

УДК 621.382:539.3

В. В. НЕФЕДОВ, Н. А. НЕФЕДОВА

*Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ)
имени М. И. Платова, Новочеркасск, Россия***МОДЕЛЬ НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРУЕМОГО СОСТОЯНИЯ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР**

Существующие модели, учитывающие влияние внутренних деформаций в напряженных структурах в зависимости от концентрации компонент и толщин слоя и подложки адекватно не работают для многокомпонентных гетероструктур с легированием. Целью данной работы является разработка уточненных моделей напряженно-деформируемого состояния таких гетероструктур.

Ключевые слова: гетероструктура, концентрация веществ, компенсация напряжений.

Возможность управлять рядом физических свойств посредством изменения величины деформации, напряжений, концентраций компонентов и соотношения толщин контактирующих слоя и подложки напряженных гетероструктур на основе соединений АЗВ5 представляет интерес для исследователей. Вопрос влияния деформаций на отдельно взятый полупроводник широко освещен в литературе, есть и экспериментальные, и теоретические исследования [1–3]. Но существующие модели, учитывающие влияние внутренних деформаций в напряженных структурах в зависимости от концентрации компонентов и толщин слоя и подложки адекватно не работают для многокомпонентных гетероструктур [4]. Таким образом, разработка уточненной модели упругих напряжений и деформаций многокомпонентных гетероструктур в зависимости от концентрации компонентов и толщин слоя и подложки является одной из важнейших задач. При наличии деформации симметрия полупроводника нарушается, что влияет на изменение энергетического спектра электронов. В случае малых деформаций тензор деформации равен

$$\varepsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{du_i}{dx_k} + \frac{du_k}{dx_i} \right),$$

где u_i, u_k – составляющие вектора смещения точки кристаллической решетки при деформации.

Экспериментальные исследования, выполненные на массивных кристаллических полупроводниках, показывают, что деформация решетки зависит от размера и концентрации N примесных атомов:

$$\varepsilon = \beta N ; \quad \beta = \frac{1}{3} \left[1 - \left(\frac{R_i}{R_0} \right)^3 \right] N_0^{-1},$$

где R_i – ковалентный (ионный) радиус примеси; R_0 – ковалентный радиус атомов матрицы; N_0 – число узлов матрицы в 1 см^3 .

Пусть гетероструктура образуется путем срачивания по основному кристаллографическому направлению $[001]$ (z на рисунке 1). Несоответствие постоянных решеток слоя и подложки вызывает механические напряжения, причем постоянная решетки слоя зависит от концентраций веществ по правилу Вегарда, а постоянная решетки подложки неизменная. Тогда напряжение, обусловленное симметричной диффузией в пластину, определяется соотношением

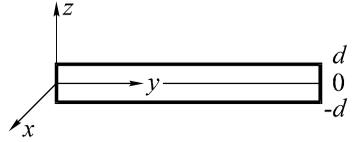


Рисунок 1 – Поперечное сечение пластины

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = \frac{\beta E}{1 - \nu} \left[N - \frac{1}{2d} \int_{-d}^d N dz \right],$$

где σ_{11}, σ_{22} – напряжение вдоль осей x и y соответственно.

Для концентрационного профиля примеси, соответствующей диффузии из постоянного источника

$$N = N_s \operatorname{erfc} \frac{d - z}{2\sqrt{Dt}},$$

где N_s – поверхностная концентрация примеси; D – коэффициент диффузии; t – время диффузии.

Распределение напряжения по толщине пластины, обусловленное диффундирующей примесью, определяется выражением

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = \frac{\beta E N_s}{1 - \nu} \left[\operatorname{erfc} \frac{d - z}{2\sqrt{Dt}} - \frac{2\sqrt{\pi Dt}}{\pi d} \right].$$

Максимальное напряжение возникает в начальный момент времени и составляет

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = \frac{\beta E N_s}{1 - \nu}.$$

Из полученной формулы можно сделать вывод, что максимальное напряжение пропорционально поверхностной концентрации диффундирующей примеси. При высоких концентрациях примеси, когда диффузионно-стимулированное напряжение превышает напряжение предела текучести материала, происходит пластическая деформация, приводящая к образованию сетки дислокаций. Напряжение, необходимое для поддержания пластического потока, имеет вид

$$\sigma_p = \frac{GbN_D^{1/2}}{\omega},$$

где G – модуль сдвига; b – вектор Бюргерса; N_D – плотность дислокаций; ω – число от 3 до 5.

Плотность дислокаций, образованных в результате диффузии примесей, связана с градиентом концентрации диффундирующего вещества соотношением

$$N_D = \frac{\beta}{\gamma} \frac{dN}{dz},$$

где γ – компонента в направлении (параллельном поверхности образца) краевой компоненты вектора Бюргерса.

Анализ концентрационных распределений примесей, возникающих в результате диффузии, показывает, что градиент концентрации обычно представляется функцией, экстремальное значение которой соответствует глубинному диффузионному слою. Тогда следует, что максимальное значение плотности дислокаций также соответствует глубинному слою.

Во избежание возникновения деформаций или дислокаций, обусловленных изменением параметра решетки, обычно используют метод компенсации деформаций, так как возникающие малые рассогласования создают значительные внутренние механические напряжения в структуре, которые зависят от величины разности периодов решетки и отношения толщин осаждаемых слоев. В итоге возникающие напряжения приводят к искривлению структуры, которое ухудшает качество монтажа кристалла на теплоотвод, увеличивает тепловое сопротивление приборов и ухудшает фокусировку лазерных пучков, при больших линейных размерах прибора этот фактор становится весьма существенным. Одним из общеизвестных способов уменьшения механических напряжений является введение фосфора в состав твердого раствора для компенсации разности периодов решетки осаждаемых слоев и подложки. Введение фосфора (P) приводит к уменьшению искривления гетероструктуры по сравнению со структурой без фосфора, использование скомпенсированной гетероструктуры улучшает ближнее поле линейки лазерных диодов и способствует сохранению наклона ватт-амперной характеристики при высоких токах накачки.

Однако в реальных растворах значение концентрации фосфора для полной компенсации упругих напряжений может допускать предельно возможное. Поэтому предпочтительным способом уменьшения механических напряжений является создание в рамках одной гетероструктуры слоев с различными напряжениями, причем так, чтобы суммарные механические напряжения были близки к нулю, но при этом толщина напряженных слоев не должна превышать критическую для выбранных составов. Необходимые значения концентраций веществ описываются функцией в области параметров концентрации и толщин гетероструктуры.

В качестве примера были проведены расчеты для четырехкомпонентной гетероструктуры $AlGaPAs/GaAs$. Получено аналитическое решение в виде функции в области параметров твердого раствора.

Значения параметров уравнений при $T = 300$ К [5–7] приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Значения параметров уравнений

Соединение	a , Å	ν	E , ГПа
AlP	5,4635	0,300	94,9
GaP	5,4508	0,306	142,4
$AlAs$	5,6611	0,325	111
$GaAs$	5,6533	0,312	37,14

Модуль Юнга (E) и коэффициент Пуассона (ν) для слоя определяются аналогично нахождению эффективных значений параметров решетки в зависимости от концентраций k_1 , k_2 , которые соответствуют индексам x и y в обозначениях бинарных соединений:

$$E_{(Al_xGa_{1-x}As_{1-y}P_y)} = [E_{AlP}k_1 + E_{GaP}(1 - k_1)]k_2 + [E_{AlAs}k_1 + E_{GaAs}(1 - k_1) + c\sqrt{E_{AlAs}E_{GaAs}}k_1(1 - k_1)](1 - k_2),$$

$$\nu_{(Al_xGa_{1-x}As_{1-y}P_y)} = [\nu_{AlP}k_1 + \nu_{GaP}(1 - k_1)]k_2 + [\nu_{AlAs}k_1 + \nu_{GaAs}(1 - k_1) + c\sqrt{\nu_{AlP}\nu_{GaP}}k_1(1 - k_1)](1 - k_2),$$

где $c = 0,001245$ – параметр кривизны [8].

Как известно, компоненты тензора напряжений можно определить по формулам [9, 10]:

$$(\sigma_{s,l})_{ik} = \frac{E_{s,l}}{(1 + \nu_{s,l})} \left[(\epsilon_{s,l})_{ik} + \frac{\nu_{s,l}}{1 - 2\nu_{s,l}} [(\epsilon_{s,l})_{11} + (\epsilon_{s,l})_{22} + (\epsilon_{s,l})_{33}] \right],$$

где индексы i и k принимают значения 1, 2 и 3;

$$(\epsilon_{s,l})_{11} = \frac{E_{l,s}(-1 + \nu_{s,l})(a_{s,l} - a_{l,s})}{E_{l,s}(-1 + \nu_{s,l})a_{s,l} + h^m E_{s,l}(-1 + \nu_{l,s})a_{s,l}},$$

$$(\epsilon_{s,l})_{22} = \frac{E_{l,s}(-1 + \nu_{s,l})(a_{s,l} - a_{l,s})}{E_{l,s}(-1 + \nu_{s,l})a_{s,l} + h^m E_{s,l}(-1 + \nu_{l,s})a_{s,l}},$$

$$(\epsilon_{s,l})_{33} = \frac{E_{l,s}\nu_{s,l}(a_{l,s} - a_{s,l})}{E_{l,s}(-1 + \nu_{s,l})a_{s,l} + h^m E_{s,l}(-1 + \nu_{l,s})a_{l,s}}.$$

Здесь индексы 11, 22, 33 определяют направления [100], [010], [001] соответственно; $E_{l,s}$ и $\nu_{s,l}$ – модули Юнга и коэффициенты Пуассона подложки

(*s*) и слоя (*l*) соответственно; *h* – относительная толщина слоя; *m* = 1 для наращиваемого слоя (*l*) и *m* = -1 для подложки (*s*).

Решение уравнения $(\sigma_{11})_i + (\sigma_{11})_s = 0$, с учетом значений из таблицы 1 представляется в виде функции в области параметров k_1, k_2 :

$$k_2 = \frac{249k_1^2 - 5869k_1}{249k_1^2 - 3329k_1 - 36440}.$$

Зависимость концентраций веществ k_2 от k_1 , при которых происходит компенсация напряжений, представлена на рисунке 2.

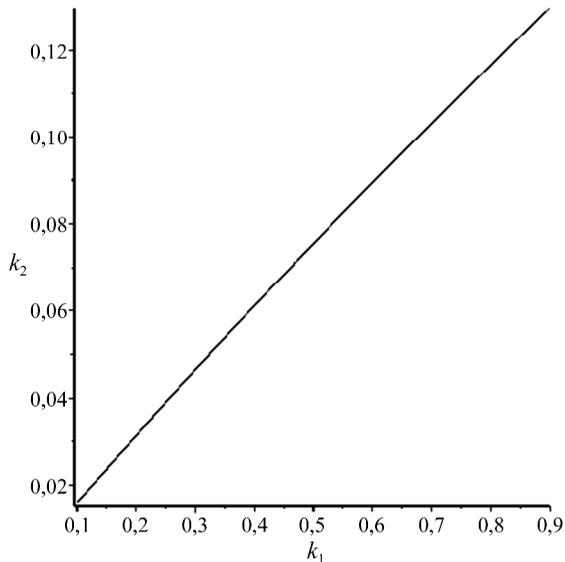


Рисунок 2 – Зависимость концентраций веществ k_2 от k_1 , при которых происходит компенсация напряжений

Полученные результаты показывают, что при увеличении концентрации *Al*, требуется больше содержание *P*, при этом компенсация напряжений происходит во всем диапазоне допустимых концентраций состава. Полученные данные хорошо согласуются с ранее известными экспериментальными результатами.

Таким образом, полученная модель позволяет описывать распределение напряжений в гетероструктурах с учетом их компенсации, а также в совокупности с влиянием состава слоя, толщины слоя и параметров решеток в слоях. Полученные результаты могут быть полезны при создании многокомпонентных гетероструктур с компенсацией напряжений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1 Индуцированные механические напряжения и электрические поля в наногетероструктурах с квантовыми нитями / Чеботарев С. Н. [и др.] // Наука Юга России. – 2017. – Т. 13, № 3. – С. 18–26.

2 **Курило, И. В.** Дислокации несоответствия и напряжения в гетероструктурах $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ / И. В. Курило, С. К. Губа // Неорганические материалы. – 2011. – Т. 47, № 8. – С. 911–915.

3 **Nakajima, K.** Calculation of compositional dependence of stresses in $\text{GaInAs}/\text{GaAs}$ strained multilayer heterostructures / K. Nakajima // Journal of Crystal Growth. – 1993. – Vol. 126, Is. 4. – P. 511–524.

4 **Полякова, А. Л.** Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов / А. Л. Полякова. – М.: Энергия, 1979. – 168 с.

5 **Vurgaftman, I.** Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys / I. Vurgaftman, J. R. Meyer, R. Ram-Mohan // Journal of Applied Physics. – 2001. – Vol. 89, Is. 11. – P. 5815–5875.

6 **Сушкова, Т. П.** Влияние подложки на устойчивость твердого раствора $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{P}$ / Т. П. Сушкова, Г. В. Семенова, Е. Ю. Кононова // Вестник Воронежского государственного университета. Серия Химия. Биология. Фармация. – 2011. – № 2. – С. 60–66.

7 Pressure effects on the elastic and lattice dynamics properties of AIP from first-principles calculations / S. Lakel [et al.] // AIP Conference Proceedings. – 2015. – Vol. 1653. – Paper 020065. – 7 p.

8 Структура и оптические свойства гетероструктур на основе твердых растворов $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_{1-y}\text{P}_y)_{1-z}\text{Si}_z$, полученных методом МOCVD / П. В. Середин [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2014. – Т. 48, № 1. – С. 23–31.

9 **Безухов, Н. И.** Теория упругости и пластичности / Н. И. Безухов. – М.: ГИТТЛ, 1953. – 420 с.

10 **Лунин, Л. С.** Напряженно-деформируемое состояние гетероструктуры $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ / Л. С. Лунин, В. В. Нефедов // Экологический вестник научных центров Черноморского экономического сотрудничества. – 2019. – № 1. – С. 83–87.

V. V. NEFEDOV, N. A. NEFEDOVA

Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Novocherkassk, Russia

MODEL OF THE MULTICOMPONENT HETEROSTRUCTURES STRESS-STRAIN STATE

The existing models take into account the effect of the internal deformations in the strained structures, depending on the components concentration and the layer and the substrate thicknesses but they do not adequately work for the multi-component doped heterostructures. The purpose of this work is to develop the refined models of the stress-strain state of such heterostructures.

Получено 17.06.2019