

УДК: 539.5

DOI: 10.30546/JNAA.2024.26.1.6.

УЛУЧШЕНИЕ СТРУКТУРЫ ДЕФОРМИРОВАННЫХ НАНОСЛОЕВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ $A^{IV}B^{VI}$: АНАЛИЗ НОВОЙ МОДЕЛИ

¹Пашаев А.М., ²Даварашвили О.И., ²Енукашвили М.И., ^{2,3}Ахвледiani З.Г.,
²Бычкова Л.П., ²Гуляев Р.Г., ^{2,4}Дзаганя М.А., ⁵Зломанов В.П.

¹Национальная Академия Авиации Азербайджана, ²Тбилисский Государственный
Университет имени Джавахишвили, ³Институт Физики им. Э. Андроликашвили,

⁴Институт Физической и Органической химии им. П. Меликишвили, ⁵Московский
Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

В работе анализируется новая модель, согласно которой в эпитаксиальных нанослоях полупроводников $A^{IV}B^{VI}$, выращенных на диэлектрических подложках, достигается высокая степень совершенства при их максимальной деформации. Выявлено различное влияние контраста упругости и критических толщин на структуру слоев. Согласно представляемой модели существующий контраст упругости, например, между слоем PbSe и подложкой KCl, приводит к смещению сетки дислокаций в подложку и понижению доли, проникающих из подложки в слой дислокаций. Рассмотрена возможность устранения нескольких критических толщин в слоях путем удаления или блокирования центров неоднородностей в их кристаллической решетке. Проведен детальный анализ гетероструктур по характеру релаксации напряжений: выделено два случая, когда напряжения полностью снимаются и, наоборот, поддерживается деформированное состояние слоев. Высокая подвижность носителей заряда и форма контура рентгено-дифракционной линии подтверждают улучшение степени совершенства нанослоев полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ при деформациях, достигающих 0,015 и в целом, рассматриваемую модель.

Ключевые слова: новая модель, деформация нанослоев, дислокации, контраст упругости, критическая толщина, структура нанослоев.

Улучшение структуры деформированных нанослоев возможно при анализе природы формирования деформаций и дефектов в слоях. Деформации в полупроводниковых гетероструктурах имеют разное происхождение [1,2], а также различное влияние и назначение [3,4]. В частности, они возникают на гетерогранице и распространяются в слой и подложку при сопряжении материалов с разными параметрами кристаллических решеток или из-за взаимной диффузии компонентов на гетерогранице, когда напряжения могут достигать предела упругости составляющих гетеропару материалов. В первом случае возникающие деформации-напряжения в растущем слое могут привести к существенному изменению энергетического спектра - ширины запрещенной зоны полупроводников [5]. При параллельном легировании примесями, повышающими модуль упругости, и уровни которых смещаются в запрещенную зону, осуществляется компенсация концентрации носителей

заряда. При этом в соединениях и твердых растворах полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ возможен переход в диэлектрическое состояние [6]. Во втором случае деформации - напряжения возникают из-за появляющегося различия в параметрах решетки вдоль переходного слоя при взаимной диффузии компонентов в процессе роста слоев в изначально изопериодной структуре, например, PbSe - PbSnSeTe [7]. Возможная релаксация напряжений в этом случае приводит к повышению дефектности переходного слоя к понижению времени жизни носителей заряда и в лазерах, например, соответственно к повышению порогового тока.

В обоих случаях деформации-напряжения существенным образом зависят от толщины слоя или переходной области. С ростом их толщины нарастает упругая энергия, определяемая упругими постоянными материалов слоев, деформацией и толщиной. При достижении порогового значения упругая энергия частично или полностью передается дефектам - существующим дислокациям или другим неоднородностям структуры, являющихся локациями для зарождения новых дислокаций. Под неоднородностями в слое в первую очередь имеется в виду смещение атомов соединения со своих позиций в решетке или размещение в ней неконтролируемых примесей, а также отсутствие атомной гладкости на его поверхности и гетерогранице. Из дефектов, свойственных особенно полупроводникам с широкой областью гомогенности, к каким относятся и полупроводники $A^{IV}B^{VI}$, следует отметить нестехиометрические дефекты, например, вакансии свинца или селена в селениде свинца. Эти дефекты меньше способствуют размножению дислокаций, а большей частью влияют на их торможение, размещаясь в их ядрах. К числу других дефектов структуры следует отнести также границы субзерен и блоков. При соотношении размера субзерен и толщины слоя > 0.5 разоориентация между субзернами $< 10^{-4}$ мин (для зарождения дислокаций невелика). Что касается дислокаций, возникающих на границе блоков, они тормозятся указанными выше вакансиями. Минимальная энергия при этом затрачивается на создание дислокаций, которые слабо связаны на центрах неоднородностей в объеме слоя и начинают создавать сетку дислокаций. В условиях деформаций неоднородные атомы, смещаясь неодинаково с основными атомами, создают дополнительные локальные напряжения и возможность зарождения новых дислокаций. В отличие от ростовых дислокаций, когда важны термоупругие напряжения, при деформациях возрастает роль дислокаций, возникающих на неоднородностях. Толщина слоев, при которой образуется начальная сетка дислокаций, называется критической толщиной. Она определяется параметрами решетки, сопрягающихся на гетерогранице материалов и ориентацией подложки и поэтому относится к фундаментальному свойству данной гетеропары [8]. Для слоев PbSe, выращенных, например, на подложке KCl, она составляет 2 нм.

В работе выстраивается модель, в которой учитываются такие обстоятельства: а) возможность существования нескольких критических толщин, когда поэтапно энергия деформации передается дислокациям, образующим сетку дислокаций; б) упругий контраст между нанослоем полупроводника $A^{IV}B^{VI}$ и диэлектрической подложкой, способный привести к смещению сетки дислокаций в подложку и значительно уменьшить долю проникающих из подложки в слой дислокаций, и тем самым создать возможность значительного улучшения структуры слоя.

Новые критические толщины возникают при зарождении или высвобождении дислокаций на различных неоднородностях (дефектах и дефектных состояниях), часть из которых появляется при деформации. Поэтому в полную энергию напряженной

гетероструктуры входит энергия взаимодействия дислокаций с дефектами слоя. Полная энергия включает также энергию деформированного состояния слоя и энергию самих дислокаций (при этом большая часть дислокаций образует сетку и их можно отнести к дислокациям несоответствия). Эта энергия меняется по толщине гетероструктуры и сетка дислокаций несоответствия образуется в ее минимуме. Если упругий контраст между слоем и подложкой отсутствует, то сетка дислокаций несоответствия располагается на самой гетерогранице, когда в случае его появления в области с меньшим модулем сдвига. Именно из-за связи обоих представленных факторов (критическая толщина и упругий контраст) с энергетическим балансом, они рассматриваются в рамках единой модели.

По мере нарастания толщины слоев или расширения переходной области возросшая упругая энергия может приводить к зарождению новых дислокаций при преодолении соответственно большего энергетического барьера. Тогда это можно отнести к поэтапному превышению новой, последующей критической толщины. Т.е. для данной толщины слоя остается доля ещё непереданной энергии дефектам и можно считать, что для каждой толщины слоя существует конечная остаточная деформация-напряжение и, как показали наши исследования, они могут сохраняться в слое в течение длительного времени - не менее трех лет. Согласно измеренным значениям остаточных деформаций (по тангенциальному параметру решетки слоя) в слоях PbSe, выращенных на подложках KCl с толщинами 20, 50, 70 нм, они составляют 0,015, 0,010, 0,008 соответственно [9]. На рисунке 1 представлена зависимость рассогласования - остаточной деформации от толщины слоев PbSe, выращенных при скоростях роста < 2 нм/с.

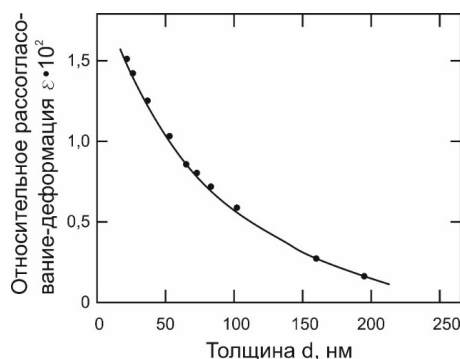


Рисунок 1. Зависимость рассогласования-деформации в слоях PbSe, выращенных на подложках KCl, от их толщины

Отметим, что несмотря на возможность существования нескольких критических толщин, слои с толщинами выше первой критической толщины относят условно к сверхкритическим. Важно учесть, что релаксация напряжений происходит уже на уровне нанотолщины слоев и поэтому деформированные слои целесообразно исследовать в пределах толщин < 100 нм. От начальной сетки дислокаций несоответствия, если она размещена в слое или на гетерогранице, в объем слоя проникают дислокации и вместе с дислокациями, проникающими из подложки и создаваемыми на неоднородностях, в напряженном слое они существенно понижают времена рассеяния и рекомбинации носителей заряда. Путем формирования различных многослойных структур можно сместить

различных многослойных структур можно сместить дислокации к краям слоев. Другим способом уменьшения плотности дислокаций при росте нанослоев может служить использование тонких подложек-мембран с уменьшенным значением модуля упругости. Используя условия контраста упругости слоя и подложки [10] при росте, например, PbSe на тонкой подложке KCl возможно значительно сместить сетку дислокаций в подложку или вовсе создать структуру без сетки дислокаций несоответствия при наименьших толщинах слоя и мембраны. Уменьшение толщины подложки при нанотолщине слоев и усиление упругого контраста влияют в одном направлении: приводят к перераспределению деформаций между слоем и подложкой и смещению сетки дислокаций несоответствия в подложку. Действительно, в гетероструктурах PbSe/KCl осуществляется значительный упругий контраст: модули сдвига слоя PbSe и подложки KCl равны соответственно 27,6 и 6,3 GPa, а их соотношение составляет $\sim 4,4$. Это приводит не только к смещению сетки дислокаций в подложку, но и к ограничению доли, проникающих в слой дислокаций и сохранению поверхности слоя гладкой. В условиях смещения сетки дислокаций несоответствия в подложку с повышенной плотностью дислокаций они аккумулируются на самой сетке. Значения модулей сдвига определялись методом внутреннего трения [11] и брались для наиболее совершенных образцов.

Что касается неоднородностей различных типов в объеме слоя подобно человеческому организму, когда принимаемые лекарства через кровь достигают органа, подлежащего лечению, так и специальные примеси вводятся в кристалл или слой активно взаимодействуя и соединяясь с неоднородными атомами, или вовсе противодействуя их появлению, они нейтрализуют возможность создания локальных напряжений, приводящих к зарождению дислокаций. Число неоднородностей в слое может быть существенно уменьшено также путем понижения скорости роста и последующего отжига. Это весьма целесообразно и как видно из рисунка 2 из-за роста числа неоднородностей при повышении скорости роста слоев растет и полуширина рентгено-дифракционной линии.

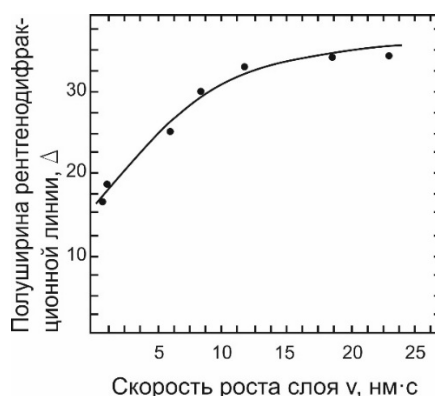


Рисунок 2. Зависимость полуширины рентгено-дифракционной линии от скорости роста слоев

При утоньшении подложки влияние в целом неоднородностей в слое ослабевает, происходит перераспределение деформаций между слоем и подложкой. Энергия деформации слоя уменьшается, соответственно и зарождение дислокации - существенно растет критическая толщина.

По аналогии со структурами Si-Ge/Si [8,12] можно оценить, как при различных толщинах слоев и подложек может максимально меняться соотношение деформаций в слое и мембране. Перераспределение деформаций между слоем и мембраной, как отмечалось, есть следствие использования тонких подложек. Рассмотрены случаи двух толщин слоев 50 и 15нм и толщин мембран 25 и 15нм и перераспределения деформации между ними. Как показывают расчеты, для толщины слоя 50нм и мембраны 25нм деформация в слое уменьшается приблизительно в 3 раза. При толщине мембраны 15нм деформация в слое уменьшается уже в 4 раза. Для толщин слоя 15нм и мембран 25 и 15нм деформации в слое понижаются в 1,5-2 раза. Запас высоких деформаций в слоях достигается дальнейшим уменьшением их толщины до уровня <10нм. Такие слои могут использоваться в ИК фотоприемниках с многократным проходом излучения. В случае использования однопроходных для ИК излучения слоев с толщинами 50-70нм компромисс между максимальной деформацией и степенью совершенства слоев достигается при использовании вместо KCl подложек BaSe с большим параметром кристаллической решетки ($a_{KCl}=6,290\text{Å}$, $a_{BaSe}=6,600\text{Å}$). На рисунке 3 представлена схема энергетического смещения краев зон и примесных уровней In и Cr в напряженных слоях $A^{IV}B^{VI}$, выращенных на подложках KCl или BaSe.

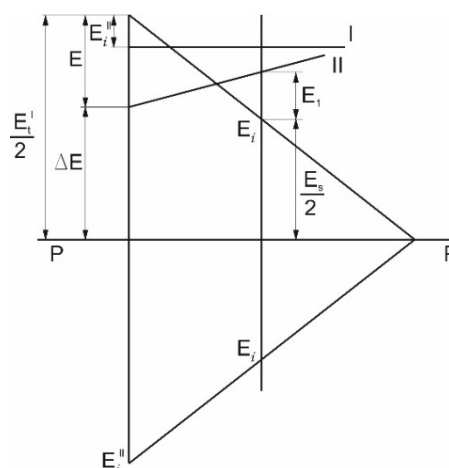


Рисунок 3. Энергетическая схема смещения краев зон и примесных уровней Cr (I) и In (II) в слоях, выращенных при «отрицательном» давлении на подложках KCl или BaSe

В целом путем оптимального подбора слоев и подложек по параметрам кристаллической решетки, упругому контрасту и толщинам можно оптимизировать деформации в слоях. Отметим, что скорость роста слоев методом молекулярной эпитаксии с «горячей стенкой» при смене критических толщин может оставаться неизменной и определяться в основном расстоянием открытого края кварцевой ампулы с источником эпитаксии до подложки, т.е. скоростью доставки испаряющихся молекул к подложке [13]. С другой стороны, исследованием полуширин рентгена-дифракционных линий подтверждает, что не происходит смены критических толщин. В общем случае при уменьшении энергии деформации в процессе ее передачи дислокациям в слоях понижается сама деформация, т.е. тангенциальный параметр решетки. В результате даже в нанослоях при нескольких критических толщинах по толщине слоев возникают области с различными параметрами кристаллических решеток. Т.е. по мере прохождения последующих критических толщин в слое происходит релаксация напряжений. Энергия деформации-напряжения поэтапно

передается на зарождение новых дислокаций и их освобождение от центров неоднородностей, изменяя таким образом их плотность в слое. Хотя ширина рентгено-дифракционной линии с утоньшением слоев возрастает из-за нарастающих остаточных напряжений, она оказалась такой же, как и для слоев кремния с той же толщиной, выращенных на сапфире и составляла $(8-10)'$ при плоскости отражения (200) [14].

В напряженных нанослоях полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ методом рентгеновской дифракции помимо деформаций изучались размеры субзерен: в частности, при толщине слоя PbSe, например, 70 нм они составили 45 нм. Четырехзондовым методом определялись концентрация носителей заряда $-(1-6) \times 10^{18} \text{см}^{-3}$ и их подвижность, которая достигала нескольких сотен $\text{В}/\text{см}^2 \cdot \text{с}$. Плотность дислокаций в слоях PbSe (подложка KCl) была на 3-4 порядка меньше, чем в подложке. Спектры оптического пропускания характеризовались резким краем. При концентрации носителей заряда $>2 \times 10^{18} \text{см}^{-3}$ спектры смещались из-за вырождения. Обнаруженная с уменьшением толщины слоев тетрагональная фаза подтверждает наличие в них высоких деформаций-напряжений [15,16].

Как вытекает из проведенного исследования, для толщины подложек $>20-40 \text{нм}$ (например, KCl при росте слоев PbSe) оба представленных фактора в модели [17] влияют на структуру слоев, но по-разному. При возрастании контраста упругости и смещении сетки дислокаций в подложку значительно уменьшается доля проникающих в слой дислокаций. Наоборот, если критических толщин несколько (выявляются по характеру рентгено-дифракционной линии), то плотность дислокаций в слое возрастает, и это связано с различными центрами неоднородностей. В этом случае введение в слой PbSe, например, соединения Ge или Sn с Te или с Po можно сохранить структуру валентных электронов, оказать противодействие размещению атомов свинца или селена в подрешетках друг друга - это, с одной стороны. С другой стороны, если введенные атомы сами будут размещаться в подрешетках свинца и селена, то образование локальных деформаций будет намного меньше.

Введение указанных соединений в слой PbSe с учетом их особенностей позволяет уменьшить эффективные массы носителей заряда и увеличить длины их свободного пробега (времена рассеяния), что приведёт к возрастанию подвижности. Влияние этих соединений заметно и при деформации растяжения слоев: подвижность носителей и в этом случае возрастает по сравнению с ненапряженным слоем без введения указанных соединений.

В случае же толщины подложек $<20-40 \text{нм}$ часть деформаций слоя передается подложке и оптимизация по деформациям и структуре слоев достигается путем значительного уменьшения их толщины.

Таким образом, по характеру релаксации напряжений гетероструктуры на основе полупроводников представляют особый интерес в двух случаях. В первом - регулирование физических свойств слоев осуществляется путем изменения состава твердых растворов [18] и совершенство слоев достигается использованием «мягких» подложек (с меньшим модулем сдвига, чем в слое). При этом уменьшение толщины подложки оказывает тот же эффект, что и уменьшение модуля сдвига: если возрастает отношение толщин слоя и подложки, деформации больше смещаются в подложку. С целью полного снятия напряжения, например, слоя кремний-германий «мягкую» подложку из пористого кремния подвергают предварительной дополнительной деформации.

Во втором случае, наоборот, требуется напряженное-деформированное состояние слоя, например, селенида свинца на подложке хлористого калия. Свойства слоев при этом меняются

при изменении степени деформации слоя. Рассогласование в этом случае вообще достигается без предварительного напряжения подложки, хотя иногда оно используется для тонкой подстройки деформации слоя. Для сохранения деформированного состояния слоя соотношение толщин слоя и подложки будет обратным по сравнению с первым случаем, меньше единицы. Совершенная структура слоя получается также при упругом контрасте между слоем и подложкой (сетка дислокаций и в этом случае смещается в подложку, особенно при введении в селенид свинца серы, усиливающей упругий контраст) и при введении в слой соединений германия или олова с более тяжелым элементом, чем селен для противодействия появлению центров неоднородностей. В результате плотность дислокаций в слое (с учетом проникающих из подложки) устанавливается на несколько порядков меньше, чем в подложке. Подвижность носителей заряда в деформированном слое будет выше, чем в ненапряженном слое.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, R.G. GuIyaev, V.P. Zlomanov. Unrelaxed State in Epitaxial Heterostructures based on Lead Selenide. *Jornal of Modern Physics*, 2012, 3, 6, 502-510.
2. А.М. Пашаев, О.И. Даварашвили, Г.Ш. Дарсавелидзе, Л.П. Бычкова, М.И. Енукашвили, М.А. Дзаганя, В.П. Зломанов. Диффузионное рассогласование в полупроводниковых гетероструктурах: условие возникновения и пути преодоления его негативного воздействия на излучательные приборы. *Известия НАН Грузии*, 2009, 6, 4, 331-336.
3. Пашаев А.М., Даварашвили О.И., Алиев В.А., Енукашвили М.И., Зломанов В.П. Закономерная связь между одновременной стабилизацией уровня Ферми и преобразованием упругих свойств в узкозонных полупроводниках IV-VI с их трансформацией в диэлектрическое состояние. Научное открытие, диплом №340. Сборник кратких описаний научных открытий, научных гипотез. Международная Академия и Ассоциация авторов научных открытий. Москва, 2008.
4. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, M.A. Dzagania. On the Possibilities for Improving the Efficiency of Radiation in Heterostructures Based on IV-VI Semiconductors. *IOP Conf.Series: Materials Science and Engineering* 49, (2013) 012029, 1-4.
5. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, Z.G. Akhvlediani, M.J. Erukashvili, L.P. Bychkova, M.A. Dzagania. Study of the Forbidden Gap Width of Strained Epitaxial Lead Selenide Layers. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2012, 2, 142-150.
6. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, V.P. Zlomanov. Modeling of the dielectric state in PbSnSe and PbSnTe nanolayers with high concentration of nonstoichiometric defects. *Book of Abstracts of the 17th International Conference on Radiation Effects in Insulators*. Helsinki, 2013, PB-16.
7. А.М. Пашаев, О.И. Даварашвили, М.И. Енукашвили, В.А. Алиев, В.П. Зломанов. Проблемы рассогласования в гетероструктурах на основе полупроводников A^{IV}B^{VI}. Труды Международной конференции «Научно-технический прогресс и современная авиация». Баку, 2009, 3, 17- 19.
8. Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, С.И. Чикичев. Кремний-германиевые

эпитаксиальные пленки: физические основы получения напряженных и полностью релаксированных гетероструктур, УФН, 2001, 171, 7, 689-715.

9. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, R.G. GuIyaev, V.P. Zlomanov. Stretching strain - effective “negative” pressure in lead selenide nanolayers. ПЕИТ, 2014, 3, 11, 318-323.
10. В.М. Юрченко, Э.П. Фельдман, Л.Н. Гумен, А.М. Кроник, А.Е. Зюбанов. Формирование сетки дислокаций несоответствия вблизи интерфейса пленка - подложка с учетом упругого контраста. Конденсированные среды и межфазные границы, 2008, 10, 3, 277-281.
11. АМ. Пашаев, О.И. Даварашвили, В.А. Алиев, Г.Ш. арсавелидзе, М.И. Енукашвили, В.П. Зломанов. Экспериментальное моделирование упругих свойств бинарных соединений $A^{IV}B^{VI}$. Вести Академии Наук Азербайджана, 2008, 5, 96-100.
12. T.David, I.Agua, K.Liu, L.Farve, A.Ronda, M.Abbarchi, I.Claude, I.Berbezier. New strategies for producing defect free Si-Ge strained nanolayers. Scientific Reports, 2018, 8, 2, 4-14.
13. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, R.G. Gulyaev, M.A. Dzagania, V.P.Zlomanov. Investigation of strained lead selenide layers. Global Journal of Engineering Science and Research Management (GJESRM), 2016, 3(6), 56-64.
14. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, Z.G. Akhvlediani, M.I. Erukashvili, R.G. Gulyaev, V.P. Zlomanov. The Structure of Thin Epitaxial Layers of Lead Selenide. Journal of Materials Science and Engineering, 2013, A(3), 116-121.
15. А.М. Пашаев, О.И. Даварашвили, М.И. Енукашвили, З.Г. Ахвледиани, Л.П. Бычкова, Р.Г. Гуляев, М.А. Дзаганя, В.П. Зломанов. Напряженные полупроводниковые слои на диэлектрических подложках (на примере материалов $A^{IV}B^{VI}$). Препринт, МНЛ-ТГУ, 2016, 22 с.
16. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, R.G. Gulyaev, M.A. Dzagania, V.P. Zlomanov. High deformations in lead selenide nanolayers and related new properties. European Chemical Bulletin, 2019, 8(2), 57-62.
17. А.М. Пашаев, О.И. Даварашвили, М.И. Енукашвили, З.Г. Ахвледиани, Л.П. Бычкова, Р.Г. Гуляев, М.А. Дзаганя, В.П. Зломанов. Сочетание высоких деформаций и степени совершенства в нанослоях полупроводников $A^{IV}B^{VI}$. Ученые Записки НАА Азербайджана, 2019, 21, 4, 3-9.
18. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, V.P. Zlomanov. Control of the forbidden gap with varying the composition and the thickness of the layers of IV-VI semiconductors. Nano Studies, 2015, 12, 5-10.

REFERENCES

1. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, R.G. GuIyaev, V.P. Zlomanov. Unrelaxed State in Epitaxial Heterostructures based on Lead Selenide. Journal of Modern Physics, 2012, 3, 6, 502-510.
2. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, G.Sh. Darsavelidze, L.P. Bichkova, M.I. Erukashvili, M.A. Dzaganiya, V.P. Zlomanov. Diffuzionnoe rassoglasovanie v poluprovodnikovikh geterostrukturakh: uslovie vozniknoveniya i puti predoleniya ego negativnogo vozdeystviya na izluchatel'nie pribori. Izvestiya NAN Gruzii, 2009, 6, 4, 331-336.
3. Pashaev A.M., Davarashvili O.I., Aliev V.A., Erukashvili M.I., Zlomanov V.P.

- Zakonomernaya svyaz' mejdu odnovremennoy stabilizatsiey urovnya Fermi i preobrazovaniem uprugikh svoystv v uzkozonnikh poluprovodnikakh IV-VI s ikh transformatsiey v dielektricheskoe sostoyanie. Nauchnoe otkritie, diplom №340. Sbornik kratkikh opisaniy nauchnikh otkritiy, nauchnikh gipotez. Mezhdunarodnaya Akademiya i Assotsiatsiya avtorov nauchnikh otkritiy. Moskva, 2008.
4. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, M.A. Dzagania. On the Possibilities for Improving the Efficiency of Radiation in Heterostructures Based on IV-VI Semiconductors. IOP Conf.Series: Materials Science and Engineering 49, (2013) 012029, 1-4.
 5. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, Z.G. Akhvlediani, M.J. Erukashvili, L.P. Bychkova, M.A. Dzagania. Study of the Forbidden Gap Width of Strained Epitaxial Lead Selenide Layers. Journal of Materials Science and Engineering, 2012, 2, 142-150.
 6. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, V.P. Zlomanov. Modeling of the dielectric state in PbSnSe and PbSnTe nanolayers with high concentration of nonstoichiometric defects. Book of Abstracts of the 17th International Conference on Radiation Effects in Insulators. Helsinki, 2013, PB-16.
 7. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.İ. Erukashvili, V.A. Aliev, V.P. Zlomanov. Problemi rassoglasovaniya v geterostrukturakh na osnove poluprovodnikov $A^{IV}B^{VI}$. Trudi Mezhdunarodnoy konferentsii «Nauchno-tehnicheskiy progress i sovremennaya aviatsiya» Baku, 2009, 3, 17-19.
 8. Yu.B. Bolkhovityanov, O.P. Pchelyakov, S.İ. Chikichev. Kremniy-germanievie epitaksial'nie plenki: fizicheskie osnovi polucheniya napryazhennikh i polnost'yu relaksirovannikh geterostruktur. UFN, 2001, 171, 7, 689-715.
 9. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, R.G. Gulyaev, V.P. Zlomanov. Stretching strain - effective "negative" pressure in lead selenide nanolayers. IIEIT, 2014, 3, 11, 318-323.
 10. B.M. Yurchenko, E.P. Fel'dman, L.N. Gumen, A.M. Kronik, A.E. Zyubanov. Formirovanie setki dislokatsiy nesootvetstviya vblizi interfeysa plenka-podlozhka s uchetom uprugogo kontrasta. Kondensirovannye sredi i mezhfaznie granitsi, 2008, 10, 3, 277-281.
 11. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, V.A. Aliev, G.Sh. Darsavelidze, M.I. Erukashvili, V.P. Zlomanov. Eksperimental'noe modelirovanie uprugikh svoystv binarnikh soedineniy $A^{IV}B^{VI}$. Vesti Akademii Nauk Azerbaydzhana, 2008,5, 96-100.
 12. T. David, I. Agua, K.Liu, L.Farve, A.Ronda, M.Abbarchi, I.Claude, I.Berberzier. New strategies for producing defect free Si-Ge strained nanolayers. Scientific Reports, 2018, 8, 2, 4-14.
 13. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, R.G. Gulyaev, M.A. Dzagania, V.P. Zlomanov. Investigation of strained lead selenide layers. Global Journal of Engineering Science and Research Management (GJESRM), 2016, 3(6), 56-64.
 14. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, Z.G. Akhvlediani, M.I. Erukashvili, R.G. Gulyaev, V.P. Zlomanov. The Structure of Thin Epitaxial Layers of Lead Selenide. Journal of Materials Science and Engineering, 2013, A(3), 116-121.
 15. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bichkova, R.G.

- Gulyaev, M.A. Dzaganiya, V.P. Zlomanov. Napryazhennye poluprovodnikovye sloi na dielektricheskikh podlozhkakh (na primere materialov $A^{IV}B^{VI}$). Preprint, MNL-TGU, 2016, 22s.
16. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, R.G. Gulyaev, M.A. Dzaganiya, V.P. Zlomanov. High deformations in lead selenide nanolayers and related new properties. European Chemical Bulletin, 2019, 8(2), 57-62.
17. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bichkova, R.G. Gulyaev, M.A. Dzaganiya, V.P. Zlomanov. Sochetanie visokikh deformatsiy i stepeni sovershenstva v nanosloyakh poluprovodnikov $A^{IV}B^{VI}$. Uchenie Zapiski NAA Azerbaydzhana, 2019, 21, 4, 3-9.
18. A.M. Pashaev, O.I. Davarashvili, M.I. Erukashvili, Z.G. Akhvlediani, L.P. Bychkova, V.P. Zlomanov. Control of the forbidden gap with varying the composition and the thickness of the layers of IV-VI semiconductors. Nano Studies, 2015, 12, 5-10.

$A^{IV}B^{VI}$ YARIMKEÇİRİCİLƏRDƏ DEFORMASIYA OLUNMUŞ NANOLAYLARIN STRUKTURUNUN YAXŞILAŞDIRILMASI: YENİ MODELİN TƏHLİLİ

**¹Paşayev A.M., ²Davaraşvili O.İ., ²Erukashvili M.İ., ^{2,3}Akhvlediani Z.Q.,
²Biçkova L.P., ²Gulyaev R.G., ^{2,4}Dzaganiya M.A., ⁵Zlomanov V.P.**

¹Azərbaycan Milli Aviasiya Akademiyası, ²İ. Cavaxışvili adına Tbilisi Dövlət Universiteti, ³E. Andronikaşvili adına Fizika İnstitutu, ⁴P. Melikişvili adına Fiziki və Üzvi Kimya İnstitutu, ⁵M.V. Lomonosov adına Moskva Dövlət Universiteti

İşdə dielektrik alıtlıqlarda yetişdirilən IV-VI yarımkeçiricilərin epitaksial nanolaylarında onların maksimum deformasiyasında yüksək mükəmməlliyə nail olunduğu yeni model təhlil edilir. Elastiklik və kritik qalınlıqların kontrastının layların strukturuna müxtəlif təsirləri aşkar edilmişdir. Təqdim olunan modelə görə, mövcud elastiklik kontrastı, məsələn, PbSe təbəqəsi ilə KCl alıtlığı arasında dislokasiya şəbəkəsinin altıqğa yerdəyişməsinə və alıtlıqdan dislokasiya təbəqəsinə nüfuz edən nisbətən azalmasına səbəb olur. Qatlarda bir neçə kritik qalınlığın onların kristal qəfəsindəki qeyri-bərabərlik mərkəzlərini aradan qaldırmaq və ya bloklamaqla aradan qaldırılması imkanları nəzərdən keçirilir. Heterostrukturların təfərrüatlı təhlili gərginliyin relaksasiya xarakteri əsasında aparılmışdır: gərginliklər tamamilə aradan qaldırıldıqda və əksinə, təbəqələrin deformasiyaya uğramış vəziyyəti saxlanıldıqda iki hal müəyyən edilmişdir. Yükdaşıyıcıların yüksək hərəkətliliyi və rentgen şüalarının difraksiya xətti konturunun forması 0,015-ə çatan deformasiyalarda $A^{IV}B^{VI}$ yarımkeçiricilərin nanolaylarının mükəmməllik dərəcəsinin və ümumiyyətlə, nəzərdən keçirilən modelin təkmilləşdirilməsini təsdiqləyir.

Açar sözlər: yeni model, nanə qatının deformasiyası, dislokasiyalar, elastiklik kontrastı, kritik qalınlıq, nano qatın strukturu.

**IMPROVEMENT OF THE STRUCTURE OF THE DEFORMED NANOLAYERS OF
 $A^{IV}B^{VI}$ SEMICONDUCTORS: ANALYSIS OF A NEW MODEL**

**¹Pashaev A.M., ²Davarashvili O.I., ²Erukashvili M.I., ^{2,3}Akhvlediani Z.G.,
²Bychkova L.P., ²Gulyaev R.G., ^{2,4}Dzaganina M.A., ⁵Zlomanov V.P.**

¹National Aviation Academy of Azerbaijan, ²Tbilisi State University named after Javakhishvili, ³Institute of Physics named after E. Andronikashvili, ⁴Institute of Physical and Organic Chemistry named after P. Melikishvili, ⁵Moscow State University M.V. Lomonosov

In this work the analysis of a new model was held, in accordance with that high degree of perfection at maximal deformations in epitaxial nanolayers of IV-VI semiconductors is achieved. Different ways of influence of contrast of elasticity and critical thicknesses on layers were discovered. The contrast in the elasticity between PbSe layer and KCl substrates, for example, leads to the displacement of the net of discrepancy of dislocations to the substrate and to decrease of the portion of the penetrated dislocations to the layer. The possible liquidation of several critical thicknesses was proposed by blocking of nonhomogenities' centers. We held the detailed analysis on the relaxation of strains in heterostructures, and two cases are presented: a) when strains are fully removed and b) on the contrary, with maintenance of deformed state of the layers. High values of the mobility of current carriers and the character of x-ray diffraction line confirm the improvement of the degree of perfection of the nanolayers IV-VI semiconductors and, particularly, of the present model.

Keywords: *new model, nanolayer deformation, dislocations, elasticity contrast, critical thickness, nanolayer structure.*