

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ СВОЙСТВ СПЛАВОВ $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$

Аннотация.

Актуальность и цели. В литературе отмечается возможность создания на основе полупроводниковых твердых растворов элементов IV группы периодической системы интересных оптоэлектронных приборов с возможностью встраивания в кремниевую технологию. Сплав $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ наиболее перспективен для этого и интенсивно изучается экспериментально и теоретически. Целью данной работы является моделирование его структурных свойств: изменения кристаллической решетки, длин межатомных связей, углов между связями в зависимости от состава.

Материалы и методы. Исследуется твердый раствор $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ как в практически важном диапазоне доли олова $0 < x < 0,2$, так и при теоретически интересном любом значении x . Моделируется кластер примерно из 4 тысяч атомов, который исследуется методом молекулярной динамики с применением потенциала Терсоффа.

Результаты. Получены зависимости параметра решетки, длин связей, углов между связями от состава. Проведено сравнение с экспериментальными и расчетными (*ab initio*) результатами. Обнаружены отклонение от закона Vegarda, существенно разный вклад связей Ge-Ge, Ge-Sn, Sn-Sn в искажение решетки при изменении состава сплава.

Выводы. Полученные результаты могут быть использованы при оценке упруго-напряженного состояния пленок GeSn, выращенных на различных подложках. Изучение сплава $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ методом молекулярной динамики позволяет проводить исследования на больших по размеру кластерах, чем при квантово-механических расчетах и получать сопоставимые результаты.

Ключевые слова: твердые растворы, сплав германий-олово, метод молекулярной динамики, потенциал Терсоффа.

A. S. Vasin

MODELING OF STRUCTURAL PROPERTIES OF $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ ALLOYS

Abstract.

Background. The literature indicates the possibility of creating interesting optoelectronic devices on the basis of semiconductor solid solutions of elements of group IV of the periodic system with the prospect of integration into silicon technology. The $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloy seems to be the most promising for this purpose and is intensively studied experimentally and theoretically. The aim of this work is to model the alloy's structural properties: restructuring of the crystal lattice, lengths of atomic bonds, angles between bonds depending on the composition.

Materials and methods. The author investigated a $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ solid solution both for the practically important range of tin fraction $0 < x < 0,2$, and for any theoretically interesting value of x . There was simulated a cluster of about 4 thousand atoms, which was investigated by molecular dynamics (MD) using the Tersoff potential.

Results. The researcher has obtained dependences of lattice parameters, bond lengths, angles between bonds on the composition, as well as compared with experimental and calculated (*ab initio*) results. There has been discovered a deviation from the Vegard law, as well as significantly different contributions of Ge-Ge, Ge-Sn, Sn-Sn bonds in the lattice distortion when changing the composition of the alloy.

Conclusions. The obtained results can be used in evaluation of the elastic-stress state of GeSn films grown on various substrates. The study of the $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ alloy by the MD method allows to conduct researches on much larger clusters than by quantum-mechanical calculations and to obtain comparable results

Key words: solid solutions, germanium–tin alloy, molecular dynamics method, Tersoff potential.

Введение

Полупроводниковые сплавы на основе элементов IV группы GeSn, GeSnSi интенсивно изучаются в последние годы [1–9]. Интерес связан с возможностью создания прямозонного полупроводникового материала, совместимого с кремниевой технологией, с независимой регулировкой постоянной решетки и/или ширины запрещенной зоны. Это позволит разработать новые оптоэлектронные устройства в различных областях применения: фотоприемники в ближнем и дальнем инфракрасном диапазоне, мультиквантовые лазеры, излучатели и модуляторы. В качестве большого достоинства отмечается тот факт, что пленки GeSn произвольной толщины и хорошего качества могут быть выращены прямо на кремнии и могут быть использованы в виде универсальной подложки для выращивания аналогов GeSnSi из элементов III–V групп.

Технологические особенности выращивания эпитаксиальных пленок GeSn и GeSnSi приводят к тому, что они получаются, как правило, упруго-напряженными. Деформации в пленках связаны как с несоответствием параметров решеток Ge, Si, Sn, так и с геометрией (в первую очередь, толщиной) пленок и их термическими свойствами (коэффициентом термического расширения). Кроме того, послеростовая термическая обработка может изменить упруго-напряженное состояние за счет движения дислокаций несоответствия на границах эпитаксиальных слоев. Разработка методов контролируемого управления деформациями эпитаксиальных пленок позволяет говорить о деформационной инженерии при создании устройств полупроводниковой электроники [1, 5, 9]. Ближайшая перспектива – создание буферных слоев с перестраиваемыми структурными и термическими свойствами.

Свойства эпитаксиально выращенных полупроводниковых пленок $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ изучаются различными экспериментальными и теоретическими методами. Экспериментально с высокой точностью определяются параметры решетки, состав x , толщины и однородность выращенных слоев, наблюдаются границы раздела слоев с дислокациями несоответствия, косвенно оцениваются деформации в плоскости пленки и перпендикулярно к ней. Теоретические расчеты (как правило, *ab initio*) позволили рассчитать равновесный параметр решетки [1, 2, 4, 10, 11], энергетическую зонную структуру [2, 5, 12]. Одним из самых информационных экспериментальных методов является рамановская спектроскопия, основанная на явлении комбинационного рассеяния света (КРС). Эта неразрушающая методика позволяет получить сведения о составе пленок и деформациях в них [8, 9, 13, 14].

Мы предлагаем расчет структурных свойств на основе полуэмпирического потенциала межатомного взаимодействия Терсоффа. Такой подход позволяет с других позиций изучить искажения кристаллической решетки при образовании сплава, исследовать отклонения от закона Вегарда, получить конкретные структурные характеристики во всем диапазоне изменения x .

1. Методика моделирования

Аналогично нашим предыдущим работам [15, 16] моделировался кластер из N^3 атомов в виде куба размером $N \times N \times N$ элементарных ячеек идеальной алмазной структуры. При $N = 8$ кластер включает 4096 атомов, размер куба $\approx 4,5\text{--}5,2$ нм. Первоначальный параметр решетки выбирался в соответствии с составом x исходя из закона Вегарда. Узлы построенной таким образом решетки заполнялись случайно долей x атомов Sn и долей $(1 - x)$ атомов Ge. Взаимодействие между атомами задавалось потенциалом Терсоффа [17, 18], приспособленным для описания межатомных связей элементов IV группы и наиболее часто используемым для моделирования кристаллов со структурой алмаза.

В силу различия параметров решетки чистых германия и α -олова полученная структура оказывалась неравновесной. Далее по методу молекулярной динамики с использованием алгоритма Верле проводилась ее релаксация к минимуму потенциальной энергии. Применялись периодические граничные условия. Диссипация энергии осуществлялась за счет искусственного уменьшения кинетической энергии в определенные моменты времени.

После релаксации рассчитывались структурные характеристики: длины связей между соседними атомами различных типов – Ge-Ge, Ge-Sn, Sn-Sn, их средние значения и гистограммы распределения по величине, то же самое – для различных углов между связями. Также строились парные корреляционные функции для атомов моделируемого кристаллита с учетом периодических граничных условий, определяемые как $g(r) = ni(r) / n$, где ni – среднее число центров атомов Ge или Sn, попадающих в сферический слой радиусом от r до $r + \Delta r$ с центром в атоме того же типа, n – полное число атомов этого типа. При этом оказалось достаточно рассмотреть не более 3–4 координационных сфер и взять Δr равной одной сотой от параметра решетки. Как известно [19], парная корреляционная функция характеризует ближний порядок сплава.

При проведении расчетов выяснилось, что наибольшие отклонения от средних значений возникают из-за первоначального случайного распределения атомов олова по узлам идеальной геометрической структуры. Поэтому все приводимые ниже результаты получены усреднением не менее, чем по десяти случайным реализациям моделируемого кристаллита.

2. Результаты и их обсуждение

Отступление от закона Вегарда

Для рассматриваемых сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ в первом приближении считается, что параметр решетки линейно зависит от состава x :

$$a_{\text{GeSn}}(x) = a_{\text{Ge}}(1 - x) + a_{\text{Sn}}x, \quad (1)$$

где a_{Ge} , a_{Sn} – параметры решеток чистых Ge и α -Sn, соответственно. Соотношение (1), как известно, называется законом Вегарда. Однако эксперименты и модельные расчеты [1–3, 6,11] показывают отклонение от этого закона при более точном рассмотрении. Оказывается также, что при сравнении с аналогичным сплавом $Ge_{1-x}Si_x$ величина отклонения существенно больше и знак отклонения не отрицательный, а положительный. Предложено вместо (1) использовать формулу

$$a_{GeSn}(x) = a_{Ge}(1-x) + a_{Sn}x + \theta(1-x)x, \quad (2)$$

где константу θ называют параметром наклона. О величине θ пока нет единого мнения, тем более для всего диапазона изменения x (заметим, что экспериментально достигнуты значения $0 < x < 0,2$, теоретические *ab initio* расчеты имеются и при некоторых других составах).

По нашей модели мы рассчитали значения параметра решетки в зависимости от состава для x с шагом 0,1 при нулевой температуре (т.е. когда движение всех атомов прекращается). Для заданного состава первоначально задавался параметр решетки $a_{GeSn}^{(0)}$, соответствующий линейному закону Вегарда, и определялась потенциальная энергия кристаллита после релаксации. Также рассчитывались аналогичные потенциальные энергии при небольшом отклонении a_{GeSn} от $a_{GeSn}^{(0)}$. Зависимость потенциальной энергии от a_{GeSn} имеет минимум, определение которого и было целью расчетов. На рис. 1 показана зависимость равновесного параметра решетки от состава x и его отклонение $\Delta a_{GeSn} = a_{GeSn} - a_{GeSn}^{(0)}$ от закона Вегарда. Здесь же приведена кривая, подгоняющая расчетные данные под формулу (2).

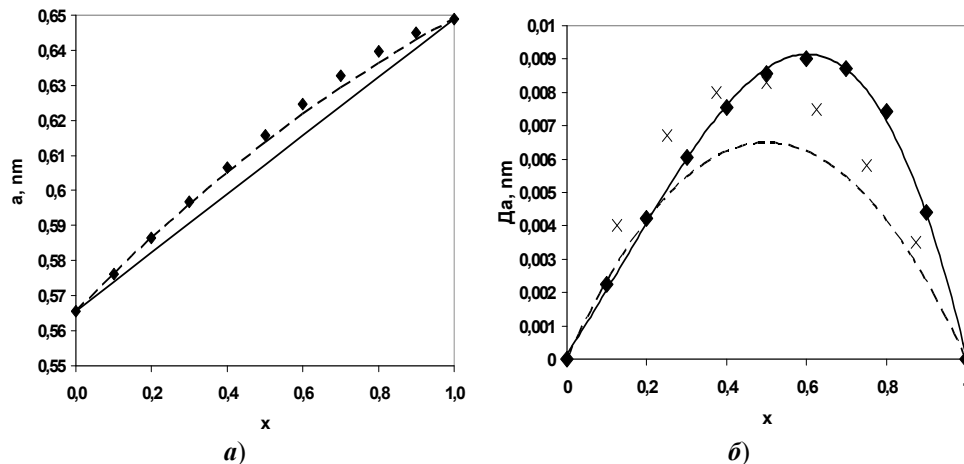


Рис. 1. Зависимость параметра решетки от доли олова (а) и отклонение от закона Вегарда (б): ромбы – наши данные; штриховая линия – подгонка по формуле (2); сплошная линия на (а) – по закону Вегарда; сплошная линия на (б) – подгонка по формуле (3); крестики на (б) – расчет [4]

Наилучший результат в практически важной области составов $0 < x < 0,2$ получается при $\theta = 0,026$ нм. Это значение существенно отличается

ся от полученного в [6] из эксперимента значения 0,00088 нм (с ошибкой, превышающей само это значение), но близко к расчетному *ab initio* значению 0,032 нм [4]. Видно, что наши результаты отличаются от симметричной кривой, полученной по (2). Максимальное отклонение от закона Вегарда достигается при $x = 0,6$, а не при $x = 0,5$. Аппроксимация полиномом третьей степени дает зависимость

$$\Delta a = 0,018x + 0,014x^2 - 0,032x^3, \text{ нм.} \quad (3)$$

Сравнение наших данных с результатами других работ в практически важной области составов показано на рис. 2. Видно, что приведенные зависимости $a(x)$ несколько отличаются друг от друга. Отчасти это связано с различными методами расчета и различными методами получения эпитаксиальных пленок, погрешностями измерений. Экспериментальные данные также могут отличаться из-за остаточных упругих напряжений в пленках. Видно, что результаты наших расчетов с использованием потенциала Терсоффа в целом хорошо согласуется с другими данными в области малых значений x .

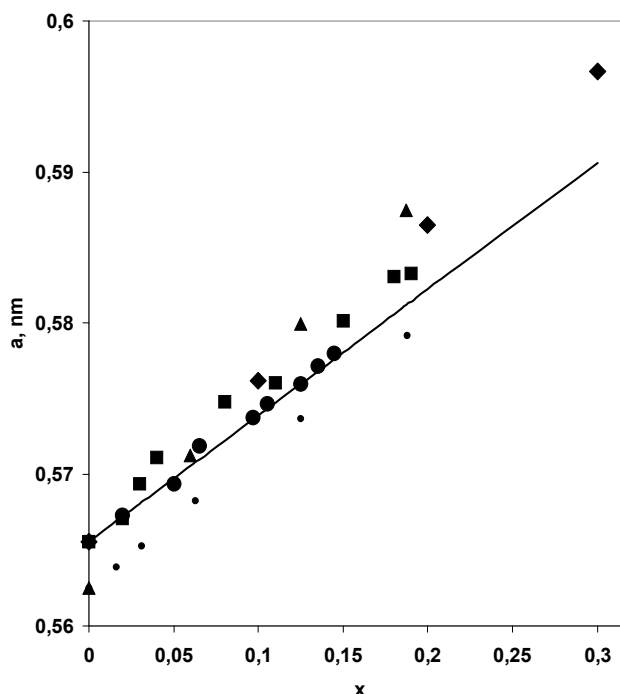


Рис. 2. Параметр решетки в зависимости от состава в области малых значений x : сравнение с литературными данными. Ромбы – наши результаты; треугольники – расчет по теории функционала плотности (ТФП) [3]; квадраты – экспериментальные данные на пленках, выращенных химическим осаждением из пара [11]; кружки – экспериментальные данные на пленках, полученных молекулярно лучевой эпитаксией [6]; точки – расчет по ТФП, но для упорядоченных (не случайных) сплавов [1]; прямая линия – по закону Вегарда

Длины связей

На рис. 3 показаны зависимости от доли олова длин межатомных связей разного типа: Sn-Sn, Sn-Ge, Ge-Ge. Видно, что они существенно отлича-

ются от закона Вегарда. Это свидетельствует о том, что при включении в алмазную решетку германия атомов олова решетка перестраивается несимметричным образом, т.е. перестает быть алмазной. Похожие закономерности обнаружены и при моделировании сплава GeSi [15], но здесь эти отклонения значительно больше, что связано с большим отличием параметра решетки α -Sn от параметра решетки Ge, чем у Si и Ge. Видно также, что длины связей Sn-Sn менее всего изменяются с составом, к тому же при малых x эта зависимость нелинейная. Кроме того, рис. 3 показывает, что сильнее изменяются связи Sn-Ge, а слабее – связи Sn-Sn, что отличается от работы [20], в которой сильнее всего изменяются связи Ge-Ge

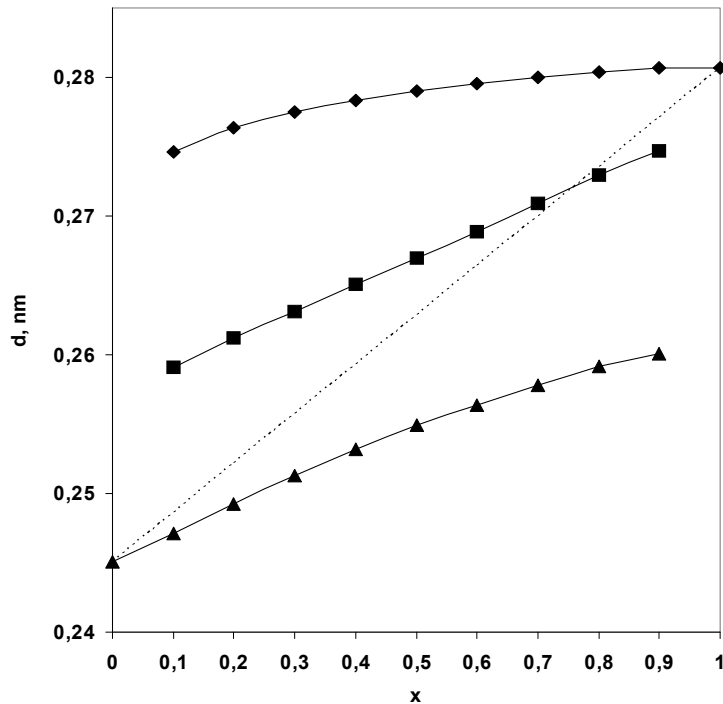


Рис. 3. Зависимость длин связей от доли олова. Ромбы – связи Sn-Sn; квадраты – Ge-Sn; треугольники – Ge-Ge; штриховая линия – по закону Вегарда

Дополнительно были построены гистограммы распределения длин связей при $x = 0,1$ и $x = 0,5$, которые изображены на рис. 4. Из гистограмм видно, что увеличение доли олова дает сдвиг и уширение пиков соответствующим связям Ge-Ge и Ge-Sn, однако разброс длин связей Sn-Sn почти не увеличивается, хотя максимум этого пика тоже смещается в соответствии с рис. 3.

Важным представляется моделирование парных корреляционных функций согласно методике, описанной в [19]. Данные функции показывают вероятность нахождения атома в сферическом слое шириной dr на расстоянии r от другого атома. Парная корреляционная функция является инструментом для описания ближнего порядка. На рис. 5 показаны $g(r)$ для $x = 0,25$. Пики соответствуют расположению атомов в первой, второй и т.д. координационных сферах для Ge и Sn соответственно. Видно, что ближний порядок для связей Ge-Ge и Sn-Sn различается только в пределах первой координа-

онной сферы: первые пики для Ge и Sn смещены. В дальних координационных сферах расположение атомов некоррелированно (пики для германия и олова находятся при одних и тех же значениях r и они более широкие). Эта же закономерность наблюдается и при других значениях x . Заметим, что уширение пиков связано не с тепловым движением, а со случайностью распределения атомов Ge и Sn по расчетной ячейке.

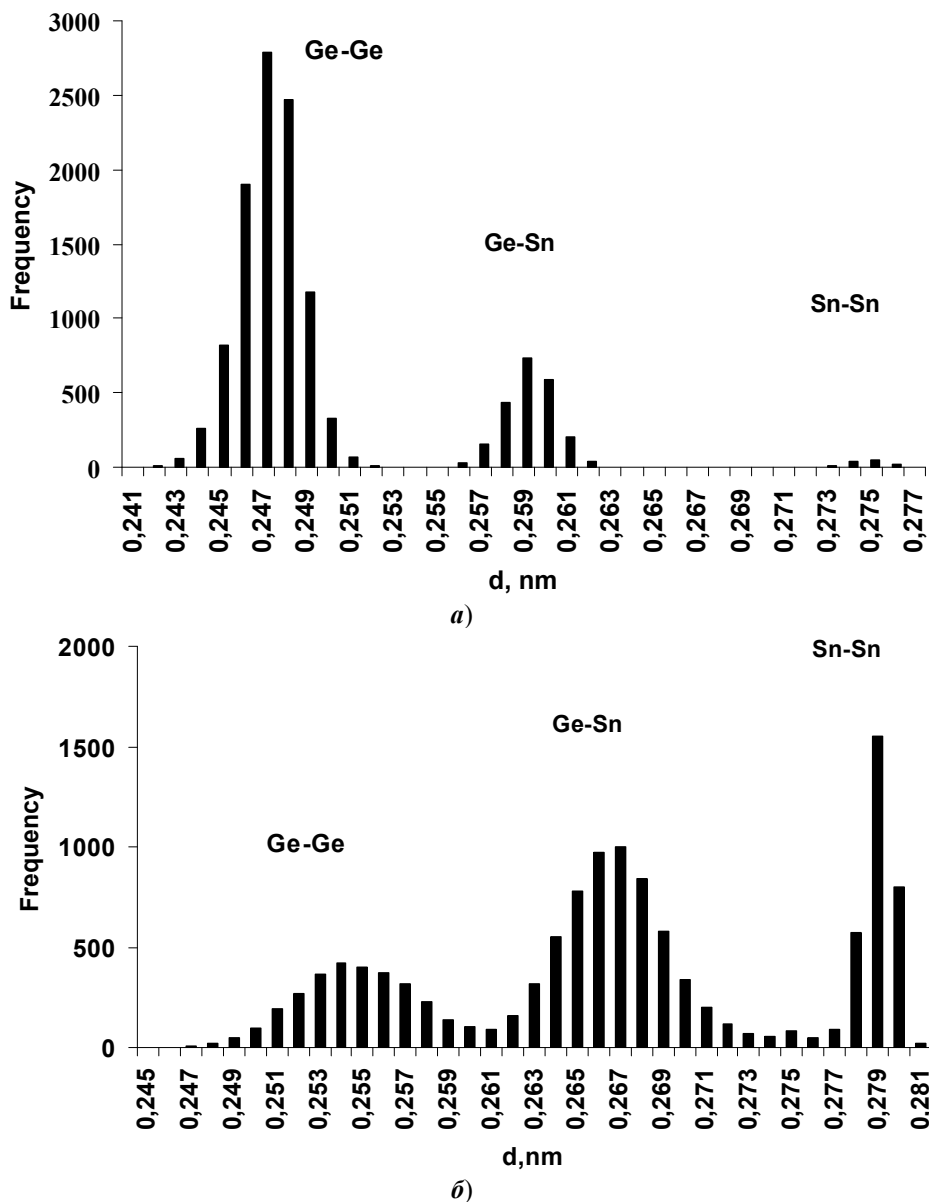


Рис. 4. Гистограммы распределения длин связей при: *а)* $x=0,1$; *б)* $x=0,5$

Углы между связями

О перестройке кристаллической структуры сплава с увеличением доли олова свидетельствует также изменение углов между связями ближайших со-

седей. Всего таких углов получается шесть: Sn-Sn-Sn, Sn-Sn-Ge и т.д. Гистограммы распределения по величине для некоторых из них показаны на рис. 6. Видно, что углы распределены в достаточно широком диапазоне и максимумы распределения смещены от значения тетраэдрического угла $109,5^\circ$ идеальной алмазной структуры. В частности, углы между связями Sn-Sn-Sn оказываются в среднем меньше, а углы между связями Ge-Ge-Ge – в среднем больше $109,5^\circ$.

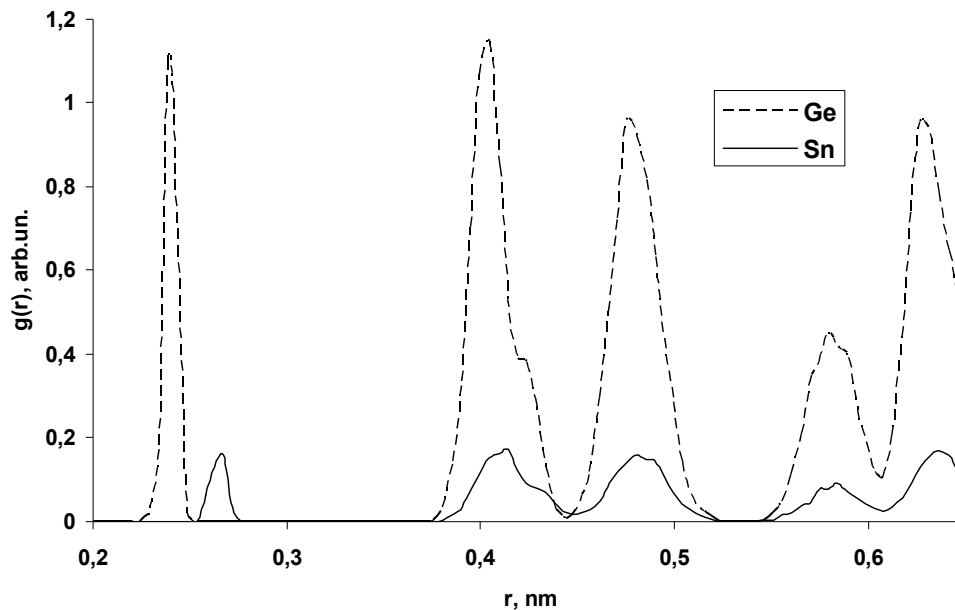


Рис. 5. Парная корреляционная функция для сплава $\text{Ge}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}$; r – радиус просмотра. Каждый пик соответствует определенной координационной сфере

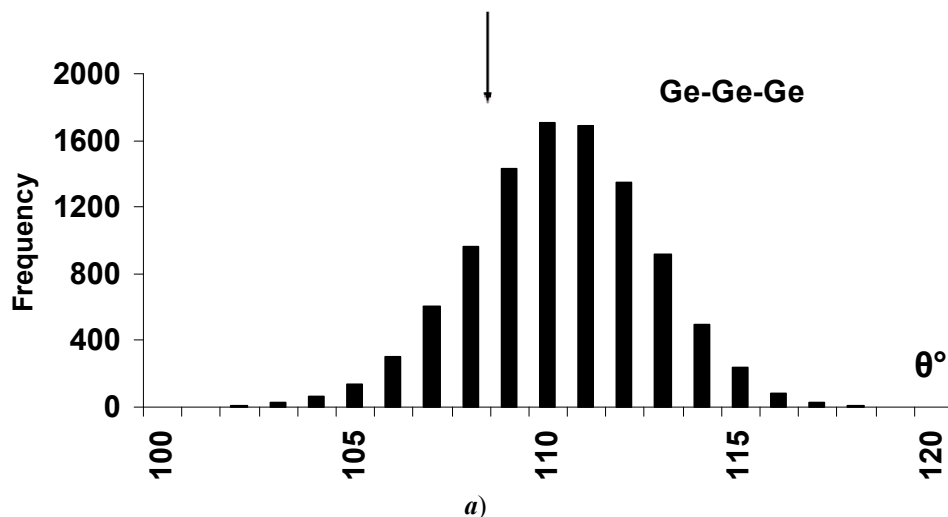


Рис. 6. Гистограммы распределения углов между связями при $x = 0,2$. Стрелка показывает теоретическое значение тетраэдрического угла ($109,5^\circ$) в алмазной решетке (см. также с. 110)

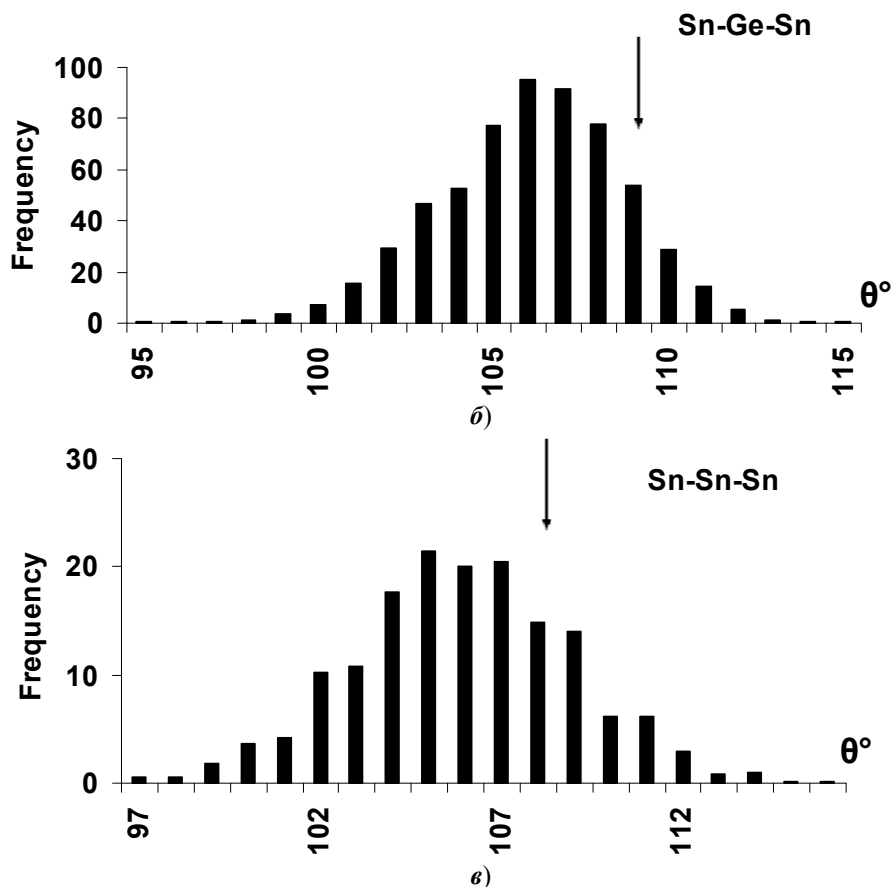


Рис. 6. Окончание

Таким образом, кристаллическая структура сплава GeSn при релаксации перестраивается весьма существенно и перестает подчиняться закону Вегарда, который предполагает изменение алмазной структуры с составом линейным образом. Важнейший вклад в данный результат вносит именно нестабильность алмазной структуры α -Sn в области малого содержания олова. Вместе с тем это искажение не настолько велико, чтобы говорить об отсутствии периодичности, что и подтверждают результаты экспериментов по определению параметра решетки сплавов методами рентгеновской дифрактометрии.

Заключение

Результаты расчетов по модели, использующей полуэмпирический потенциал Терсоффа, показывают достаточно хорошее соответствие с экспериментальными и расчетными (из первых принципов) результатами. Это проявляется как при исследовании параметра решетки и его отклонения от закона Вегарда, так и при изучении длин связей и углов между ними. Кроме того, наши расчеты выявили различие в расположении атомов Ge и Sn в первой координационной сфере, в отличие от расположения в дальних сферах.

Следует также отметить, что модель на основе потенциала Терсоффа строится для значительно большего числа атомов, требует меньших вычислительных ресурсов и достаточно просто программируется.

Список литературы

1. GeSn semiconductors for band-gap and lattice engineering / M. Bauer, J. Taraci, J. Tolle, A.V.G. Chizmeshya, S. Zollner, David J. Smith, J. Menendez, Changwu Hu, J. Kouvetakis // *Appl. Phys. Lett.* – 2002. – Vol. 81. – P. 2992–2994.
2. **Kouvetakis, J.** Tin-based group IV semiconductors: new platforms for opto – and microelectronics on silicon / J. Kouvetakis, J. Menendez, A. V. G. Chizmeshya // *Ann. Rev. Mater. Res.* – 2006. – Vol. 36. – P. 497 – 554.
3. **Chibane, Y.** Electronic structure of $\text{Sn}_x\text{Ge}_{1-x}$ alloys for small Sn compositions: unusual structural and electronic properties / Y. Chibane, M. Ferhat // *J. Appl. Phys.* – 2010. – Vol. 107. – P. 053512.
4. **Pulikkotil, J. J.** Structure of $\text{Sn}_{1-x}\text{Ge}_x$ random alloys as obtained from the coherent potential approximation / J. J. Pulikkotil, A. Chroneos, U. Schwingenschlögl // *J. Appl. Phys.* – 2011. – Vol. 110. – P. 036105.
5. **Gupta, S.** Achieving direct band gap in germanium through integration of Sn alloying and external strain / S. Gupta, B. Magyari-Kope, Y. Nishi, K. C. Soraswat // *J. Appl. Phys.* – 2013. – Vol. 113. – P. 073707.
6. Lattice constant and substitutional composition of GeSn alloys grown by molecular beam epitaxy / N. Bhargava, M. Coppinger, J. Prakash Gupta, L. Wielunski, J. Kolodzey // *Appl. Phys. Lett.* – 2013. – Vol. 103. – P. 041908.
7. **Ventura, C. I.** Electronic structure of $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ ternary alloys for multijunction solar cells / C. I. Ventura, J. D. Querales-Flores, J. D. Fuhr, R. A. Barrio // *Prog. Photovolt: Res. Appl.* – 2015. – Vol. 23. – P. 112–118.
8. **Kasper, E.** Germanium tin: silicon photonics toward the mid-infrared / E. Kasper, M. Kittler, M. Oehme, T. Arguirov // *Photon. Res.* – 2013. – Vol. 1. – P. 69–76.
9. Strain and composition effects on Raman vibrational modes of silicon-germanium-tin ternary alloys / J.-H. Fournier-Lupien, S. Mukherjee, S. Wirths, E. Pippel, N. Hayazawa, G. Mussler, J. M. Hartmann, P. Desjardins, D. Buca, O. Moutanabbir // *Appl. Phys. Lett.* – 2013. – Vol. 103. – P. 263103.
10. **Shen, J.** *Ab initio* calculation of the structure of the random alloys $\text{Sn}_x\text{Ge}_{1-x}$ / J. Shen, J. Zi, X. Xie // *Phys. Rev. B.* – 1997. – Vol. 53. – P. 12084–12087.
11. **Chizmeshya, A. V. G.** Experimental and theoretical study of deviations from Vegard's law in the $\text{Sn}_x\text{Ge}_{1-x}$ system / A. V. G. Chizmeshya, M. R. Bauer, J. Kouvetakis // *Chem. Mater.* – 2003. – Vol. 15. – P. 2511–2519.
12. Electronic band structures of $\text{Sn}_x\text{Ge}_{1-x}$ semiconductors: A first-principles density functional theory study / M. H. Lee, P. L. Liu, Y. A. Hong, Y. T. Chou, J. Y. Hong, J. Y. Siao // *J. Appl. Phys.* – 2013. – Vol. 113. – P. 063517.
13. Relaxed and strained patterned germanium-tin structures: A Raman scattering study / R. Cheng, W. Wang, X. Gong, L. F. Sun, P. F. Guo, H. L. Hu, Z. X. Shen, G. Q. Han, Y. C. Yeo // *ECS J. Solid State Science and Technology.* – 2013. – Vol. 2. – P. 138–145.
14. The strain dependence of $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ ($x=0.083$) Raman shift / C. Chang, H. Li, T. P. Chen, W. K. Tseng, H. Chen, C. T. Ko, C. Y. Hsie, M. J. Che, G. Sun // *Thin Solid Films.* – 2015. – Vol. 593. – P. 40–43.
15. **Vasin, A. S.** Phonon modes and Raman scattering in SixGe_{1-x} nanocrystals: microscopic modeling / A. S. Vasin, O. V. Vikhrova, M. I. Vasilevskiy // *Phys. Status Solidi (C).* – 2013. – Vol. 10. – P. 701–704.
16. **Vasin, A. S.** Effects of alloy disorder and confinement on phonon modes and Raman scattering in $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ nanocrystals: A microscopic modeling / A. S. Vasin, O. V. Vikhrova, M. I. Vasilevskiy // *J. Appl. Phys.* – 2014. – Vol. 115. – P. 143505.
17. **Tersoff, J.** Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems / J. Tersoff // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol. 39, № 8. – P. 5567.

18. **Powell, D.** Elasticity, lattice dynamics and parameterization techniques for the Tersoff potential applied to elemental and type III-V semiconductors / D. Powell // The university of Sheffield, semiconductor materials and devices group, department of electronic and electrical engineering. – 2006. – P. 62.
19. **Займан, Дж.** Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем / Дж. Займан. – М. : Мир, 1982. – 592 с.

References

1. Bauer M., Taraci J., Tolle J., Chizmeshya A.V.G., Zollner S., Smith David J., Menendez J., Changwu Hu, Kouvetakis J. *Appl. Phys. Lett.* 2002, vol. 81, pp. 2992–2994.
2. Kouvetakis J., Menendez J., Chizmeshya A.V.G. *Ann. Rev. Mater. Res.* 2006, vol. 36, pp. 497–554.
3. Chibane Y., Ferhat M. *J. Appl. Phys.* 2010, vol. 107, p. 053512.
4. Pulikkotil J. J., Chroneos A., Schwingenschlögl U. *J. Appl. Phys.* 2011, vol. 110, p. 036105.
5. Gupta S., Magyari-Kope B., Nishi Y., Soraswat K. C. *J. Appl. Phys.* 2013, vol. 113, p. 073707.
6. Bhargava N., Coppinger M., J. Prakash Gupta, Wielunski L., Kolodzey J. *Appl. Phys. Lett.* 2013, vol. 103, p. 041908.
7. Ventura C. I., Querales-Flores J. D., Fuhr J. D., Barrio R. A. *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 2015, vol. 23, pp. 112–118.
8. Kasper E., Kittler M., Oehme M., Arguirov T. *Photon. Res.* 2013, vol. 1, pp. 69–76.
9. Fournier-Lupien J.-H., Mukherjee S., Wirths S., Pippel E., Hayazawa N., Mussler G., Hartmann J. M., Desjardins P., Buca D., Moutanabbir O. *Appl. Phys. Lett.* 2013, vol. 103, p. 263103.
10. Shen J., Zi J., Xie X. *Phys. Rev. B.* 1997, vol. 53, pp. 12084–12087.
11. Chizmeshya A. V. G., Bauer M. R., Kouvetakis J. *Chem. Mater.* 2003, vol. 15, pp. 2511–2519.
12. Lee M. H., Liu P. L., Hong Y. A., Chou Y. T., Hong J. Y., Siao J. Y. *J. Appl. Phys.* 2013, vol. 113, p. 063517.
13. Cheng R., Wang W., Gong X., Sun L. F., Guo P. F., Hu H. L., Shen Z. X., Han G. Q., Yeo Y. C. *ECS J. Solid State Science and Technology.* 2013, vol. 2, pp. 138–145.
14. Chang C., Li H., Chen T. P., Tseng W. K., Chen H., Ko C. T., Hsie C. Y., Che M. J., Sun G. *Thin Solid Films.* 2015, vol. 593, pp. 40–43.
15. Vasin A. S., Vikhrova O. V., Vasilevskiy M. I. *Phys. Status Solidi (C).* 2013, vol. 10, pp. 701–704.
16. Vasin A. S., Vikhrova O. V., Vasilevskiy M. I. *J. Appl. Phys.* 2014, vol. 115, p. 143505.
17. Tersoff J. *Phys. Rev. B.* 1989, vol. 39, no. 8, p. 5567.
18. Powell D. *The university of Sheffield, semiconductor materials and devices group, department of electronic and electrical engineering.* 2006, p. 62.
19. Zayman Dzh. *Modeli besporyadka. Teoreticheskaya fizika odnorodno neuporyadochennykh sistem* [Disorder models. Theoretical physics of homogeneously disordered systems]. Moscow: Mir, 1982, 592 p.

Васин Александр Сергеевич

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра информационных
технологий в физических исследованиях,
Национальный исследовательский
Нижегородский государственный
университет имени Н. И. Лобачевского
(Россия, г. Нижний Новгород,
пр. Гагарина, 23)

E-mail: vasin@phys.unn.ru

Vasin Aleksandr Sergeevich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of information technologies
in physical research, Lobachevsky State
University of Nizhny Novgorod
(23 Gagarina avenue, Nizhny
Novgorod, Russia)

УДК 538.91:548.31

Васин, А. С.

Моделирование структурных свойств сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ / А. С. Васин //
Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-матема-
тические науки. – 2016. – № 4 (40). – С. 102–113. DOI 10.21685/2072-3040-
2016-4-9