

УДК 621.315.592.2

Н.М. Ляхова<sup>1</sup>, В.І. Осінський<sup>1</sup>, д.-р.техн.наук, О.В. Семеновська<sup>2</sup>, канд.техн.наук, Н.О. Суховій<sup>1</sup>,  
В.І. Тимофєєв<sup>2</sup>, д.-р.техн.наук, О.М. Фалєєва<sup>2</sup>, канд.техн.наук

<sup>1</sup>Інститут мікроприладів НАН України, вул. Північно-Сирецька, 3, м. Київ, 04136, Україна.

<sup>2</sup>Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»,  
кафедра фізичної та біомедичної електроніки, вул. Політехнічна, 16, м. Київ, 03056, Україна.

## Моделювання темплетних наноструктур

*Мета даних досліджень – знаходження оптимальних параметрів наноутворень для зменшення проростаючих дислокацій в темплетних наноструктурах. У даній роботі досліджено вплив розмірів темплетів на щільність дислокацій зміщення наноструктур, встановлена залежність висоти проростаючої дислокації від її радіусу, а також досліджено вплив розузгодження ґратки наноструктури на умовно-бездислокаційний рельєф темплетних напівпровідникових наноутворень. Бібл. 9, рис.4.*

**Ключові слова:** наноструктури, темплету, дислокації, розузгодження ґратки, сполуки GaN.

### Вступ

Сучасна тенденція мініатюризації приладів зумовлює інтерес до розробки та створення на-ноприладів з високим рівнем інтеграції напів-провідникових елементів [1, 2]. Для таких приладів широко використовуються матеріали напів-провідникових сполук  $A^3B^5$ , оскільки вони мають високоефективні характеристики у широкому діапазоні частот. Це дозволяє використовувати зазначені матеріали для створення оптоелектронних надвисокочастотних та високотемпературних приладів. Найбільш актуальним напрямком розвитку нанотехнологій є створення складних функціональних приладів на одному чипі. Перші однокіпові прилади  $S_i/A^3B^5$  були запропоновані ще у 1972 році [3] на базі одержання бездефектних селективних монокристалічних областей. Вони були розроблені для селективної епітаксії структур  $A^3B^5$  у глибоких вікнах підкладок кремнію [4]. Використання селективного вирощування наноструктур в порах темплетів (шаблонів) дозволило здійснювати прецизійний контроль розмірів і задане шаблоном розташування квантових точок, а також реалізувати механізми одержання бездефектних селективних монокристалічних областей. Як результат, на їх

основі побудовані сучасні інтегральні пристрої НВЧ зв'язку, дуплексери, конвертери, схеми модуляції і підсилювачі потужності, які працюють у НВЧ діапазоні [5].

### Постановка задачі

Метод темплетного синтезу наноструктур полягає у вирощуванні на напівпровідниковій підкладці тонкого шару плівки наноструктур. На рис. 1 наведено схематичне зображення наноутворення радіусом  $R$  і висотою  $h$ .

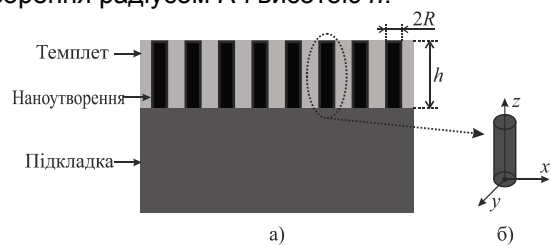


Рис. 1. Схематичне зображення геометрії наноструктури (а) і частини наноутворення (б)

На границі розділу двох середовищ виникає напруження, викликане розузгодженням ґраток підкладки і наноутворення. Суцільність темплетного шару визначається ступенем цього розузгодження, яке, у свою чергу, залежить від радіуса і висоти наноутворення (рис. 1). При деякому критичному співвідношенні радіусу і висоти наноутворення виникають проростаючі дислокації, які призводять до скорочення терміну служби приладу (рис. 2).

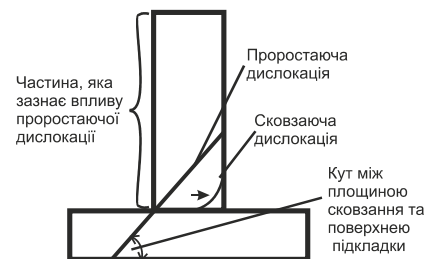


Рис. 2. Схематичне зображення утворення дислокацій у наноструктурі

Проростаючі дислокації, як правило, розташовуються під певним кутом до поверхні (рис. 2), і мають вплив тільки поблизу основи наноутворень, зберігаючи при цьому іншу частину наноутворення низькодефектною. Тому актуальною стає задача встановлення взаємозв'язку між геометричними розмірами наноутворень і дислокаційністю наноструктури. Оптимальний вибір матеріалів підкладки і наноутворення може мінімізувати розузгодження ґраток.

$$E_l(d) = \frac{\mu b_1^2}{4\pi(1-\nu)} \left( \ln(4a^2 + 1) + 4a^2 \frac{4a^2 + 3}{(4a^2 + 1)^2} \right) + \frac{\mu b_2^2}{4\pi(1-\nu)} \left( \ln(4a^2 + 1) - 4a^2 \frac{4a^2 + 1}{(4a^2 + 1)^2} \right) + \frac{\mu b_3^2}{4\pi} \ln(4a^2 + 1),$$

де  $a = h/d$ , де  $d$  – відстань між уявними дислокаціями;  $h$  – висота наноутворення.

У роботі [7] досліджено співвідношення для розрахунку критичної товщини  $h_c$  утворення дислокації:

$$h_c(R) = \frac{E_d(h_c/R)}{kb\varepsilon^m g(h_c/R)}, \quad \text{де}$$

$k = 2\mu \frac{1+\nu}{1-\nu}$  – біаксіальний модуль, де  $\mu$  – стала Лейма;  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона;  $b$  – вектор Бюргерса;

$\varepsilon^m = 2 \frac{a_f - a_s}{a_f + a_s}$  – неузгодженості ґраток; де  $a_f$ ,  $a_s$  – параметри ґраток наноутворення і підкладки, відповідно. Коефіцієнти  $\alpha$  у виразі  $g(h_c/R)$  підбиралися чисельно із застосуванням методу найменших квадратів:

$$g(h_c/R) = \frac{1}{\alpha(h_c/R)} (1 - e^{-\alpha(h_c/R)}).$$

### Результати моделювання

Для верифікації моделі, використано дані з роботи [9] для різних параметрів розузгодженості ґратки. На рис. 3 наведено результати моделювання [7] для кривих умовно-бездислокаційного рельєфу при ступенях

Дана стаття є продовженням робіт [6, 7]. У роботі [6] проаналізовано вираз для енергії дислокації тривимірного наноутворення:

$$E_d = E_{d,\infty} + \sum_{n=1}^{\infty} (E_l(4Rn) - E_l((2n-1)2R)),$$

де  $E_{d,\infty}$  – власна енергія дислокації у необмеженому середовищі;  $n$  – порядок системи;  $R$  – радіус наноутворення;  $E_l$  – енергія взаємодії між дислокаціями:

розузгодженості ґраток 1,67%, 2,51%, 4,1%, відповідно.

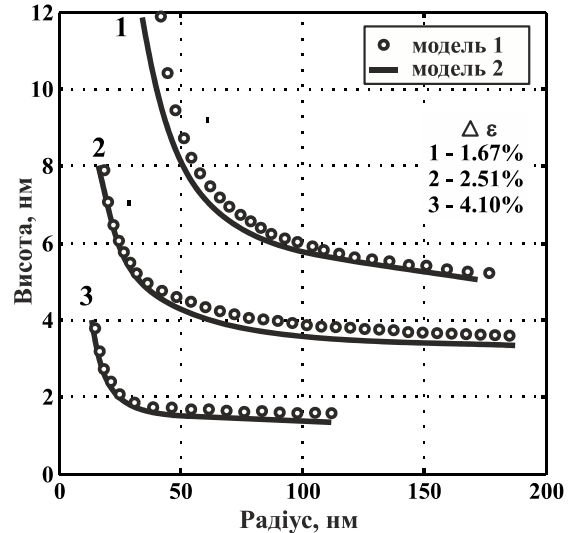


Рис. 3. Криві умовно-бездислокаційного рельєфу зі ступенями розузгодженості ґраток 1,67%, 2,51%, 4,1%, відповідно (о – результати згідно моделі [9])

На рис. 4 наведені криві умовно бездислокаційного рельєфу для GaN наностержнів на GaN епітаксійних шарах зі ступенями розузгодженості ґраток 0,1%; 0,05% і 0,01%, відповідно.

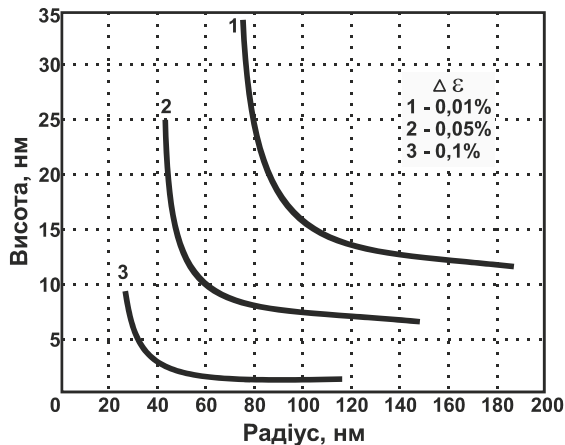


Рис. 4. Криві умовно-бездислокаційного рельєфу для GaN наноструктури на підкладці GaN зі ступенями розузгодження ґраток 0,1%, 0,05% і 0,01%, відповідно

За результатами моделювання кривих умовно-бездислокаційного рельєфу наноструктур для різних ступенів розузгодження ґраток встановлено можливість визначення оптимальних темплетних параметрів. Із, наведеної на рис. 4 залежності, видно, що сформовані на GaN епітаксійних шарах GaN нанострижнів (радіусом  $R=30$  нм) з щільністю дислокацій  $3 \cdot 10^6 \text{ см}^{-2}$  [8] відповідають «умовному розузгодженню ґраток» порядку 0,1%.

#### Висновки

Розроблено методику розрахунку оптимальних темплетних параметрів згідно кривих умовно-бездислокаційного рельєфу і ступеню розузгодження ґратки. Запропонована методика дозволила встановити залежність умовного бездислокаційного рельєфу від геометричних розмірів наноструктур. Отримано криві умовно-бездислокаційних рельєфів для GaN наноутворень на GaN епітаксійних шарах зі ступенями розузгодження ґраток 0,1%, 0,05% і 0,01%. Похибки розрахунків не перевищують 5%.

#### Список використаних джерел

1. S. Nakamura, "The Roles of Structural Imperfections in InGaN-Based Blue Light-Emitting Diodes and Laser Diodes," *Science*, vol. 281, pp. 956 – 961, August 1998.
2. S. Strite, G.B. Gao and M.E. Lin, "Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semi-conductor device technologies," *J. Appl. Phys.*, vol. 76, P.1363 – 1366, April 2004.
3. Certificate of authorship # 551730 (USSR) V.I. Osinski and N.K. Kostyukevich, "Integral optocoupler," priority 1973.
4. Osinsky V. Katsapov T.M. Tyavlovskaya E.A. Structural perfection of selective GaAs regions in Si-substrate windows // *Phys. Stat. Sol. (a)* – 1984 –v.82, №2, - p.174 -177.
5. V. Osinsky, D. Murchenko and H. Homarmand, "Si/A3B5 one chip integration of white LED sources," *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*, vol. 12, pp. 240 – 250, March 2009.
6. Н.О. Ляхова Моделювання впливу темплетних розмірів на дислокаційність наноструктур при селективній епітаксії ііі-нітридів // *Електроника и связь*, № 3, 2011. – с.39 – 43.
7. V. Timofeyev, E. Faleyeva, E. Semenovskaya, A. Andryushchenko, V. Osinsky, N. Lyahova, N. Sukhoviyy Simulation of Influence of Template Size on Burger Dislocation in Nanostructures// *IEEE IEEE 34th International Conference ELNANO-2014, APRIL 15-18, 2014.* pp. 191-193.
8. V. Osinskiy, P. Deminsky, N. Lyahova, N. Suhoviyy, H. Homarmand The dependence of Si/AlIIBV light source photoluminescence efficiency on dynamic displacements of atoms in the crystal lattice // *IEEE IEEE 34th International Conference ELNANO-2014, APRIL 15-18, 2014.* pp. 171-175.
9. A. Alizade, P. Sharma and S. Ganti, Templet wide band-gap nanostructures" *Applied biophysics*, vol. 95, pp. 294 – 298, December 2004.

Поступила в редакцію 20 сентября 2014 г.

УДК 621.315.592.2

**Н.Н. Ляхова<sup>1</sup>, В.И. Осинский<sup>1</sup>**, д.-р.техн.наук, **Е.В. Семеновская<sup>2</sup>**, канд.техн.наук,  
**Н.О. Суховий<sup>1</sup>, В.И. Тимофеев<sup>2</sup>**, д.-р.техн.наук, **Е.М. Фалеева<sup>2</sup>**, канд.техн.наук

<sup>1</sup>Институт микроприборов НАН Украины, ул. Северо-Сырецкая, 3, г. Киев, 04136, Украина.

<sup>2</sup>Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический Институт»,  
кафедра физической и биомедицинской электроники,  
ул. Политехническая, 16, г. Киев, 03056, Украина.

## Моделирование темплетных наноструктур

*Целью данных исследований является нахождение оптимальных параметров для уменьшения прорастающих дислокаций в темплетных наноструктурах. Разработана методика оценивания прорастания условно-бездислокационного рельефа темплетных наноструктур. Исследовано влияние темплетных размеров на плотность дислокаций смещения темплетных наноструктур, установлена зависимость высоты прорастающей дислокации от ее радиуса, а также исследовано влияние рассогласования решетки наноструктуры на условно-бездислокационный рельеф темплетный полупроводниковых нанобразований. Библ. 9, рис. 4.*

**Ключевые слова:** наноструктуры, темплеты, дислокации, рассогласование решетки, соединения GaN.

UDC 621.315.592.2

**N.M. Lyahova<sup>1</sup>, V.I. Osinskiy<sup>1</sup>**, Dr.Sc., **E.V. Semenovskaya<sup>2</sup>**, Ph.D., **N.O. Suhoviy<sup>1</sup>**,  
**V.I. Timofeev<sup>2</sup>**, Dr.Sc., **E.M. Faleeva<sup>2</sup>**, Ph.D.

<sup>1</sup>Institute of Microdevices NASU, 3, str. North Syretskaya, Kiev, 04136, Ukraine.

<sup>2</sup>National Technical University of Ukraine "Kiev Polytechnic Institute",  
Department of Physical and Biomedical Electronics, office. 413a,  
16, str. Polytechnique, Kiev, 03056, Ukraine.

## Modeling of templet nanostructures

*The purpose of paper is to find the optimal parameters for decreasing dislocations in templet nanostructures. The estimation method of dislocation-free relief germination of templet nanostructures is developed. The influence of templet size on the dislocation density of nanostructures is studied. The dependence of the dislocation height on its radius is determined. The influence of the nanostructures lattice mismatch on conditional relief dislocation of templet semiconductor nanostructures is studied. Reference 9, figures 4.*

**Keywords:** nanostructures, templet, dislocations, lattice mismatch, GaN compounds

### References

1. S. Nakamura, (1998), "The Roles of Structural Imperfections in InGaN-Based Blue Light-Emitting Diodes and Laser Diodes," Science, Vol. 281, Pp. 956 – 961, August 1998. (Eng)
2. S. Strite, G.B. Gao and M.E. Lin, (1973), "Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semi-conductor device technologies," J. Appl. Phys., Vol. 76, Pp.1363 – 1366, April 2004. (Eng)
3. V.I. Osinski and N.K. Kostyukevich, "Integral optocoupler," priority 1973.Certificate of authorship # 551730 (USSR) (Rus)
4. Osinsky V. Katsapov T.M. Tyavlovskaya E.A. (1984), "Structural perfection of selective GaAs regions in Si-substrate windows". Phys. Stat. Sol. (a) Vol. 82, No2, Pp.174 -177.
5. V. Osinsky, D. Murchenko and H. Honarmand. (2009), "Si/A3B5 one chip integration of white LED sources," Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, Vol. 12, Pp. 240 – 250, March 2009. (Eng)

6. *N.O. Lyakhova*. (2011), "Simulation of template sizes on dislocation nanostructures by selective epitaxy of III-nitrides". *Electronics and Communications*, No 3, Pp.39 - 43. (Ukr)
7. *V. Timofeyev, E. Faleyeva, E. Semenovskaya, A. Andryushchenko, V. Osinsky, N. Lyakhova, N. Suhoviy*. (2014), "Simulation of Influence of Template Size on Burger Dislocation in Nanostructures". *IEEE IEEE 34th International Conference ELNANO-2014, APRIL 15-18, 2014*. pp. 191-193. (Eng)
8. *V. Osinsky, P. Deminsky, N. Lyakhova, N. Suhoviy, H. Homarmand*. (2004), "The dependence of Si/AlIBV light source photoluminescence efficiency on dynamic displacements of atoms in the crystal lattice". *IEEE IEEE 34th International Conference ELNANO-2014, APRIL 15-18, 2014*. pp. 171-175.(Eng)
9. *A. Alizade, P. Sharma and S. Ganti*. (2004), "Templeted wide band-gap nanostructures" *Applied biophysics*. Vol. 95, pp. 294 – 298, December 2004. (Eng).