

03,07,13

## Критическая толщина и напряжения слоев HgTe на подложках Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te

© С.А. Дворецкий<sup>1</sup>, Н.Н. Михайлов<sup>1</sup>, Р.В. Меньшиков<sup>1</sup>, В.И. Окулов<sup>2</sup>, Т.Е. Говоркова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

<sup>2</sup> Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: dvor@isp.nsc.ru

Поступила в Редакцию 25 января 2024 г.

В окончательной редакции 25 января 2024 г.

Принята к публикации 26 января 2024 г.

Проведен расчет критической толщины псевдоморфного слоя и механических напряжений HgTe на подложках (013) Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te при температурах роста 120, 150 и 180°C для двух дислокационных систем скольжения. Установлено, что критическая толщина HgTe варьируется от 40–60 до 1200–1800 nm при изменении  $x$  от 0 до 0.9. Механические напряжения, обусловленные несоответствием параметров решетки гетеропары HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te, изменяются в диапазоне от 6 до 125 МПа при изменении  $x$  и слабо зависят от температуры. Механические напряжения при охлаждении, обусловленные несоответствием коэффициентов термического расширения, составили от –1 до –7 МПа. Эти результаты позволяют прогнозировать механические напряжения в различных приборных конструкциях на основе гетеропары HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te.

**Ключевые слова:** критическая толщина, напряжения, состав, HgTe, Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te, параметр решетки, коэффициент термического расширения.

DOI: 10.61011/FTT.2024.02.57244.9

### 1. Введение

Монокристаллы и гетероэпитаксиальные слои на основе бесщелевых соединений HgSe и HgTe привлекают особое внимание исследователей необычными физическими свойствами, которые определяются их уникальной электронной структурой и высокими электрофизическими параметрами. Концентрация электронов составляет менее  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  для HgTe и порядка  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  для HgSe. Подвижность электронов достигает величин более  $10^5 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ . Так, при исследовании объемных монокристаллов HgSe, легированных переходными 3d-металлами (Fe, Co, Ni) предельно низкой концентрации (< 1 at.%), были обнаружены и детально исследованы особенности электронных свойств, связанные с проявлениями аномалий в температурных и концентрационных зависимостях кинетических (электронная концентрация, подвижность, коэффициент Холла) и термодинамических коэффициентов (теплоемкость, скорость и поглощение ультразвука, магнитная восприимчивость). Было установлено, что все наблюдаемые эффекты обусловлены гибридизацией электронных состояний  $d$ -примеси и полосы проводимости кристалла и описываются в рамках разработанной теории резонансного рассеяния и спонтанной спиновой поляризации [1–7]. Одно из активно развивающихся направлений исследований в этой области связано с изучением нового квантового эффекта — спонтанного спинового магнетизма донорных электронов проводимости [7]. Магнетизм такого типа был экспериментально обнаружен в объемных монокри-

сталлах HgSe:Fe(Co) с предельно низкой концентрацией  $d$ -примесей (< 1 at.%) как при низких  $\sim 5 \text{ K}$  [8–10], так и при комнатной температурах [11]. Электронная структура таких систем представляет собой бесщелевую кристаллическую матрицу HgSe и полосу проводимости, заполненную донорными электронами примесных атомов. Спонтанный спиновый магнетизм нового типа (без межпримесного взаимодействия) наблюдается при условии предельно низкой концентрации  $d$ -примесей (< 1 at.%). При этом в полосе проводимости кристалл-матрицы HgSe образуется система донорных электронов, состояния которых, под действием сильного обменного межэлектронного взаимодействия, зависящего от спина, в условиях исходной поляризации электронов примесных атомов, создают полную спонтанную спиновую поляризацию такой системы. При этом примесные состояния гибридизируются с состояниями полосы проводимости, что также является необходимым условием для возникновения спонтанной спиновой поляризации нового типа. Однако управлять такими свойствами при изменении концентрации  $d$ -примесей в кристаллах достаточно сложно. Развитие эпитаксиальных технологий позволило рассматривать слои для создания магнитных материалов с низкой концентрацией магнитной примеси.

Интерес к проведению исследований гетероэпитаксиальных слоев на основе HgSe и HgTe, легированных 3d-примесями, открывает широкие возможности как для дальнейшего изучения примесного магнетизма нового типа (при переходе от объемных монокристаллов к сло-

ям), так и для обнаружения новых физических свойств таких структур. Было показано, что слои HgSe, выращенные на подложках из (001)ZnTe/GaAs при легировании Fe до концентрации более  $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  показали значительное увеличение подвижности до  $2.7 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  по сравнению с нелегированными слоями [12,13]. Наблюдение такого эффекта авторы связали с закреплением уровня Ферми на уровне Fe, находящимся в зоне проводимости, что было отмечено для кристаллов HgSe:Fe [14]. Однако такой результат не был получен при дальнейших исследованиях, что определялось низким структурным совершенством слоев HgSe:Fe, связанных с низкой температурой выращивания менее 120°C [15–18]. Повышение структурного совершенства позволяют обеспечить более высокие температуры роста. Было предложено рассмотреть выращивание слоев HgTe при легировании 3d-элементами до различной концентрации как перспективный материал для создания магнитного полуметалла. Показано, что слои HgTe, выращенные при  $\sim 180^\circ\text{C}$  на различных подложках, имеют высокое качество [19–21], которые позволили создать различные низкоразмерные структуры на основе квантовых ям [22–30].

Для создания материала при выращивании слоев HgTe методом МЛЭ с магнитными свойствами при легировании примесными атомами Fe на (013)Cd<sub>1-x</sub>Hg<sub>x</sub>Te/ZnTe/GaAs необходимо рассмотреть влияние такой сложной подложки на ожидаемое структурное качество, возникающие и остаточные напряжения, зависящие от толщины слоя и температуры роста.

Структурное качество в значительной степени определяется плотностью дислокаций. Для минимизации плотности дислокаций, возникающих в процессе роста, необходимо определить критическую толщину псевдоморфного слоя ( $h_c$ ), в которых не происходит генерации дислокаций несоответствия (ДН). Величина  $h_c$  зависит от несоответствия постоянных решетки сопрягаемых материалов выращиваемого слоя и подложки при температуре роста и ориентации. При толщине слоев HgTe с толщиной, превышающей  $h_c$ , генерируемые ДН будут приводить к ухудшению структурного качества. Механические напряжения, возникшие в слоях толщиной  $h_c$  будут определяться несоответствием параметров решеток при росте и коэффициентов теплового расширения при охлаждении. С увеличением толщины величина механических напряжений будет уменьшаться.

Таким образом, при выращивании слоев HgTe на сложной многослойной подложке (013)Cd<sub>1-x</sub>Hg<sub>x</sub>Te/CdTe/ZnTe/GaAs необходимо провести анализ параметров  $h_c$  и механических напряжений, которые будут определять процессы встраивание атомов Fe при легировании и их электронное состояние.

В работе представлен анализ зависимости критической толщины  $h_c$  слоев HgTe и напряжений при выращивании на релаксированных подложках (013)Cd<sub>1-x</sub>Hg<sub>x</sub>Te/CdTe/ZnTe/GaAs от величины состава  $x$  при различных температурах роста и последую-

щем охлаждении до комнатной температуры. Проведена оценка влияния толщины слоя HgTe на величину остаточных напряжений.

## 2. Анализ

### 2.1. Расчет критической толщины псевдоморфного слоя

Расчет критической толщины псевдоморфного слоя  $h_c$  проводился по формуле, полученной в соответствие с моделью Мэтьюза [31]:

$$h_c = (b/\cos\lambda)(1 - \nu \cos 2\alpha)[1 + \ln(h_c/b)]/[8\pi(1 + \nu)f], \quad (1)$$

где  $\alpha$  — угол между вектором Бюргерса  $b$  и дислокационной линией,  $\lambda$  — угол между вектором Бюргерса и направлением, лежащим в границе раздела перпендикулярно ДН,  $\nu$  — коэффициент Пуассона в изотропном твердом теле и  $f = (a_l - a_s)/a_s$  — параметр несоответствия, равный относительной разности постоянных решетки слоя ( $a_l$ ) и подложки ( $a_s$ ). Выражение (1) получено в результате равновесного термодинамического подхода и справедливо только как некий предел, к которому система будет стремиться при бесконечной выдержке. В реальной ситуации роста пленки с конечной скоростью влияние могут оказывать кинетические факторы, связанные с механизмом введения ДН [32]. Для случая гетероэпитаксии на вициальных поверхностях введение ДН, принадлежащих системам скольжения  $(a/2)\langle 110 \rangle\{111\}$ , происходит в рамках 12 дислокационных систем (ДС) [33]. В случае гетероэпитаксии слоев HgCdTe на подложке (013)CdTe/ZnTe/GaAs параметры этих ДС приведены в [34]. Экспериментальные результаты, полученные методом просвечивающей микроскопии показали, что для слоев Hg<sub>0.7</sub>Cd<sub>0.3</sub>Te при выращивании на (013)CdTe ДН вводятся при толщинах сравнимых с расчетными значениями  $h_c$  для ДС 1, 2 и 3, 4, для которых углы  $\alpha$  и  $\lambda$  составляют 79.1 град. и 44.2 град. и 40.9 град. и 61.4 град. соответственно.

Нами проведено моделирование  $h_c$  слоя HgTe при выращивании на поверхности (013)Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te по формуле (1) с данными по углам  $\alpha$  и  $\lambda$  для ДС 1, 2 и 3, 4 в интервале  $x = (0-0.9)$  с шагом 0.1. Вектор Бюргерса  $b = a_{\text{HgTe}}/2$  в направлении  $[110]$  и  $[\bar{1}10]$  для системы 1, 2 и 3, 4, соответственно. Расчет проводился для температуры роста 120, 150 и 180°C. Несовпадение параметров решеток  $f = (a_{\text{HgTe}} - a_{\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}})/a_{\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}}$  определяется при указанных температурах ( $T$ ) по формуле [35]:

$$a(x, T) = 6.4614 + 0.008x + 0.0168x^2 - 0.0057x^3 - 0.0095 + 2.613 \cdot 10^{-5}T + 1.131 \cdot 10^{-8}T. \quad (2)$$

Коэффициенты Пуассона  $\nu$  получены при расчете упругих постоянных для температуры роста.

**Таблица 1.** Значения упругих постоянных и температурных коэффициентов

Соединение	Упругие постоянные, GPa			$\alpha_c$ , GPa/K		
	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$
CdTe	53.6	37.0	20.1	0.011	0.009	0.002
HgTe	54.1	37.4	20.8	0.020	0.016	0.006

## 2.2. Расчет остаточных напряжений после выращивания в слоях HgTe

Выражение для расчета механических напряжений ( $\sigma_{\text{mech.}}$ ) слоя включает в себя напряжения, связанные с несоответствием параметров решетки ( $\sigma_{\text{misf.}}$ ), возникающие при росте, и несоответствия коэффициентов теплового расширения, возникающие при охлаждении выращенной структуры после выращивания ( $\sigma_{\text{therm.}}$ ):

$$\sigma_{\text{mech.}} = \sigma_{\text{misf.}} + \sigma_{\text{therm.}} \quad (4)$$

Расчет  $\sigma_{\text{mismatch}}$  проводился по уравнению, предложенному в [36] выражению

$$\sigma_{\text{misf.}} = \frac{Ef(h_c/h)}{1-\nu}, \quad (5)$$

где  $E$  — модуль Юнга,  $h_c$  — толщина псевдоморфного слоя,  $h$  — толщина выращенного слоя.

Это выражение определяет величину механического напряжения от толщины, которое имеет максимальное значения при  $h = h_c$  и при  $h > h_c$  уменьшается обратно пропорционально толщине слоя. Расчет модуля Юнга проведен по формуле [37]:

$$\frac{1}{E} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - 2C_{12})} + \left( \frac{1}{C_{44}} - \frac{2}{C_{11} - C_{12}} \right) \times (n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_y^2 n_z^2), \quad (6)$$

где  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  и  $C_{44}$  — упругие постоянные;  $n_x$ ,  $n_y$  и  $n_z$  — направляющие косинусы.

Расчет упругих постоянных  $C_{ij}$  при температурах роста  $T$  проводился в предположении линейной зависимости упругих постоянных от температуры в соответствии [38]:

$$C_{ij}(T) = C_{ij}(300) + \alpha_c(300 - T). \quad (7)$$

Значения упругих постоянных  $C_{ij}$  и их температурных коэффициентов  $\alpha_c$  приведены в табл. 1.

Значение параметра  $\nu$  для слоев HgTe при температуре роста определен в соответствие с методикой в соответствии [38]:

$$\nu = \frac{3B - 2\mu}{2(3B + \mu)}, \quad (8)$$

где  $B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}$  — объемный модуль упругости;  $\mu = \frac{C_{11} - C_{12} + C_{44}}{3}$  — модуль сдвига.

Расчеты показали, что значения  $\nu$  составили 0.366, 0.365 и 0.364 при температурах 120, 150 и 180°C соответственно.

Расчет остаточных напряжений при слоя HgTe в составе структуры HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te/CdTe/ZnTe/GaAs при охлаждении от температуры роста до комнатной температуры проводился по формуле для

$$\sigma_{\text{therm}} = \frac{E\Delta\alpha_T\Delta T}{(1-\nu)}, \quad (9)$$

где  $\Delta\alpha = \alpha_{\text{HgTe}} - \alpha_{\text{GaAs/substrate}}$ ,  $\alpha_{\text{HgTe}}$  и  $\alpha_{\text{GaAs}}$  — коэффициенты теплового расширения HgTe и GaAs,  $\Delta T$  — интервал температур при охлаждении от температуры роста до комнатной температуры. Расчет напряжений для многослойной структуры может быть выполнен для каждого слоя [39].

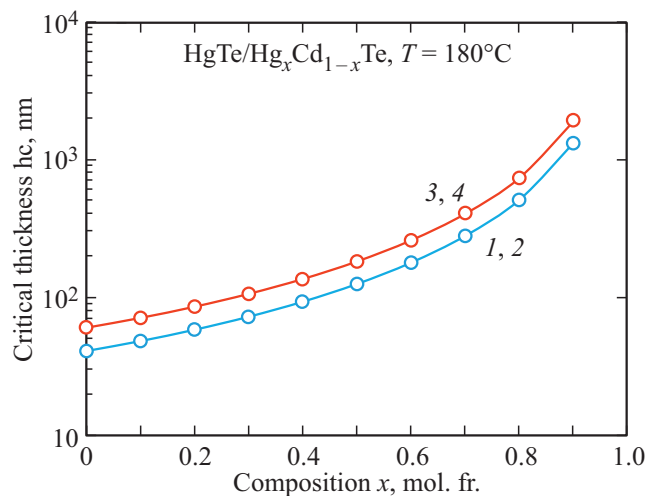
## 3. Обсуждением результатов

На рис. 1 представлена зависимость критической толщины  $h_c$  слоя HgTe в гетеропаре HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te от  $x$  при температуре 180°C для ДС скольжение 1, 2 и 3, 4.

Как следует из приведенных данных, с увеличением  $x$  толщина  $h_c$  значительно возрастает, но слабо зависит от температуры. Это связано с большим изменением несоответствия параметров решетки HgTe и Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te при изменении состава  $x$  и слабым изменением при изменении температуры, которые определяются постоянными решетки как следует из соотношения (2). Следует отметить, что полученные данные при  $x = 0$  практически совпадают с расчетом  $h_c$ , приведенном в [36] для гетеропары Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te/CdTe.

В табл. 2 приведены значения  $h_c$  слоя HgTe для гетеропары HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te для температур 120, 150 и 180°C при изменении состава  $x$  от 0 до 0.9 с шагом 0.1.

Критическая толщина  $h_c$  для ДС 1, 2 в 1.5 раза меньше, чем в случае ДС 3, 4 для всех температур

**Рис. 1.** ависимость критической  $h_c$  слоя HgTe при температуре роста 180°C.

**Таблица 2.** Критическая толщина псевдоморфного слоя HgTe для гетерпары HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te для двух ДС 1, 2 и 3, 4

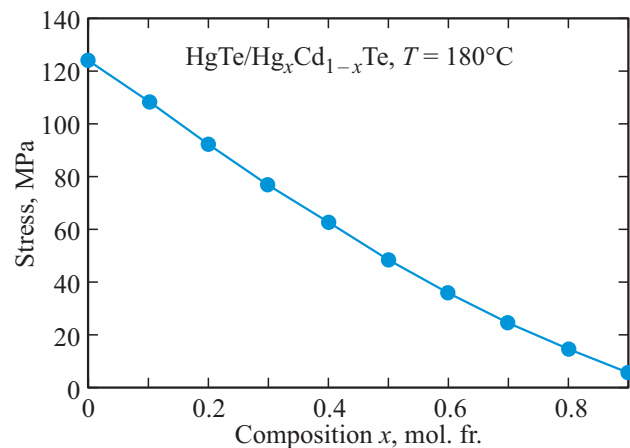
Состав подложки $x$ , mol.%	Критическая толщина псевдоморфного слоя HgTe, $h_c$ , nm					
	Температура роста, °C		Температура роста, °C		Температура роста, °C	
	120		150		180	
	Система скольжения дислокаций		Система скольжения дислокаций		Система скольжения дислокаций	
	1, 2	3, 4	1, 2	3, 4	1, 2	3, 4
0	37.0	54.7	38.6	57.0	40.8	60.2
0.1	43.7	64.5	45.7	67.3	48.2	71.0
0.2	52.9	77.8	55.2	81.2	58.3	85.6
0.3	65.7	96.4	68.6	100.6	72.4	106.1
0.4	84.6	123.7	88.3	129.0	93.1	136.0
0.5	113.8	165.9	118.7	173.0	125.2	182.3
0.6	162.7	236.4	169.7	246.5	178.8	259.6
0.7	254.6	368.0	265.4	384.2	279.5	404.5
0.8	465.0	670.5	484.5	698.4	510.0	734.9
0.9	1205.0	1728.1	1254.7	1799.1	1319.7	1891.8

роста и составляет 40–60 nm и 1200–1900 nm для  $x = 0$  и  $x = 0.9$  соответственно. Для обеих ДС наблюдается слабая температурная зависимость  $h_c$ . Следует отметить, что кинетические ограничения процессов введения ДН могут привести к увеличению  $h_c$ , которая может превышать расчетные значения в  $\sim 2$  раза для температуры роста  $\sim 180^\circ\text{C}$ , как показано для гетеропары Hg<sub>0.7</sub>Cd<sub>0.3</sub>Te/CdTe при начале введении дислокаций [34], наблюдаемой при толщине слоя Hg<sub>0.7</sub>Cd<sub>0.3</sub>Te 75 nm.

При выращивании слоя HgTe на подложке CdTe толщиной менее  $h_c$  параметр кристаллической решетки слоя HgTe будет иметь значение параметра решетки CdTe. Морфология поверхности слоев HgTe/CdTe с толщиной менее  $h_c$  будет иметь неровности на уровне нанометров. При превышении толщины слоев HgTe  $h_c$  морфология поверхности слоев будет постепенно изменяться от островковой до последующего их слияния и сглаживания поверхности. Экспериментальные исследования позволяют определить требуемую толщину сплошного слоя HgTe с минимальной неровностью поверхности. Легирование Fe до величины менее 1 at.% не должно оказать существенного влияния на морфологию поверхности.

При выращивании слоя HgTe на подложках с  $x \sim 0.8$ –0.9 толщина  $h_c$  составляет более 1000 nm (1  $\mu\text{m}$ ). Параметр кристаллической решетки слоя HgTe будет иметь значение слабо отличающиеся от параметра решетки кристалла HgTe. Морфология поверхности таких слоев HgTe/Cd<sub>0.1</sub>Hg<sub>0.9</sub>Te будет иметь неровности на уровне нанометров.

Изменение состава подложки  $x$  при выращивании слоев HgTe даст возможность изменять параметр кристаллической решетки слоев HgTe и состояние морфологии поверхности.

**Рис. 2.** Зависимость напряжений псевдоморфного слоя HgTe в гетеропаре HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te от состава  $x$  при температуре  $180^\circ\text{C}$ .

На рис. 2 приведена зависимость напряжений, вызванных несоответствием параметров решетки  $\sigma_{\text{misf}}$  в слое HgTe толщиной до  $h_c$  от состава Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te при  $180^\circ\text{C}$ .

Как видно из приведенных данных напряжения уменьшаются при увеличении состава  $x$ , что связано с уменьшением несоответствия параметров решетки HgTe и Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te в гетеропаре HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te.

В табл. 3 приведены напряжения  $\sigma_{\text{misf}}$  в слоях HgTe при температурах 120, 150 и  $180^\circ\text{C}$ .

При выращивании слоя HgTe на подложке CdTe напряжения составляют от 123–125 MPa при изменении температуры роста от  $180^\circ\text{C}$  до  $120^\circ\text{C}$ . При увеличении толщины слоя HgTe при выращивании на CdTe большей критической в  $\sim 20$  раз введение ДН приведет к уменьшению напряжения обратно пропорционально толщине

**Таблица 3.** Напряжения псевдоморфных слоев HgTe в гетеропаре HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te

Состав подложки <i>x</i> , mol.%	Напряжения HgTe в гетеропаре HgTe/Hg <sub>x</sub> Cd <sub>1-x</sub> Te, $\sigma_{\text{mist}}$ МПа		
	Температура роста, °С	Температура роста, °С	Температура роста, °С
	120	150	180
0	125.8	124.6	123.5
0.1	109.7	108.7	107.7
0.2	93.8	92.9	92.1
0.3	78.3	77.6	76.9
0.4	63.4	62.8	62.3
0.5	49.4	48.9	48.5
0.6	36.4	36.1	35.8
0.7	24.8	24.6	24.4
0.8	14.7	14.6	14.4
0.9	6.4	6.3	6.2

**Таблица 4.** Напряжения  $\sigma_{\text{term}}$  в слое HgTe после охлаждения от температуры роста до комнатной температуры

Коэффициент теплового расширения, $\Delta\alpha_T$ , 1/Т	Напряжения слоя HgTe при охлаждении $\sigma_{\text{тепл}}$ , МПа		
	Температура роста, °С	Температура роста, °С	Температура роста, °С
	120	150	18
для $\alpha_{\text{HgTe}} = 0.00000485$ 1/Т [40]	-5.1	-6.6	-6.8
для $\alpha_{\text{HgTe}} = 0.00000545$ 1/Т [41]	-1.0	-1.3	-1.4

слоя, как следует из выражения (5), и составят  $\sim 6$  МПа для всех температур.

При выращивании слоя HgTe на подложках с  $x \sim 0.9$  напряжения в слое HgTe толщиной 1000 nm составят 6 МПа при температурах роста 120–180°С.

Таким образом, в процессе роста слоя HgTe на подложках CdTe и Hg<sub>x</sub>0.9Cd<sub>0.1</sub>Te, будут получены слои HgTe с одинаковыми остаточными напряжениями, вызванными несоответствием параметров решетки, но с различным структурным совершенством — слоями с введенными ДН и псевдоморфными слоями.

Выбор состава подложки, требуемой толщины слоя HgTe и температуры роста позволят получить материал с изменением напряжений в широком диапазоне значений и различного структурного совершенства.

В табл. 4 приведены данные по напряжениям в слое HgTe в структуре HgTe/Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te/CdTe/ZnTe/GaAs после охлаждения от температуры роста до комнатной температуры (300 K). Значения коэффициентов теплового расширения для HgTe и GaAs взяты из литературных источников и составили  $\alpha_{\text{HgTe}} = 0.00000485$  1/Т [40],  $\alpha_{\text{HgTe}} = 0.00000545$  1/Т [41] и  $\alpha_{\text{GaAs}} = 0.0000056$  1/Т [42].

Полученные значения напряжений при охлаждении от температур роста 120, 150 и 180°С до комнатной температуры вследствие несоответствия коэффициентов термического охлаждения сравнимы с напряжениями, определяемыми различием параметров кристаллической решетки при тех же температурах роста с использованием данных из [40]. Для данных несоответствия

коэффициентов термического охлаждения из [41] получена низкая величина напряжений при охлаждении от температур роста до комнатной температуры. Знак напряжений свидетельствует о сжатии слоев HgTe при охлаждении.

Таким образом, можно ожидать, что суммарные напряжения  $\sigma_{\text{mech}}$  слоев HgTe после роста, определяемые по формуле (4) будут отсутствовать в выращенных слоях HgTe толщиной 1000 nm или иметь слабое растяжение, напряжение для которого составит  $\sim 5$  МПа при сопряжении слоев HgTe с Hg<sub>0.9</sub>Cd<sub>0.1</sub>Te и с CdTe.

Проведенное моделирование критической толщины  $h_c$  слоев и напряжений  $\sigma_{\text{mech}}$  позволяет провести анализ возможного состояния кристаллической структуры слоев HgTe при их выращивании и легирования железом.

## 4. Заключение

Проведено моделирование параметров слоев HgTe при выращивании методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на поверхности Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te в составе структуры (013)Hg<sub>x</sub>Cd<sub>1-x</sub>Te/CdTe/ZnTe/GaAs для последующего легирования Fe.

Проведен расчет и получены значения критической толщины ( $h_c$ ) псевдоморфного слоя HgTe при выращивании на подложках Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te с различным содержанием кадмия и при различных температурах роста. Показано, что величина  $h_c$  определяется несоответствием параметров решетки и слабо зависит от температуры.

Проведен расчет и получены значения напряжений слоев HgTe в гетеропаре HgTe/Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te от величины несоответствия параметров решетки при различных температурах и при охлаждении до комнатной температуры. Найдено, что напряжения определяются несоответствием параметров решетки, практически не зависят от температуры роста и приводят к растяжению решетки HgTe. Охлаждение приводит к небольшим напряжениям сжатия.

Полученные данные позволяют проводить оценку структурного состояния слоев HgTe и определять условия их выращивания.

### Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00126, <https://rscf.ru/project/23-22-00126/>

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] V.I. Okulov, T.E. Govorkova, V.V. Gudkov, I.V. Zhevstovskikh, A.V. Korolyev, A.T. Lonchakov, K.A. Okulova, E.A. Pamyatnykh, S.Yu. Paranchich. *Low Temp. Phys.* **33**, 207 (2007).
- [2] T.E. Govorkova, I.V. Zhevstovskikh, A.T. Lonchakov, V.I. Okulov, K.A. Okulova, S.M. Podgornykh, S.B. Bobin, V.V. Deryushkin, L.D. Paranchich. *Low Temp. Phys.* **43**, 508 (2017).
- [3] A.T. Lonchakov, V.I. Okulov, T.E. Govorkova, M.D. Andriichuk, L.D. Paranchich. *JETP Lett.* **96**, 405 (2012).
- [4] V.I. Okulov, T.E. Govorkova, I.V. Zhevstovskikh, A.T. Lonchakov, K.A. Okulova, E.A. Pamyatnykh, S.M. Podgornykh, M.D. Andriichuk, L.D. Paranchich. *Low Temp. Phys.* **39**, 384 (2013).
- [5] T.E. Govorkova, A.T. Lonchakov, V.I. Okulov, M.D. Andriichuk, A.F. Gubkin, L.D. Paranchich. *Low Temp. Phys.* **41**, 154 (2015).
- [6] V.I. Okulov. *Low Temp. Phys.* **30**, 897 (2004).
- [7] V.I. Okulov, E.A. Pamyatnykh, V.P. Silin. *Low Temp. Phys.* **37**, 798 (2011).
- [8] T.E. Govorkova, V.I. Okulov. *Low Temp. Phys.* **44**, 1221 (2018).
- [9] T.E. Govorkova, V.I. Okulov, K.A. Okulova. *Low Temp. Phys.* **45**, 234 (2019).
- [10] T.E. Govorkova, V.I. Okulov. *Phys. Solid State* **64**, 58 (2022).
- [11] T.E. Govorkova, V.I. Okulov, E.A. Pamyatnykh, V.S. Gaviko, V.T. Surikov. *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **87**, 735 (2023).
- [12] Th. Widmer, D. Schikora, G. Hendorfer, S. Luther, W. Jantsch, K. Lischka, M.v. Ortenberg. *Mater. Sci. Forum* **182–184**, 395 (1995).
- [13] D. Schikora, Th. Widmer, C. Prott, K. Lischka, P. Schäfer, G. Machel, S. Luther, M. von Ortenberg. *Solid State Electron.* **40**, 63 (1996).
- [14] F.S. Pool, J. Kossut, U. Debska, R. Reifengerger. *Phys. Rev. B* **35**, 3900 (1987).
- [15] D. Schikora, Th. Widmer, K. Lischka, P. Schäfer, G. Machel, S. Luther, M. von Ortenberg. *J. Cryst. Growth* **159**, 959 (1996).
- [16] L. Parthier, H. Wißmann, S. Luther, G. Machel, M. Schmidbauer, R. Kiihler, M. von Ortenberg. *J. Cryst. Growth* **175/176**, 642 (1997).
- [17] D. Schikora, T. Widmer, K. Lischka, P. Schäfer, G. Machel, S. Luther, M. von Ortenberg. *Phys. Rev. B* **52**, 12072 (1995).
- [18] C.R. Becker, L. He, S. Einfeldt, Y.S. Wu, H. Heinke, S. Oehling, R.N. Bicknell-Tassius, G. Landwehr. *J. Cryst. Growth* **127**, 331 (1993).
- [19] J.P. Faurie, S. Sivananthan, M. Boukerche, J. Reno. *Appl. Phys. Lett.* **45**, 1307 (1984).
- [20] E. Selvig, C.R. Tonheim, K.O. Kongshaug, T. Skauli, T. Lorentzen, R. Haakenaasen. *J. Vac. Sci. Technol. B* **25**, 1776 (2007).
- [21] E. Selvig, C.R. Tonheim, T. Lorentzen, K.O. Kongshaug, T. Skauli, R. Haakenaasen. *J. Electron. Mater.* **37**, 1444 (2008).
- [22] M. König, S. Wiedmann, A. Roth, H. Buhmann, L.W. Molekamp, X.L. Qi, S.C. Zhang. *Science* **318**, 766 (2007).
- [23] З.Д. Квон, Е.Б. Ольшанецкий, Д.А. Козлов, Н.Н. Михайлов, С.А. Дворецкий. *Письма в ЖЭТФ* **87**, 588 (2008).
- [24] C. Brune, C.X. Liu, E.G. Novik, E.M. Hankiewicz, H. Buhmann, Y.L. Chen, X.L. Qi, Z.X. Shen, S.C. Zhang, L.W. Molekamp. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 126803 (2011).
- [25] E.B. Olshansky, Z.D. Kvon, S.S. Kobylkin, D.A. Kozlov, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretzky, J.C. Portal. *JETP Lett.* **93**, 9, 526 (2011).
- [26] S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov, Yu.G. Sidorov, V.A. Shvets, S.N. Danilov, B. Wittmann, S.D. Ganichev. *J. Electron. Mater.* **39**, 7, 918 (2010).
- [27] M.V. Yakunin, A.V. Suslov, M.R. Popov, E.G. Novik, S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov. *Phys. Rev. B* **93**, 085308 (2016).
- [28] S.V. Gudina, Yu.G. Arapov, V.N. Neverov, S.M. Podgornykh, M.R. Popov, N.G. Shelushinina, M.V. Yakunin, S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov. *Phys. Status Solidi C* **13**, 7–9, 473 (2016).
- [29] S.V. Morozov, V.V. Romyantsev, M.A. Fadeev, M.S. Zholudev, K.E. Kudryavtsev, A.V. Antonov, A.M. Kadykov, A.A. Dubinov, N.N. Mikhailov, S.A. Dvoretzky, V.I. Gavrilenko. *Appl. Phys. Lett.* **111**, 19, 192101 (2017).
- [30] M.A. Fadeev, V.V. Romyantsev, A.M. Kadykov, A.A. Dubinov, A.V. Antonov, K.E. Kudryavtsev, S.A. Dvoretzky, N.N. Mikhailov, V.I. Gavrilenko, S.V. Morozov. *Opt. Express* **26**, 10, 12755 (2018).
- [31] J.W. Matthews. *J. Vac. Sci. Technol.* **12**, 126 (1975).
- [32] Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, С.И. Чикичев. *УФН* **171**, 7, 689 (2001).
- [33] Е.М. Труханов, А.В. Колесников, И.Д. Лошкарев. *Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед.* **5**, 100 (2014).
- [34] Ю.Г. Сидоров, М.В. Якушев, В.С. Варавин, А.В. Колесников, Е.М. Труханов, И.В. Сабинина, И.Д. Лошкарев. *ФТТ* **57**, 11, 2095 (2015).

- [35] P. Capper. EMIS Datareviews Ser. N 10. INSPEC, London (1994). P. 41.
- [36] M. Carmody, J.G. Pasko, D. Edwall, R. Bailey, J. Arias, M. Groenert, L.A. Almeida, J.H. Dinan, Y. Chen, G. Brill, N.K. Dhar. *J. Electron. Mater.* **35**, 6, 1417 (2006).
- [37] I.V. Kurilo, V.P. Alekhin, I.O. Rudyi, S.I. Bulychev, L.I. Osypyshin. *Phys. Status Solidi A* **163**, 47 (1997).
- [38] M.A. Berding, W.D. Nix, D.R. Rhiger, S. Sen, A. Sheer. *J. Electron. Mater.* **29**, 676 (2000).
- [39] А.Р. Шугуров, А.В. Панин. *ЖТФ* **90**, 12, 1971 (2020).  
A.R. Shgurov, A.V. Panin. *Tech. Phys.* **65**, 1881 (2020).
- [40] T. Skauli, R. Haakenaasen, T. Colin. *J. Cryst. Growth* **241**, 39 (2002).
- [41] P. Gergaud, A. Jonchére, B. Amstatt, X. Baudry, D. Brellier, P. Ballet. *J. Electron. Mater.* **41**, 2694 (2012).
- [42] V.K. Yang, M. Groenert, C.W. Leitz, A.J. Pitera, M.T. Currie, E.A. Fitzgerald. *J. Appl. Phys.* **93**, 7, 3859 (2003).

*Редактор Т.Н. Василевская*