

«восстановлением» дефектов. Очевидно, что поглощение водорода дефектами может происходить и непосредственно в процессе наводороживания. Поэтому, вообще говоря, при наводороживании возможно не только расширение, но и сужение дифракционных максимумов. С рассматриваемым здесь сценарием согласуется и тот факт, что наблюдаемая картина более отчетливо видна в отожженном сплаве, в котором исходное количество дефектов заметно меньше, чем в деформированном. Дело в том, что поглощаемое количество водорода недостаточно для залечивания большинства дефектов деформированного сплава.

Для подтверждения того или иного сценария необходимы дальнейшие экспериментальные и теоретические исследования. Однако ясно, что оба сценария и возможные другие связаны с самоорганизацией системы водород—дефект в сплавах Pd—W при стремлении к равновесию и могут быть рассмотрены на основе синергетического подхода. Поскольку некоторое количество водорода в палладии возможно и в равновесии, то нельзя исключить и то, что обнаруженные в работе явления связаны не с уходом водорода из палладия, а с его перераспределением, происходящим одновременно с перераспределением дефектов. Существование подобных явлений может быть установлено и при изучении временной зависимости структурных изменений при релаксации после других возмущающих обработок.

В заключение следует добавить, что осцилляционные изменения структурных характеристик наблюдались и ранее, например при установлении ближнего порядка после деформации [5—8]. По-видимому, эти эффекты могут быть также объяснены в синергетической модели, и было бы весьма интересным проведение нового цикла исследований изменения ближнего порядка после различных обработок. Весьма вероятно, что осцилляционное поведение кинетических характеристик является общей чертой процессов установления равновесия. Укажем также, что рассматриваемая выше осцилляционная картина структурных изменений нами выявлена и для других сплавов Pd—W.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Ревкевич Г. П., Кацнельсон А. А., Свешников С. В. и др. Деп. ВИНТИ № 6658-B87. М., 1987. [2] Ревкевич Г. П., Кацнельсон А. А., Христов В. // Металлофизика. 1989. 11, № 3. С. 57. [3] Ревкевич Г. П., Кацнельсон А. А., Христов В. и др. Деп. ВИНТИ № 6659-B87. М., 1987. [4] Кривоглаз М. А. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М., 1967; Кривоглаз М. А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев, 1983. [5] Дажаяев П. Ш., Кацнельсон А. А. // ФММ. 1970. 30. С. 663. [6] Кацнельсон А. А. // Изв. вузов. Физика. 1971. № 10. С. 17. [7] Иверонова В. И., Кацнельсон А. А., Кондратьева М. Д., Ревкевич Г. П. // ФММ. 1973. 35. С. 355. [8] Иверонова В. И., Кацнельсон А. А., Ревкевич Г. П. // ФММ. 1968. 26. С. 1064.

Поступила в редакцию
07.07.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 2

УДК 539.22:531

МЕХАНИЧЕСКИЕ НАПРЯЖЕНИЯ В ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ А⁴В⁶

Ю. В. Кочетков, В. Н. Никифоров, О. Н. Васильева, А. М. Гаськов
(кафедра физики низких температур)

Исследовано возникновение анизотропных механических напряжений в пленках на основе полупроводниковых соединений А⁴В⁶. Показано, что переходный слой, образованный взаимной диффузией элементов пленки и подложки, является причиной формирования сетки дислокаций несоответствия.

Введение

Полупроводниковые гетероструктуры, широко используемые в современном приборостроении, зачастую имеют разнообразные дефекты, наиболее распространенными из которых являются дислокации. Дислокационная структура в состоянии заметно изменить электрофизические свойства пленок. Главной причиной возникновения дислокаций являются напряжения в пленке.

Расчет напряжений в пленках

Источниками напряжений являются в основном различия параметров решетки и коэффициентов теплового расширения подложки и пленки. В случае согласованных параметров решетки (что реализовано для исследуемых структур A^4B^6) доминирующей причиной формирования механических напряжений становится взаимодиффузия элементов, так как напряжения, вызванные различием коэффициентов теплового расширения, значительно меньше [1].

Взаимодиффузия элементов пленки и подложки образует переходный слой, для которого параметр решетки a не является постоянным вдоль нормали к поверхности пленки.

В работе приводятся расчеты напряжений в исследуемых структурах A^4B^6 , а также критической толщины пленки — параметра, который определяет механизм релаксации напряжений несоответствия. Если толщина пленки превышает критическую, то пленка будет подвержена образованию сетки дислокаций, в обратном случае реализуется упругая деформация пленки без генерации дислокаций.

Взаимодиффузия начинается фактически с самого начала процесса напыления пленки на подложку, поскольку температура синтеза велика — 300—600 °С. Интересным является тот факт, что взаимодиффузия элементов пленки и подложки сильно зависит от качества подложки [2].

Необходимо отметить, что напряжения несоответствия вдоль нормали к поверхности пленки практически равны нулю, так как изгиб пленки для рассматриваемых структур пренебрежимо мал (пленки достаточно тонкие — 1000—2000 Å при толщине подложки около 1 мм), поэтому напряжения несоответствия рассчитываются вдоль направления q :

$$q = (\sin \varphi, \cos \varphi, 0), \quad (*)$$

угол φ определяет направление в плоскости границы раздела.

Основная формула для расчета напряжений имеет вид [3]

$$\varepsilon(d, \varphi) = \frac{E(d, \varphi) \Delta a(d)}{(1 - \nu(d, \varphi)) a(d)}. \quad (1)$$

Здесь d — глубина по оси, перпендикулярной плоскости пленки, отсчитанная от поверхности пленки, $a(d)$ — параметр решетки переходного слоя, $\Delta a(d)$ — его отклонение от параметра решетки пленки, $E(d, \varphi)$ — модуль Юнга, $\nu(d, \varphi)$ — коэффициент Пуассона, а $\varepsilon(d, \varphi)$ — искомые напряжения несоответствия.

В общем случае

$$E^{-1}(q) = s_{11} - [2(s_{11} - s_{12}) - s_{44}](q_x^2 q_y^2 + q_y^2 q_z^2 + q_z^2 q_x^2).$$

Здесь q_x, q_y, q_z — проекции вектора q на оси в декартовой системе координат, s_{ij} — модули упругой податливости.

Коэффициент Пуассона рассчитывался по формуле

$$\nu(\mathbf{q}) = \left(1 - \left(\sum_{ij} \hat{S}_{ij} q_i q_j\right) E(\mathbf{q})\right) / 2, \quad (3)$$

где S_{ij} — диагональная матрица, причем $S_{ii} = s_{11} + 2s_{12}$ для $i=1, 2, 3$.
Далее, подставляя в (2) и (3) выражение (*), получаем

$$E^{-1}(d, \varphi) = s_{11}(d) - [2(s_{11}(d) - s_{12}(d)) - s_{44}(d)] \{\sin^2 \varphi - \cos^2 \varphi\},$$

$$\nu(d, \varphi) = (1 - 2(s_{11}(d) - s_{12}(d)) E(d, \varphi)) / 2.$$

Модули упругой податливости s_{ij} рассчитываются по формулам

$$s_{11} = \frac{(c_{11} + c_{12})}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})},$$

$$s_{12} = \frac{-c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})},$$

$$s_{44} = \frac{1}{c_{44}}.$$

Здесь c_{ij} — модули упругости.

Расчет критической толщины для пленки с кубической решеткой проводили по следующей формуле [4]:

$$h_c = \frac{b(1 - \nu/4)}{4\pi f(1 + \nu)} \ln(\kappa h_c / b), \quad (4)$$

где b — вектор Бюргера дислокации (принят равным параметру решетки подложки), f — отношение величины Δa к параметру решетки подложки, κ — величина, равная примерно 4.

Эта формула применима для оценки критической толщины переходного слоя, если рассматривать его образование сразу с момента осаждения первых атомов пленки на подложку, и в этом случае переходный слой имеет возможность образовывать дислокации несоответствия фактически до образования самой пленки с фиксированным составом.

Расчет напряжений проводился на основе информации об изменении концентрации элементов вдоль оси выращивания гетероструктуры по результатам оже-спектроскопии и на основе упругих параметров: модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν .

Для определения величины E и ν использовались значения упругих модулей c_{ij} , полученные с помощью измерения скоростей продольного и поперечного звука.

Оже-электронный анализ состава гетероструктур

Анализ состава гетероструктуры по толщине проводился методом оже-электронной спектроскопии. Запись оже-спектров проводилась после каждого послойного стравливания поверхности структуры пучком ионов Ag с энергией 3 кэВ. Скорость распыления определялась из предварительных экспериментов для эталонных пленок известной толщины и состава для указанных материалов около 130 А/мин. Средняя ошибка определения элементного состава в каждом слое не превышала 1%.

В соответствии с законом Вегарда изменение постоянной решетки a по толщине переходного слоя, обязанное взаимодиффузии компонентов, описывается выражением

$$a(d) \{Pb_{1-x}Sn_xTe_{1-z}D_z\} = xz a_{SnD} + x(1-z) a_{SnTe} + (1-x)za_{PbD} + (1-x)(1-z) a_{PbTe}, \quad (5)$$

где $D = Se$ и S ; $a_{PbTe} = 6,461 \text{ \AA}$, $a_{PbSe} = 6,126 \text{ \AA}$, $a_{SnTe} = 6,327 \text{ \AA}$, $a_{SnSe} = 6,002 \text{ \AA}$, $a_{SnS} = 5,788 \text{ \AA}$, $a_{PbS} = 5,936 \text{ \AA}$.

Из приведенных выше данных рассчитаны параметры элементарных ячеек в переходных слоях гетероструктур. Концентрации элементов в исследованных гетерозитаксиальных структурах и профили параметров элементарных ячеек в исследованных эпитаксиальных гетероструктурах в зависимости от глубины представлены на рис. 1.

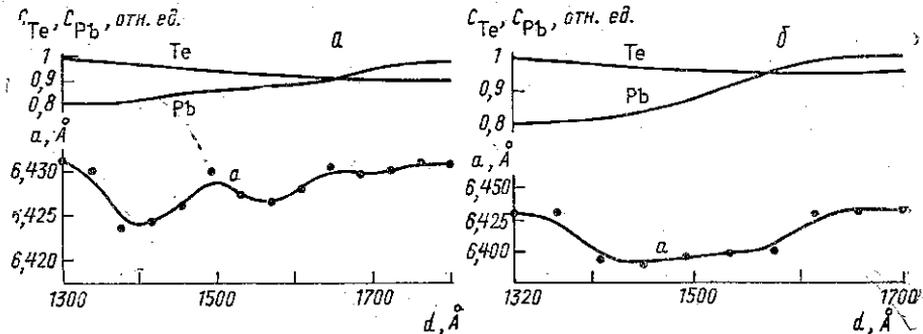


Рис. 1. Концентрация C_{Te} и C_{Pb} вдоль переходного слоя и параметр решетки a в зависимости от глубины переходного слоя для гетероструктур $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te/PbS_{0,05}Te_{0,95}$ (а) и $Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te/PbSe_{0,08}Te_{0,92}$ (б)

Ультразвуковые исследования

Для расчета напряжения, возникающих в переходных слоях гетероструктур, необходима информация об упругих свойствах материалов, образующих эти структуры. В настоящей работе упругие модули исследованных твердых растворов рассчитывались из данных по измерению скоростей продольных и поперечных упругих волн в массивных полупроводниках.

Измерения проводились с использованием бесконтактной методики, основанной на электромагнитном возбуждении звука в проводящих средах [5]. Суть метода, разработанного А. Н. Васильевым и В. Н. Никифоровым, заключалась в том, что на обе поверхности отполированной плоскопараллельной пластины путем рассеяния в вакууме нанесли тонкие (толщиной около 1 мкм) пленки алюминия. В этих пленках с помощью катушки индуктивности, охватывавшей образец, наводился переменный ток высокой частоты. В присутствии создаваемого независимым источником постоянного магнитного поля H на ток в скин-слое действует знакопеременная сила Лоренца

$$F_L = [j, H]/c, \quad (6)$$

где j — плотность тока, c — скорость света. Если поле H перпендикулярно пластине, сила Лоренца направлена вдоль поверхности. Это приводит к возбуждению поперечного звука, распространяющегося затем

в толщу полупроводника. В тангенциальном магнитном поле сила Лоренца действует по нормали к поверхности пластины, что вызывает возбуждение продольного звука. И в том и в другом случае направление распространения звука совпадает с нормалью к плоскости образца и, следовательно, с кристаллографической осью высокой симметрии.

Результаты измерений
упругих модулей для 300 К

Образец	c_{11} , ГПа	c_{44} , ГПа
$Pb_{0,8}Sn_{0,2}Te$	124,9	16,84
$Pb_{0,98}Sn_{0,07}Se$	151,1	18,28
$PbSe_{0,98}Te_{0,02}$	121,9	12,30
$PbS_{0,95}Te_{0,05}$	111,3	6,88

Регистрация возбуждаемого звука осуществлялась с помощью второй катушки индуктивности за счет эффекта обратного электромагнитно-акустического преобразования. На соответствующих частотах в пластине устанавливаются стоячие звуковые волны, что сопровождается резонансным изменением поверхностного импеданса Z пластины. Эти изменения могут быть зарегистрированы стандартными радиотехническими мето-

дами. Зная частоты установления стоячих звуковых волн, можно рассчитать искомые скорости звука (точность составила 10^{-2} процента). По известным скоростям звука рассчитывались упругие модули (таблица).

Напряжения и критическая толщина в пленках

Данные гетероструктуры согласованы по параметру решетки, вследствие этого пленка практически не напряжена, и главную роль в образовании дислокаций в гетероструктурах играет переходный слой, образованный взаимодиффузией элементов.

Из-за отсутствия значений c_{12} в данных образцах пришлось воспользоваться известными значениями α — параметра анизотропии в двойных соединениях, а также в некоторых тройных, например $Pb_{0,87}Sn_{0,13}Te$ [6]. Путем линейной аппроксимации рассчитывались значения α .

Из выражения для параметра анизотропии

$$\alpha = 2c_{44} / (c_{11} - c_{12}) \quad (7)$$

рассчитывались значения c_{12} .

В связи с тем что величина c_{11} на порядок больше c_{12} , ошибка аппроксимации c_{12} давала меньший вклад в общую ошибку, чем ошибка измерения c_{11} .

На рис. 2 изображена трехмерная картина модулей напряжений в переходном слое перпендикулярно поверхности пленки в зависимости от угла φ в цилиндрических координатах (φ, d). На рис. 3 изображен характерный вид розеток напряжений в плоскости, параллельной поверхности пленки для обеих гетероструктур на глубинах d , соответствующих максимальным значениям напряжений.

Напряжения в согласованной пленке и подложке отсутствуют, на рис. 2 этому соответствует спадение до нуля модуля напряжений на левых и правых концах рисунков. Таким образом, область по оси Z (ось, соответствующая направлению от пленки в подложку), на которой существует эллипсоид напряжений, есть область переходного слоя. Такая сложная зависимость модуля напряжений от глубины d определяется немонотонным видом зависимости параметра решетки от d , который есть в свою очередь следствие реального распределения концентраций элементов, образующих пленку и подложку.

Таким образом, несмотря на то что в данных гетероструктурах подложка и пленка согласованы по параметру решетки, вследствие взаимодиффузии элементов возникают значительные напряжения, не-

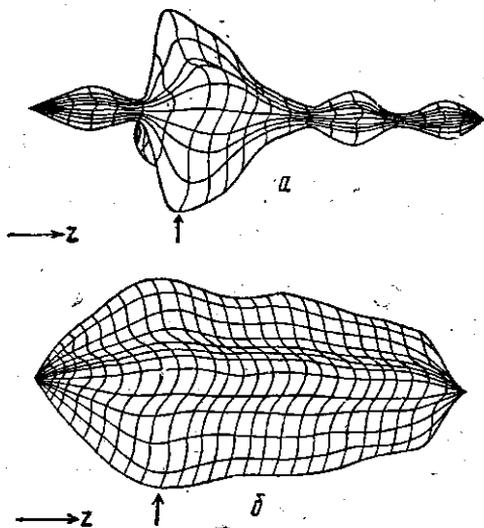


Рис. 2

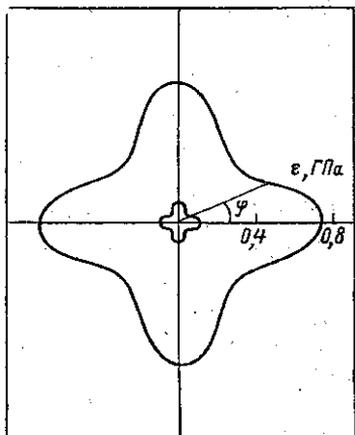


Рис. 3

Рис. 2. Анизотропное напряжение $\varepsilon(\varphi)$ в плоскости, параллельной границе раздела по глубине переходного слоя гетероструктур $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}/\text{PbS}_{0,05}\text{Te}_{0,95}$ (а) и $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}/\text{PbSe}_{0,08}\text{Te}_{0,92}$ (б). Слева находится пленка, справа — подложка. Стрелками указаны места сечений, приведенных на рис. 3

Рис. 3. Анизотропные напряжения в переходном слое на фиксированной глубине (внешняя розетка соответствует рис. 2, а, внутренняя — 2, б)

изотропные в плоскости гетероструктуры, причем наибольшие значения достигаются в направлении $[100]$ (т. е. $\varphi = \pi/2$).

Главной причиной возникновения напряжений в согласованных структурах является взаимодиффузия, следовательно, основным способом их ослабления является уменьшение взаимодиффузии элементов. В частности, в работе [7] отмечается, что при бесконтактном методе полировки подложки удается достичь почти бездефектной поверхности подложки и сделать диффузию незначительной, тем самым ликвидировав переходный слой. Другим путем уменьшения диффузии является выбор оптимального режима напыления по температуре и времени.

В работе [7] также указывается, что получение пленок высокого качества требует максимального понижения температуры подложки, и этому требованию наиболее удовлетворяет метод молекулярно-лучевой эпитаксии. В качестве альтернативного решения проблемы можно также отметить способ напыления между пленкой и подложкой буферного слоя инертного вещества с аналогичным параметром решетки, который препятствовал бы взаимодиффузии элементов.

Для $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}/\text{PbSe}_{0,2}\text{Te}_{0,92}$ максимальные напряжения составляют 0,1 ГПа, а для $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}/\text{PbS}_{0,05}\text{Te}_{0,95}$ — 0,73 ГПа. Полученные данные существенно выше предела текучести для подобного соединения — PbTe , который составляет 0,05 ГПа.

Что касается критической толщины, характеризующей начало образования собственных дислокаций несоответствия, то по формуле (4) были получены следующие результаты: для $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}-\text{PbSe}_{0,2}\text{Te}_{0,92}$ $h_c \approx 100$ нм, а для $\text{Pb}_{0,8}\text{Sn}_{0,2}\text{Te}-\text{PbS}_{0,05}\text{Te}_{0,95}$ $h_c \approx 20$ нм, т. е. для по-

следнего случая толщина переходного слоя сопоставима с критической длиной релаксации напряжений может пойти путем образования сетки дислокаций. Кроме того, реальные пленки всегда обладают некоторым количеством различных дефектов, которые могут стать самостоятельными центрами образования дислокаций в упругом поле напряжений несоответствия.

Можно сделать вывод, что даже в том случае, когда пленка и подложка согласованы по параметру решетки, напряжения несоответствия возникают из-за диффузии в переходном слое, а следовательно, будет происходить формирование дислокаций несоответствия и анизотропной остаточной упругой деформации, которые могут изменить рабочие параметры и физические свойства гетероструктуры.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Vasil'ev A. N., Nikiforov V. N., Malinski I. M. et al.//Semicond. Sci. and Technol. 1990. 5, N 11. P. 1105. [2] Woolhouse G. R. et al.//J. Vac. Sci. Technol. 1985. A3, N 1. P. 83. [3] Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных структурах. Киев, 1983. [4] Basson J. H., Booуens H.//Phys. Stat. Solidi (a). 1983. 80. N 2. P. 663. [5] Васильев А. Н., Гайдуков Ю. П., Никифоров В. Н. А. с. 4299270 СССР. [6] Landolt-Bornstein. New series. Vol. 17f, Semiconductors: Physics of Tetrahedral Compounds. Springer-Verlag, 1982. [7] Dinan J. H., Qadri S. B.//Thin Solid Films. 1985. 131. P. 267.

Поступила в редакцию
24.05.93

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1994. Т. 35, № 2

УДК 621.315.592

ПРИМЕСНОЕ ЭКРАНИРОВАНИЕ В КОМПЕНСИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А. Г. Миронов

(кафедра физики полупроводников)

Рассчитан ряд эффектов случайного поля в компенсированных полупроводниках в условиях примесного экранирования. Найдено распределение потенциальной энергии в зависимости от степени компенсации K и радиуса экранирования r_0 . Самостоятельным образом определены зависимости r_0 и уровня Ферми от K и температуры. Конкретные результаты даны для случая германия с многозарядным акцептором — золотом и донорами.

Общепризнана роль эффектов случайного поля, неизбежно присутствующего в легированных полупроводниках, в формировании их наблюдаемых физических характеристик. В особенности это относится к подвижности носителей заряда, радиусу экранирования, энергетическому положению уровня Ферми. Последнее зависит от положения и ширины примесных пиков плотности состояний в запрещенной зоне и в свою очередь определяет эффективность примесного экранирования за счет перераспределения электронов по центрам локализации, а вместе с тем и суммарное случайное поле в системе. Однако существующий количественный анализ названных эффектов весьма неполон, а отдельные оценки для простоты делаются в гауссовом приближении для распределения случайного поля без установления пределов его применимости.

В настоящей работе находится удобное для приложений представление для распределения $\mathcal{P}(V)$ случайной потенциальной энергии элект-