

ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ В МНОГОСЛОЙНОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ, ВЫРАЩЕННОЙ НА ПОДЛОЖКЕ (001) GaAs

© 2020 г. А. Н. Алёшин^{1,*}, А. С. Бугаев¹, О. А. Рубан¹, В. В. Сарайкин¹,
Н. Ю. Табачкова², И. В. Щегинин²

¹Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники им. В.Г. Мокерова РАН, Москва, Россия

²Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия

*E-mail: a.n.aleshin@mail.ru

Поступила в редакцию 19.11.2018 г.

После доработки 19.11.2018 г.

Принята к публикации 29.11.2018 г.

На основе структурных исследований, выполненных методом построения карт обратного пространства, а также экспериментальных результатов, полученных методами вторичной ионной масс-спектрометрии и просвечивающей электронной микроскопии, показано, что в многослойной эпитаксиальной гетероструктуре, содержащей метаморфный ступенчатый буфер, наряду с латеральными сжимающими напряжениями возникают вертикальные сжимающие напряжения, причиной возникновения которых являются межфазные границы, препятствующие полному снятию напряжений в процессе структурной релаксации. Выполненный в рамках линейной теории упругости анализ показал, что упруго-напряженное состояние слоев гетероструктуры является аналогом состояния, возникающего в процессе двухстадийного деформационного процесса: всестороннего и двухосного сжатия. Показано, что в этом случае значение свободной энергии системы, находящейся в метастабильном состоянии, минимально.

DOI: 10.31857/S0023476120010038

ВВЕДЕНИЕ

Одним из основных конструктивных элементов гетероструктуры с квантовой ямой, выращенной на подложках (001) GaAs, является метаморфный буфер (ММБ) [1–4], функциональное назначение которого состоит в демпфировании упругих напряжений, возникающих вследствие рассогласования кристаллических решеток подложки (материального носителя гетероструктуры) и активных приборных слоев, например, в высокочастотном транзисторе (HEMT). Метаморфный буфер представляет собой область, в которой с помощью легирования основного материала соответствующей примесью (для легирования таких веществ, как GaAs и AlAs, используют In) достигается пространственное изменение периода решетки, вследствие которого создается виртуальная подложка для активных слоев. Закон изменения концентрации In по толщине ММБ может быть различным: линейным, параболическим, квадратно-корневым и др. [5, 6]. К конструкции ММБ – толщине и числу ступеней, содержанию легирующего элемента в ступенях, закону изменения In в пространстве, градиенту концентрации (в случае однослойного буфера) –

предъявляется ряд требований, основным из которых является способность буфера к формированию вблизи поверхности бездислокационной области (в ступенчатом ММБ – бездислокационного слоя), которая является платформой для активных слоев HEMT. Наличие бездислокационной области предотвращает проникновение прорастающих дислокаций в активные слои HEMT. Образование бездислокационной области происходит в процессе структурной релаксации системы, основными механизмами которой являются мультипликация дислокаций несоответствия и их скольжение по плотноупакованным плоскостям. В [7] на примере однослойного ММБ с линейным законом изменения концентрации легирующего элемента по толщине буфера было показано, что при образовании бездислокационного слоя в такой системе достигается локальный минимум свободной энергии. Распространение модельного подхода [7] на ступенчатые ММБ дано в [8–10]. В основу этих работ положена закономерность, выявленная для релаксационного процесса в однослойных гетероструктурах композиции $In_xGa_{1-x}As$, выращенных на подложке (001) GaAs [11, 12]. В этих работах показано, что область легкого скольже-

ния дислокаций вдоль плоскостей семейства $\{111\}$ ограничивается толщинами 100–800 нм. При этом между остаточной упругой деформацией и толщиной пленки наблюдается обратно пропорциональная зависимость. При толщинах пленки, превышающих 800 нм, структурная релаксация замедляется, что вызвано деформационным упрочнением, которое в общем случае обусловлено взаимодействием движущихся дислокаций между собой [13, 14]. В многослойных тонкопленочных системах существенное влияние на эффект деформационного упрочнения оказывают межфазные границы. Их роль двояка: с одной стороны, в области межфазных границ происходит мультипликация дислокаций несоответствия, а с другой – межфазные границы являются препятствием для скользящих дислокаций в нижележащем слое [15]. Наличием межфазных границ можно объяснить установленный экспериментальным путем факт [16], что в многослойных системах наблюдается снижение критической толщины эпитаксиального слоя, при которой начинает развиваться эффект деформационного упрочнения, по сравнению с толщиной слоя в однослойной гетероструктуре.

Поскольку многослойная гетероструктура находится в существенно неравновесном состоянии, ее важной характеристикой является величина свободной энергии. Однако вклад от деформационного упрочнения в общий баланс свободной энергии многослойной тонкопленочной системы неизвестен. Целью данной работы явилось изучение влияния деформационного упрочнения на энергетическое состояние эпитаксиальных слоев в многослойной гетероструктуре, содержащей ступенчатый ММБ. Исходные экспериментальные данные о кристаллографических параметрах слоев многослойной гетероструктуры были получены в результате построения карт обратного пространства. Этот метод является единственным, позволяющим учитывать пространственную разориентацию эпитаксиальных слоев, присущую гетероэпитаксиальным структурам [17]. Поправка на эффект пространственной разориентации вносит существенные изменения в координаты дополнительных интерференционных максимумов при определении их положения в обратном пространстве [18]. Далее при описании гетероструктуры НЕМТ, содержащей ММБ, используется аббревиатура МНЕМТ (метаморфный НЕМТ).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Выращивание гетероструктуры

Гетероструктура МНЕМТ с активными слоями InAlAs/InGaAs/InAlAs и содержащая пятиступенчатый ММБ была выращена на стандартной полуизолирующей подложке GaAs с ориентацией

11	$n^+ \text{In}_{0.42}\text{Ga}_{0.58}\text{As}$ (кэп-слой)	10 нм	
10	$\text{In}_{0.394}\text{Al}_{0.606}\text{As}$ (барьерный слой)	15 нм	
9	$\delta\text{-Si}$ ($N_{\text{Si}} = 7 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$)	монослой	
8	$\text{In}_{0.42}\text{Al}_{0.58}\text{As}$ (спейсер)	5 нм	
7	$\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ (квантовая яма)	18 нм	
6	$\text{In}_{0.39}\text{Al}_{0.61}\text{As}$ (барьерный слой)	200 нм	
5	$\text{In}_{0.39}\text{Al}_{0.61}\text{As}$	200 нм	ММБ 0,6 мкм
4	$\text{In}_{0.35}\text{Al}_{0.65}\text{As}$	100 нм	
3	$\text{In}_{0.30}\text{Al}_{0.70}\text{As}$	100 нм	
2	$\text{In}_{0.23}\text{Al}_{0.77}\text{As}$	100 нм	
1	$\text{In}_{0.15}\text{Al}_{0.85}\text{As}$	100 нм	
GaAs (подложка)		–	

Рис. 1. Схематическое представление МНЕМТ с квантовой ямой AlInAs/AlGaAs/AlInAs, содержащей пятиступенчатый ММБ. Конструкционные элементы гетероструктуры: 1–5 – ступени ММБ с увеличивающимся содержанием In, 6 – нижний барьерный слой, 7 – квантовая яма, 8 – спейсер, 9 – δ -слой, 10 – верхний барьерный слой, 11 – кэп-слой.

(001) методом молекулярно-лучевой эпитаксии на установке RIBER 32P. Мольное содержание In, X_{In} в активных слоях МНЕМТ было равно 0.39. Толщина первых четырех ступеней ММБ равнялась 0.1 мкм, содержание X_{In} в них составляло 0.15, 0.23, 0.29 и 0.35 соответственно. Пятая ступень имела толщину 0.2 мкм и $X_{\text{In}} = 0.39$. Такое же мольное содержание In и такую же толщину имел нижний барьерный слой – следующий конструкционный элемент МНЕМТ. Рост ММБ происходил при постоянной температуре подложки ($T_{\text{подл}} = 380^\circ\text{C}$). Нижний барьерный слой МНЕМТ был сформирован при $T_{\text{подл}} = 480^\circ\text{C}$. Скорость роста эпитаксиальных слоев равнялась 0.5 мкм ч^{-1} . Перед ростом нижнего барьерного слоя для повышения $T_{\text{подл}}$ процесс эпитаксии был остановлен на пять минут. В процессе роста состав элементов конструкции МНЕМТ контролировался температурой молекулярных источников In, Al, Ga, As и Si (последний из элементов использовался для δ -легирования) на основе предварительной калибровки температурной зависимости молекулярных потоков. Перед выращиванием ММБ на подложке была сформирована сверхрешетка, на которой выращен слой из чистого GaAs толщиной 100 нм. Схематическое представление выращенной конструкции МНЕМТ показано на рис. 1.

Аттестация МНЕМТ

Аттестацию гетероструктуры выращенного МНЕМТ проводили методами вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Использовали масс-спектрометр IMS-4f фирмы Cameca. При профилировании в качестве первичного ионного пучка использовали ионы Cs^+ с энергией 5.5 кэВ. В качестве вторичных ионов регистрировали ионы GaCs_2^+ , InCs_2^+ и AlCs_2^+ . За величину X_{In} принимали отношение тока ионов InCs_2^+ к сумме токов ионов GaCs_2^+ , InCs_2^+ и AlCs_2^+ . Учет выхода ионов GaCs_2^+ позволил максимально снизить влияние матричного эффекта при проведении анализа состава эпитаксиальных слоев МНЕМТ методом ВИМС, особенно в области межфазной границы подложка–первая ступень ММБ. Структурная аттестация МНЕМТ выполнена на микроскопе JeolJEM 2010 при ускоряющем напряжении 200 кВ.

Рентгеновскую съемку проводили в излучении $\text{CuK}_{\alpha(1)}$ в трехосевой геометрии при двух азимутальных углах 0° и 90° на прецизионном дифрактометре SmartLab 9kW в пошаговом режиме. В качестве кристалла-анализатора использовали монокристалл Ge с ориентацией (022). Съемку вели в двух рефлексах 004 и 224 (в положении скользящего отражения) в режиме ω – 2θ -сканирования, которое заключается в съемке образца по методу Брэгга–Брентано при различных исходных угловых отклонениях подложки от угла Брэгга. Режим ω – 2θ -сканирования позволяет построить карты обратного пространства, представляющие собой набор линий равной интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения, включая области пучностей (неосновных рентгеновских максимумов), с указанием их расположения вдоль осей обратного пространства: [001] (ось Z) и [110] (ось Y). За начало координат обратного пространства был принят основной рентгеновский максимум, соответствующий подложке. Координаты неосновных рентгеновских максимумов, т.е. значения векторов отклонения q_y и q_z от основного рентгеновского максимума, определяли путем нахождения точки с максимальным значением интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения с помощью специальной опции компьютерной программы Origin 15.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Общий вид гетероструктуры (светлопольное ПЭМ-изображение ее поперечного сечения), а также пространственное распределение мольной доли In, X_{In} , в эпитаксиальных слоях МНЕМТ показаны на рис. 2. Видно, что в нижних четырех

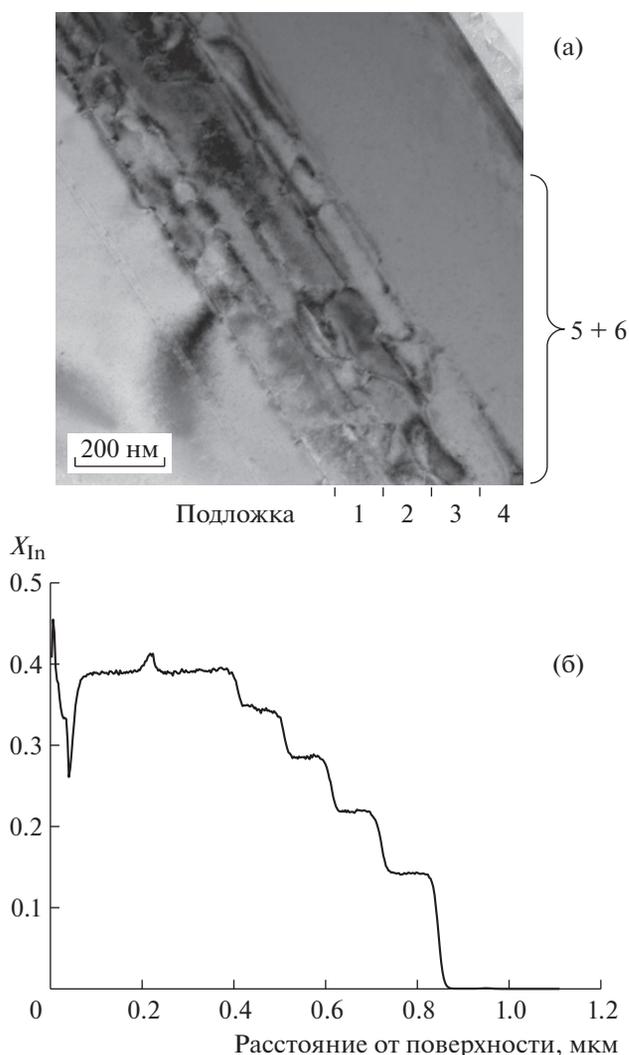


Рис. 2. Светлопольное ПЭМ-изображение поперечного сечения исследуемой гетероструктуры МНЕМТ (а) и пространственное распределение мольного содержания In в эпитаксиальных слоях, полученное методом ВИМС (б). Цифрами обозначены порядковые номера эпитаксиальных слоев.

ступенях ММБ наблюдаются скопления дислокаций, в то время как пятая ступень и прилегающий к ней нижний барьерный слой от дислокаций свободны. В структурном отношении финальные эпитаксиальные слои (слои 5 и 6) являются единым конструктивным элементом, который ввиду отсутствия в них прорастающих дислокаций можно рассматривать как бездислокационную область. Далее совокупность ступени 5 ММБ и нижнего барьерного слоя рассматривается как объединенный слой 5 толщиной 0.4 мкм. Из данных ВИМС следует, что величина X_{In} в эпитаксиальных слоях МНЕМТ совпадает с задаваемыми в процессе роста концентрациями In, а глубина залегания In в пространстве соответствует задаваемым толщинам эпитаксиальных слоев.

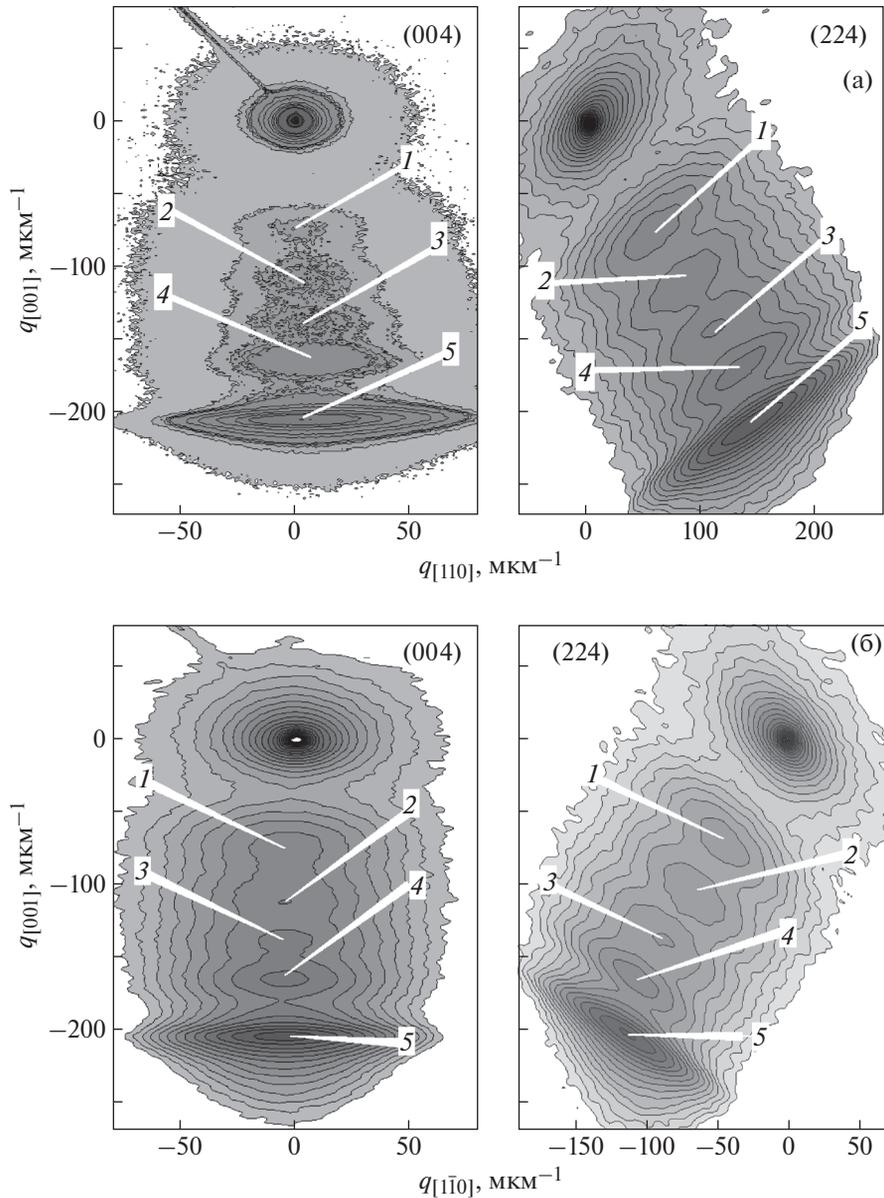


Рис. 3. Карты обратного пространства, полученные на основе отражений 004 и 224, для двух азимутальных углов: 0° (а) и 90° (б). Цифрами обозначены порядковые номера эпитаксиальных слоев, ответственных за появление данного рентгеновского максимума.

Карты обратного пространства (отражения 004 и 224) для изученной гетероструктуры МНЕМТ при двух азимутальных углах 0° и 90° показаны на рис. 3. На них видны пять неосновных рентгеновских максимумов, которые в соответствии с ростом величины $|q_z|$ можно приписать слоям 1, 2, 3, 4 и 5 (б). Наличие одного (пятого по счету) сильного рефлекса свидетельствует о том, что слой 5 и б являются в структурном отношении одинаковыми, что согласуется с результатами исследования ПЭМ.

Карты обратного пространства позволяют определить так называемые “полные” (относи-

тельно подложки GaAs) деформации ϵ_\perp и ϵ_\parallel каждого из эпитаксиальных слоев: ϵ_\perp вдоль кристаллографической оси [001] ($\epsilon_\perp = [(a_\perp - a_s)/a_s]_{(100)}$) и ϵ_\parallel вдоль кристаллографических осей [110] и $[1\bar{1}0]$ ($\epsilon_\parallel = [(a_\parallel - a_s)/a_s]_{(110)}$), где a_\perp и a_\parallel – вертикальный и латеральный периоды решетки слоя в соответствующих кристаллографических направлениях, a_s – период решетки подложки. Необходимость определения двух значений $\epsilon_{[110]}$ и $\epsilon_{[1\bar{1}0]}$ обусловлена существованием в химических соединениях GaAs, InAs и AlAs двух типов дислокаций, так на-

зываемых α - и β -дислокаций [19], которые ответственны за релаксационные процессы в двух взаимно перпендикулярных направлениях [110] и [1 $\bar{1}$ 0]. Эти направления в указанных веществах неэквивалентны, так как вектор Бюргера в них связан с подрешетками, образованными различными сортами атомов. Процедура определения величин ϵ_{\perp} и ϵ_{\parallel} на основе соответствующих карт обратного пространства описана в [20]. Для определения компонент тензора упругой деформации e_{ij} и e_j необходимо перейти от $\epsilon_{[110]}$ и $\epsilon_{[1\bar{1}0]}$ к ϵ_{11} и ϵ_{22} — диагональным компонентам тензора полных упругих деформаций, записанным в главных кристаллографических осях. Такой переход достигается вращением системы декартовых координат вокруг оси [001] на угол 45°. Соответствующие компоненты ϵ_{11} и ϵ_{22} , а также недиагональный компонент ϵ_{12} будут равны

$$\epsilon_{11} = \epsilon_{22} = \frac{\epsilon_{[110]} + \epsilon_{[1\bar{1}0]}}{2}, \quad (1)$$

$$\epsilon_{12} = \frac{\epsilon_{[1\bar{1}0]} - \epsilon_{[110]}}{2}. \quad (2)$$

Планарная геометрия изучаемого объекта не позволяет определить недиагональные компоненты ϵ_{13} и ϵ_{23} , поэтому в данной работе их полагаем равными нулю. Такое ограничение является стандартным и широко используемым при изучении релаксационных процессов в однослойных гетероструктурах на основе GaAs [11, 12]. За ϵ_{33} принимали усредненное значение ϵ_{\perp} по двум азимутальным углам.

Упругие деформации e_{ij} (отнесенные к равновесному состоянию вещества) в обобщенном виде, включающем в себя случаи $i = j$, определяются выражением

$$e_{ij} = \frac{\epsilon_{ij} - \delta_{ij}\epsilon_0^V}{1 + \epsilon_0^V}, \quad (3)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера; ϵ_0^V — параметр рассогласования, равный $(a_R - a_S)/a_S$ (a_R — период полностью релаксированной решетки данного эпитаксиального слоя, рассчитанный в соответствии с законом Вегарда), а напряжения вдоль главных кристаллографических осей σ_{33} и σ_{11} — выражениями

$$\sigma_{33} = \frac{(S_{11} + S_{12})\epsilon_{33} - 2S_{12}\epsilon_{11}}{(S_{11} + S_{12})S_{11} - 2S_{12}^2}, \quad (4)$$

$$\sigma_{11} = \frac{\epsilon_{11} - S_{12}\sigma_{33}}{S_{11} + S_{12}}, \quad (5)$$

где S_{11} и S_{12} — коэффициенты упругой податливости. При обработке экспериментальных данных

тройные твердые растворы $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ рассматривались как двойные растворы соединений AlAs и InAs с переменным составом по In и Al. Значения S_{11} и S_{12} рассчитывали на основе коэффициентов упругой жесткости C_{11} и C_{12} , взятых из [21], а периоды решеток GaAs, AlAs и InAs, значения которых необходимы для расчета ϵ_{11} , ϵ_{33} и ϵ_0^V , — из [22]. Для тройных растворов $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ значения C_{11} и C_{12} были рассчитаны на основе закона Вегарда. В соответствии с результатами, полученными методом ВИМС, за величину X_{In} принимали значение, задаваемое в процессе изготовления МНЕМТ. Результаты рентгеноструктурного анализа, а также параметры упруго-напряженного состояния многослойной тонкопленочной системы — четвертые ступени ММБ и объединенный пятый слой — приведены в табл. 1. Значения ϵ_{11} и ϵ_{33} свидетельствуют о возникновении тетрагональности в слоях МНЕМТ ($\epsilon_{11} > \epsilon_{33}$), что типично для многослойных гетероструктур на основе GaAs [21, 23]. Кроме параметров упруго-напряженного состояния в табл. 1 приведен фактор структурного “зацепления” f_i (i — номер слоя), определяемый как

$$f_i = \frac{a_{\parallel}^i - a_{\parallel}^{i-1}}{a_{\parallel}^{i-1}} \quad (6)$$

и позволяющий выявить роль межслоевого упругого взаимодействия путем сопоставления пространственных (послойных) зависимостей f_i и латеральной остаточной упругой деформации e_{11} . Сопоставление двух пространственных зависимостей, построенных в виде $|e_{11}|(\epsilon_0^V)$ и $f_i(\epsilon_0^V)$, иллюстрирует рис. 4. Видно, что эти зависимости “коррелируют” между собой в соответствии с принципом зеркальной симметрии. Уменьшение фактора зацепления при переходе от четвертого слоя к пятому бездислокационному слою свидетельствует о резком увеличении межслоевого упругого взаимодействия [7], что обеспечивает условие перехода от релаксированной области к бездислокационной. Уменьшению величины f_i для пятого слоя (более чем на порядок по сравнению со значениями f_i для других слоев) сопутствует изменение характера структурных фрагментов в области сочленения этих двух слоев (рис. 5). Наряду с фрагментами, на которых имеется четкое изображение границы раздела между четвертым и пятым слоями (рис. 5а), наблюдаются структурные фрагменты, на которых граница раздела отсутствует (рис. 5б). Такой тип сочленения двух фаз с одинаковыми кристаллическими решетками, но не совпадающими периодами решеток, наблюдается при псевдоморфном гетероэпитаксиальном росте, и ему соответствует высо-

Таблица 1. Результаты рентгеноструктурного анализа и параметры упруго-напряженного состояния эпитаксиальных слоев МНЕМТ, рассчитанные на основании закона Гука

Параметры	Слой 1	Слой 2	Слой 3	Слой 4	Слой 5
X_{In}	0.15	0.23	0.29	0.35	0.39
$\epsilon_0^V, \times 10^{-3}$	12.10	17.71	21.92	26.12	28.92
$\epsilon_{[110]}, \times 10^{-3}$	8.52	13.01	17.06	21.78	22.19
$\epsilon_{[1\bar{1}0]}, \times 10^{-3}$	8.07	12.63	16.65	21.43	21.79
$\epsilon_{11}, \times 10^{-3}$	8.30	12.82	16.86	21.61	21.99
$\epsilon_{\perp}(0^\circ), \times 10^{-3}$	10.77	15.90	20.11	23.85	29.89
$\epsilon_{\perp}(90^\circ), \times 10^{-3}$	10.77	16.00	20.09	23.93	29.79
$\epsilon_{33}, \times 10^{-3}$	10.77	15.95	20.10	23.89	29.84
$\epsilon_{12}, \times 10^{-4}$	-2.25	-1.90	-2.05	-1.75	-2.0
$e_{11}, \times 10^{-3}$	-3.76	-4.80	-4.95	-4.40	-6.74
$e_{33}, \times 10^{-3}$	-1.32	-1.73	-1.78	-2.17	0.89
$e_{12}, \times 10^{-4}$	-2.22	-1.87	-2.01	-1.71	-1.94
$\sigma_{11}, \text{ МПа}$	-712.9	-891.5	-902.7	-819.7	-1019.4
$\sigma_{33}, \text{ МПа}$	-566.7	-714.9	-725.2	-698.5	-612.2
$f_i, \times 10^{-3}$	8.065	4.525	3.973	4.699	0.357

кий уровень латеральных напряжений. Пространственное распределение $|\sigma_{11}|(\epsilon_0^V)$ подобно распределению $|e_{11}|(\epsilon_0^V)$ “коррелирует” с про-

странственным распределением $f_i(\epsilon_0^V)$ на основе принципа зеркальной симметрии. Отметим, что для зависимостей $|\sigma_{33}|(\epsilon_0^V)$ и $|e_{33}|(\epsilon_0^V)$ подобной зеркальной симметрии с фактором межслоевого структурного “зацепления” не наблюдается.

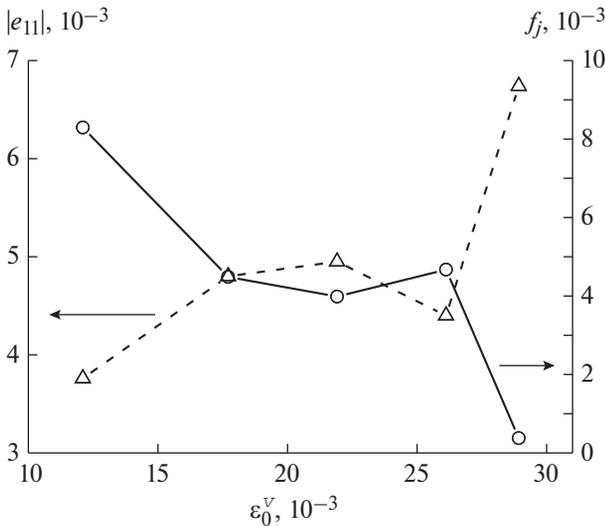


Рис. 4. Сопоставление пространственных распределений модуля остаточных латеральных упругих деформаций $|e_{11}|$ и фактора межслоевого структурного “зацепления” f_i , построенных в виде зависимости от параметра рассогласования ϵ_0^V , рассчитанного на основании закона Вегарда.

СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ МНЕМТ В УСЛОВИЯХ ДЕФОРМАЦИОННОГО УПРОЧНЕНИЯ

При анализе упруго-напряженного состояния эпитаксиальных слоев в многослойных МНЕМТ большую роль играет параметр рассогласования ϵ_0^{sl} , рассчитываемый на основании теории упругости при описании упруго-напряженного состояния одиночного эпитаксиального слоя со свободной поверхностью [24]. Выражение для расчета величины ϵ_0^{sl} имеет вид

$$\epsilon_0^{sl} = \epsilon_{33}^{sl} - \frac{2C_{12}}{C_{11} + 2C_{12}}(\epsilon_{33}^{sl} - \epsilon_{11}^{sl}), \quad (7)$$

где ϵ_{ii}^{sl} – диагональные компоненты тензора полных деформаций одиночного эпитаксиального слоя, определяемые экспериментально. Выражение (7) следует из анализа закона Гука применительно к схеме двухосного сжатия эпитаксиальной пленки. Процесс двухосного сжатия лежит в основе современных представлений об эпитакси-

альном росте [21, 23]. Наличие в слоях МНЕМТ сжимающих вертикальных напряжений σ_{33} свидетельствует о нарушении условий, при которых формируется упруго-напряженное состояние эпитаксиального слоя со свободной поверхностью. Количественно это обстоятельство выражается неравенством $\epsilon_0^V > \epsilon_a^{sl}$, где ϵ_a^{sl} – кажущийся параметр рассогласования, рассчитываемый на основании выражения (7) и приведенных в табл. 1 значений ϵ_{11} и ϵ_{33} . Этот экспериментальный факт позволяет предположить, что в многослойной системе протекает процесс всестороннего сжатия, причиной которого является эффект деформационного упрочнения (множество плоскостей семейства $\{111\}$ в кубических кристаллах способствует этому процессу).

Дадим формальное описание упруго-напряженного состояния эпитаксиальных слоев МНЕМТ в условиях деформационного упрочнения. В кристаллах кубической сингонии процесс всестороннего сжатия вдоль главных кристаллографических осей (случай, соответствующий исследуемой гетероструктуре МНЕМТ) является аналогом процесса сжатия изотропных материалов в условиях гидростатического давления. При этом относительное изменение элементарного объема $\Delta V/V$ описывается выражением

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{\sigma_{bc}}{\beta}, \quad (8)$$

где β – объемный модуль упругости (для рассматриваемого случая $\beta = (C_{11} + 2C_{12})/3$), σ_{bc} – сжимающие напряжения вдоль главных кристаллографических осей. Поскольку в кристаллах кубической сингонии при продольных деформациях вдоль осей $\langle 100 \rangle$ коэффициент Пуассона не зависит от латеральных кристаллографических направлений [25], выражение (8) может быть использовано для расчета параметра рассогласования эпитаксиального слоя ϵ_0^{bc} , вызванного всесторонним сжатием исходного кристалла, находящегося первоначально в равновесном состоянии. Соответствующее выражение имеет вид

$$\epsilon_0^{bc} = (1 + \epsilon_0^V) \left(1 - \left| \frac{\sigma_{bc}}{\beta} \right| \right)^{1/3} - 1. \quad (9)$$

Расчет показывает, что при $\sigma_{bc} = \sigma_{33}$ расхождение между величинами ϵ_0^{bc} и ϵ_a^{sl} для всех эпитаксиальных слоев (за исключением первого) не превышает 0.1% (для первого слоя расхождение равно 0.3%). Такое совпадение значений параметров рассогласования ϵ_0^{bc} и ϵ_a^{sl} , соответствующих различным схемам деформации – всестороннему (ϵ_0^{bc}) и двухосному (ϵ_a^{sl}) сжатию – свидетельствует о том, что финальное упруго-напряженное состо-

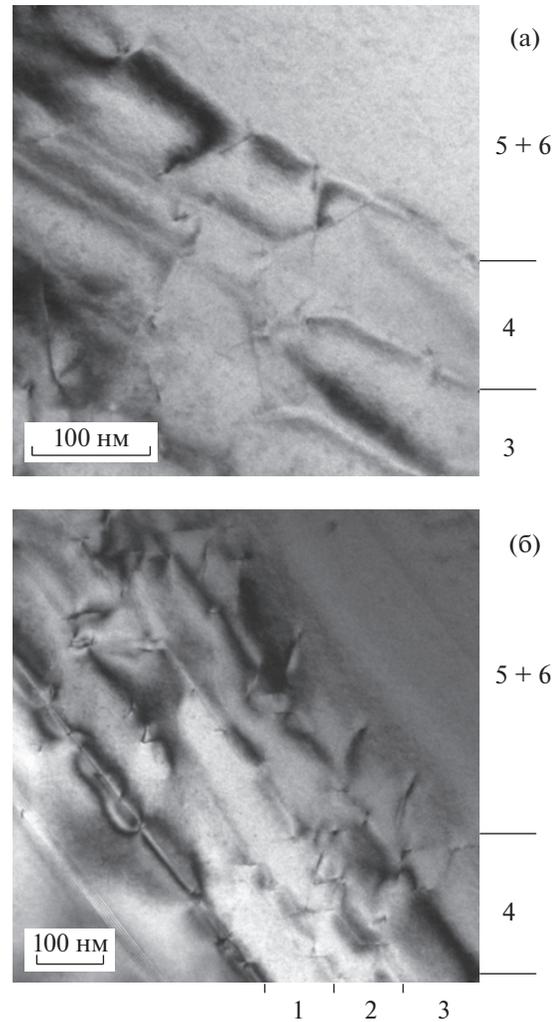


Рис. 5. Фрагменты микроструктуры, определяющие характер сочленения 4 и 5 эпитаксиальных слоев МНЕМТ: а – с образованием четкой межфазной границы между слоями, б – с “прямым” сочленением кристаллических решеток двух слоев. Цифрами обозначены порядковые номера эпитаксиальных слоев.

яние эпитаксиальных слоев МНЕМТ, зафиксированное процессом структурной релаксации, можно моделировать как протекание двухстадийного деформационного процесса, состоящего из стадии всестороннего сжатия и последующей стадии двухосного сжатия слоя, обладающего свойством слоя со свободной поверхностью. Величины ϵ_0^{bc} и ϵ_a^{sl} рассматриваются как эквивалентные, и в конкретных расчетах при дальнейшем анализе энергетического состояния эпитаксиальных слоев МНЕМТ используется параметр рассогласования ϵ_a^{sl} .

Для двухстадийного деформационного процесса упругую деформацию e_{ii}^{mod} можно представить как сумму деформации всестороннего сжа-

Таблица 2. Параметры упруго-напряженного состояния МНЕМТ, реализующегося в результате двухстадийного деформационного процесса

Параметры	Слой 1	Слой 2	Слой 3	Слой 4	Слой 5
$\varepsilon_a^{sl}, \times 10^{-3}$	9.56	14.41	18.49	22.76	25.93
$u_{11}, \times 10^{-3}$	-1.25	-1.56	-1.61	-1.12	-3.84
$e_0^{bc}, \times 10^{-3}$	-2.52	-3.26	-3.35	-3.28	-2.91
$e_{11}^{mod}, \times 10^{-3}$	-3.77	-4.82	-4.96	-4.4	-6.75
τ_{11} , МПа	-145.7	-177.1	-178.1	-121.5	-408.5
σ_{11}^{mod} , МПа	-712.4	-892	-903.3	-820	-1020.7
ΔF_v^{bc} , Дж/см ³	2.14	3.48	3.64	3.44	2.67
ΔF_v^{ba} , Дж/см ³	0.18	0.28	0.29	0.14	1.57
ΔF_v^{Σ} , Дж/см ³	2.32	3.76	3.93	3.58	4.24
ΔF_v , Дж/см ³	3.06	4.90	5.12	4.37	6.60

тия e_0^{bc} и латеральной (или вертикальной) деформации u_{ii} , возникающей при двухосном сжатии:

$$e_{ii}^{mod} = e_0^{bc} + u_{ii}, \quad (10)$$

причем обе эти величины, e_0^{bc} и u_{ii} , связаны с параметром рассогласования ε_a^{sl} . Связь между деформациями e_0^{bc} , u_{ii} и величиной ε_a^{sl} устанавливаются соотношения

$$e_0^{bc} = \frac{\varepsilon_a^{sl} - \varepsilon_0^V}{1 + \varepsilon_0^V}, \quad (11)$$

$$u_{ii} = \frac{\varepsilon_{ii} - \varepsilon_a^{sl}}{1 + \varepsilon_a^{sl}}. \quad (12)$$

В силу условий $\varepsilon_a^{sl} \ll 1$ и $\varepsilon_0^V \ll 1$ выражения (11) и (12) обеспечивают практическое равенство экспериментальных и модельных значений как латеральных, так и вертикальных упругих деформаций e_{ii} и e_{ii}^{mod} . Можно показать, что предложенный подход, описывающий упруго-напряженное состояние многослойной структуры МНЕМТ как результат двухстадийного деформационного процесса, обеспечивает также практическое равенство σ_{11} и σ_{11}^{mod} (σ_{11}^{mod} – сумма латеральных напряжений, соответствующих двухстадийному деформационному процессу). Величина σ_{11}^{mod} рассчитывается как

$$\sigma_{11}^{mod} = \sigma_{33} + \tau_{11}, \quad (13)$$

где τ_{11} – латеральное сжимающее напряжение, вызывающее двухосное сжатие. Выражение для расчета величины τ_{11} имеет вид

$$\tau_{11} = \frac{(C_{11} + 2C_{12})(C_{11} - C_{22})}{C_{11}} \frac{\varepsilon_{11} - \varepsilon_a^{sl}}{1 + \varepsilon_a^{sl}}. \quad (14)$$

Параметры упруго-напряженного состояния, возникающего в результате протекания в слоях МНЕМТ двухстадийного деформационного процесса, приведены в табл. 2. Из таблицы видно, что для всех эпитаксиальных слоев МНЕМТ σ_{11}^{mod} практически совпадает с величиной σ_{11} , а величина e_{11}^{mod} – с величиной e_{11} , что свидетельствует о достоверности описания структурной релаксации как двухстадийного деформационного процесса. Кроме этих значений в табл. 2 приведены значения избыточной свободной энергии ΔF_v^{bc} и ΔF_v^{ba} , рост которой обусловлен всесторонним или двухосным сжатием соответственно, сумма указанных величин ΔF_v^{Σ} и величина избыточной свободной энергии ΔF_v , связанной с протеканием “хаотически” организованного деформационного процесса. Выражение для расчета ΔF_v имеет вид [26]:

$$\begin{aligned} \Delta F_v = & \frac{1}{2} C_{11}(e_{11}^2 + e_{22}^2 + e_{33}^2) + \\ & + C_{12}(e_{11}e_{22} + e_{11}e_{33} + e_{22}e_{33}) + \\ & + 2C_{44}(e_{12}^2 + e_{13}^2 + e_{23}^2). \end{aligned} \quad (15)$$

При расчете ΔF_v значения недиагональных компонентов тензора упругой деформации e_{13} и e_{23} принимали равными нулю; используемые в расчетах значения e_{ii} и e_{12} приведены в табл. 1. Выполненные расчеты показали, что вклад в величину ΔF_v , связанный с недиагональной компонен-

той тензора упругих деформаций e_{12} , составляет всего $10^{-3}\%$, что позволяет при моделировании энергетического состояния эпитаксиальных слоев многослойной гетероструктуры МНЕМТ использовать только остаточные упругие деформации, направленные вдоль главных кристаллографических осей. Учитывая данное обстоятельство, а также предположение (высказанное на основе экспериментальных данных) о протекании в многослойной тонкопленочной системе в ходе структурной релаксации двухстадийного деформационного процесса, энергетическое состояние МНЕМТ можно представить как сумму величин ΔF_v^{bc} и ΔF_v^{ba} . Выражения для ΔF_v^{bc} и ΔF_v^{ba} , на основании которых проводились расчеты, были получены после преобразования выражения (15) к виду, соответствующему всестороннему или двухосному сжатию.

Отметим, что для всех эпитаксиальных слоев МНЕМТ выполняется неравенство $\Delta F_v^{\Sigma} < \Delta F_v$. Таким образом, “упорядоченный” деформационный процесс, сводящийся к двум последовательным элементарным схемам деформации, характеризуется меньшей работой деформации (и соответственно меньшей свободной энергией системы) по сравнению с “хаотически” организованным деформационным процессом, что обеспечивает энергетический выигрыш образующегося при этом метастабильного состояния. Структурное состояние элементарного объема эпитаксиальных слоев в многослойной гетероструктуре МНЕМТ можно описать как состояние всесторонне сжатой квазичастицы, обладающей свойством одиночного слоя со свободной поверхностью. При этом энергетические затраты, связанные с эффектом деформационного упрочнения, являются затратами на проведение процесса всестороннего сжатия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В многослойной тонкопленочной системе, представляющей собой гетероструктуру с пятиступенчатым метаморфным буфером с толщинами слоев 100–200 нм, наряду с латеральными сжимающими упругими деформациями, появление которых типично при метаморфном эпитаксиальном росте, наблюдаются вертикальные сжимающие упругие деформации, связанные с эффектом деформационного упрочнения. Выполнено моделирование упруго-напряженного состояния слоев гетероструктуры, возникающего в процессе эпитаксиального роста, основанное на представлении о протекании в системе двухстадийного деформационного процесса: всестороннего (первая стадия) и двухосного (вторая стадия) сжатия. Показано, что протекание двухстадийного деформационного процесса при эпитаксиаль-

ном росте слоев обеспечивает минимальное энергетическое состояние многослойной тонкопленочной системы по сравнению с “хаотическим” нерегулируемым процессом структурной релаксации. Установлено, что эффект деформационного упрочнения изменяет структурное состояние эпитаксиальных слоев, в результате чего кристаллическая решетка каждого эпитаксиального слоя находится в состоянии всестороннего сжатия, образуя при этом квазичастицу, обладающую свойством слоя со свободной поверхностью. На основании проведенных исследований можно сделать вывод, что при эпитаксиальном росте в результате структурной релаксации происходит самоорганизация многослойной тонкопленочной системы через «механизм» двухстадийного деформационного процесса.

Авторы выражают благодарность профессору Б.С. Бокштейну за полезное обсуждение полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Imaizumi M., Hirotsu M., Soga T.* Proceedings of 2015 IEEE 42nd Photovoltaic Specialist Conference, New Orleans, LA, 2015. 5 p.
2. *Kumar R., Bag A., Mukhopadhyay P. et al.* // Appl. Surf. Sci. 2015. V. 357. P. 922.
3. *Kujofsa T., Ayers J.E.* // Int. J. High Speed Electronics Systems. 2015. V. 24. P. 152009.
4. *Галиев Г.Б., Климов Е.А., Имамов Р.М. и др.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исслед. 2016. № 5. С. 32.
5. *Romanato F., Napolitani E., Carnera A. et al.* // J. Appl. Phys. 1999. V. 86. P. 4748.
6. *Capotondi F., Biasiol G., Ercolani D. et al.* // Thin Solid Films. 2005. V. 484. P. 400.
7. *Tersoff J.* // Appl. Phys. Lett. 1993. V. 62. P. 693.
8. *Dunstan D.J., Kidd P., Fewster P.E. et al.* // Appl. Phys. Lett. 1994. V. 65. P. 839.
9. *Dunstan D.J.* // Philos. Mag. A. 1996. V. 73. P. 1323.
10. *Beanland R., Dunstan D.J., Goodhew P.J.* // Adv. Phys. 1996. V. 45. P. 87.
11. *Dunstan D.J., Young S., Dixon R.H.* // J. Appl. Phys. 1991. V. 70. P. 3038.
12. *Dunstan D.J., Kidd P., Howard L.K., Dixon R.H.* // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 59. P. 3390.
13. *Dodson B.W.* // J. Appl. Phys. 1988. V. 53. P. 37.
14. *Gonzalez D., Araujo D., Aragon G., Garcia R.* // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71. P. 2475.
15. *Freund L.B., Ramirez J.C., Bower A.F.* // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 1990. V. 160. P. 47.
16. *Gonzalez D., Araujo D., Aragon G., Garcia R.* // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71. P. 3099.
17. *Ayers J.E., Ghandhi S.K., Schowalter L.J.* // J. Cryst. Growth. 1991. V. 113. P. 430.
18. *Алёшин А.Н., Бугаев А.С., Ермакова М.А., Рубан О.А.* // Физика и техника полупроводников. 2015. Т. 49. С. 1065.

19. *Feuillet G., Chems D.* // Mater. Sci. Forum. 1986. V. 10–12. P. 803.
20. *Алёшин А.Н., Бугаев А.С., Ермакова М.А., Рубан О.А.* // Кристаллография. 2016. Т. 61. № 2. С. 300.
21. *Tu K.N., Mayer J.W., Feldman L.S.* Electronic thin film science. For electrical engineers and materials scientists. New York: Macmillan Publishing Company, 1992. 428 p.
22. *Стрельченко С.С., В.В. Лебедев В.В.* Соединения A_3B_5 . Справочник. М.: Металлургия, 1984. 144 с.
23. *Ayers J.E.* Heteroepitaxy of semiconductors. Theory, growth, and characterization. Boca Raton: Taylor and Francis Group, 2007. 439 p.
24. *Kharachev Yu.P., Dyshekov A.A., Kiselev D.S.* // Phys. Status Solidi. B. 1984. V. 126. P. 37.
25. *Ballato A.* // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. 1996. V. 43. № 1. P. 56.
26. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. М.: Физматлит, 2003. 264 с.