

УДК 539.293.011.44

Володимир Павлиш, Ігор Данчишин, Любов Закалик, Ростислав Іваник, Роман Корж  
 Національний університет “Львівська політехніка”,  
 кафедра електронних засобів інформаційно-комп’ютерних технологій

## МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПЕНСАЦІЙНИХ ШАРІВ ГРАДІЄНТНО-НАПРУЖЕНИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

© Павлиш Володимир, Данчишин Ігор, Закалик Любов, Іваник Ростислав, Корж Роман, 2003

Наведено результати термодинамічного стану на границі розділу гетероструктури  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$  при товщині перехідного шару не більше 4 нм.

In this paper the results of thermodynamic analysis of a tight - strained state on boundary of separation of heterostructure  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$  are reduced at thickness of a transitional layer no more 4 nm.

### 1. Постановка проблеми

Пошук нових напівпровідникових матеріалів значно посилив інтерес до глибшого вивчення процесів, які відбуваються на границі розділу контакту надтонких плівок з різних напівпровідникових матеріалів. Ці дослідження відкривають нові можливості використання гетероструктур для створення електронних та оптоелектронних пристроїв. Сьогодні досить добре експериментально досліджені процеси, які спричиняють виникнення напружено-деформованого стану, з використанням сучасних методів, які базуються на фотолюмінесценції, х-променевої дифракції, з допомогою електронних і оптичних мікроскопів та інші [1, 2, 3]. Виявилось [4], що перехідний шар, який виникає на границі розділу двох тонких шарів з різного матеріалу при певних умовах нанесення шарів і критичній товщині не погіршує, а навпаки, покращує властивості структури, а це, в свою чергу, покращує електричні характеристики електронних пристроїв.

### 2. Аналіз останніх досліджень та мета роботи

У процесі нарощування плівки на границі розділу з’являються дислокаційні петлі, які з ростом плівки при певних технологічних режимах розмножуються і утворюють сітку дислокацій невідповідності. Причиною виникнення сітки дислокацій невідповідності є релаксація внутрішніх напруг в гетероструктурі при нанесенні плівок і те, що тільки при їх виникненні будемо мати мінімум енергії гетеросистеми, тобто рівновагу на контакті. Отже, енергетично вигідне їх виникнення [5]. В роботах Метьюза [6, 7] описані механізми виникнення дислокацій невідповідності, де стверджується, що однією з причин, яка є найбільш ймовірною у випадку тонких шарів, є зародження дислокаційних напівпетель на поверхні нарощуваної плівки та її розширення до границі розділу. Власна енергія дислокацій при досягненні певних розмірів компенсується зменшенням енергії пружної деформації, яка пов’язана з наявністю внутрішніх напружень і дислокація має можливість розширятися. Як показали експериментальні дослідження [4], внаслідок цього значно зменшуються напруження при товщині перехідного шару не більше 5 – 10 моношарів – це від 2 до 4 нм у випадку контакту  $\text{GaAs-In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Але утворення перехідного шару критичної товщини ставить вимоги і до товщини верхнього шару. Стабілізація і зниження напружень також залежить від величини  $x$ . Як показано на рис.1 [4], утворення перехідного шару критичної

товщини буде в межах  $x = (0,6 \div 1)$ . Нашою задачею є змодельовати напружено-деформований стан перехідного шару, який має товщину декількох одиниць нм. Оскільки перехідний шар дуже тонкий і представляє сітку дислокацій невідповідності, то і вимагає нестандартного підходу до розв'язання цієї задачі. Цю задачу можна розв'язати на рівні атомної взаємодії, враховуючи дефектність структури або як окрему термодинамічну систему з певними параметрами.

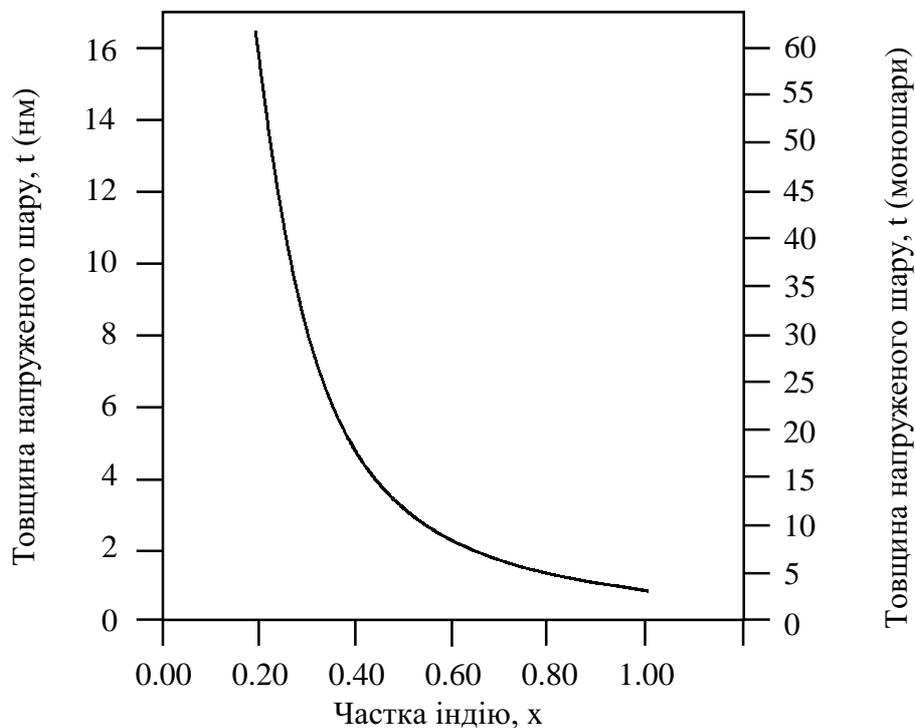


Рис. 1

### 3. Термодинамічний аналіз градієнтно-напруженої гетероструктури

Розглянемо структуру  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ , показану на рис. 2, як термодинамічну систему, для якої рівняння напружено-деформованого стану, згідно з теорією Тимошенко С.П., можна записати у вигляді:

$$\frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \varphi}{\partial y^4} = 0, \quad (1)$$

де компоненти напружень

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2}; \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}; \quad \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y}. \quad (2)$$

Структура, яка показана на рис. 2, має такі розміри: довжина структури дорівнює  $2b$ , товщина нижнього шару  $h_1$ , перехідного  $h_2$  і верхнього  $h_3$ .

Найбільш точним методом для розв'язання рівняння (1) є метод Фаукса і Гайгна [8], оскільки маємо справу з тонким шаром, у результаті функція  $\varphi$  набуде вигляду:

$$\varphi = \sum_{m=0}^{\infty} A_m \cos \alpha_m y \cdot f(x, m) + \sum_{n=0}^{\infty} B_n \cos \beta_n x \cdot f(y, n) \quad (3)$$

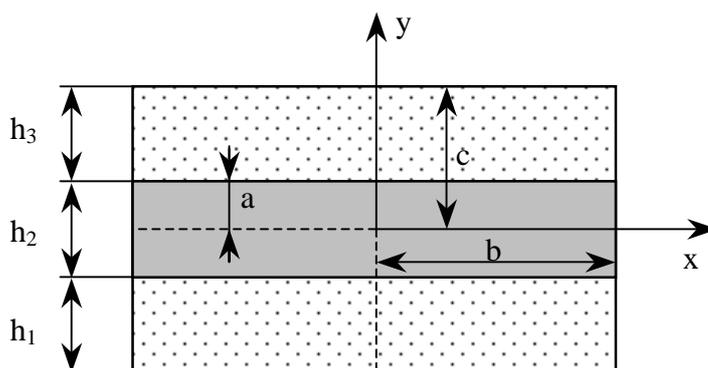


Рис. 2

де  $\alpha_m = \frac{m\pi}{c}$ ;  $\beta_n = \frac{n\pi}{b}$ , а коефіцієнти  $A_m$  і  $B_n$  визначаються граничними умовами. Компоненти напружень з рівняння (2) дорівнюватимуть:

$$\sigma_{xx} = -A_0 - \sum_{m=1}^{\infty} A_m \cdot \alpha_m^2 \cos \alpha_m y f(x, m) + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cos \beta_n x f''(y, n) \quad (4)$$

$$\sigma_{yy} = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \cdot \cos \alpha_m y f''(x, m) + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \beta_n^2 \cos \beta_n x f(y, n) \quad (5)$$

$$\sigma_{yy} = \sum_{m=1}^{\infty} A_m \cdot \alpha_m \sin \alpha_m y f'(x, m) + \sum_{n=1}^{\infty} B_n \beta_n \sin \beta_n x f'(y, n) \quad (6)$$

Якщо вважати, що  $m = 0$  і  $n = 0$ , тоді  $B_n = 0$  і  $f''(x, 0) = f''(y, 0)$ , отже  $A_0 = \rho_0$  і його можна визначити з умови:

$$\rho_0 = \begin{cases} -\sigma_{xx} a/c \\ 2\sigma_{xx} \sin \alpha_i a/\alpha_i c \end{cases} \quad \text{при } i = 0. \quad (7)$$

Функції  $f(x, m)$ ,  $f(y, n)$  можна визначити, користуючись методикою [8]. При інших значеннях  $m - A_m = \rho_m$ . З рівняння (5) випливає, що  $\sigma_{yy} \neq 0$  при умові, що  $y = \pm c$ . Оскільки коефіцієнти  $A_m$  і  $B_n$  визначають всі компоненти напружень в тонкому перехідному шарі, існуватимуть всі три компоненти, а в півках завтовшки десятки частки чи одиниці мікронів при  $y = \pm c$  та  $x = \pm b$   $\sigma_{yy}$  і  $\sigma_{xy}$  дорівнюватимуть нулю.

Для визначення коефіцієнта  $A_m$  і розв'язання рівнянь (4, 5, 6) можна користуватися виразом (7).

Визначивши за рівняннями (4, 5, 6) компоненти релаксації напружень, визначаємо величини деформацій за формулами:

$$\varepsilon_{xx} = [\sigma_{xx} + \mu\sigma_{yy}] / E_i \quad (8)$$

$$\varepsilon_{yy} = [\sigma_{yy} + \mu\sigma_{xx}] / E_i \quad (9)$$

$$\varepsilon_{xy} = \sigma_{xy}/G, \quad (10)$$

де модуль зсуву  $G = E/2(1 + \mu)$ ,  $E$  – модуль Юнга, і  $\mu$  – коефіцієнт Пуассона.

Розрахунок, проведений нами за цією методикою для гетероструктури  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ , дає результати, близькі до експериментальних. За розрахунками отримано  $\varepsilon_{xx}$  в центрі структури при товщині перехідного шару 3 нм – 0,0027,  $\varepsilon_{yy} = 0,0080$  і  $\varepsilon_{xy} = 0,0050$ . Ці значення нижчі на 0,5 % від експериментальних [4].

#### 4. Висновок

З цього можна зробити висновок, що сітка дислокацій невідповідності забезпечує ефективне зменшення напружень в перехідному шарі і гальмує їх розповсюдження. Такий стан забезпечується технологічними режимами нанесення тонких плівок та відповідним співвідношенням складових три- чи більше компонентних напівпровідників. Методика розрахунку, запропонована в цій статті, створює можливість визначення критичної товщини перехідного шару, який покращує властивості гетероструктури, але вимагає порівняльного аналізу з іншими методами.

1. Maree P.M., Barbour J.C., Vander Veen I.F. *Karanagh* 1987, *I. Appl. Phys.* 62, 4413– 20.
2. Chang K.H., Bhattacharya P.K., Gilbala, 1989, *I. Appl. Phys.* 66, 2993 – 2998.
3. Drigo A.V., Aydingli A., Pigo C., Ferrari C., Franzosi P., Salviatig, 1989, *I. Appl. Phys.* 66, 1975 – 83.
4. Yao I.Y., Andersson T.G., Dunlop G.L., *Semiconductor Sci. Technol.*, 9, 1994, 1086 – 1095.
5. Van der Merwe J.H., *i. Appl. Phys.* 1963, 34, № 1, 117-127; № 11, 3420.
6. Matthews I.W., Mader S., Light T.B., 1970, *I. Appl. Phys.*, 41, 131 – 160.
7. Matthews I.W., Blakeslee A.E., 1974, *I. Crystal Growth*, 27, 118 – 25.
8. Faux D.A., Haigh J., 1990, *I. Phys.*, 2, 10289.