

тоте, при оптимизации фильтров с меньшим числом слоев расширяется область пропускания.

Приведенные примеры показывают, что при синтезе покрытий с заданными спектральными характеристиками в диапазоне углов падения могут использоваться оба подхода. Но, как видно, в ряде случаев оптимизацией уже известных систем не удастся получить требуемых покрытий и метод игольчатых вариаций оказывается предпочтительнее.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонравов А. В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1982. 23, № 6. С. 91.
2. Свешников А. Г., Тихонравов А. В., Яншин С. А. // ЖВМ и МФ. 1983. 23, № 4. С. 929.
3. Гришина Н. В. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1986. 27, № 5. С. 26.
4. Гришина Н. В., Тихонравов А. В. // Опт. и спектр. 1988. 65, № 5. С. 1170.

Поступила в редакцию  
04.07.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 3

### ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 539.22:531

#### РАСЧЕТ НАПРЯЖЕНИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $Cd_{0,2}Hg_{0,8}Te/CdTe$ И $Cd_{0,3}Hg_{0,7}Te/CdTe$

Ю. В. Кочетков, В. Н. Никифоров, О. Н. Васильева

(кафедра физики низких температур)

Проведен расчет анизотропных напряжений несоответствия в переходном слое между несогласованными по параметру решетки пленкой и подложкой в гетероструктурах типа  $CdHgTe/CdTe$  для различных способов взаимной ориентации пленки и подложки. Результат продемонстрировал незначительную роль этого слоя в создании дефектов в пленке по сравнению со случаем полного согласования. Показано, что для согласованной гетероструктуры типа  $CdHgTe/CdZnTe$  взаимодиффузия приводит к возникновению напряженного переходного слоя, который может стать источником дислокаций, проникающих в пленку.

#### Введение

В последние десятилетия значительное внимание уделялось проблеме образования дефектов в различных полупроводниковых гетероструктурах, в том числе и типа  $CdHgTe/CdTe$ . Этот тип гетероструктур привлекает внимание тем, что дает возможность создать детекторы ИК-излучения в диапазоне  $\lambda \sim 2-14$  мкм с достаточно широкой площадью. Однако наличие большого числа дефектов значительно ухудшает рабочие характеристики гетероструктур.

В статье приводится анализ влияния переходного слоя, возникающего при напылении пленки, на дефектообразование, а также рассчитываются величины напряжений несоответствия для трех различных способов взаимной ориентации пленки и подложки. Результаты расчетов показывают, что возникающий переходный слой не приводит к существенному изменению картины напряжений по сравнению со случаем его отсутствия (случай жесткой границы).

## Напряжения в пленках CdHgTe/CdTe

Кристаллы систем CdHgTe характеризуются хорошей пластичностью, следствием которой является низкая плотность дефектов. Тем не менее в процессе напыления и отжига часто возникает большое число дислокаций, образованных из-за механических напряжений.

Главным источником возникновения напряжений в гетероструктуре является несоответствие параметров решетки подложки и пленки. В работе [1] упомянуто, что для нормальной работы приборов, использующих данную гетероструктуру, несоответствие параметров решетки не должно превышать  $4 \cdot 10^{-3}$ . Там же указывается, что для  $\text{Cd}_{0,2}\text{Hg}_{0,8}\text{Te}$  это несоответствие не должно быть более  $3 \cdot 10^{-3}$ . Необходимо отметить, что даже при полном согласовании имеются значительные напряжения, возникающие из-за диффузии элементов и приводящие к образованию сетки дислокаций, а иногда и к разрушению пленки [2]. В таком случае главной областью образования напряжений является переходный слой между подложкой и пленкой. Интересно изучить его роль в случае несогласованных гетероструктур.

Гетероструктуры CdHgTe/CdTe характеризуются довольно большой протяженностью области взаимодиффузии, которая приводит к образованию переходного слоя глубиной около 10 мкм (хотя в [1] указывается, что при бесконтактной полировке удастся значительно уменьшить взаимодиффузию, а следовательно, и глубину переходного слоя). Представляет интерес исследовать роль этого переходного слоя в формировании упругих напряжений и дислокационной структуры.

Известно, что вдоль переходного слоя параметр состава  $x$  меняется довольно монотонно, возникает зависимость параметра решетки  $a$  и упругих модулей  $c_{ij}$  от глубины  $d$ , отсчитываемой от поверхности пленки по направлению к подложке.

В данной работе рассчитываются напряжения в гетероструктурах  $\text{A}^2\text{B}^6$  по экспериментальным данным [3, 4], где велось напыление на подложку CdTe (111). Из этих статей были взяты значения концентраций элементов в зависимости от глубины  $d$ . Параметр решетки был рассчитан по закону Вегарда [5]:

$$a = 6,461 + 0,02x \text{ [Å]}. \quad (1)$$

В [5] также приведена зависимость коэффициента теплового расширения от состава

$$\alpha(x) = 4 \cdot 10^{-6} + 9 \cdot 10^{-7} x \text{ [K}^{-1}\text{]}. \quad (2)$$

Напряжения несоответствия, определяемые параметром  $\Delta a/a$  (который составляет величину порядка  $10^{-3}$  в данных системах), больше, чем напряжения, вызванные разностью коэффициентов  $\Delta \alpha$  теплового расширения и определяемые параметром  $\Delta T \Delta \alpha$ , который имеет величину порядка  $10^{-4}$  ( $\Delta T$  — разность температуры напыления и рабочей температуры — составляет 500—700 К).

Набор используемых упругих постоянных по данным ультразвуковых исследований из работ [6] и [7] дан в таблице.

Дополнительно к известным значениям упругих модулей CdHgTe были получены новые данные для составов с  $x=0,08; 0,11; 0,21; 0,25$  и  $0,415$ . Исследованные образцы в виде шайб с ориентацией (111) и (110) размерами  $1 \times 1 \times 10$  мм были выращены по той же технологии [6, 7].

Расчет напряжений несоответствия велся в предположении, что в процессе напыления пленки отсутствовали явления релаксации, а так-

Образец	$x$	$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{44}$
$\text{Cd}_{0,11}\text{Hg}_{0,89}\text{Te}$	0,11	59	38,1	24,3
$\text{Cd}_{0,21}\text{Hg}_{0,79}\text{Te}$ [6]	0,21	56,0	30	23,4
$\text{Cd}_{0,3}\text{Hg}_{0,7}\text{Te}$ [7]	0,3	61,9	36,2	24
$\text{CdTe}$ [8]	1	53,5	36,8	19,9

же изгиб гетероструктуры (толщина пленки на несколько порядков меньше толщины подложки).

Ниже приведены формулы из [2], описывающие напряжения в слое, определяемом глубиной  $d$ , в зависимости от направления в плоскости, параллельной границе раздела:

$$\varepsilon(d, \varphi) = \frac{E_{\text{eff}}(d, \varphi) \Delta a(d)}{(1 - \nu_{\text{eff}}(d, \varphi)) a(d)}, \quad (3)$$

$$1/E_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = s_{11} - [2(s_{11} - s_{12}) - s_{44}] (q_x^2 q_y^2 + q_y^2 q_z^2 + q_z^2 q_x^2), \quad (4)$$

$$\nu_{\text{eff}}(\mathbf{q}) = (1/2) \left( 1 - \left( \sum_{ij} s_{ij} q_i q_j \right) E_{\text{eff}}(\mathbf{q}) \right). \quad (5)$$

Здесь  $a(d)$  — параметр решетки соединения,  $\Delta a(d)$  — его отклонение от параметра решетки пленки,  $E_{\text{eff}}(d, \varphi)$  — эффективный модуль Юнга,  $\nu_{\text{eff}}(d, \varphi)$  — эффективный коэффициент Пуассона,  $\varepsilon(d, \varphi)$  — искомые напряжения несоответствия,  $q_x, q_y, q_z$  — проекции единичного вектора направления  $\mathbf{q}$  на оси в декартовой системе координат,  $s_{ij}$  — модули упругой податливости.

Обычно используются три вида ориентации подложки при напылении по отношению к границе раздела. Ниже приведены значения проекции единичного вектора  $\mathbf{q}$  на соответствующее направление:

$$1) [001]: q_x = \cos(\varphi), q_y = \sin(\varphi), q_z = 0,$$

угол  $\varphi$  отсчитывается от направления [100];

$$2) [110]: q_x = \cos(\varphi)/\sqrt{2}, q_y = \sin(\varphi), q_z = \cos(\varphi)/\sqrt{2},$$

угол  $\varphi$  отсчитывается от направления [110];

$$3) [111]: q_x = (\cos(\varphi) + \sin(\varphi)/\sqrt{3})/\sqrt{2},$$

$$q_y = (\cos(\varphi) - \sin(\varphi)/\sqrt{3})/\sqrt{2},$$

$$q_z = \sin(\varphi) \sqrt{2}/\sqrt{3},$$

угол  $\varphi$  отсчитывается от направления  $[\bar{1}10]$ .

На рис. 1 показана трехмерная картина зависимости величины механических напряжений вдоль толщины пленки от угла  $\varphi$  в цилиндрических координатах для структуры  $\text{Cd}_{0,2}\text{Hg}_{0,8}\text{Te}/\text{CdTe}$ , картина напряжений для  $\text{Cd}_{0,3}\text{Hg}_{0,7}\text{Te}/\text{CdTe}$  почти аналогична. Видно, что зна-

чения напряжений монотонно спадают в направлении от пленки к границе раздела. Это следует из основной формулы (3): так как параметр решетки пропорционален изменению состава в переходном слое,

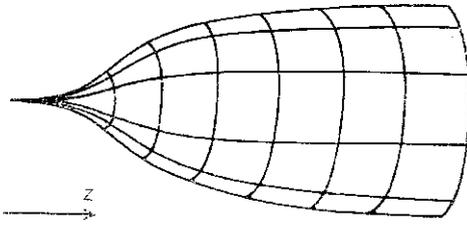


Рис. 1. Распределение анизотропных напряжений  $\varepsilon(\varphi)$  в плоскости, параллельной границе раздела, по глубине переходного слоя гетероструктур  $\text{Cd}_{0,2}\text{Hg}_{0,8}\text{Te}/\text{CdTe}$  и  $\text{Cd}_{0,3}\text{Hg}_{0,7}\text{Te}/\text{CdTe}$ . Справа находится пленка, слева — подложка

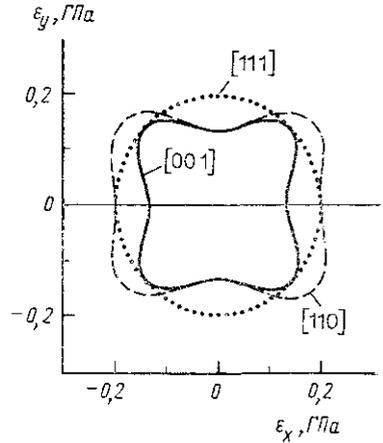


Рис. 2. Анизотропные напряжения в плоскости границы переходный слой — пленка для различных способов ориентации подложки гетероструктуры  $\text{Cd}_{0,2}\text{Hg}_{0,8}\text{Te}/\text{CdTe}$

то и напряжения  $\varepsilon(d)$  пропорциональны изменению состава. Расчеты показывают, что максимальные напряжения возникают в конце переходного слоя, т. е. в самой пленке.

Таким образом, принципиальной разницы между случаем мягкой границы (переходный слой есть) и жесткой (прямой контакт пленки и подложки без переходного слоя) нет. И в том и в другом случае значения напряжения в самой пленке одинаковы. В то же время необходимо отметить, что значения напряжения в переходном слое меньше, чем в пленке. Следовательно, данная область будет менее подвержена образованию дислокаций.

Необходимо отметить, что для любой глубины  $d$  механические напряжения достигают наибольшей величины в направлении  $[110]$  ( $\alpha = \pi/4 + 2k\pi$ ). На рис. 2 представлена зависимость значения напряжений несоответствия от угла, отсчитанного от кристаллографической оси  $[010]$  в самой пленке для всех трех ориентаций. Расчет в рамках изотропной модели привел бы к значению  $\varepsilon$  меньшему на 5—10%. Максимальные напряжения в пленке и оценка критической толщины пленки для образования дислокаций ( $h_c$ ) по формуле, приведенной в [5], следующие: для гетероструктуры  $\text{Cd}_{0,2}\text{Hg}_{0,8}\text{Te}/\text{CdTe}$   $h_c = 65,3$  нм,  $\varepsilon_{\text{max}} = 0,2$  ГПа, для гетероструктуры  $\text{Cd}_{0,3}\text{Hg}_{0,7}\text{Te}/\text{CdTe}$   $h_c = 76,5$  нм,  $\varepsilon_{\text{max}} = 0,17$  ГПа.

Реальные пленки обладают толщиной порядка 100 нм. Для пленок, напыленных на CdTe, эта толщина превышает критическую, что должно привести к генерации сетки дислокаций.

### Диффузия для согласованных гетероструктур

С целью подобрать подложку с параметром решетки, не отличающимся от параметра решетки пленки, в последние годы стали при-

менять твердый раствор  $Cd_{1-y}Zn_yTe$  с  $y=0,04-0,05$ . Исследования показали, что при значениях  $x=0,31$ ;  $y=0,045$  наблюдается уменьшение плотности числа дислокаций, в то же время при  $x=0,205$ ;  $y=0,045$  и  $x=0,225$ ;  $y=0,05$  такого эффекта нет, причем во всех случаях рассогласование приблизительно равно нулю [9]. В работе [9] отмечена довольно сильная диффузия атомов цинка по направлению к границе раздела и в глубь подложки. Аналогичная диффузия отмечена и в [3], где использовали соединение  $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ , причем область диффузии оказалась и областью повышенной концентрации дислокаций. Скорее всего, эта диффузия приводит к рассогласованию переходного слоя и пленки. Это можно показать следующим образом: для четверного соединения  $Hg_{1-x-y}Zn_yCd_xTe$  параметр решетки равен  $6,461 + +0,02x - 0,36y$  [5, 10], и проникновение цинка в переходную область приведет к рассогласованию параметра решетки переходного слоя и, следовательно, к возникновению напряжений. В то же время переходный слой препятствует продвижению дислокаций подложки в пленку.

Предварительно напыленный буферный слой, согласованный по параметру решетки, мог бы препятствовать взаимодиффузии в этом случае, что дает возможность создать гетероструктуру с минимальными напряжениями несоответствия. Имея возможность варьировать параметр решетки пленки и подложки, применяя для этого тройные и четверные растворы, получить такую гетероструктуру вполне возможно.

## Выводы

В рассматриваемых гетероструктурах возникают напряжения несоответствия, релаксирующие путем образования сетки дислокаций. При этом переходный слой, образованный в результате взаимодиффузии, не в состоянии кардинально изменить картину напряжений в пленках на основе  $CdHgTe$ . При попытке согласовать эти гетероструктуры (например, внедрением атомов цинка) диффузия, по-видимому, будет играть значительную роль в формировании напряжений.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Rotter S., Kasemset D., Fonstad C. J.//IEEE El. Dev. Lett. 1982. 3. P. 66.
2. Кочетков Ю. В., Никифоров В. Н., Васильева О. Н., Гасков А. М.//Вести. Моск. ун-та; Физ. Астрон. 1994. 35, № 2. С. 68.
3. Takigawa H., Yoshikawa M., Maekawa T.//J. Cryst. Growth. 1988. 86, N 1—4. P. 446.
4. Chiang C. D., Wu T. B., Chung W. C.//J. Cryst. Growth. 1988. 87. P. 161.
5. Basson J. H., Booysens H.//Phys. Stat. Solidi (a). 1983. 80, N 2. P. 663.
6. Васильев А. Н., Курбанов К. Р., Никифоров В. Н. и др.//Письма в ЖТФ. 1987. 13, № 1. С. 682.
7. Васильев А. Н., Курбанов К. Р., Никифоров В. Н. и др.//ФТП. 1987. 21, № 5. С. 944.
8. Landolt-Bornstein. New series. 17b: Semiconductors; Physics of II—VI & I—VII Compounds. Springer—Verlag, 1982. P. 241.
9. Woolhouse G. R., Magee T. G., Kawayoshi K. A. et al.//J. Vac. Sci. Technol. 1985. A3, N 1. P. 83.
10. Motta N., Balzarotti A., Letardi P.//J. Cryst. Growth. 1985. 72. P. 205.

Поступила в редакцию  
28.09.94