УДК 538.911, 538.975

ПРОЕКТИРОВАНИЕ МЕТАМОРФНОГО СТУПЕНЧАТОГО БУФЕРА, ОСНОВАННОЕ НА ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОМ ОПИСАНИИ СТРУКТУРНОЙ РЕЛАКСАЦИИ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЯХ

А.Н. Алёшин, О.А. Рубан

*Институт сверхвысокочастотной полупроводниковой электроники им. В.Г. Мокерова
Российской академии наук (ИСВЧПЭ РАН), 117105, Москва, Россия*

Методом построения карт обратного пространства и на основании линейной теории упругости получено пространственное распределение остаточных упругих деформаций в слоях метаморфного ступенчатого буфера, выращенного методом молекулярно-лучевой эпитаксии на основе тройных растворов $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ на подложке (001) GaAs. Показано, что с учётом поправки на эффект деформационного упрочнения пространственное распределение упругих деформаций в слоях ступенчатого ММ-буфера подчиняется тому же феноменологическому закону, который описывает процесс структурной релаксации в однослойных гетероструктурах. На основе установленной феноменологической закономерности предложен графический метод проектирования метаморфного ступенчатого буфера, который позволяет, задавая градиент параметра рассогласования, рассчитать толщину бездислокационного слоя и величину остаточной упругой деформации, достаточную для его формирования.

Ключевые слова: гетероструктура, ступенчатый буфер, трёхосевая дифрактометрия, обратное пространство, деформационное поле, феноменологическая постоянная

Сведения об авторах: Андрей Николаевич Алёшин, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, a.n.aleshin@mail.ru; Олег Альбертович Рубан, младший научный сотрудник, myx.05@mail.ru

.....

DESIGN OF THE METAMORPHIC STEP-GRADED BUFFER LAYER, BASED ON PHENOMENOLOGICAL DESCRIPTION OF STRUCTURAL RELAXATION IN EPITAXIAL LAYERS

A.N. Aleshin, O.A. Ruban

*Institute of microwave semiconductor electronics named after V.G. Mokerov of Russian Academy of Sciences,
117105, Moscow, Russia*

In this article using the method of reciprocal space mapping and on the basis of the linear theory of elasticity we obtain spatial distribution of residual elastic strains in metamorphic step-graded buffer layers, grown by the molecular-beam epitaxy on the basis of $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ on GaAs (001) substrate. It was demonstrated that accounting the strain-hardening effect, the spatial distribution of elastic strains in metamorphic step-graded buffer layers is determined by the same phenomenological law that describes the process of structural relaxation in monolayered heterostructures. Based on the established phenomenological pattern, we offer the graphic method for designing the metamorphic step-graded buffer, which sets mismatch gradient value and allows to determine the thickness of the dislocation-free layer and the value of residual elastic strain, which is enough for the buffer formation.

Keywords: heterostructure, step-graded buffer, 3-axis diffractometry, reciprocal space, deformation field, phenomenological constant

Authors: Andrey Nikolaevich Aleshin, Doctor of Physico-Mathematical Sciences, Senior Researcher, a.n.aleshin@mail.ru; Oleg Albertovich Ruban, Associate Researcher, myx.05@mail.ru

Введение

Используемые в приборах сверхвысокочастотной (СВЧ) полупроводниковой электроники (например, в транзисторах с высокой подвижностью электронов – high electron mobility transistors, HEMTs) гетероструктуры (например, гетероструктуры $\text{AlInAs}/\text{AlGaAs}/\text{AlInAs}$) выращиваются, как правило, на монокристаллических подложках GaAs с ориентацией (001) методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Поскольку параметр решётки активных слоёв транзистора (квантовой ямы) превышает параметр решётки подложки GaAs, HEMT содержит в качестве демпфирующего элемента метаморфный буфер (ММБ). ММБ представляет собой переходную область с пространственным изменением периода решётки, что в случае вышеназванных гетероструктур достигается путём изменения содержания In. Характер изменения содержания In в пространстве может быть различным: ступенчатым [1–3], линейным [2, 3], а также параболическим или квадратно-корневым [4]. В технологии создания гетероструктур наибольшее распространение получили многослойные ступенчатые ММБ ввиду относительной простоты их изготовления. Часто в ступенчатом ММБ в качестве дополнительного элемента конструкции присутствует инверсная ступень – слой с пониженным содержанием In по сравнению с нижерасположенной ступенью [5]. Основным элементом конструкции ММБ является бездислокационный слой, образующийся в верхней части буфера; этот слой в свою очередь может быть использован в качестве платформы для создания инверсной ступени. Образование бездислокационного слоя следует рассматривать как один из этапов процесса структурной релаксации слоёв ММБ, который сопровождается эпитаксиальным ростом. Процесс структурной релаксации связан с генерацией дислокаций несоответствия и распространением прорастающих дислокаций (представляющих собой дислокационные петли, замкнутые на дислокации несоответствия [6]) в верхние слои HEMT вплоть до активных слоёв. Теоретическое обоснование возможности образования бездислокационного слоя в однослойном буфере переменного состава (т.е. с изменяющимся периодом решётки) было дано в [7]. Данная теоретическая модель пред-

ставляет собой анализ изменения энергии системы, состоящей из однослойного буфера с изменяющимся периодом решётки, при её стремлении к равновесию. В [7] было показано, что при образовании бездислокационного слоя достигается устойчивое метастабильное состояние системы, близкое к равновесному. Уровень остаточных упругих деформаций в бездислокационном слое является важнейшей характеристикой всей конструкции ММБ, а выявление закономерностей, лежащих в основе его формирования, является актуальной задачей, решение которой важно для разработки физических основ технологии создания гетероструктур.

Наиболее подробно процесс структурной релаксации был изучен для однослойных гетероструктур состава $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (при $x = 0.05 - 0.25$), выращенных методом МЛЭ на подложках GaAs с ориентацией (001). Было установлено, что в однослойных гетероструктурах структурная релаксация характеризуется тремя стадиями: медленной, быстрой и финальной стадией насыщения. Медленная стадия заключается в проникновении решёточных дислокаций из подложки в эпитаксиальный слой с их последующим искривлением, что приводит к образованию на межфазной границе дислокаций несоответствия. Быстрая стадия – это стадия мультипликации дислокаций несоответствия и скольжения их дислокационных петель; эта стадия протекает при толщине эпитаксиального слоя порядка 100–800 нм. Третья стадия наблюдается при толщине эпитаксиального слоя более 800 нм. На этой стадии происходит торможение скольжения дислокационных петель, что обусловлено эффектом деформационного упрочнения. Для быстрой стадии структурной релаксации экспериментальным путём было установлено, что между остаточной деформацией сжатия и толщиной эпитаксиального слоя существует обратно пропорциональная зависимость [8, 9], что вытекает из условия баланса сил, действующих на скользящую дислокацию [10]. Существование в однослойных гетероструктурах обратно пропорциональной зависимости между остаточными упругими деформациями сжатия эпитаксиального слоя и его толщиной вытекает также из «геометрического принципа» [11], который устанавливает в области межфазной границы обратно пропорциональную зависимость

между линейным размером деформационного поля отдельной дислокации и плотностью дислокаций несоответствия.

Разработка конструкции ступенчатого ММБ включает в себя подбор числа ступеней, определение суммарной толщины буфера, толщины его ступеней, определение содержания легирующего элемента в ступенях, а также закона пространственного изменения концентрации легирующего элемента. При этом конечной целью конструирования является получение в верхних слоях ММБ бездислокационного слоя при минимальном уровне сжимающих латеральных напряжений в нём. Цель настоящей работы – разработка научных положений конструкционного подхода к проектированию ММБ на основе феноменологической закономерности, выявленной для процесса структурной релаксации в однослойных гетероструктурах для композиций типа InGaAs, которая свидетельствует о существовании обратно пропорциональной зависимости между остаточными упругими деформациями сжатия эпитаксиального слоя и его толщиной [8, 9]. Ниже такой подход конструирования ММБ будем называть феноменологическим. Важной составной частью работы явилась проверка предложенного подхода конструирования ступенчатого ММБ. В отличие от однослойного буфера переменного состава ступенчатый ММБ позволяет использовать такой метод структурного анализа как высокоразрешающая дифрактометрия, в частности, метод построения карт обратного пространства [12, 13], который является единственным методом структурного анализа, позволяющим учесть пространственную разориентацию эпитаксиальных слоёв – эффект, который присутствует в многослойных гетероструктурах, особенно в случае их выращивания на вихриальных поверхностях [14]. Ниже для обозначения гетероструктуры с ММБ будем использовать аббревиатуру МНЕМТ (metamorphic NEMT).

Теоретические основы конструирования ММБ на основе феноменологического подхода

Эмпирическое правило [8, 9] для кристаллов композиции InGaAs, обладающих кристаллической решёткой с кубической сингонией, которое устанавливает связь между остаточными упругими деформациями e и толщиной эпитаксиального слоя h , можно выразить следующим образом:

$$|e|h = k, \quad (1)$$

где k – феноменологическая константа, равная 0.83 нм [8]. Обнаруженный в [8, 9] экспериментальный факт, а также его интерпретация на основе «геометрического принципа» [11] позволяют создать достаточно простой графический метод расчёта предельного значения остаточных упругих деформаций сжатия и толщины бездислокационного слоя в однослойном ММБ с непрерывно меняющимся (по линейному закону) параметром рассогласования ε_0 :

$$\varepsilon_0 = \frac{a_R - a_s}{a_s}, \quad (2)$$

где a_s – период решётки подложки и a_R – период полностью релаксированной (находящейся в равновесном состоянии) решётки данного эпитаксиального слоя, величину которого для сложных композиций можно определить на основании закона Вегарда. В основе метода лежит утверждение (основанием для которого является «геометрический принцип» [11]), что процесс структурной релаксации контролируется произведением $\varepsilon_0 h_c$ (h_c – некая критическая толщина слоя, зависящая неявным образом от параметра рассогласования ε_0). Произведение $\varepsilon_0 h_c$ является величиной постоянной, не зависящей от толщины эпитаксиального слоя h . В случае, когда толщина эпитаксиального слоя $h < h_c$, структурная релаксация не происходит. При условии $h > h_c$ в эпитаксиальном слое развивается процесс структурной релаксации, который обеспечивает равенство $|e|h = \varepsilon_0 h_c$. Величина e определяется выражением

$$e = \varepsilon_0 - \Delta\varepsilon, \quad (3)$$

где $\Delta\varepsilon$ – параметр рассогласования в условиях латеральной деформации. Связь между остаточной упругой деформацией e и толщиной эпитаксиального слоя иллюстрирует рис. 1 (ось деформаций на рисунке обозначена обобщённым символом ε). Показанные площади прямоугольников (обозначены символом S) равны между собой (в соответствии с [8] $S = 0.83$ нм). На рис. 2 показана однослойная гетероструктура с параметром рассогласования ε_0 , величина которого изменяется по толщине эпитаксиального слоя h линейным образом. Отсекаемая прямой $\varepsilon_0(z)$ (z – пространственная координата, направленная от поверхности эпитаксиального слоя к подложке) площадь треугольника

S равна площади прямоугольников, показанных на рис. 1. Нетрудно показать, что в этом случае толщина бездислокационного слоя z_0 определяется выражением

$$z_0 = \sqrt{\frac{2S}{\alpha}}, \quad (4)$$

где α – модуль производной $\left| \frac{d\varepsilon_0}{dz} \right|$, а величина остаточной деформации сжатия ε_s на поверхности слоя (в точке $z = 0$) будет равна

$$\varepsilon_s = \sqrt{2S\alpha}. \quad (5)$$

При применении данного подхода к ступенчатому ММБ (исходя из предположения, что ступенчатый ММБ представляет собой набор слоёв со свободной поверхностью, а бездислокационный слой является одной из ступеней ММБ) упругая деформация сжатия в бездислокационном слое $|e^{dfl}|$ будет усреднённой величиной функции $\varepsilon(z)$ на отрезке $0 \leq z \leq z_0$ в однослойном буфере переменного состава. Таким образом, в ступенчатом буфере $|e^{dfl}| = \varepsilon_s/2 = \sqrt{2S\alpha}/2$.

Рис. 1

Связь между упругой деформацией и толщиной эпитаксиального слоя при однородной латеральной деформации по толщине с меньшей – а) и большей – б) толщиной эпитаксиального слоя

Рис. 2

Связь между упругой деформацией и толщиной эпитаксиального слоя при однородной латеральной деформации по толщине с параметром рассогласования слоёв, изменяющимся по толщине

Далее изложены результаты изучения ступенчатого ММБ в МНЕМТ с квантовой ямой InAlAs/InGaAs/InAlAs, на основе которых произведено сопоставление экспериментальной величины остаточной упругой деформации в бездислокационном слое с величиной $|e^{dfl}|$, рассчитанной на основе феноменологического подхода.

Экспериментальная часть

Конструкция и изготовление МНЕМТ

В работе была исследована МНЕМТ, выращенная на вицинальной поверхности подложки GaAs с ориентацией (001) с углом отклонения 2° на установке МЛЭ RIBER 32P. Гетероструктура состояла из активных слоёв InAlAs/InGaAs/InAlAs с мольной долей In, X_{In} , равной 0.394, и 6-ступенчатого ММБ с толщиной каждого слоя 0.2 мкм, который включал в себя инверсную ступень. Изменение мольной доли индия в твёрдом растворе InAlAs при переходе от одной ступени ММБ к другой равнялось для первых трёх ступеней 0.1, для четвёртой ступени – 0.09, для пятой – 0.08. В шестой (инверсной) ступени мольная доля In была равна 0.394. Такое же содержание In было в обоих барьерных слоях МНЕМТ. Точность создания желаемого уровня концентрации In в слоях ММБ составляла $\pm 0.005 X_{In}$. Слои ступенчатого ММБ выращивали при температуре подложки 400°C при постоянной температуре источника алюминия при скорости 0.5 мкм/час. Прерывание роста между ступенями ММБ не прово-

дилось. Нижний барьерный слой состава $\text{In}_{0.394}\text{Al}_{0.606}\text{As}$ выращивался при температуре 500 °С и имел толщину 0.2 мкм, т.е. такую же, как и ступени ММБ. Состав элементов конструкции гетероструктуры контролировался температурой молекулярных источников In, Al, Ga, As и Si (Si использовался для создания δ -слоя) на основе калибровки температурной зависимости молекулярных потоков. Схематическое представление выращенной МНЕМТ показано на рис. 3.

12	$n\text{-In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$	15 нм	
11	$\text{In}_{0.394}\text{Al}_{0.606}\text{As}$	12 нм	
10	$\delta\text{-Si}(N_{\text{Si}}=7\cdot 10^{12}\text{ см}^{-2})$	–	
9	$\text{In}_{0.4}\text{Al}_{0.606}\text{As}$	3 нм	
8	$\text{In}_{0.394}\text{Al}_{0.606}\text{As}$	18 нм	
7	$\text{In}_{0.394}\text{Al}_{0.606}\text{As}$	200 нм	
6	$\text{In}_{0.394}\text{Al}_{0.606}\text{As}$	200 нм	ММ-буфер MM-buffer
5	$\text{In}_{0.48}\text{Al}_{0.26}\text{As}$	200 нм	
4	$\text{In}_{0.40}\text{Al}_{0.70}\text{As}$	200 нм	
3	$\text{In}_{0.30}\text{Al}_{0.70}\text{As}$	200 нм	
2	$\text{In}_{0.20}\text{Al}_{0.80}\text{As}$	200 нм	
1	$\text{In}_{0.10}\text{Al}_{0.906}\text{As}$	200 нм	
GaAs (подложка/substrate)			

Рис. 3
Схематическое представление МНЕМТ с квантовой ямой $\text{AlInAs}/\text{AlGaAs}/\text{AlInAs}$ со ступенчатым ММБ, состоящим из 6 эпитаксиальных слоёв, включая инверсную ступень. Цифрами обозначены конструктивные элементы гетероструктуры: 1-5 – ступени ММБ с увеличивающимся содержанием In; 6 – инверсная ступень; 7 – нижний барьерный слой; 8 – квантовая яма; 9 – спейсер; 10 – δ -слой; 11 – верхний барьерный слой; 12 – кэп-слой

Аттестация выращенной МНЕМТ

Для аттестации выращенной МНЕМТ использовали методы 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 регистрировались 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^+ . Учёт выхода ионов GaCs_2^+ позволяет максимально снизить влияние матричного эффекта при проведении анализа состава эпитаксиальных слоёв МНЕМТ методом ВИМС. Структурная аттестация МНЕМТ была выполнена на микроскопе Jeol JEM 2010 при ускоряющем напряжении 200 кВ.

Рентгеновская съёмка

Рентгеновская съёмка была выполнена в трёхосевой геометрии с использованием прецизионного дифрактометра SmartLab 9kW в пошаговом режиме в медном излучении $\text{K}_{\alpha(1)}$. В качестве кристалла-анализатора был использован монокристалл Ge с ориентацией (022). Съёмка велась в двух отражениях 004 и 224 (в положении скользящего отражения) в режиме так называемого $\omega - 2\theta$ сканирования, которое заключается в съёмке образца по методу Брэгга–Брентано при различных исходных угловых отклонениях подложки от угла Брэгга, что достигается за счёт поворота образца на фиксированный угол $\Delta\omega$ относительно одной из кристаллографических осей типа $\langle 110 \rangle$. Во время съёмки проводилась регистрация дифрагированного рентгеновского излучения для выбранного отражения путём сканирования вдоль вектора рассеяния H_{hkl} : H_{004} (симметричная съёмка) и H_{224} (асимметричная съёмка). При симметричной съёмке (отражение 004) начальное положение образца соответствовало положению подложки под углом Брэгга ($\Delta\omega = 0$). При асимметричной съёмке (отражение 224) варьировались значения hkl , что позволило разложить вектор H_{224} по направлениям обратного пространства [001] и [110].

Экспериментальные результаты

Описание микроструктуры МНЕМТ и результат концентрационного профилирования

На рис. 4 показан общий вид гетероструктуры (светлопольное электронномикроскопическое изображение её поперечного сечения), а также пространственное распределение мольной доли In, X_{In} в эпитаксиальных слоях МНЕМТ, полученное методом ВИМС.

Рис. 4

Электронно-микроскопическое изображение поперечного сечения исследуемой МНЕМТ – а; пространственное распределение мольного содержания In в эпитаксиальных слоях, полученное методом ВИМС – б; цифрами обозначены порядковые номера эпитаксиальных слоёв

Видно, что величина X_{In} в эпитаксиальных слоях МНЕМТ с высокой точностью совпадает с задаваемыми в процессе роста концентрациями In, а глубина залегания In в пространстве соответствует задаваемым толщинам эпитаксиальных слоёв. В структурном отношении МНЕМТ характеризуется наличием в ней бездислокационного слоя (5-я ступень ММБ), а также отсутствием прорастающих дислокаций в инверсной ступени и нижнем барьерном слое. Толщина бездислокационного слоя равна 0.2 мкм и соответствует толщине 5-й ступени, задаваемой в процессе эпитаксиального роста.

Карты обратного пространства

Рентгеновская съёмка в режиме трёхосевого сканирования позволяет построить карты обратного пространства, которые представляют собой контуры равной интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения, расположенные по осям пространства, обратного по отношению к кристаллической решётке. Пучности изоконцентрационных контуров представляют собой интерференционные рентгеновские максимумы, которые являются неосновными по отношению к рентгеновскому максимуму от подложки. Актуальными осями обратного пространства для эпитаксиальных слоёв МНЕМТ, выра-

щенной на подложке (001) GaAs, являются ось [110] (ось Y) и ось [001] (ось Z). За начало координат обратного пространства принимается точка, задаваемая вектором рассеяния от подложки – основного рентгеновского максимума. Таким образом, координаты пучностей (неосновных рентгеновских максимумов) определяются векторами $q_{[110]}$ (q_y) и $q_{[001]}$ (q_z), которые представляют собой отклонения (вдоль соответствующих осей обратного пространства) от положения основного рентгеновского максимума H_{hkl}^0 , возникающего от подложки. Набор векторов q_z^{004} , q_y^{004} и q_y^{224} является достаточным для определения вертикального и латерального периодов решётки данного эпитаксиального слоя, а также для описания деформационного состояния каждого слоя ММБ на основе линейной теории упругости.

Карты обратного пространства исследованной МНЕМТ для одного из азимутальных углов приведены на рис. 5. Карты имеют сложное строение благодаря частичному перекрытию рефлексов, а также отсутствию чётко выраженного рефлекса для слоя 4. Такое строение карт требует специальных подходов при их обработке. Характер взаимного расположения неосновных рентгеновских максимумов на карте обратного пространства для отражения 004 характеризует соответствующая кривая качания, показанная на рис. 6.

Рис. 5

Карты обратного пространства для рефлексов 004 – а) и 224 (в геометрии скользящего отражения) – б), снятые при одном и том же азимутальном угле; цифрами обозначены порядковые номера эпитаксиальных слоёв, ответственных за появление соответствующего рефлекса

Видно, что область дифрагированного отражения, соответствующая слою 4, значительно шире в угловом выражении по сравнению с другими неосновными рентгеновскими максимумами. Причинами отсутствия на картах обратного пространства чётко выраженного рентгеновского максимума для слоя 4 является близость концентрации In в этом слое и слоях 6 (7), а также, возможно, сильная дефектность слоя 4, вызванная процессом структурной релаксации. Сильная дефектность слоя 4 приближает его структурное состояние к аморфным материалам, которые характеризуются широкими рентгеновскими максимумами на дифрактограммах [15]. С целью нахождения точного положения на картах обратного пространства рентгеновских максимумов для слоёв 3 и 4 использовалась техника моделирования скана рентгеновского дифрагированного излучения набором гауссиан [12], справедливая для симметричной съёмки. Данная техника позволяет определить для слоёв МНЕМТ значения векторов q_z^{004} и q_y^{004} (принимая за эти

значения медианы соответствующих гауссиан). При проведении моделирования считалось, что слои 6 и 7 (инверсная ступень и нижний барьерный слой) характеризуются одним сильным рефлексом, который на картах обратного пространства находится между рефлексом, соответствующим слою 3, и областью дифрагированного рентгеновского излучения, соответствующей слою 4. Таким образом, число гауссиан при моделировании принимали равным 6. Пример моделирования скана дифрагированного рентгеновского излучения, соответствующего положению подложки под углом Брэгга, показан на рис. 7. Аналогичный метод – представление отдельного рентгеновского максимума на картах обратного пространства для отражения 004 с помощью функции Гаусса – был использован для моделирования распределения интенсивности дифрагированного рентгеновского излучения вдоль оси Y . Моделирование рентгеновских сканов вдоль осей обратного пространства Y и Z (для отражения 004) с помощью набора гауссиан было выпол-

нено с помощью компьютерной программы Origin 15. Значения векторов q_y^{224} для всех слоёв (за исключением вектора q_y^{224} для 4-го слоя) были определены непосредственно из карт обратного пространства. Определение величины остаточной упругой деформации для ступени 4 описано в следующем разделе.

Рис. 6

Кривая качания, полученная в отражении 004; цифрами обозначены порядковые номера эпитаксиальных слоёв, ответственных за появление соответствующего рефлекса

Рис. 7

Моделирование центральной части скана дифрагированного рентгеновского излучения для отражения 004 набором гауссиан (разложение вдоль оси обратного пространства Z), соответствующего кривой качания; данный скан соответствует кривой качания, показанной на рис. 6; цифрами обозначены порядковые номера эпитаксиальных слоёв, ответственных за появление данного рефлекса

Деформационное поле слоёв ступенчатого метаморфного буфера

Значения векторов обратного пространства q_{ε}^{004} , q_y^{004} и q_y^{224} позволяют определить величины $[(a_{\perp} - a_s)/a_s]_{[001]}$ и $[(a_{\square} - a_s)/a_s]_{[110]}$, где $a_{\perp}$ и $a_{\square}$ – соответственно вертикальный и латеральный периоды решётки слоя.

В соответствии с [16]

$$\left(\frac{a_{\perp} - a_s}{a_s} \right)_{[001]} = - \frac{q_z^{004}}{4/a_s + q_z^{004}}, \quad (6)$$

$$\left(\frac{a_{\square} - a_s}{a_s} \right)_{[110]} = - \frac{Q_y^{224}}{2^{3/2}/a_s + Q_y^{224}}, \quad (7)$$

где

$$Q_y^{224} = q_y^{224} - q_y^{004}. \quad (8)$$

Выражение (8) учитывает эффект пространственной разориентации эпитаксиальных слоёв относительно подложки GaAs. В случае равенства упругих деформаций, направленных вдоль главных кристаллографических осей, а также отсутствия недиагональных компонентов тензора упругой деформации (эти условия в данной работе принимались *a priori*) величины $[(a_{\perp} - a_s)/a_s]_{[001]}$ и $[(a_{\square} - a_s)/a_s]_{[110]}$ соответствуют полным (относительно подложки GaAs) деформациям ε_{33} и ε_{11} , являющимися диагональными компонентами соответствующего тензора. (При переходе от оси [110] – актуального кристаллографического направления для МНЕМТ – к оси [100] сформулированные выше условия обеспечивают равенство между экспериментальной величиной $[(a_{\square} - a_s)/a_s]_{[110]}$ и величиной ε_{11}). В данной работе каждый эпитаксиальный слой МНЕМТ рассматривался как единичный слой со свободной поверхностью (т.е. слой, в котором вертикальные напряжения отсутствуют), что позволяет использовать упругие свойства исследуемых эпитаксиальных слоёв и определить деформации вдоль главных кристаллографических осей e_{ii} непосредственно из рентгеновских данных. В этом случае параметр рассогласования единичного эпитаксиального слоя со свободной поверхностью ε_0^{sl} подчиняется следующему выражению:

$$\varepsilon_0^{sl} = \varepsilon_{33} - \frac{2C_{12}}{C_{11} + 2C_{12}}(\varepsilon_{33} - \varepsilon_{11}), \quad (9)$$

где C_{11} и C_{12} – коэффициенты упругой жесткости. Остаточные упругие деформации e_{ii} и параметр рассогласования ε_0^{sl} в кристаллах кубической сингонии связаны между собой соотношением [17]

$$e_{ii} = \varepsilon_{ii} - \varepsilon_0^{sl}, \quad (10)$$

которое соответствует графическому методу определения остаточной упругой деформации, представленному на рис. 1 и рис. 2.

Экспериментальные значения ε_{33} и ε_{11} , а также результаты расчёта величин ε_0^{sl} и

e_{11} представлены в таблице. В расчётах период решётки GaAs был принят в соответствии с [18] равным 0.565321 нм. Необходимые при расчётах значения коэффициентов упругой жёсткости тройных растворов $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ C_{11} и C_{12} были получены на основании закона Вегарда исходя из соответствующих данных для химических соединений InAs и AlAs [19]. Приведённое в таблице значение $\varepsilon_0^{\text{sl}}$ для слоя 4 было получено на основании интерполяции зависимости $\varepsilon_0^{\text{sl}}(X_{\text{In}})$, которая имела линейный характер. Данное обстоятельство позволило в свою очередь на основании выражений (9) и (10)

определить для слоя 4 значения ε_{11} и e_{11} . Из приведённых в таблице данных видно, что инверсная ступень (а также нижний барьерный слой) характеризуется значительно меньшей величиной остаточной упругой деформации по сравнению с другими слоями, что соответствует идеологии создания инверсной ступени в конструкции ММБ [20]. Эти два структурных элемента (инверсная ступень и нижний барьерный слой) никакого влияния на характер распределения остаточных упругих деформаций в нижних ступенях ММБ не оказывают и в дальнейшем рассматриваться не будут.

Таблица

Полные деформации, параметр рассогласования и латеральная остаточная упругая деформация сжатия в ступенях ММБ

Слой	1	2	3	4	5	6 (7)
$\varepsilon_{33} \times 10^{-3}$	8.898	15.788	22.024	27.327	37.614	25.955
$\varepsilon_{11} \times 10^{-3}$	6.601	11.440	17.490	24.317	26.031	26.031
$\varepsilon_0 \times 10^{-3}$	7.483	13.648	19.779	25.829	31.815	25.993
$e_{11} \times 10^{-3}$	-1.48	-2.21	-2.29	-1.51	-5.78	0.04

Пространственное распределение остаточной упругой деформации – деформационное поле – приведено на рис. 8. Видно, что распределение состоит из двух частей: «пьедестала», относящегося к нижним четырём ступеням ММБ, и деформационного «всплеска», характеризующего структурное состояние 5-й ступени, что справедливо для бездислокационного слоя. Таким образом, данные рентгеноструктурного анализа, на основе которых были проведены расчёты, соответствуют микроструктуре МНЕМТ, показанной на рис. 4а.

Рис. 8

Деформационное поле в пяти нижних ступенях ММБ

Расчёт толщины и величины упругой деформации бездислокационного слоя на основе феноменологического подхода

Физико-химические свойства растворов InAlAs и InGaAs (для которых были установлены феноменологические закономерности структурной релаксации) должны быть близки, так как близки свойства химических соединений GaAs и AlAs (эти соединения имеют одну и ту же кристаллическую решётку, практически равные периоды решёток и близкие значения коэффициентов упругой жёсткости), и следовательно, релаксационные процессы в однослойных эпитаксиальных гетероструктурах со слоями InAlAs и InGaAs должны характеризоваться одной и той же феноменологической константой, а именно $k = 0.83$ нм. В идеальном случае (то есть, когда структурная релаксация в нижних ступенях буфера происходит полностью) остаточная упругая деформация в бездислокационном слое должна определяться выражением (1). Такой подход был использован в [21] при создании модельного описания процесса структурной релаксации

в ступенчатом ММБ. В случае воздействия на систему эффекта деформационного упрочнения необходимо учитывать влияние «замороженного» деформационного поля, на возможность существования которого в многослойных тонкоплёночных системах указывалось в [22].

Экспериментальные результаты для 4-й и 5-й ступеней ММБ, представленные в таблице, можно обобщить, записав их в виде:

$$(e_{11}^{(5)} - e_{11}^{(4)})h_{дл} = 0.85 \text{ нм}, \quad (11)$$

что практически совпадает с выражением (1), если в нём толщину одиночного эпитаксиального слоя h заменить на толщину слоя $h_{дл}$, а также учесть упругое воздействие нижележащего 4-го слоя на бездислокационный слой. Из полученных результатов следует, что влияние «замороженного» деформационного поля на величину остаточной упругой деформации в бездислокационном слое ограничивается воздействием упругой деформации нижерасположенного слоя. Таким образом, истинная деформация сжатия бездислокационного слоя в случае полной структурной релаксации нижних ступеней ММБ $|e_{11}^{дл}| = 4.3 \cdot 10^{-3}$.

При конструировании ММБ для определения пространственного градиента параметра рассогласования естественно использовать закон Вегарда. Иллюстрацией линейной зависимости параметра рассогласования, рассчитанного на основании закона Вегарда, служит рис. 4б, на котором приведён концентрационный профиль In . Градиент параметра рассогласования для исследуемой гетероструктуры $\left| \frac{d\epsilon_0}{dz} \right| = 3.3 \cdot 10^{-5} \text{ нм}^{-1}$. Полагая в соответствии с [8] $S=0.83 \text{ нм}$ (такое предположение основывается на близости физико-химических свойств соединений композиции InGaAs и InAlAs , на что указывалось выше), получим величины $z_0 = 224 \text{ нм}$ и $|e_{11}^{дл}| = 3.7 \cdot 10^{-3}$. Обе эти величины несколько отличаются от соответствующих экспериментальных значений: $z_0^{\text{exp}} = 200 \text{ нм}$ и $(|e_{11}^{(5)}| - |e_{11}^{(4)}|)^{\text{exp}} = 4.3 \cdot 10^{-3}$, что позволяет сделать вывод о том, что бездислокационный слой в исследуемой МНЕМТ перенапряжён. Увеличение пространственного шага ММБ (толщины его ступеней) при некотором увеличении содержания In в каждой из ступеней позволит увеличить толщину бездислокаци-

онного слоя и уменьшить уровень напряжений в нём.

Заключение

В работе предложен графический метод для разработки дизайна метаморфного ступенчатого буфера, основанный на феноменологическом описании процесса структурной релаксации в однослойных гетероструктурах. Приведены математические выражения, позволяющие рассчитать толщину бездислокационного слоя и уровень сжимающих напряжений в нём. Варьируемым параметром расчётов является градиент параметра рассогласования, который может изменяться как путём изменения толщины ступеней, так и путём изменения концентрационного шага легирующего элемента. Результаты расчётов, выполненных на основе предложенного метода для метаморфного ступенчатого буфера конкретного дизайна, оказались близки к соответствующим экспериментальным величинам, полученным при изучении исследуемой гетероструктуры методом построения карт обратного пространства, просвечивающей электронной микроскопией и методом ВИМС.

Литература

1. Imaizumi M., Hirotsu M., Soga T. Study on effect of an intermediate buffer layer structure on the growth of GaAs layers on GaP substrates // Proceedings of IEEE 42nd Photovoltaic Specialist Conference. 2015. 5 p.
2. Kumar R., Bag A., Mukhopadhyay P., Das S., Biswas D. Comparison of different grading schemes in InGaAs metamorphic buffers on GaAs substrate: tilt dependence on cross-hatch irregularities // Applied Surface Science. 2015. V. 357. P. 922-930.
3. Kujofsa T., Ayers J.E. Equilibrium lattice relaxation and misfit dislocations in continuously- and step-graded $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (001) and $\text{GaAs-P}_{1-y}/\text{GaAs}$ (001) metamorphic buffer layers // International Journal of High Speed Electronics and Systems. 2015. V. 24. P. 152009.
4. F. Romanato, E. Napolitani, A. Camera, A.V. Drigo, L. Lazzarini, G. Salvati, C. Ferrari, A. Bosacchi, and S. Franchi. Strain relaxation in graded composition $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ buffer layers // J. Appl. Phys. V. 86, P. 4748-4755 (1999).

5. Галиев Г.Б., Климов Е.А., Имамов Р.М., Ганин Г.В., Пушкарев С.С., Мальцев П.П., Жигалина О.М., Орехов А.С., Васильев А.Л., Пресняков М.Ю., Трунькин И.Н. Применение высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии и просвечивающей электронной микроскопии для изучения строения многослойных транзисторных наногетероструктур // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2016. – № 5. – С. 32-47.
6. Andrews A.M., Speck J.S., Romanov A.E., Bobeth M., Pompe W. Modeling cross-hatch surface morphology in growing mismatched layers // J. Appl. Phys. 2002. V. 91, N. 4. P. 1933-1943.
7. Tersoff J. Dislocations in strain relief compositionally graded layers // Appl. Phys. Lett. 1993. V. 62, N 7. P. 693-695.
8. Dunstan D.J., Kidd P., Howard L.K., Dixon R.H. Plastic relaxation of InGaAs grown on GaAs // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 59, N 26. P. 3390-3392.
9. Dunstan D.J., Kidd P., Beanland R., Sacedon A., Calleja E., Gonzalez L., Gonzalez Y., Pacheco F.J. Predictability of plastic relaxation in metamorphic epitaxy // Materials science and technology. 1996. V. 12. P. 181- 186.
10. Matthews J.W., Blakeslee A.E. Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations // J. Cryst. Growth. 1974. V. 27. P. 118-125.
11. Dunstan D.J., Young S., Dixon R.H. Geometrical theory of critical thickness and relaxation in strained-layer growth // J. Appl. Phys. 1991. V. 70, N 6. P. 3038-3045.
12. Алёшин А.Н., Бугаев А.С., Ермакова М.А., Рубан О.А. Исследование МНЕМТ гетероструктуры с каналом In_{0.4}Ga_{0.6}As, выращенной методом МЛЭ на подложке GaAs, с помощью построения карт обратного пространства // Физика и техника полупроводников. – 2015. – Т. 49. – Вып. 8. – С. 1065-1070.
13. А.Н. Алёшин, А.С. Бугаев, М.А. Ермакова, О.А. Рубан. Структурная аттестация элементов МНЕМТ-гетероструктуры с квантовой ямой In_{0.4}Ga_{0.6}As, выращенной методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs, на основе карт обратного пространства // Кристаллография. – 2016. – Т. 61. – № 2. – С. 300-305.
14. Ayers J.E., Ghandhi S.K., Schowalter L.J. Crystallographic tilting of heteroepitaxial layers // J. Cryst. Growth. 1991. V. 113. P. 430-440.
15. Абросимова Г.Е. Эволюция структуры аморфных сплавов // Успехи физических наук. – 2011. – Т. 181. – № 12. – С. 1265-1281.
16. Chauveau J.-M., Androussi Y., Lefebvre A., Di Persio J., Cordier Y. Indium content measurements in metamorphic high electron mobility transistor structures by combination of X-ray reciprocal space mapping and transmission electron microscopy // J. Appl. Phys., 2003. V. 93. № 7. P. 4219 – 4225.
17. Khapachev Yu.P., Dyshenkov A.A., Kiselev D.S. The theory of X-ray diffraction analysis of elastic-strain states in epitaxial films // Phys. Stat. Sol. B. 1984. V. 126. P. 37-42.
18. Straumanis M.E., Kim C.D. Phase extent of gallium arsenide determined by the lattice constant and density method // Acta Cryst. 1965. V. 19. P. 256-259.
19. Tu K.N., Mayer J.W., Feldman L.C. Electronic thin film science. For electrical engineers and materials scientists, New York, Macmillan Publishing Company, 1992, 428 p.
20. Cordier Y., Ferre D. InAlAs buffer layers grown lattice mismatched on GaAs with inverse steps // J. Cryst. Growth. 1999. V. 201/202. P. 263-266.
21. Dunstan D.J. Mathematical model for strain relaxation in multilayer metamorphic epitaxial structures // Phil. Mag. A. 1996. V. 73, N 5. P. 1323-1332.
22. Gonzalez D., Araujo D., Aragon G., Garcia R. A work hardening based model of the strain relief in multilayer graded buffer structures // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71, N 21. P. 3099-3101.

References

1. Imaizumi M., Hirotsu M., Soga T. Study on effect of an intermediate buffer layer structure on the growth of GaAs layers on GaP substrates // Proceedings of IEEE 42nd Photovoltaic Specialist Conference. 2015. 5 p.
2. Kumar R., Bag A., Mukhopadhyay P., Das S., Biswas D. Comparison of different grading schemes in InGaAs metamorphic buffers on GaAs substrate: tilt dependence on cross-hatch irregularities // Applied Surface Science. 2015. V. 357. P. 922-930.
3. Kujofsa T., Ayers J.E. Equilibrium lattice relaxation and misfit dislocations in continuously- and step-graded In_xGa_{1-x}As /GaAs (001) and GaAs-P_{1-y}/GaAs (001) metamorphic buffer layers // International Journal of High Speed Electronics and Systems. 2015. V. 24. P. 152009.
4. F. Romanato, E. Napolitani, A. Carnera, A.V. Drigo, L. Lazzarini, G. Salvati, C. Ferrari, A. Bosacchi, and S. Franchi. Strain relaxation in graded composition In_xGa_{1-x}As/GaAs buffer layers // J. Appl. Phys. V. 86, P. 4748-4755 (1999).
5. Galiev G.B., Klimov E.A., Imamov P.M., Ganin G.V., Pushkarev S.S., Maltsev P.P., Zhigalina

- O.M., Orekhov A.S. Vasilyev A.L. Presnyakov M.Yu., Trunkin I.N. High-resolution X-ray diffractometry and transmission electron microscopy methods for studying the structure of multi-layer transistor nano-heterostructures. «Surface. X-ray, synchrotron and neutron research». 2016. No.5. pp.32-47.
6. Andrews A.M., Speck J.S., Romanov A.E., Bobeth M., Pompe W. Modeling cross-hatch surface morphology in growing mismatched layers // J. Appl. Phys. 2002. V. 91, N. 4. P. 1933-1943.
7. Tersoff J. Dislocations in strain relief compositionally graded layers // Appl. Phys. Lett. 1993. V. 62, N 7. P. 693-695.
8. Dunstan D.J., Kidd P., Howard L.K., Dixon R.H. Plastic relaxation of InGaAs grown on GaAs // Appl. Phys. Lett. 1991. V. 59, N 26. P. 3390-3392.
9. Dunstan D.J., Kidd P., Beanland R., Sacedon A., Calleja E., Gonzalez L., Gonzalez Y., Pacheco F.J. Predictability of plastic relaxation in metamorphic epitaxy // Materials science and technology. 1996. V. 12. P. 181- 186.
10. Matthews J.W., Blakeslee A.E. Defects in epitaxial multilayers. I. Misfit dislocations // J. Cryst. Growth. 1974. V. 27. P. 118-125.
11. Dunstan D.J., Young S., Dixon R.H. Geometrical theory of critical thickness and relaxation in strained-layer growth // J. Appl. Phys. 1991. V. 70, N 6. P. 3038-3045.
12. Aleshin A.N., Bugaev A.S., Ermakova M.A., Ruban O.A. Research of MBE-grown MHEMT $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ heterostructure on GaAs substrate, using reciprocal space mapping. «Semiconductor Physics and Engineering». 2015. T.49. Issue 8. pp.1065-1070.
13. A.N. Aleshin, A.S. Bugaev, M.A. Ermakova, O.A. Ruban. Structural analysis of MHEMT-heterostructure elements, with quantum well $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$, grown by molecular-beam epitaxy on GaAs substrate, based on reciprocal space mapping. «Crystallography». T.61. pp.300-305 (2016).
14. Ayers J.E., Ghandhi S.K., Schowalter L.J. Crystallographic tilting of heteroepitaxial layers // J. Cryst. Growth. 1991. V. 113. P. 430-440.
15. Abrosimova G.E. Evolution of amorphous alloys structure. «Successes of Physical Sciences». 2011. T.181. No.12. pp.1265-1281.
16. Chauveau J.-M., Androussi Y., Lefebvre A., Di Persio J., Cordier Y. Indium content measurements in metamorphic high electron mobility transistor structures by combination of X-ray reciprocal space mapping and transmission electron microscopy // J. Appl. Phys., 2003. V. 93. № 7. P. 4219 – 4225.
17. Khapachev Yu.P., Dyshenkov A.A., Kiselev D.S. The theory of X-ray diffraction analysis of elastic-strain states in epitaxial films // Phys. Stat. Sol. B. 1984. V. 126. P. 37-42.
18. Straumanis M.E., Kim C.D. Phase extent of gallium arsenide determined by the lattice constant and density method // Acta Cryst. 1965. V. 19. P. 256-259.
19. Tu K.N., Mayer J.W., Feldman L.C. Electronic thin film science. For electrical engineers and materials scientists, New York, Macmillan Publishing Company, 1992, 428 p.
20. Cordier Y., Ferre D. InAlAs buffer layers grown lattice mismatched on GaAs with inverse steps // J. Cryst. Growth. 1999. V. 201/202. P. 263-266.
21. Dunstan D.J. Mathematical model for strain relaxation in multilayer metamorphic epitaxial structures // Phil. Mag. A. 1996. V. 73, N 5. P. 1323-1332.
22. Gonzalez D., Araujo D., Aragon G., Garcia R. A work hardening based model of the strain relief in multilayer graded buffer structures // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 71, N 21. P. 3099-3101.