УДК 539 : 537.531

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ

Ю. П. Хапачев, Ф. Н. Чуховский

Показано, что по данным двухкристальной рентгеновской дифрактометрии из измерений компонент тензора кривизны и компонент тензора деформации в плоскости гетерограницы и в направлении, перпендикулярном гетерогранице, можно извлечь информацию о скачках пластической деформации в слоях гетероструктур. На основе этого для двухслойных гетероструктур ряда соединений $A^{III}B^{V}$ определены плотность дислокаций и толщина области их сосредоточения в подложке.

Структурное совершенство гетероэпитаксиальных систем зависит как от условий выращивания, так и от их структурных параметров, и в первую очередь от степени пластической деформации и величины несоответствия параметров решеток (НПР) слоев и подложки [1].

Определение пластической деформации $\varepsilon_{ij}^{\text{пл}}$ и НПР β_{ij} необходимо, в частности, для выяснения механизмов, вызывающих отклонение от условий псевдоморфного роста [2]. Измерение упругой деформации важно в связи с предсказанной в [3] возможностью существования метастабильных состояний типа сверхрешеток в гетероструктурах тройных твердых растворов, имеющих тенденцию к распаду.

Рентгенодифрактометрические (РД) методы позволяют измерять для многослойных гетероструктур общую кривизну системы $\varkappa_{ij}$ [4] и компоненты тензора деформации ε_{ij} [5] для каждого эпитаксиального слоя. Смысл тензора ε_{ij} зависит от причин, вызывающих деформацию кристалла. Если деформация вызвана внешними силами или дислокациями, то РД методом может быть измерена только упругая деформация $\varepsilon_{ij}=\varepsilon_{ij}^{\text{упр}}$ [6]. В том случае, когда деформация возникает только из-за НПР β_{ij}, то РД методом измеряется полная деформация $\varepsilon_{ij}=\varepsilon_{ij}^{\text{пол}}$ [7], причем $\varepsilon_{ij}^{\text{пол}}=\beta_{ij}+\varepsilon_{ij}^{\text{упр}}(\beta)$, где $\varepsilon_{ij}^{\text{упр}}(\beta)$ — упругая деформация, возникающая при когерентном сопряжении слоев и подложки в условиях псевдоморфного роста. В общем случае при наличии в гетероструктуре дислокаций и НПР РД методом измеряется сумма указанных деформаций, т. е. тензор равен

$$\varepsilon_{ij}=\varepsilon_{ij}^{\text{упр}}+\beta_{ij}+\varepsilon_{ij}^{\text{упр}}(\beta). \tag{1}$$

Поскольку в данном случае полная деформация системы равна $\varepsilon_{ij}^{\text{пол}}=\varepsilon_{ij}+\varepsilon_{ij}^{\text{пл}}$, то ε_{ij} может быть представлена в виде

$$\varepsilon_{ij}=\varepsilon_{ij}^{\text{пол}}-\varepsilon_{ij}^{\text{пл}}. \tag{2}$$

Цель данной работы — показать, что по данным двухкристальной рентгеновской дифрактометрии в многослойных гетероструктурах могут быть определены скачки тензора пластической деформации на границах между слоями. Специальное внимание уделено практически важному случаю — двухслойной гетероструктуре, толщина эпитаксиальной пленки в которой меньше соответствующего критического значения [1, 2], при котором дислокации несоответствия (ДН) в пленке не образуются. В таких гетероструктурах пленки являются бездислокационными, а ДН сосредоточены в подложке [8].

1. Общие соотношения для определения НПР и скачков пластической деформации в многослойных гетероструктурах

Наличие в гетероструктуре дислокаций описывается тензором плотности дислокаций α_{ij}, связанным с тензором пластической дисторсии $u_{kl}^{\text{пл}}$ соотношением [6]

$$\alpha_{ij} = e_{ijk} \frac{\partial}{\partial x_j} u_{kl}^{\text{пл}}, \tag{3}$$

где e_{ijk} — единичный антисимметричный тензор третьего ранга.

Для дислокаций, равномерно распределенных в некоторой области, можно ввести скалярную плотность дислокаций ρ_i, которая связана с вектором Бюргерса $\mathbf{b}$ и средним значением пластической деформации следующим образом [2, 5]:

$$\overline{\varepsilon_{ii}^{\text{пл}}} = \rho_i |\mathbf{b}|. \tag{4}$$

Здесь и в дальнейшем черта сверху означает усреднение по толщине области h, которое понимается в обычном смысле, т. е.

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{h} \int_0^h \varepsilon(z)\, dz.$$

Несоответствие параметров решетки эпитаксиальных слоев и подложки описывается тензором НПР [5, 7]

$$\beta_{ij}(z) = \beta f(z) \delta_{ij}, \tag{5}$$

где $\beta = \Delta a/a$ — амплитуда НПР определяет относительное изменение параметров решеток слоя и подложки в свободном состоянии; δ_{ij}— символ Кронекера; $f(z)$ — закон изменения НПР (модель гетероструктуры), причем, $0 \leqslant f(z) \leqslant 1$ в пленке и $f(z) = 0$ в подложке.

Решение одномерной задачи упруго- и пластическидеформированного состояния гетероструктур кубической системы для ориентаций эпитаксиальных пленок по (001), (110) и (111) имеет вид [5]

$$\beta f(z) = q_1 (\varepsilon_{xx}^{\text{пол}} - \varepsilon_{xx}^{\text{пл}}) + q_2 (\varepsilon_{yy}^{\text{пол}} - \varepsilon_{yy}^{\text{пл}}) + q_3 (\varepsilon_{zz}^{\text{пол}} - \varepsilon_{zz}^{\text{пл}}), \tag{6}$$

$$\varepsilon_{ii}^{\text{пол}} = \beta D(z) + D_{ii}^{\text{пл}}(z), \quad i = x, y, \tag{7}$$

$$\varkappa_{ij} = \frac{12}{L^2} [\beta \langle (z - L/2) f(z) \rangle + \langle (z - L/2) \varepsilon_{ii}^{\text{пл}}(z) \rangle] (1 - \delta_{ij}), \tag{8}$$

где

$$D_{ii}^{\text{пл}}(z) = \langle \varepsilon_{ii}^{\text{пл}}(z) \rangle + \frac{12}{L^2} (z - L/2) \langle (z - L/2) \varepsilon_{ii}^{\text{пл}}(z) \rangle, \tag{9}$$

знак $\langle \ldots \rangle$ означает усреднение по всей толщине гетероструктуры L. Выражение для $D(z)$ получается из (9) заменой $\varepsilon_{ii}^{\text{пл}}(z)$ на $f(z)$. Коэффициенты q_i, выраженные через компоненты тензора упругой жесткости, для указанных выше ориентаций пленок приведены в [7].

Для гетероструктур с резко разграниченными слоями постоянного состава угловое расстояние РД максимумов слоев от РД максимума подложки зависит от средней деформации данного слоя относительно недеформированного состояния подложки [5]. Поэтому, усредняя (6) и (7) и вычитая, согласно (2), из (7) $\varepsilon_{ii}^{\text{пл}}$, получим

$$\beta \overline{f(z)} = q_1 \overline{\varepsilon_{xx}} + q_2 \overline{\varepsilon_{yy}} + q_3 \overline{\varepsilon_{zz}}, \tag{10}$$

$$\overline{\varepsilon_{ii}} = \beta \langle f(z) \rangle + \Delta \varepsilon_{ii}^{\text{пл}} - \frac{L-h}{2} \varkappa_{ij}, \tag{11}$$

где

$$\Delta\varepsilon_{ii}^{пл}=\langle\varepsilon_{ii}^{пл}(z)\rangle-\overline{\varepsilon_{ii}^{пл}}(z) \qquad (12)$$

определяет скачок между средним значением $\varepsilon_{ii}^{пл}$ в данном слое и средним значением $\varepsilon_{ii}^{пл}$ в остальной части гетероструктуры. В РД эксперименте фиксируется именно величина этого скачка, которая, согласно (4), может быть выражена через скалярную плотность ДН на гетерогранице.

Таким образом, если закон изменения НПР $f(z)$ известен, то система пяти уравнений (8), (10) и (11) позволяет по экспериментально измеренным значениям компонент тензора кривизны $\varkappa_{xy}$, $\varkappa_{yx}$ и компонентам тензора деформации $\overline{\varepsilon_{zz}}$, $\overline{\varepsilon_{xx}}$ и $\overline{\varepsilon_{yy}}$ найти пять неизвестных величин: амплитуду НПР β, $\langle(z-L/2)\varepsilon_{ii}^{пл}\rangle$ и $\Delta\varepsilon_{ii}^{пл}$, $i=x$, y.

Выражение (10) может быть проверено экспериментально, например, для гетероструктур со значительной плотностью дислокаций в пленке. В [9] были исследованы двухслойные гетероструктуры ряда бинарных соединений $A^{III}B^{V}$ и $A^{II}B^{VI}$ с плотностью дислокаций в пленке $\rho\simeq10^5\div10^6$ см$^{-1}$. Расчет амплитуды НПР по формуле (10) и непосредственно по значениям параметров решеток исходных соединений, составляющих гетероструктуры, дал в [9] хорошее соответствие.

2. Определение плотности дислокаций и толщины области их сосредоточения в двухслойной гетероструктуре

Рассмотрим двухслойную гетероструктуру — систему пленка—подложка со ступенчатым законом изменения НПР, т. е. $f(z)=\Theta(h-z)$, где $\Theta(z)$ — функция Хевисайда, h — толщина пленки. При $\varepsilon_{xx}^{пл}=\varepsilon_{yy}^{пл}$ из системы уравнений (8) и (10)—(12) получим

$$\beta=(1-q_3)\overline{\varepsilon_{xx}}+q_3\overline{\varepsilon_{zz}}, \qquad (13)$$

$$\overline{\varepsilon_{xx}}=\frac{h}{L}\beta-\frac{L-h}{2}\varkappa_{xy}+\Delta\varepsilon_{xx}^{пл}, \qquad (14)$$

$$\varkappa_{xy}=-\frac{6h}{L^2}\left[\frac{L-h}{L}\beta-\frac{2}{h}\langle(z-L/2)\,\varepsilon_{xx}^{пл}(z)\rangle\right]. \qquad (15)$$

Выражение (13) в отличие от аналогичного выражения работы [10] учитывает анизотропию упругих постоянных. Для ультратонких пленок в пределе при $h/L\to0$ выражения (14) и (15) переходят в соответствующие формулы работы [10], если отношение

$$\gamma=\frac{2}{h}\langle(z-L/2)\,\varepsilon_{xx}^{пл}\rangle/\Delta\varepsilon_{xx}^{пл} \qquad (16)$$

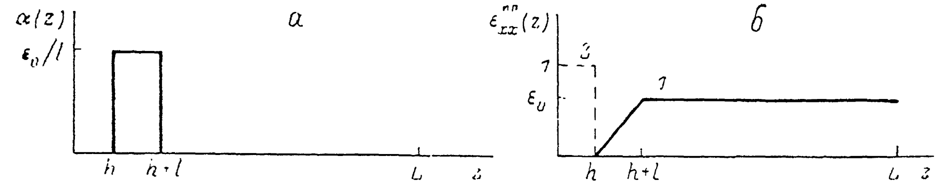
равно единице; при этом, согласно (4), следует положить $\Delta\varepsilon_{xx}^{пл}=\rho\,|\mathbf{b}|$. Это осуществляется, в частности, при двух различных законах изменения пластической деформации

$$\varepsilon_{xx}^{пл}=\varepsilon_0(1-\Theta(z-h)),\quad \varepsilon_{xx}^{пл}=-\varepsilon_0\Theta(z-h),$$

где ε_0 — амплитуда пластической деформации. Оба закона изменения отвечают одному и тому же закону изменения плотности дислокаций $\alpha(z)=\varepsilon_0\delta(z-h)$. Подобная неоднозначность $\varepsilon_{xx}^{пл}$ связана с тем, что тензор пластической дисторсии (3), а значит, и тензор $\varepsilon_{xx}^{пл}$ определены для одного и того же значения $\alpha(z)$ с точностью до произвольной постоянной. Поэтому физический смысл имеет тензор α_{ij} и соответственно скачок тензора пластической деформации, т. е. $\Delta\varepsilon_{ii}^{пл}$, но не сам тензор $\varepsilon_{ij}^{пл}$. Заметим, что, поскольку в формулу для кривизны гетероструктуры (8) $\varepsilon_{ii}^{пл}$ входит как среднее от момента, т. е. $\langle(z-L/2)\,\varepsilon_{ii}^{пл}\rangle$, а $\langle(z-L/2)\rangle=0$, то $\varkappa_{ij}$ определена однозначно. Также однозначно определены и компоненты тензора ε_{ii}, поскольку зависят от $\varkappa_{ij}$ и величины скачка $\Delta\varepsilon_{ii}^{пл}$.

В [10] исследованы гетероструктуры, в которых ДН были сосредоточены преимущественно на гетерогранице. В общем случае при расчете НПР и пластической деформации необходимо использовать соотношения (13)—(15), справедливые для любого одномерного закона распределения дислокаций как в пленке, так и в подложке. Если $\gamma \neq 1$, то это свидетельствует о размытом распределении дислокаций.

Рассмотрим важный для практического приложения пример — гетероструктуру с бездислокационной пленкой. Тогда $\varepsilon_{xx}^{\text{пл}} = 0$, а дислокации будем считать равномерно распределенными в подложке в области толщиной l (см. рисунок, *а*). Для такой гетероструктуры примем простейшую модель изменения пластической деформации (см. рисунок, *б*).



Модель двухслойной гетероструктуры со ступенчатым законом изменения НПР и равномерным распределением дислокаций в подложке в области толщиной l.

а — плотность дислокаций $\alpha(z)$; *б* — пластическая деформация $\varepsilon_{xx}^{\text{пл}}(z)$ (*1*), закон изменения НПР $f(z)$ (*2*).

$$\varepsilon_{xx}^{\text{пл}}(z) = \varepsilon_0 \left[\frac{z-h}{l} \Theta(z-h)\,\Theta(h+l-z) + \Theta(z-h-l) \right]. \tag{17}$$

Подставляя (17) в (16), находим толщину слоя l и амплитуду пластической деформации ε_0

$$l = p\left[1 - \sqrt{1 + q/p^2}\right], \quad \varepsilon_0 = 2L\Delta\varepsilon_{xx}^{\text{пл}}/(2(L-h) - l), \tag{18}$$

где введены следующие обозначения:

$$p = {}^3/_4 h\,(L/h + \gamma - 2), \quad q = 3h\,(L-h)(1-\gamma). \tag{19}$$

Деформации, кривизна и рассчитанные по ним НПР, плотность и толщина области сосредоточения дислокаций в гетероструктурах соединений $A^{III}B^{V}$

	Толщина, мкм		Деформация, 10^{-3}		Кривизна, 10^{-7} мкм$^{-1}$ $\varkappa_{xy}$
	h	L	$\overline{\varepsilon_{zz}}$	$\overline{\varepsilon_{xx}}$	
$In_{1-x}Ga_xP/(001)InP$ [10]	2.2	233.2	3.60	1.80	—2.09
	4.1	383.1	4.00	1.30	—0.48
$In_{1-x}Ga_xAs_{1-y}P_y/(001)GaAs$ [11]	4.0	304.0	—1.72	—0.17	1.23
$Al_xGa_{1-x}As/(001)GaAs$ [12]	1.3	317.2	2.30	0.02	—0.91
	1.3	314.6	2.27	0.02	—0.89

Продолжение

	Пластическая деформация, 10^{-3}		НПР 10^{-3} β	Плотность дислокаций 10^2 см$^{-1}$ ρ	Толщина области сосредоточения дислокаций, мкм l
	$2/h \langle (z-L/2)\,\varepsilon_{xx}^{\text{пл}} \rangle$	$\Delta\varepsilon_{xx}^{\text{пл}}$			
$In_{1-x}Ga_xP/(001)InP$ [10]	1.76	1.75	2.65	$8.8 \cdot 10^2$	0.03
	2.25	1.26	2.57	$6.3 \cdot 10^2$	7.09
$In_{1-x}Ga_xAs_{1-y}P_y/(001)GaAs$ [11]	—0.426	—0.139	—0.90	69	16.64
$Al_xGa_{1-x}As/(001)GaAs$ [12]	0.038	0.001	1.22	0.5	102.86
	0.066	0.001	1.20	0.5	200.41

В качестве примера использования полученных выше формул рассмотрим гетероструктуры соединений $A^{III}B^{V}$, экспериментально исследованные в [10-12]. В таблице приведены результаты РД измерений кривизны $\varkappa_{xy}$ и компонент тензора деформации $\overline{\varepsilon_{zz}}$ и $\overline{\varepsilon_{xx}}$. По этим данным рассчитаны амплитуда НПР β, $(2/h)\ \langle(z-L/2)\ \varepsilon_{xx}^{\text{пл}}\rangle$ и $\Delta\varepsilon_{xx}^{\text{пл}}$, а также плотность дислокаций ρ и толщина области их сосредоточения l. Видно, что с увеличением параметра γ толщина области l возрастает.

Таким образом, из данных двухкристальной рентгеновской дифрактометрии можно определить не только плотность дислокаций, но и толщину области их сосредоточения.

В заключение отметим, что использование трехкристальной рентгеновской дифрактометрии в дифференциальном режиме существенно расширяет возможности РД метода измерения деформаций, поскольку позволяет получить двухкоординатную развертку кривой дифракционного отражения в направлениях, перпендикулярном и параллельном гетерогранице. На основе этого в [13] был предложен новый способ измерения деформаций, который позволяет не только выделить скачки $\Delta\varepsilon_{ii}^{\text{пл}}$ в пленках однородного и монотонно изменяющегося составов, но и определить локализацию по толщине пленки дефектов структуры, вызывающих эти скачки $\Delta\varepsilon_{ii}^{\text{пл}}$.

Авторы благодарны В. Л. Инденбому, В. М. Каганеру и Р. Н. Кютту за полезные обсуждения и ценные замечания.

Список литературы

[1] Мильвидский М. Г., Освенский В. Б. // Кристаллография. 1977. Т. 22. № 2. С. 431—447.
[2] Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия. Киев, 1983. 304 с.
[3] Елюхин В. А., Сорокина Л. П. // ДАН СССР. 1986. Т. 287. № 6. С. 1384—1386.
[4] Cohen B. G., Focht M. W. // Sol. St. Electronics. 1970. V. 13. N 1. P. 105—112.
[5] Хапачев Ю. П., Чуховский Ф. Н. // Кристаллография. 1989. Т. 34. № 4. С. 931—943.
[6] Инденбом В. Л. // Физика кристаллов с дефектами (Тбилиси). 1966. Т. 1. С. 5—106.
[7] Чуховский Ф. Н., Хапачев Ю. П. // ДАН СССР. 1987. Т. 292. № 2. С. 354—356.
[8] Прохоров И. А., Захаров Б. Г., Кунакина О. Н., Акимов Г. Г. // Поверхность. 1983. № 5. С. 23—30.
[9] Кузнецов Г. Ф. Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в кристаллах с искажениями. Ереван, 1988. С. 56.
[10] Chu S. N. G., Macrander A. T., Strege K. E., Johnston W. D. // J. Appl. Phys. 1985. V. 57. N 2. P. 249—257.
[11] Хапачев Ю. П., Дышеков А. А., Киселев Д. С. Субструктурное упрочнение металлов и дифракционные методы исследования. Киев, 1985. С. 221—222.
[12] Дышеков А. А., Хапачев Ю. П. // II совещ. по всесоюзн. межвузовской программе «Рентген». Ереван, 1987. С. 198.
[13] Кютт Р. Н., Рувимов С. С. // IV Всес. совещ. по когерентному взаимодействию излучения с веществом. М., 1988. С. 27—28.

Институт кристаллографии АН СССР
Москва
Кабардино-Балкарский
государственный университет
Нальчик

Поступило в Редакцию
9 марта 1989 г.