

УДК 539.23+539.3

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ ОДНОРОДНОЙ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ НА ПОДЛОЖКЕ ПРИ РАССОГЛАСОВАННЫХ ПАРАМЕТРАХ ИХ РЕШЕТОК

Д. ф.-м. н. Р. М. Пелешчак, к. ф.-м. н. Н. В. Дорошенко, Н. Я. Кулык, Н. И. Жук

Дрогобычский государственный педагогический университет имени Ивана Франко
Украина, г. Дрогобыч
peleshchak@rambler.ru

Предложена усовершенствованная модель формирования в процессе молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) структурно-однородных нанозэпитаксиальных пленок с параметрами решеток, рассогласованных с кристаллической решеткой подложки. Повышение степени структурной однородности наращиваемого монослоя достигается за счет подавления напряженного состояния этого слоя.

Ключевые слова: эпитаксиальный слой, напряженная гетерограница, электрон-деформационный диполь, парциальное давление атомов, электрическое поле.

До сих пор остается актуальной технологическая задача получения структурно-однородных эпитаксиальных наноматериалов на подложках с несогласованными параметрами решеток. Известно [1], что кроме обычных технологических параметров (температура поверхности, скорость осаждения материала), обеспечивающих получение высококачественных слоев с заданными свойствами, необходимо принимать во внимание как тип химической связи, так и рассогласование параметров решетки на гетерограницах Al(Sb-In)As, Sb(Al-As) In, Ga(Sb-In)As, Sb(Ga-As)In. При переходе через гетерограницу одновременно изменяются сорта атомов как в катионной, так и в анионной подрешетках. При этом они располагаются на гетерогранице двумя возможными способами: “InSb-подобная” гетерограница формируется, когда слой InAs заканчивается атомами In, в то время как слой Al(Ga)Sb начинается с атомов Sb. В другом случае атомы As из слоя InAs и атомы Al или Ga из слоя Al(Ga)Sb формируют “Al(Ga)As-подобную” гетерограницу, на которой образуются связи Al – As или Ga – As [1]. Кроме того, одной из причин флуктуации толщины наращиваемого слоя являются неоднородные деформации сжатия или растяжения [2] в контактирующих слоях, которые возникают в результате несогласования параметров решеток на гетерограницах. В частности, в [1] предполагается, что упругие механические напряжения, которые возникают при формировании монослоя на гетерограницах Al(Sb-In)As, Sb(Al-As) In, Ga(Sb-In)As, Sb(Ga-As)In методом МПЭ, обуславливают сильное увеличение парциального давления элементов 5 группы (Sb или As) над этим монослоем. В результате, равновесное давление, которое растет с увеличением температуры, может превосходит давление молекул элементов 5 группы во внешнем потоке ($10^{-5} - 10^{-6}$ Торр). Данный эффект приводит к обеднению поверхности формируемого на гетероструктурах монослоя по атомам элементов 5 группы и, как следствие, к невозможности формирования совершенной гетерограницы требуемого типа.

Целью данной работы является разработка модели формирования структурно-однородного нанозэпитаксиального слоя на подложке в случае несогласования параметров решетки материалов. Для этого предлагается усовершенствованная технология молекулярно-пучковой эпитаксии (учитывается воздействие внешнего электрического поля на формируемую в процессе МПЭ гетероструктуру). Сущностью предлагаемой модели является способ подавления напряженного состояния на гетерогранице «нанозэпитаксиальный слой – подложка» за счет воздействия в процессе эпитаксии внешнего электрического поля, перпендикулярного к формируемой гетероструктуре. Взаимодействие внешнего электрического поля с напряженной гетерограницей происходит за счет наличия электрон-деформационного диполя $\vec{P}_{el.-def.}$ [3] на напряженной гетерогранице. Такое взаимодействие изменяет свободную энергию Гиббса ΔG_{strain} с соответствующим изменением энтальпии $\Delta H_{strain}(\vec{E})$, что в итоге приводит к изменению парциального давления элемента 5 группы (Sb или As) над этим монослоем:

$$\Delta H(\vec{E}) = 2 \sum_{\beta=1,2} G_{\beta} \frac{C_{11}^{\beta} + C_{22}^{\beta} + C_{12}^{\beta}}{C_{11}^{\beta} + C_{22}^{\beta} - C_{12}^{\beta}} V_{m\beta} \left(\frac{a_{II}(\vec{E}) - a_{0\beta}}{a_{0\beta}} \right) + \frac{1}{v} \int \vec{E} d \vec{P}_{el-def.}(x), \quad (1)$$

где $V_{m\beta}$ – молярный объем β -слоя; $G_{\beta} = \frac{1}{2} C_{44}^{\beta}$ для поверхности (100); $a_{0\beta}$ – постоянная решетки ненапряженного слоя; $a_{II}(\vec{E})$ – параметр решетки в плоскости гетерограницы при наложении электрического поля \vec{E} ; C_{ij}^{β} – упругие постоянные; $v = \frac{\mu_1 \mu_2}{(\mu_1 + \mu_2)(\rho_1 V_1 + \rho_2 V_2)}$ – количество молей на гетерогранице (μ_{β} , ρ_{β} – молярная масса и плотность β -й компоненты гетерограницы соответственно); $d\vec{P}_{el-def.} = -eSx\Delta n(x) dx \vec{i}$ – элементарный электрон-деформационный диполь; S – площадь контактирующих решеток; $\Delta n(x)$ – изменение электронной плотности в окрестности границы раздела.

Первое слагаемое в (1) описывает изменение энтальпии, обусловленное составляющей как механического напряжения, которое возникает вследствие несогласования параметров контактирующих решеток, так и соответствующей деформации, которая возникает при взаимодействии электрон-деформационного диполя с внешним электрическим полем \vec{E} . Второе слагаемое в (1) – это потенциальная энергия электрон-деформационного диполя.

Таким образом, прикладывая электрическое поле к формируемому эпитаксиальному монослою, мы уменьшаем напряженное состояние гетерограницы и, соответственно, энтальпию. Изменение последней обуславливает изменение равновесного парциального давления молекул элемента 5 группы над ликвидусом $A - AB$ (где $A - \text{In, Ga, Al}$; и $B - \text{As}$ или Sb), что в конечном счете приводит к повышению степени структурной однородности наращиваемого монослоя.

Результаты расчета согласуются с экспериментальными данными [4, 5] и позволяют сделать вывод, что с ростом приложенного в процессе МПЭ к наногетеросистеме InAs/GaAs электрического поля, вектор напряженности которого направлен от InAs к GaAs, контактирующий с подложкой GaAs эпитаксиальный слой InAs претерпевает воздействие дополнительной всесторонней деформации сжатия, а в случае противоположного направления поля – деформации растяжения. При этом повышается степень структурной однородности наращиваемого эпитаксиального слоя InAs.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Нехлюдов П. В., Иванов С. В., Мельцер Б. Я., Копьев П. С. Особенности формирования гетерограниц (Al, Ga) Sb/InAs при молекулярно-пучковой эпитаксии // Физика и технология полупроводников.— 1997.— Т. 31, № 10.— С. 1242—1245.
2. Chris G., van de Welle. Band Lineups and Deformation Potential in the Model-Solid Theory // Phys.Rev.B. — 1983.— Vol. 39, № 3.— P. 1871—1883.
3. Пелешак Р. М., Лукиянец Б. А., Зегря Г. Г. Влияние электрического поля на напряженное состояние гетероструктуры // Физика та техника полупроводников.— 2000.— Т. 34, № 10.— С. 1223—1227.
4. Палатник А. С. Эпитаксиальные пленки.— Москва: Наука, 1971.
5. Ksenofontov D. A., Dem'yanets L. N., Ivanov-Schitz A. K. Electrical current-induced growth of γ -Li3PO4-type single crystals from flux // Abs. 11th European Conf. On Solid State Chemistry (ECSSC XI).— Caen, France.— 2007.— P. 242.

R. M. Peleshchak, N. V. Doroshenko, N. Ya. Kulyk, N. I. Zhuk

Modeling of a homogeneous epilayer on substrate with lattice disregistry in the electric field.

This study presents an improved model of formation of structurally homogeneous nanoepitaxial films in the process of molecular beam epitaxy (MBE), the film and the substrate having mismatched lattice parameters. Increasing the degree of structural homogeneity of the overgrown monolayer is achieved by suppressing the stress state of the layer.

Keywords: *epilayer, heterointerface stress, electron dipole deformation, partial pressure of the atoms, the electric field.*