5]. Получены структуры ДВК с разным числом электронов n и разным коэффициентом асимметрии β (рис. 1), проанализирован переход «струна-зигзаг».

Рассмотрено поведение ДВК во внешнем переменном магнитном поле $B(t)$ [6], которое создает вихревое электрическое поле в плоскости ДВК и приводит его в движение. Существуют два режима движения ДВК, когда он является жестким или мягким. В первом режиме крутящий момент, создаваемый этим электрическим полем, пропорционален моменту

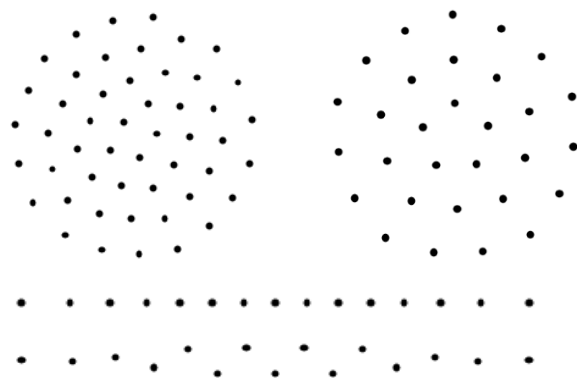


Рис.1. На рисунках представлены структуры кластеров с $n=50, 30, 11, 15$ электронов в зависимости от асимметрии потенциальной ямы $\beta=1$ для круглых кластеров и $\beta=10, 5$ для остальных.

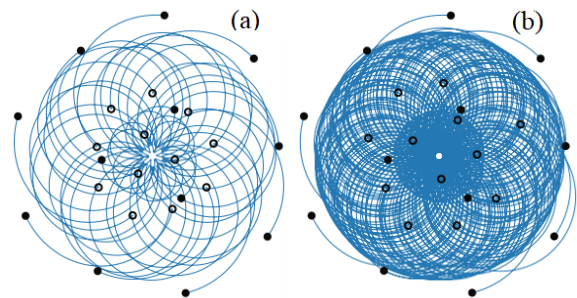


Рис.2. Траектории движения системы электронов, помещенных в переменное магнитное поле. Жирные точки - начальные позиции, пустые - конечные. (a) Кластер сжимается, сохраняя форму. (b) Разрушение структуры кластера после многократного прохождения им через центр координат.

инерции кластера. Вследствие этого, независимо от структуры кластера, происходит его вращение с частотой $\Omega(t) = -e(B(t) - B(0))/2mc$.

При достаточно сильных магнитных полях реализуется второй режим вращения: кластер, вращаясь, может самоподобно сжиматься, собираясь вблизи начала координат. После многократного сжатия, из-за взаимодействия электронов между собой, структура кластера меняется, что в конечном счете, приводит к разрушению ДВК. Типичные траектории движения электронов в ДВК, помещенных в переменное магнитное поле $B(t) = B_0(\tanh((t - t_0)/\tau_0) + 1)$ показаны на (рис. 2).

Другой решенной задачей является вопрос о спиновой структуре и магнитных свойствах неподвижных ДВК. Задача рассматривалась в модели Изинга. На рисунке 3 представлен магнитный момент и магнитная восприимчивость в зависимости от магнитного поля для ДВК с $n = 7$ электронами и $\beta = 1$ при температуре $T \sim 0,15K$ в магнитном поле $B \sim 1T$.

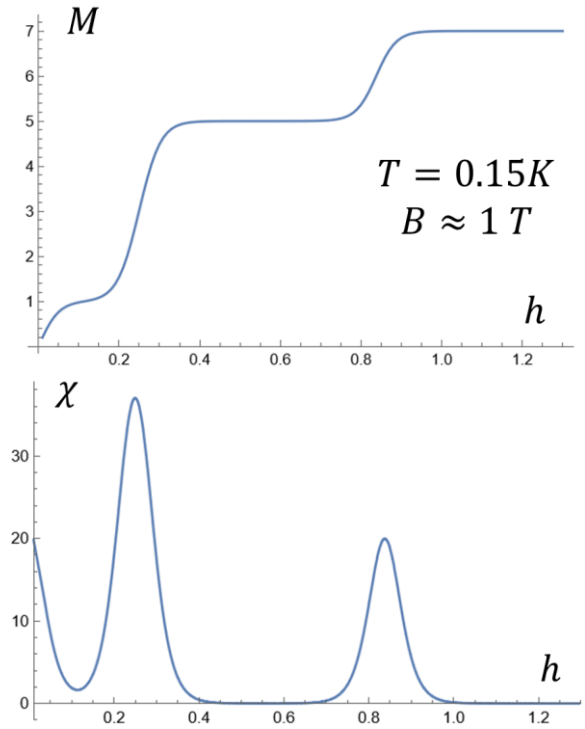


Рис.3.

Работа поддержана грантом РФФИ №20-02-00622.

- [1] Wigner E.P., *Phys. Rev.*, **46**, 1002 (1934).
- [2] Чаплик А.В., *ЖЭТФ*, **62**, 746 (1972).
- [3] Platzman P.M., Fukuyama H., *Phys. Rev. B*, **10**, 3150 (1974).
- [4] Чаплик А.В., *Письма в ЖЭТФ*, **31**, 275 (1980).
- [5] Mahmoodian Mehrdad, Entin M.V., *J. Phys.: Conf. Ser.*, **2227**, 012012 (2022).
- [6] Махмудиан М.М., Махмудиан Мехрдад М., Энтин М.В., *Письма в ЖЭТФ*, **115**(10), 642 (2022).

Изучение спинового транспорта и электронной структуры PbSnTe вблизи точки инверсии зон

Микаева А.С.^{1,2}, Голяшов В.А.^{1,2}, Климов А.Э.¹, Тарасов А.С.¹,
Ищенко Д.В.¹, Супрун С.П.¹, Кавеев А.К.³, Терещенко О.Е.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

³ ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, 26

В твердых растворах $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ ширина запрещенной зоны зависит от их состава x [1]. Она уменьшается до 0 эВ при $x \sim 0,3$, и затем при $x > 0,3$ ширина запрещенной зоны увеличивается, при этом вследствие сильного спин-орбитального взаимодействия происходит инверсия порядка зон и образуется фаза топологического кристаллического изолятора (ТКИ) с появлением невырожденных по спину дираковских поверхностных состояний. Такие системы могут быть интересны для реализации спинтронных устройств, однако спиновый транспорт в них ранее не исследовался. Целью данной работы является изучение спинового транспорта в пленках $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ с составами вблизи точки инверсии зон и исследование электронной структуры их поверхности.

Для исследования электронной структуры пленок (111) $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}/\text{BaF}_2$ с помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) предварительно поверхность пленок $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ подготавливалась путем химической обработки в HCl -изопропанол и последующего отжига в сверхвысоком вакууме при $T = 300 - 350$ °С для получения атомарно-чистой и структурно-упорядоченной нереконструированной поверхности 1×1 [2]. На картинах дисперсии зон вблизи Γ -точки зоны Бриллюэна (рис. 1) для составов $x \sim 0,27 - 0,5$ во всем исследованном температурном диапазоне (77 К – 300 К) наблюдались спин-поляризованные поверхностные состояния с квазилинейным законом дисперсии, соответствующим состоянию ТКИ. Поверхностные состояния ТКИ также наблюдались в M -точке зоны Бриллюэна и имели максимальную интенсивность для $\text{Pb}_{0,5}\text{Sn}_{0,5}\text{Te}$.

Для изучения спинового транспорта были изготовлены спин-вентильные структуры на основе пленок (111) $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$.

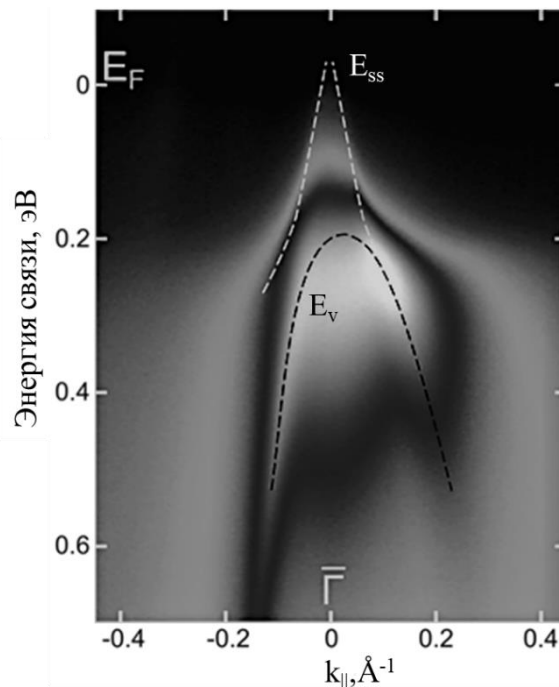


Рис.1. Электронная структура поверхности пленки (111) $\text{Pb}_{0,5}\text{Sn}_{0,5}\text{Te}/\text{BaF}_2$ вблизи уровня Ферми при $T = 77$ К. Направление $\Gamma - M$.

$\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ ($x \sim 0,21 - 0,42$) с ферромагнитными контактами. Пары ферромагнитных контактов Co и FeCoB осаждались на поверхность пленок методом лазерного напыления через специальную композитную маску на расстоянии 30 мкм друг от друга.

Было обнаружено, что для спин-вентильных структур на основе пленок с составами близи точки инверсии зон наблюдается локальный и нелокальный спин-вентильный эффект. Величина нелокального спин-вентильного эффекта ($\Delta R/R$) для $\text{Pb}_{0,66}\text{Sn}_{0,34}\text{Te}$ составила $2 \cdot 10^{-3}$ при $T = 4,2$ К. Оценочное значение длины спиновой диффузии в пленках $\text{Pb}_{0,66}\text{Sn}_{0,34}\text{Te}$ составило $L_s \sim 150$ мкм. Для структур с составами $x < 0,3$ и $x > 0,4$ спин-вентильный эффект не наблюдался. Увеличение длины спиновой диффузии для составов $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ близи точки инверсии зон может быть связано с реализацией в них бесщелевого объемного энергетического спектра.

Большая длина спиновой диффузии в $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ вблизи точки инверсии зон представляет значительный интерес, однако причины этого остаются неизвестными и требуют дальнейших исследований.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 22-12-20024.

[1] Volobuev V.V. et al., *Advanced Materials*, **29** (2017).

[2] Tarasov A.S. et al., *Applied Surface Science*, **569**, 150930 (2021).

Двумерные структуры Si, выращенные молекулярно-лучевой эпитаксией на подложках CaF₂/Si(111)

Муратов В.И.¹, Зиновьева А.Ф.^{1,2}, Зиновьев В.А.², Володин В.А.^{1,2},
Крупин А.Ю.³, Двуреченский А.В.^{1,2}

¹ Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

² ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

³ Новосибирский государственный технический университет, 630073, Новосибирск,
пр. Карла Маркса, 20

На текущий момент актуален поиск двумерных графеноподобных материалов. В качестве наиболее перспективных рассматривается двумерный материал на основе кремния, силицен. Для дальнейшего применения в приборах желательно выращивать силицен на диэлектрических подложках. В теоретической работе [1] было показано, что силицен должен быть стабилен на CaF₂(111). Однако, из-за неудачного соотношения поверхностных энергий Si и CaF₂, формирование двумерных слоев кремния является проблематичным [2].

В данной работе найдены ростовые условия, при которых происходит формирование участков двумерных слоев Si на CaF₂(111). Синтез многослойных структур проводился методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках Si(111) при температуре 550°C. Параметры образцов указаны в Табл. 1.

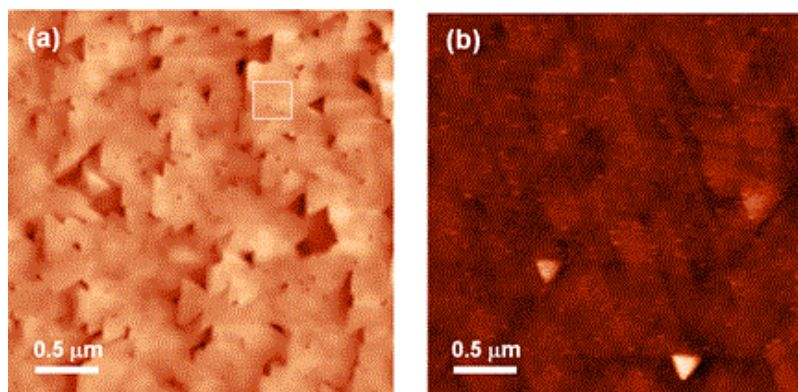


Рис. 1. АСМ – сканы поверхности структур различной толщины: (а) – структуры 4 толщиной 29 нм; (b) – структуры 5 толщиной 123 нм.

Исследования методами спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС), атомно-силовой микроскопии (АСМ), и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) продемонстрировали, что для структур с прослойками кремния, были сформированы участки двумерных слоев Si. Анализ спектров КРС (рис. 2) показал наличие узкого пика при 418 см⁻¹, который обусловлен колебаниями Si атомов в плоскости двумерного слоя Si, интеркалированного кальцием. Для структур с толщиной, большей критической для введения дислокаций, интенсивность сигнала КРС при таком же количестве осажденного Si оказалась значительно больше. Согласно данным АСМ (рис. 1) на поверхности структур, для которых наблюдался интенсивный сигнал КРС, была сформирована сетка из ступеней, связанная с введением дислокаций.

Для образцов 1 и 2 при подсветке белым светом был получен ЭПР-сигнал с $g=1,9992$ (рис. 3). Сигнал имеет асимметричную форму линии, близкую к форме линии Дайсона. Этот сигнал можно отнести к фотоиндуцированным электронам проводимости в протяженных двумерных островках Si. На основании сопоставления результатов КРС, ЭПР и микроскопических исследований сделан вывод, что рост Si слоев происходит преимущественно от ступеней на поверхности пленки CaF_2 . На краю ступеней на поверхность выходят атомы кальция, с которыми могут связаться атомы кремния. Чем больше ступеней, тем более вероятно зарождение и дальнейший рост двумерного слоя кремния.

Полученные результаты могут быть использованы в дальнейшем для разработки подходов к получению двумерных материалов на основе кремния.

[1] Kokott S. et al., *Phys.: Condens. Matter*, **26**, 185002 (2014).

[2] Wang C.R. et al., *Appl. Surf. Sci.*, **211**, 203 (2003).

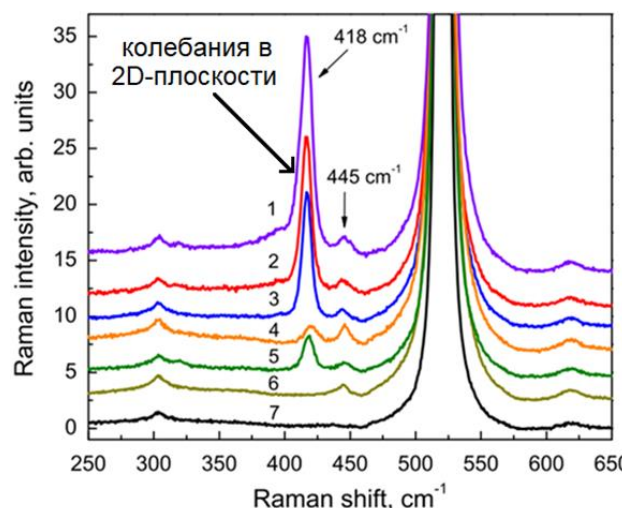


Рис.2. Спектры КРС от исследуемых структур (номера кривых совпадают с номерами образцов в таблице).

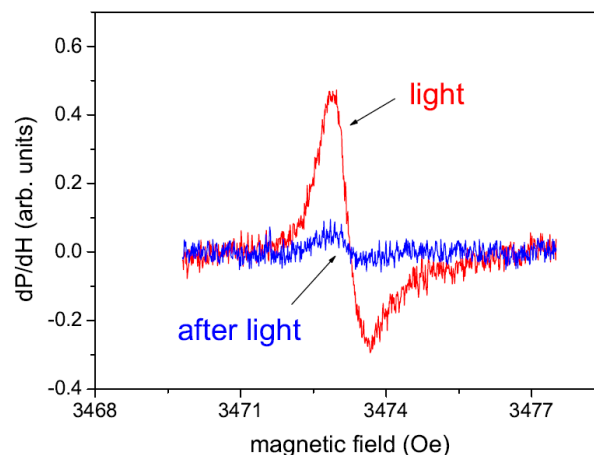


Рис.3. ЭПР спектры от структуры 2, измеренные при подсветке белым светом (красная линия) и в темноте, после выключения света (синяя линия), $T=6$ К.

Таблица 1 – Параметры исследуемых структур

№	Толщина буфера CaF_2	Толщина осажденного Si	Количество слоев Si	Толщина прослоек CaF_2
1	70	3 БС	9	6 нм
2	70	2 БС	9	6 нм
3	20	1 БС	9	6 нм
4	10	1 БС	9	2 нм
5	120	1 БС	1	-
6	40	-	-	-

Гистерезис фазового перехода $\beta \rightleftharpoons \beta'$ в пленках In_2Se_3

Пономарев С.А.^{1,2}, Рогило Д.И.¹, Миронов А.Ю.¹, Курусь Н.Н.¹,
Милехин А.Г.¹, Щеглов Д.В.¹, Латышев А.В.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

С начала открытия графена в начале XXI века изучение слоистых двумерных (2D) материалов является активно развивающейся областью физики конденсированного состояния. В частности, слоистый In_2Se_3 представляет интерес для создания солнечных фотоэлементов, фотоприемников, работающих в диапазоне от УФ до ИК и устройств памяти [1]. Однако исследование управляемого ван-дер-ваальсового роста In_2Se_3 и изучение электронных свойств полученных пленок является актуальной темой, приближающей применение In_2Se_3 в приложениях современной электроники.

В данной работе методом *in situ* отражательной электронной микроскопии (ОЭМ) на поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ впервые изучен процесс адсорбции индия при температуре около 400°C (Рис. 1). На рис. 1а показано ОЭМ изображение поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ в процессе конгруэнтной сублимации Bi_2Se_3 , визуализированной впервые в работе [2]. Области темного контраста соответствуют атомным ступеням и эшелонам ступеней, области светлого контраста — гладким террасам. В процессе адсорбции индия происходит постепенное потемнение контраста на участках поверхности вблизи ступеней (рис. 1б,в). По мере увеличения площади, трансформированной покрытием индия, происходит полное потемнение контраста от поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ (рис. 1г).

На поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ выращена пленка $\beta\text{-In}_2\text{Se}_3$ толщиной около 70 нм для последующих измерений спектров комбинационного рассеяния света (КРС). Спек-

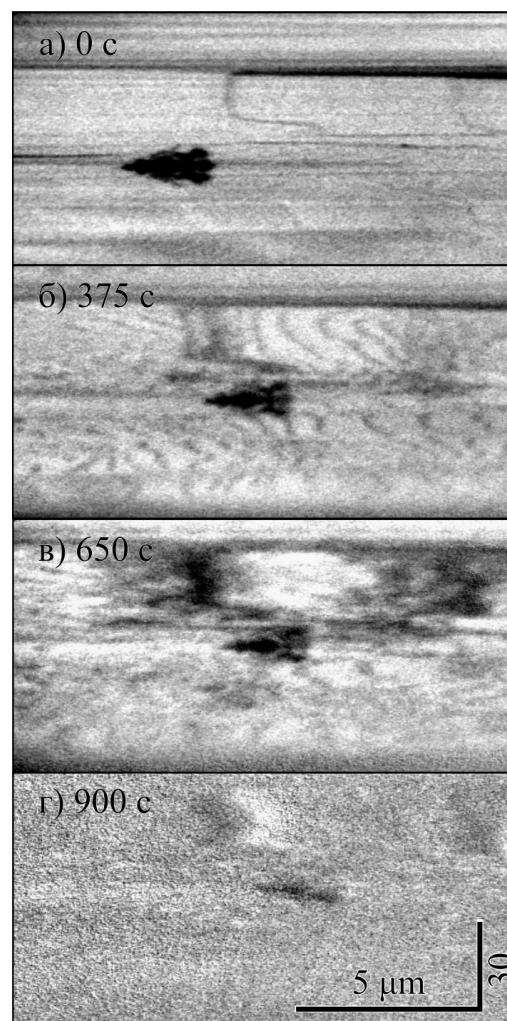


Рис. 1. Процесс адсорбции In на поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$:

(а) конгруэнтная сублимация при 400°C в потоке селена. (б,в) увеличение покрытия In, (г) полная трансформация поверхности покрытием In.

тры КРС измерялись при охлаждении от комнатной температуры до 77 К и последующем обратном нагреве до комнатной температуры с шагом 10 К (Рис. 2). При охлаждении до температур около 140 К наблюдалось исчезновение пика при 175 см^{-1} , и последующее появление трех пиков при 155 , 170 и 188 см^{-1} . Более того, при нагреве пленки до температуры около 180 К наблюдалось повторное появление пика при 175 см^{-1} , соответствующего $\beta\text{-In}_2\text{Se}_3$. Ранее в интервале температур 140–180 К переход из фазы $\beta\text{-In}_2\text{Se}_3$ в фазу $\beta'\text{-In}_2\text{Se}_3$ обнаружен методом сканирующей туннельной микроскопии [3]. При изменении температурной зависимости электрического сопротивления пленки In_2Se_3 толщиной 8 нм на поверхности Si(111), обнаружено два гистерезиса в области 20–40 К и 140–180 К [4]. В диапазоне 140–180 К при охлаждении образца от комнатной температуры сначала наблюдалось резкое уменьшение сопротивления в $\sim 10^4$ раз вблизи 140 К. Обратный переход происходил при нагреве выше 180 К. Поскольку в работе обнаружено гораздо более низкое сопротивление для низкотемпературной фазы, предполагается, что образующаяся фаза $\beta'\text{-In}_2\text{Se}_3$ имеет высокую концентрацию структурных дефектов, которые увеличивают проводимость пленки за счет генерации мелких доноров после структурного перехода $\beta\text{-In}_2\text{Se}_3 \Rightarrow \beta'\text{-In}_2\text{Se}_3$. В данной работе, температурный гистерезис КРС в области 140–180 К также соответствует обратимому фазовому переходу $\beta\text{-In}_2\text{Se}_3 \Leftrightarrow \beta'\text{-In}_2\text{Se}_3$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 22-72-10124) с использованием оборудования ЦКП «Наноструктуры».

- [1] Vishwanath S. et al., *J. Mater. Res.*, **31**, 900 (2016).
- [2] Ponomarev S. et al., *J. Phys.: Conf. Ser.*, **1984**, 012016 (2021).
- [3] Rathi S. et al., *Cryst. Growth Des.*, **14**, 4617 (2014).
- [4] Ponomarev S. et al., *2021 IEEE 22nd International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM)*, **21**, 50 (2021).

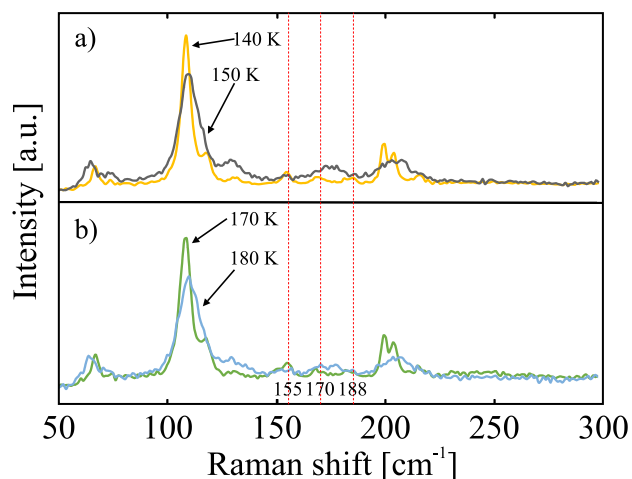


Рис. 2. (а) Спектры КРС пленки In_2Se_3 при охлаждении. При 140 К видно появление пиков при 155 , 170 и 188 см^{-1} . (б) Спектры КРС при нагреве. При 180 К наблюдается исчезновение пиков при 155 , 170 и 188 см^{-1} .

Баллистический электронный транспорт в квантовых точечных контактах траншейного типа

**Сарыпов Д.И., Похабов Д.А., Погосов А.Г., Жданов Е.Ю.,
Бакаров А.К.**

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Несмотря на долгую историю изучения квантовых точечных контактов (КТК), ряд явлений, выходящих за рамки традиционного целочисленного квантования кондактанса, остаются слабоизученными. К ним относится и эффект многоканальности, заключающийся в образовании внутри КТК нескольких проводящих каналов, квантующиеся кондактансы которых дают независимый вклад в общий кондактанс. Этот эффект можно обнаружить путём асимметричного смещения потенциала КТК при помощи разных напряжений на боковых затворах [1, 2]. Для наблюдения многоканальности используют КТК траншейного типа (создаваемые с помощью литографических траншей, отделяющих каналы от двух боковых затворов), позволяющие прикладывать большие разности затворных напряжений.

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию многоканальности. В ней представлены измерения кондактанса КТК, демонстрирующие это явление, и предложен лежащий в его основе физический механизм, состоящий в скореллированном перераспределении электронов двумерного газа, а также заряженных доноров и X-долинных электронов. С помощью численного моделирования показано формирование многоямного потенциала в КТК [3].

Для экспериментального изучения многоканальности, помимо стандартных измерений кондактанса, применялась техника магнитной фокусировки, позволяющая явно рассмотреть присутствующие в КТК каналы за счёт разделения их вкладов в измеряемый сигнал по шкале магнитных полей. Для этого использовались два отделённых друг от друга на расстояние 4 мкм параллельных КТК, один из которых является инжектором электронов, а другой — детектором. В данной работе было исследовано влияние суммы (ΣV_G) и разности (ΔV_G) затворных напряжений на спектр магнитной фокусировки.

Напряжение на детекторе демонстрирует пик в магнитном поле, соответствующем циклотронному диаметру, равному расстоянию между коллектором и детектором. Установлено, что уменьшение ширины детектора с помощью ΣV_G приводит к увеличению высоты пика, а прикладывание ΔV_G на инжектор приводит к его смещению. Высота пика экспоненциально подавляется с ростом квадрата температуры, что указывает на физическую природу затухания, связанную с электрон-электронным взаимодействием [4].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ (грант №22-12-00343).

- [1] Pokhabov D.A. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **118**, 012104 (2021).
- [2] Pokhabov D.A. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **115**, 152101 (2019).
- [3] Сарынов Д.И. и др., *Письма в ЖЭТФ*, **116**, 350 (2022).
- [4] Gupta A. et al., *Nat. Commun.*, **12**, 5048 (2021).

Долинный эффект холла, индуцированный электронной диффузией, и нелинейный гальвано-диффузионный транспорт в гексагональных дираковских 2D монослойных материалах

Снегирев А.В.^{1,2}, Ковалев В.М.^{1,3}, Энтин М.В.¹

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

³ Новосибирский государственный технический университет, 630072, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20

В последнее время значительный интерес был привлечен к исследованию свойств двумерных полупроводников, таких как дихалькогениды переходных металлов (ДПМ). Они имеют уникальные оптические свойства, которые могут быть применены в оптоэлектронике. На транспортные свойства ДПМ определяющее влияние оказывает их необычная зонная структура, содержащая пары электронных и дырочных долин, расщепленных сильным спин-орбитальным взаимодействием. В результате, у носителей заряда появляется дополнительная, долинная степень свободы. Оптическое возбуждение циркулярно-поляризованным светом может приводить к неравновесному заселению долин. Из-за большого расстояния в импульсном пространстве номер долины становится хорошо сохраняющейся величиной, которая может определять транспортные свойства материала.

Данная работа посвящена теоретическому исследованию электронных транспортных эффектов в монослоях ДПМ, обусловленных неоднородным распределением концентрации носителей заряда. Последнее может быть достигнуто, например, неравномерным облучением образца или инжекцией электронов из других материалов.

В первой части работы рассмотрен процесс анизотропного рассеяния носителей заряда на точечных примесях (skew-рассеяние), в результате которого появляется поперечная к градиенту концентрации компонента тока. Рассчитана и проанализирована поперечная компонента тензора диффузии. Результат качественно аналогичен долинному эффекту Холла с заменой компонент электрического поля на соответствующие градиенты концентрации носителей заряда.

Во второй части работы рассмотрено изотропное рассеяние на точечных и кулоновских примесях. Показано, что в результате учета тригональной гофрировки зон появляются квадратичные по градиентам концентрации поправки к току. В первом порядке по величине гофрировки зон были вычислены и проанализированы компоненты тензоров нелинейной диффузии, связанные с тригональным спектром в долинах, а также смешанные компоненты, обусловленные градиентом концентрации и электрическим полем. Результат качественно аналогичен фотогальваническому эффекту. Кроме того, найдены токи, обусловленные вторыми производными концентрации по координатам.

Температурная зависимость сверхструктурных переходов при гетероэпитаксиальном росте Ge на Si(111)

Соколов А.С., Кукунов О.И.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск, пр. Ленина, 36

Формирование полупроводниковых наногетероструктур является важной частью развития современной электроники, поскольку элементы, основанные на них, обладают лучшими характеристиками, по сравнению с их микроэлектронными предшественниками. Особое внимание уделяется структурам на основе кремния и германия, составляющим элементную базу большинства современных электронных устройств. В современном мире возрастает потребность к созданию идеальных бездефектных квантовых ям, квантовых нитей и квантовых точек. Методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) в условиях сверхвысокого вакуума можно получать тонкие эпитаксиальные слои высокой чистоты с малым количеством дефектов, которые имеют резкое изменение состава на границе.

Метод дифракции быстрых отражённых электронов (ДБОЭ) дает информацию об атомной структуре поверхности и используется в процессе эпитаксиального роста [1]. Электронная пушка ДБОЭ посылает поток электронов на подложку под малым скользящим углом. Поскольку длина волны электронов соизмерима с параметрами кристаллической решётки, при отражении от эпитаксиальной структуры на люминесцентном экране образуются картины дифракции. По виду картины можно оценить структуру и качество наблюдаемого кристаллического слоя.

Свойства полученных наноструктур по большей степени зависят от условий их создания. Например, температура подложки влияет на кинетические процессы, протекающие при синтезе. В процессе работы проведена серия экспериментов по гетероэпитаксии Ge на Si (111) на установке МЛЭ «Катунь–100». Контроль процесса синтеза наногетероструктур осуществлялся с помощью метода ДБОЭ.

В результате анализа дифракционных картин получена температурная зависимость времени сверхструктурного перехода 7×7 в 5×5 при синтезе Ge на Si (111) в диапазоне $400^{\circ}\text{C} - 650^{\circ}\text{C}$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-72-10031.

[1] Lozovoy K.A., *Surface and Coatings Technology*, **384**, 125289 (2020).

Исследование тонких плёнок Bi на поверхности InAs(111)A(2x2)

Соловова Н.Ю., Голяшов В.А., Терещенко О.Е.

ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 30

Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

В данной работе изучаются условия осаждения тонких плёнок висмута на поверхность n-InAs(111)A с реконструкцией (2x2). Благодаря двумерному электронному газу, образующемуся на исследуемой поверхности InAs(111)A, в котором происходит снятие вырождения по направлению спина за счёт расщепления Расшбы, InAs может быть использован в качестве канала в спиновых транзисторах [1]. Для снижения напряжений, регулирующих спиновый ток, необходимо увеличить параметр Расшбы, т.е. усилить спин-орбитальное взаимодействие. Этого можно добиться добавлением на поверхность InAs тяжелых атомов, например, висмута. Кроме того, получение графеноподобных плёнок висмута на полупроводниковых подложках представляет отдельный интерес, поскольку в них могут проявляться топологические эффекты.

Чистая поверхность InAs готовилась путём химической обработки в HCl – изопропанолем с последующим прогревом в сверхвысоком вакууме 10^{-9} - 10^{-10} мбар.

Висмут осаждался из эффузионной ячейки Кнудсена. Скорость осаждения плёнок была откалибрована с помощью in situ рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭ) и составляла $\sim 0,25$ Å/мин. Обнаружено, что на кристаллическую структуру выращиваемых тонких плёнок (1-2 моноатомных слоя) влияет как температура подложки в процессе роста, так и способ подготовки поверхности (2x2) InAs(111)A.

На поверхности InAs, подготовленной с использованием ионного травления Ag^+ в процессе прогрева, рост плёнок Bi при комнатной температуре происходит эпитаксиально с сохранением реконструкции (2x2) вплоть до покрытий ~ 20 Å. Повышение температуры подложки при росте Bi (до 200-260°C) приводит к изменению атомной структуры поверхности плёнок. При покрытиях ~ 2 Å образуется реконструкция $(2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3})$, переходящая в

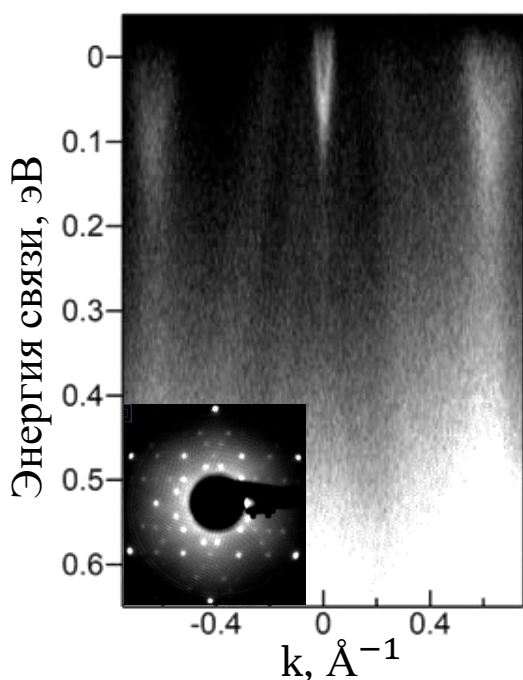


Рис.1. Дисперсионные зависимости, полученные методом ФЭСУР, для поверхности $(2\sqrt{3} \times 3)$ Bi/InAs(111)A. На вставке показана картина ДМЭ на этой поверхности.

(1x1) с увеличением толщины плёнки. Исключение ионного травления позволяет улучшить качество исходной поверхности (2x2) InAs(111)A. На таких поверхностях высокотемпературный (300°C) рост висмута приводит к образованию реконструкции ($2\sqrt{3}\times 3$) с прямоугольной элементарной ячейкой.

Анализ химических сдвигов в РФЭ-спектрах показал, что отличается не только кристаллическая структура выращиваемых плёнок, но и химическое состояние атомов висмута на поверхности. Висмут в плёнках, выращенных при комнатной температуре, формирует химические связи с подложкой. В РФЭ-спектрах, измеренных на плёнках с реконструкцией ($2\sqrt{3}\times 3$) химические сдвиги, характерные для связей Bi-In, Bi-As, обнаружены не были. Что указывает на формирование квазисвободной двумерной решетки из атомов Bi. Поверхность скола объёмного висмута обладает гексагональной структурой, однако известны аллотропные модификации 2-мерных плёнок висмута, обладающие прямоугольной симметрией [2]. Постоянная решетки таких плёнок составляет порядка 4 Å, что значительно меньше наблюдаемых в работе 13 Å x 15 Å. Поэтому вопрос об атомной структуре формирующегося слоя остаётся открытым.

Изучение дисперсии поверхностных состояний методом ФЭСУР показало, что при низких температурах роста формируется «полуметаллический» спектр состояний Bi. В случае поверхностной структуры ($2\sqrt{3}\times 3$) наблюдается сложная картина дисперсии зон, указывающая на общий полупроводниковый характер полученной системы (рис. 1). Измерения с разрешением по спину показали наличие спиновой поляризации у электронов, эмитируемых из состояний сформированной пленки висмута, со спиновой структурой схожей с геликоидальной.

[1] Datta S., Das B., *Appl. Phys. Lett*, **56**, 665 (1990).

[2] Kowalczyk P.J. et al., *Physical Review B*, **96**, 205434 (2017).

Моделирование конструкций лавинного фотодиода на основе Ge/Si

Хомякова К.И., Диб Х.

Национальный исследовательский томский государственный университет, 634050, Томск, просп. Ленина, 36

Однофотонные фотоприемники, которые имеют возможность обнаружения одиночных фотонов, являются ключевыми компонентами для создания квантовых информационных систем. Кроме того, высокопроизводительные фотоприемники также находят многочисленные применения в других областях исследований, таких как обнаружение света и определение дальности (ЛИДАР), флуоресцентная медицинская визуализация, регистрация слабого излучения в спектроскопии, в космических и т.д. В настоящее время доступно несколько однофотонных фотоприемников, включая фотоумножители, сверхпроводящие нанопроволки и полупроводниковые лавинные фотодиоды [1].

Лавинные фотодиоды Ge/Si (ЛФД) широко используются для обнаружения в ближнем инфракрасном диапазоне благодаря следующим преимуществам: полоса поглощения в германии находится в диапазоне 800–1550 нм, кремний демонстрирует размножение электронов явление и его легко интегрировать с КМОП-технологией, германий недорогой и т. д. [1-2].

В данной работе с помощью программы TCAD были смоделированы два вида структур ЛФД. Получили распределение электрического поля для меза и планарной структуры. Наблюдается отличие в распределении электрического поля в этих структурах, что должно приводить к изменению темнового тока в линейном режиме, скорости темнового счета в режиме Гейгера и квантовой эффективности.

Для исследования характеристик и параметров фотоприемника, с помощью программы TCAD была спроектирована и смоделирована планарная структура ЛФД Ge/Si. Поперечное сечение спроектированной структуры ЛФД Ge/Si показано на рисунке 1. Структура сконструирована таким образом, что инфракрасный свет поглощается в слое германия, в то время как процесс умножения происходит в слое кремния.

Проведено моделирование для планарной структуры влияние концентрации легирования примесью зарядового слоя и рабочей температуры на параметры ЛФД

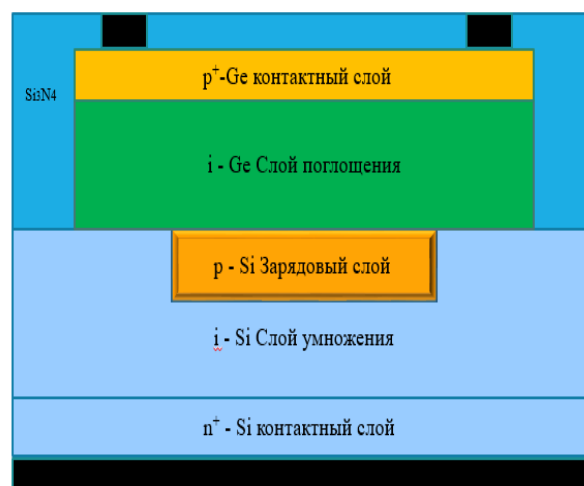


Рис.1. Поперечное сечение планарной структура лавинного фотодиода Ge/Si.

Ge/Si. Зарядовый слой играет важную роль в работе ЛФД, потому что между областями поглощения и умножения предоставляет гибкость в управлении профилем внутреннего электрического поля устройства. Он обеспечивает достаточно высокое электрическое поле в области умножения для достижения лавинного усиления при сохранении достаточно низкого электрического поля в поглотителе, чтобы подавить туннельные эффекты, возникающие в слое поглощения при сильном электрическом поле [3].

Получены зависимости распределения профиля электрического поля вдоль вертикального направления в центре структуры при напряжении поля 95 % от напряжения пробоя для концентраций легирования $1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и $3 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Из полученных результатов выбрали оптимальную концентрацию легирования $2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$, которая удовлетворяет всем критериям с точки зрения проектирования и величины распределения электрического поля по структуре.

В работе были построены вольт-амперные характеристики, предложенной планарной структуры ЛФД Ge/Si, при различных температурах с диаметром зарядового слоя 100 мкм и концентрацией легирования $2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. В результате при снижении температуры с комнатной до 150 К пробой ЛФД происходит при более низких напряжениях. В дальнейшем представленные результаты моделирования конструкций ЛФД и построенные зависимости помогут при изготовлении экспериментальных структур.

Работа выполнена при поддержке Программы развития Томского государственного университета (Приоритет-2030) (проект №2.0.6.22 ЛМУ).

[1] Cova S. et al., *Chem. Rev.*, **51**, 12671288 (2004).

[2] Vines P. et al., *Nat. Commun.*, **10**, 1-9 (2019).

[3] Warburton R.E. et al., *IEEE Trans. Electron Dev.*, **60**, 3807-3813 (2013).

Пленение излучения в $p\text{-GaAs}(\text{Cs},\text{O})$ -фотокатодах: эксперимент и расчет

Хорошилов В.С.^{1,2}, Протопопов Д.Е.¹

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

Поверхности арсенида галлия с адсорбированными слоями цезия и кислорода используются в качестве фотокатодов с отрицательным эффективным электронным сродством (ОЭС) [1]. Благодаря высокому квантовому выходу фотоэмиссии, ОЭС-фотокатоды на основе $p\text{-GaAs}(\text{Cs},\text{O})$ применяются в фотоумножителях и источниках электронов. Ранее переход от положительного электронного сродства (ПЭС) к ОЭС на поверхности $p\text{-GaAs}(\text{Cs},\text{O})$ изучался методом спектроскопии квантового выхода фотоэмиссии [2]. При этом в геометрии на отражение (т.е. при освещении эмитирующей поверхности) впервые наблюдались особенности в виде ступеньки или пика при субзонной (меньшей ширины запрещённой зоны $\varepsilon_g = 1,43$ эВ) энергии фотонов. В данной работе экспериментально, а также с помощью расчета, установлено, что возникновение этих особенностей связано с пленением излучения в фотокатодной структуре.

Эксперименты проводились на эпитаксиальном слое $p\text{-GaAs}$, выращенном на подложке с матовой задней гранью. Чистая поверхность приготавливалась удалением оксидов в растворе HCl в изопропиловом спирте в атмосфере сухого азота, с последующим переносом в вакуумную установку без контакта с воздухом и прогревом в вакууме. Состояние ОЭС достигалось нанесением на поверхность цезия и кислорода. Затем производился переход от ОЭС к ПЭС и деградация квантового выхода фотоэмиссии путем нанесения избыточного кислорода или цезия. В процессе кислородной деградации в субзонной области спектров квантового выхода наблюдалась небольшая ступенька при энергии фотонов $\hbar\omega = 1,365$ эВ. При цезиевой деградации данная ступенька с увеличением дозы цезия превращалась в отчетливый пик (рис. 1).

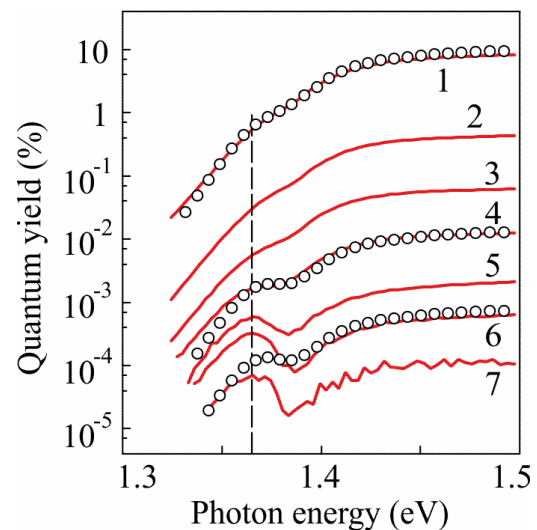


Рис.1. Спектры квантового выхода фотоэмиссии при нанесении избыточного цезия на поверхность $p\text{-GaAs}(\text{Cs},\text{O})$. Увеличение номера спектра соответствует увеличению дозы цезия. Кружками показаны расчетные спектры с параметрами: (1) $S_d = 0.2$, $R_d = 0.95$; (4) $S_d = 0.75$, $R_d = 1$; (7) $S_d = R_d = 1$.

Ранее в геометрии на отражение наблюдался только монотонный рост квантового выхода фотоэмиссии при увеличении энергии фотонов, вызванный усилением поглощения за счет межзонных переходов [1]. Мы полагаем, что наблюдаемые субзонные особенности в спектрах связаны с эффектом пленения слабопоглощаемого излучения. Благодаря диффузному рассеянию на матовой задней грани и полному внутреннему отражению на передней грани, такое излучение может многократно проходить через структуру, порождая высокий квантовый выход фотоэмиссии. Увеличение поглощения в структуре в определенном спектральном диапазоне приводит к уменьшению числа проходов, и, как следствие, к замедлению роста или падению квантового выхода; при этом в спектрах возникает ступенька или пик, соответственно.

Для проверки данной гипотезы, мы отполировали заднюю грань образца и повторно измерили спектры квантового выхода в процессе цезиевой деградации. В этих спектрах отсутствовали какие-либо субзонные особенности, что подтверждает предложенную гипотезу. Мы также провели численный расчёт спектров с учетом многократных проходов света через структуру, в модели, учитывающей смешанный (диффузно-зеркальный) характер отражения света от задней грани. Параметрами расчета при этом были доля диффузной компоненты отражения S_d и коэффициент отражения диффузной компоненты R_d . Диффузная компонента распределялась по углам по закону Ламберта, т.е. пропорционально косинусу угла отражения.

Сравнение расчета с экспериментом показано на рис. 1. Видно, что спектры со ступенькой (1) и небольшим пиком (4) хорошо описываются расчетом. Спектр (6) с большой амплитудой пика, соответствующий большим дозам цезия, не описывается расчетом даже с полным отражением света от задней грани. Ясно также, что нанесение цезия на переднюю грань структуры не может влиять на параметры отражения света от задней грани. Таким образом, расчет подтверждает возможность формирования субзонных особенностей (ступеньки и пика) в спектрах квантового выхода фотоэмиссии из $p\text{-GaAs}(\text{Cs},\text{O})$, однако эволюция пика с увеличением дозы избыточного цезия определяется некоторым дополнительным механизмом, природа которого еще не выяснена.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 20-02-00355).

[1] Bell R.L., *Negative Electron Affinity Devices*, Clarendon, Oxford (1973).

[2] Protopopov D.E. et al., *J. Phys.: Conf. Ser.*, **1695**, 012105 (2020).

Влияние ловушек на фотоэлектрические характеристики детекторов на основе тонких пленок оксида галлия

Цымбалов А.В., Калыгина В.М., Олейник В.Л., Кушнарёв Б.О.

Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050, Томск, пр. Ленина, 26

Приборы на основе широкозонных полупроводников чувствительны к УФ-излучению. Устройства должны иметь высокую внешнюю квантовую эффективность (EQE), низкие темновые токи (I_D), малое время отклика τ_r и время восстановления τ_d . В большинстве опубликованных к настоящему времени работ [1] отмечается, что детекторы ультрафиолетового излучения на основе пленок оксида галлия обладают достаточно быстрым откликом, не превышающим секунды. Однако времена восстановления, как правило, в несколько раз и даже на порядок превышают τ_r [2]. Большие значения τ_d в ряде случаев объясняются наличием избыточной фотопроводимости. Эта избыточная фотопроводимость называется «остаточной фотопроводимостью» и связана с наличием ловушек в запрещенной зоне и самозахваченными дырками, не дающих вклада в проводимость Ga_2O_3 .

В данной работе рассматриваются детекторы УФ излучения на основе пленок оксида галлия, полученные высокочастотным магнетронным распылением на сапфировую подложку. Полученные структуры отжигались в аргоне в течение 30 минут при 900 °С.

Проведено экспериментальное исследование влияния белого и ультрафиолетового излучений на детекторы. Устройства оказываются чувствительны к воздействию коротковолнового излучения длиной волны $\lambda = 254$ нм, и ток увеличивается на 5 порядков. После выключения УФ излучения в устройствах наблюдаются остаточная проводимость, которая существует больше минуты (рис. 1). Облучение белым светом с освещенностью более 500 лк, тоже приводит к появлению фототока I_{LW} . Однако, несмотря на более высокую интенсивность белого света по сравнению с УФ, значения I_{LW} лишь на один-два порядка превышают исходные темновые токи. Было обнаружено, что предварительное воздействие белым светом перед освещением УФ излучением приводит к тому, что работа детекторов становится более стабильной в режиме непрерывного действия коротковолнового излучения. Это объясняется перезарядкой локальных уровней в запрещенной зоне оксида галлия.

Проведенные исследования позволили подтвердить наличие остаточной

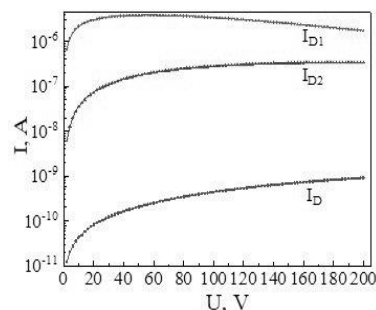


Рис. 1. Темновые ВАХ образца: I_D — начальные значения темнового тока; I_{D1} и I_{D2} — сразу и через 30 секунд после выключения УФ.

проводимости в пленках оксида галлия, обусловленной ловушками, как в объеме пленки, так и на границе металл-Ga₂O₃. Обнаружен метод, снижения времени восстановления детекторов и уменьшения остаточного тока после отключения УФ излучения.

[1] Wang X. et al., *Opt. Mater. Express.*, **8**, 2918 (2018).

[2] Oshima T. et al., *Appl. Phys. Express.*, **1**, 011201 (2008).

Структура тонких пленок GeO стехиометрического состава

Чжан Фань^{1,2}, Азаров И.А.^{1,2}, Астанкова К.Н.¹, Просви́рин И.П.³,
Володин В.А.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

³ ИК СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 5

Оксиды германия (GeO_2 и GeO_x) могут быть перспективны для создания мемристивной памяти благодаря высокой плотности дефектов (вакансий кислорода), которые являются ловушками для носителей заряда [1]. Также германиевые включения в метастабильных пленках GeO_x могут выступать как глубокие ловушки для электронов и дырок [2]. Чтобы до конца понять природу мемристивного эффекта, необходимо знать структуру монооксида германия и уметь управлять глубиной его диспропорционирования: $2\text{GeO} \rightarrow \text{GeO}_2 + \text{Ge}$.

В работе проведены исследования атомной структуры тонких пленок GeO стехиометрического состава с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Данные пленки получены методом термического испарения в вакууме композитных слоев GeO_2 , содержащих нанокластеры Ge, и осаждения паров GeO на холодную подложку [3]. По данным электронной микроскопии плёнка GeO толщиной 10 нм имела аморфную структуру и не содержала кластеры Ge (рис. 1).

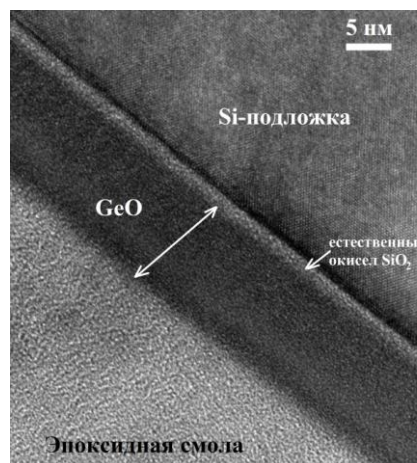


Рис.1. ПЭМ-изображение пленки GeO на подложке Si(100).

На рис. 2 представлен РФЭС-спектр 3d-электронов германия в свеженанесённой плёнке GeO (толщиной 10 нм) на подложке Si. С помощью программы Fityk 0.9.8 было проведено разложение региона Ge3d на отдельные спектральные компоненты и определен вклад каждого из состояний германия в общий спектр. Доля германия в состоянии GeGe_4 (чистый Ge) составила 4% (максимум при энергии $29,4 \pm 0,1$ эВ). Значение энергии связи наиболее интенсивного пика – $31,2 \pm 0,1$ эВ и характерно для германия в состоянии GeO_2Ge_2 (стехиометрический оксид GeO) с долей 54%. Кроме двух указанных пиков, в РФЭС-спектре имеется максимум при $33 \pm 0,1$ эВ, который можно приписать германию, связанному с четырьмя атомами кислорода в составе GeO_2 (тетраэдр GeO_4) с долей 7%. Также в спектре выявлены компоненты, отвечающие промежуточным оксидам: тетраэдры GeOGe_3 (13%) и GeO_3Ge (22%) с максимумами при $30,2 \pm 0,1$ эВ и $32 \pm 0,1$ эВ, соответственно [4]. Ширина всех пиков на полувысоте составила 1,4 эВ.

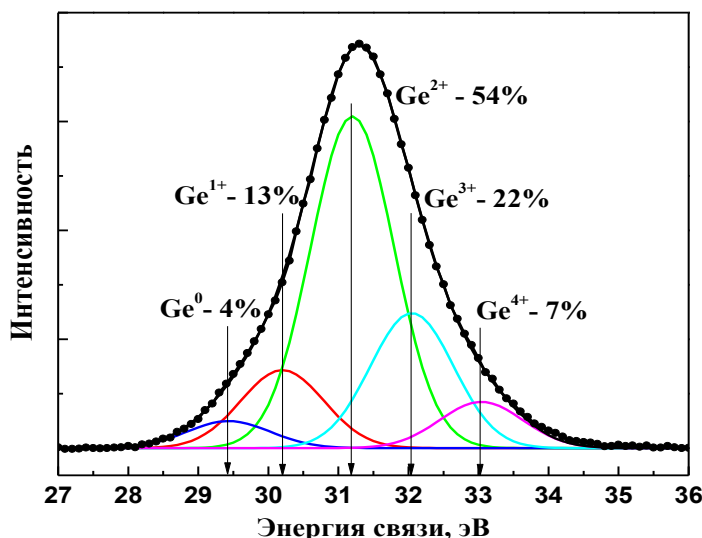


Рис.2. РФЭ-спектр атомного Ge 3d-уровня в свежеприготовленной плёнке GeO (10 нм)/Si. Показана деконволюция спектра на отдельные спектральные компоненты.

Для определения состава свежеприготовленных плёнок GeO_x использовалась формула из работы [5]:

$$x = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sum_{v=1}^4 v W_v}{\sum_{v=0}^4 W_v},$$

где $v = 0, 1, 2, 3, 4$, а W_v – вероятность распределения (доля) тетраэдров в плёнке (определяется из спектра РФЭС). В нашем случае x составил величину 1,07, из чего можно сделать вывод, что полученные плёнки GeO высокостехиометричны.

Экспериментальные данные свидетельствует в пользу того, что структуру аморфного монооксида германия стехиометрического состава можно описать моделью неупорядоченной случайной сетки (random bonding (RB) model) [6]. В рамках данной модели структура GeO состоит из сочлененных тетраэдров типа GeGe_4 , GeOGe_3 , GeO_2Ge_2 , GeO_3Ge , GeO_4 , при этом атомы кислорода случайным образом распределены по объему пленки.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Высокие технологии и аналитика наносистем» НГУ.

- [1] Shaposhnikov A.V. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **100**, 243506 (2012).
- [2] Volodin V.A. et al., *Phys. Status Solidi RRL*, **14**, 2000165 (2020).
- [3] Астанкова К.Н. и др., *ФТП*, **54**(12), 1296 (2020).
- [4] Prabhakaran K. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **76**(16), 2244 (2000).
- [5] Новиков Ю.Н. и др., *ФТТ*, **54**(3), 465 (2012).
- [6] Гриценко В.А., *УФН*, **178**(7), 727 (2008).

Влияние ионной имплантации на газочувствительные свойства $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃

Яковлев Н.Н., Алмаев А.В.

*Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050,
Томск, пр. Ленина, 26*

$\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃ являются сверх широкозонным полупроводниками n-типа проводимости из-за наличия вакансий кислорода и других более мелких собственных примесей. Ширина запрещенной зоны $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃ не превышает 4,9 эВ и этот полупроводник Ga₂O₃ считается вторым по стабильности после β -фазы и сохраняет свои свойства вплоть до $T = 750$ °C. На основе этого материала возможно разработать транзисторы с высокой подвижностью (HEMT), диоды с барьером Шоттки и солнечно-слепых УФ детекторов [1-2].

В качестве легирующих примесей чаще всего используют: Sn, Ge, Mg, Si, Zn. Атомы Sn, Si и Ge в $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃ являются мелкими донорами с энергией активации до 50 мэВ. Введение примеси Si в образцы Ga₂O₃ имеет ряд преимуществ. Энергия активации примесей Sn и Si, наиболее активно используемых в $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃, не превышает 50 мэВ [3]. Атомные радиусы Ga и Si отличаются на 3.6 % [69-70], что обеспечивает лучшую встраиваемость атомов Si в решетку $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃. Подвижность электронов μ_n $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃:Si выше, чем μ_n $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃:Sn. Кроме этого, $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃, легированная Si, в отличие от образцов, легированных Sn, демонстрирует стабильность электрофизических характеристик при высоких температурах, соответствующих 500 °C [4]. Процент активации имплантированных ионов Si⁺ > 60 %. Кроме того, в $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃ сложно управлять концентрацией примеси при росте структур, получаются либо структуры без примеси, либо сильно легированные. Ионная имплантация позволяет это исправить.

Воздействие H₂ на структуры Pt/ $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃/Pt приводит к увеличению их тока независимо от дозы облучения D, температуры T и проведения отжига (рисунки 1). Из проведенных исследований следует, что с точки зрения высокого отклика, быстродействия и широкого интервала рабочих температур целесообразно исследовать структуры на основе слоев $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃, подвергнутых облучению Si⁺ при $D = 8 \cdot 10^{14}$ ион/см², $8 \cdot 10^{15}$ ион/см², без последующего отжига и $8 \cdot 10^{15}$ ион/см², после отжига. Отклики S_{MAX} и температуры максимального отклика T_{MAX} всех исследуемых образцов представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Дозовая зависимость максимального отклика и температуры, соответствующей максимальному отклику

D , ион/см ²		0	$8 \cdot 10^{12}$	$8 \cdot 10^{13}$	$8 \cdot 10^{14}$	$8 \cdot 10^{15}$
S_{MAX} , % / T_{MAX} , °C	Без отжига	236,1/200	61,8/150	58,6/25	1214,9/200	777,8/150
	После отжига	129,9/400	41,8/350	134,1/100	186,7/350	1172,3/100

Механизм чувствительности исследуемых структур $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃ и облученных Si⁺ заключается в образование дипольного слоя на границе раздела Pt/ $\epsilon(\kappa)$ -Ga₂O₃ в результате диффузии атомов водорода через Pt. В силу высокой проводимости полученных образцов хемосорбция практически не дает вклада в чувствительность сенсоров. В результате отклики наблюдаются только на водородсодержащие газы CH₄, NH₃ и CO, так как он тоже обладает высокой скоростью диффузии через Pt.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20 79-10043).

- [1] Leone S. et al., *J. Cryst. Growth*, **534**, 125511 (2020).
- [2] Liu Z. et al., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **53**, 295109 (2020).
- [3] Villora E.G. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **92**, 202120 (2008).
- [4] Uchida T. et al., *MRS Advances*, **3**, 171 (2018).

Авторский указатель

Азаров И.А.	77	Ковзик В.М.	38
Аксенов М.С.	28	Кожухов А.С.	24
Алмаев А.В.	49, 79	Колосовский Д.А.	40, 42
Астанкова К.Н.	77	Константинов В.О.	53
Баженов А.О.	26	Копьев В.В.	36
Бакаров А.К.	65	Косинова М.Л.	15
Баранов Е.А.	53	Краснова И.А.	44
Володин В.А.	61, 77	Крупин А.Ю.	61
Волошин Б.В.	55	Кудрич С.В.	46
Воробьев Ю.В.	53	Кукенов О.И.	48, 68
Гаврилова Т.А.	42	Кунцевич А.Ю.	26
Гензе И.Ю.	28	Курусь Н.Н.	34, 63
Голяшов В.А.	42, 59, 69	Кушнарёв Б.О.	36, 49, 75
Горшков Д.В.	44	Латышев А.В.	18, 24, 34, 63
Гуляев Д.В.	9	Литвиненко М.А.	51
Гутаковский А.К.	22	Лунев Н.А.	53
Двуреченский А.В.	61	Лысенко Н.И.	55
Демьяненко М.А.	11	Марин Д.В.	44
Диб Х.	71	Махмудиан М.М.	57
Дмитриев Д.В.	28, 40, 42	Микаева А.С.	59
Дураков Д.Е.	29	Милехин А.Г.	34, 63
Жачук Р.А.	22	Миронов А.Ю.	29, 63
Жданов Е.Ю.	65	Муратов В.И.	61
Жилицкий В.Е.	30	Мутилин С.В.	55
Журавлев К.С.	40, 42	Настовьяк А.Г.	51
Залялов Т.М.	32	Наумова О.В.	17
Замчий А.О.	53	Николаев В.И.	49
Захожев К.Е.	34	Олейник В.Л.	36, 75
Зиновьев В.А.	61	Перевалов Т.В.	38
Зиновьева А.Ф.	61	Петров А.С.	18
Исламов Д.Р.	13, 32, 38	Погосов А.Г.	65
Ищенко Д.В.	26, 59	Пономарев С.А.	18, 34, 40, 63
Кавеев А.К.	59	Похабов Д.А.	65
Калыгина В.М.	75	Просвирин И.П.	77
Кириенко В.В.	26	Протопопов Д.Е.	73
Киселева О.С.	36	Рогило Д.И.	18, 24, 34, 63
Кичай В.Н.	55	Родякина Е.Е.	18, 24
Климов А.Э.	59	Сабина И.В.	44
Ковалев В.М.	67	Сарыпов Д.И.	65

Селезнев В.А.	55	Хомякова К.И.	71
Семенова О.И.	20	Хорошилов В.С.	73
Сидоров Г.Ю.	44	Цымбалов А.В.	75
Ситников С.В.	18, 24	Черников Е.В.	49
Снегирев А.В.	67	Чжан Фань	77
Соколов А.С.	48, 68	Чистохин И.Б.	28
Соловова Н.Ю.	69	Шамирзаев Т.С.	30
Степина Н.П.	26	Шварц Н.Л.	46
Супрун С.П.	59	Шумилин А.В.	26
Тарасов А.С.	59	Щеглов Д.В.	18, 24, 34, 63
Терещенко О.Е.	26, 59, 69	Энтин М.В.	57, 67
Торопов А.И.	40, 42	Яковлев Н.Н.	79
Федина Л.И.	18, 22, 24		