

что при низких температурах резонансный уровень расположен выше уровня Ферми на расстоянии  $\sim kT$ .

Движение резонансного уровня в глубь зоны в образцах с  $N_{\text{Tl}} \leq 9.8 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  может быть связано не только с изменением концентрации примесей, но и с изменением соотношения концентрации таллия и вакансий свинца. Вакансии свинца при этом могут играть роль, аналогичную примеси натрия в PbTe с  $N_{\text{Tl}} \sim 2 \text{ ат}\%$  [3]. Из вышесказанного следует, что в теллуриде свинца с относительно невысоким уровнем легирования положение резонансного уровня может зависеть от способа приготовления кристаллов.

### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Кайданов В. П., Равич Ю. И. // УФН. 1985. Т. 145. В. 1. С. 51—86.
- [2] Кайданов В. И., Немов С. А., Равич Ю. И., Зайцев А. М. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 9. С. 1613—1617.
- [3] Машкова Т. Р., Немов С. А. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 10. С. 1864—1867.
- [4] Кайданов В. И., Немов С. А. // ФТП. 1981. Т. 15. В. 3. С. 542—550.
- [5] Равич Ю. И., Ефимова Б. А., Смирнов И. А. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS. М., 1968. 384 с.
- [6] Грузинов Б. Ф., Драбкин И. А., Елисева Ю. Я., Лев Е. Я., Нельсон И. В. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 7. С. 1308—1313.
- [7] Сизов Ф. Ф., Тетеркин В. В., Пляцко С. В. // ФТП. 1984. Т. 18. В. 9. С. 1608—1611.

Институт полупроводников АН УССР  
Киев

Получено 3.03.1989  
Принято к печати 10.07.1989

ФТП, том 23, вып. 11, 1989

## НАПРЯЖЕНИЯ НЕСООТВЕТСТВИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ $\text{Pb}_{0.93}\text{Sn}_{0.07}\text{Se}-\text{PbS}_{0.05}\text{Se}_{0.95}$

Гайдуков Ю. П., Гаськов А. М., Малинский И. М.,  
Никифоров В. Н., Васильева О. Н.

Одним из основных механизмов деградации полупроводниковых приборов, используемых в оптоэлектронике и инфракрасной спектроскопии, является генерация дислокаций в эпитаксиальных гетероструктурах, обусловленная напряжениями несоответствия в переходных слоях. Напряжения возникают как из-за рассогласования постоянных кристаллических решеток компонентов структуры, так и из-за различия их коэффициентов теплового расширения. Последнее происходит вследствие того, что синтез гетероструктур осуществляется обычно при температурах, существенно превышающих их рабочую температуру. Задачей настоящего исследования являлась оценка напряжений несоответствия в перспективной гетероструктуре  $\text{Pb}_{0.93}\text{Sn}_{0.07}\text{Se}-\text{PbS}_{0.05}\text{Se}_{0.95}$ , согласованной по параметру кристаллической решетки.

Напряжения несоответствия  $\sigma$  в гетероструктуре определяются профилем распределения элементов в переходном слое (в данном случае Pb, Sn, Se и S) и связанным с ним градиентом постоянной решетки  $a$ , а также упругими постоянными компонентов структуры  $C_{ij}$ .

В модели «жесткого сцепления» [1] напряжения рассчитываются по формуле

$$\sigma(\Delta a) = \frac{E}{1-\nu} f, \quad (1)$$

где  $E$  — модуль Юнга,  $\nu$  — коэффициент Пуассона. Функция  $f = \Delta a/a$  описывает изменение постоянной решетки в переходном слое, возникающее из-за взаимодиффузии элементов. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона характеризуют

упругие свойства изотропных тел, в случае кристаллов кубической симметрии эти величины можно ввести как

$$E = \frac{G(3\lambda + 2G)}{G + \lambda}, \quad \nu = \frac{\lambda}{2(G + \lambda)}, \quad (2)$$

где  $G \approx C_{44}$  и  $\lambda \approx C_{11} - 2C_{44}$  — параметры Ламэ в приближении изотропной среды.

Синтез эпитаксиальной гетероструктуры  $\text{Pb}_{0.93}\text{Sn}_{0.07}\text{Se} - \text{PbS}_{0.05}\text{Se}_{0.95}$  проводился из пара методом вакуумной конденсации в квазизамкнутом объеме (горячая стенка). В качестве подложки использовалась монокристаллическая

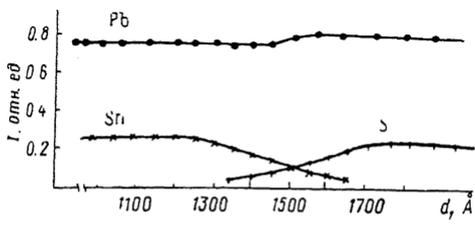


Рис. 1. Распределение компонентов по толщине гетероструктуры  $\text{PbSnSe} - \text{PbSSe}$ , полученные из данных оже-спектроскопии.

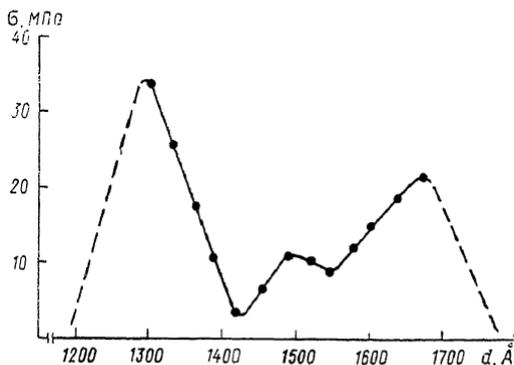


Рис. 2. Распределение напряжений несоответствия  $\varepsilon(\Delta a)$  по толщине переходного слоя в гетероструктуре  $\text{PbSnSe} - \text{PbSSe}$ .

пластина  $\text{PbS}_{0.93}\text{Se}_{0.07}$  толщиной  $\sim 1$  мм, выращенная из пара по методу пар-жидкость-кристалл. Нормаль к пластине совпадала с кристаллографическим направлением  $[100]$ . Шпихтой для напыления эпитаксиального слоя толщиной  $0.02 - 0.05$  мкм служили монокристаллы  $\text{Pb}_{0.93}\text{Sn}_{0.07}\text{Se}$ . Вакуум в процессе напыления составлял  $10^{-5}$  Па, температура конденсации  $543 - 593$  К, время синтеза  $10 - 30$  мин.

Анализ состава гетероструктур по толщине переходного слоя проводился методом оже-электронной спектроскопии с распылением поверхности структуры пучком аргона. Распределение Pb, Sn и S по толщине переходного слоя показано на рис. 1. Постоянная кристаллической решетки  $a$  рассчитывалась в соответствии с законом Вегарда по формуле

$$a(d) = (1-x)z a_{\text{PbS}} + (1-x)(1-z) a_{\text{PbSe}} + x(1-z) a_{\text{SnSe}} + xz a_{\text{SnS}}, \quad (3)$$

где  $x$  соответствует формуле  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ ,  $z$  — формуле  $\text{PbS}_z\text{Se}_{1-z}$ , а постоянные кубических решеток бинарных соединений при  $T = 300$  К:  $a_{\text{PbSe}} = 6.126 \text{ \AA}$ ,  $a_{\text{PbS}} = 5.936 \text{ \AA}$ ,  $a_{\text{SnS}} = 5.788 \text{ \AA}$ ,  $a_{\text{SnSe}} = 6.002 \text{ \AA}$ .

Упругие модули  $C_{11}$  и  $C_{44}$   $\text{Pb}_{0.93}\text{Sn}_{0.07}\text{Se}$  и  $\text{PbS}_{0.05}\text{Se}_{0.95}$

T, К	$\text{Pb}_{0.93}\text{Sn}_{0.07}\text{Se}$		$\text{PbS}_{0.05}\text{Se}_{0.95}$	
	$C_{11}$ , ГПа	$C_{44}$ , ГПа	$C_{11}$ , ГПа	$C_{44}$ , ГПа
10	155.7	18.70	144.2	14.60
20	155.4	18.68	143.9	14.30
30	155.2	18.66	143.8	14.05
40	154.3	18.58	142.7	13.55
50	153.8	18.52	142.3	13.25
60	152.8	18.43	141.5	12.90
70	151.5	18.35	140.9	12.45
80	151.0	18.28	140.0	11.90
90	148.8	18.21	138.5	11.50
100	148.4	18.14	138.1	11.20

Упругие модули  $C_{11}$  и  $C_{44}$  компонентов гетероструктуры определялись бесконтактным методом из измерений скоростей продольного и поперечного звука, распространявшегося вдоль кристаллографического направления [100] в монокристаллах  $Pb_{0,93}Sn_{0,07}Se$  и  $PbS_{0,05}Se_{0,95}$ . Измерения проводились в температурном интервале  $4-100$  К. Рассчитанные по формулам  $C_{11} = \rho S_l^2$  и  $C_{44} = \rho S_t^2$  значения упругих модулей представлены в таблице. Плотности тройных полупроводниковых твердых растворов вычислялись путем линейной экстраполяции известных данных [2] для плотностей бинарных соединений. При  $T = 78$  К фактор  $F = E/(1-\nu)$  для  $Pb_{0,93}Sn_{0,07}Se$  составляет  $9.40 \cdot 10^{11}$ , для  $PbS_{0,05}Se_{0,95}$  —  $6.33 \cdot 10^{11}$  г/см $\cdot$ с $^2$ .

Напряжения несоответствия в переходном слое, рассчитанные с использованием данных по параметру кристаллической решетки  $a$  и по упругим свойствам (величина  $F$  для различных значений  $x$  и  $z$  вычислялась путем линейной экстраполяции), представлены на рис. 2.

Максимальное значение  $\sigma = 3.4 \cdot 10^8$  г/см $\cdot$ с $^2$  достигается в переходном слое на глубине около  $50 \text{ \AA}$  со стороны пленки  $PbSnSe$ . Полученное значение  $\sigma$  сравнимо по величине с характерными величинами предела упругости в соединениях типа  $A^{IV}B^{VI}$  (в  $PbTe$  —  $5 \cdot 10^8$  г/см $\cdot$ с $^2$  [3]). Это позволяет предположить, что даже в гетероструктурах, согласованных по параметру кристаллической решетки, взаимодиффузия элементов и различие упругих модулей компонентов структуры приводят к неупругой деформации переходного слоя и, как следствие, к генерации дислокаций несоответствия. Механические напряжения при термоциклировании, как это следует из температурных зависимостей коэффициентов теплового расширения бинарных соединений  $A^{IV}B^{VI}$  [2] и упругих модулей  $C_{11}$  и  $C_{44}$  (см. таблицу), на 2 порядка меньше, чем напряжения несоответствия, и в случае гетероструктуры  $Pb_{0,93}Sn_{0,07}Se - PbS_{0,05}Se_{0,95}$  термическими напряжениями можно пренебречь.

Для получения гетероструктур с минимальными внутренними напряжениями помимо согласования компонентов по параметру решетки  $a$  необходимо согласовывать их также по упругим модулям и оптимизировать профили распределения элементов в переходном слое. Согласование упругих свойств подложки и эпитаксиального слоя может быть достигнуто путем легирования подложки [4], а распределение элементов по толщине переходного слоя может быть оптимизировано выбором режимов синтеза и термообработки.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев, 1983. 304 с.
- [2] Landolt-Börnstein. New ser. 3. V. 17f. 1983. P. 141—190.
- [3] Гаськов А. М. Автореф. докт. дис. М., 1988.
- [4] Васильев А. Н., Гайдуков Ю. П., Зломанов В. П., Никифоров В. Н., Тананаева О. И. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1988. Т. 24. В. 2. С. 227—229.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Получено 12.05.1989  
Принято к печати 10.07.1989