

01;05;11;12

Поля смещений и адекватность моделей неравновесного упорядочения в композициях A_3B_5

© К.С. Максимов, С.К. Максимов

Московский институт электронной техники

Поступило в Редакцию 15 сентября 1997 г.

Экспериментальные изображения с интерференционным контрастом для композиции GaAsP/GaAs, автомодулированной по составу, сопоставляются с расчетными. Расчетные изображения соответствуют двум законам вариаций состава, вытекающим из моделей: а) сопрягающихся фаз и б) "синергетической". Все особенности экспериментальных изображений объясняются только в рамках синергетической модели, что доказывает адекватность этой модели и гипотез, лежащих в ее основе.

Композиционную автомодуляцию, возникающую в трехкомпонентных соединениях A_3B_5 , часть авторов объясняет в рамках модели сопрягающихся фаз [1] как равновесный спинодальный распад [2,3]. В отличие от четверных сплавов, где распад наблюдается также для "массивных" объектов [4], в GaAsP и GaAlAs расслоение присуще только эпитаксиальным слоям [5,6]. Поэтому в [7,8] автомодуляция объяснена в рамках неравновесного подхода, основанного на гипотезе о росте энергии смещения Ω , связанном с реконструкцией поверхности. Однако атомный порядок, также возникающий в сплавах A_3B_5 , объясняется на основе положения о том, что реконструкция поверхности снижает Ω [9,10]. Направление автомодуляции для GaAsP и $Ga_{1-x}Al_xAs$ при $x < 0.3$ совпадает с $\langle 001 \rangle$ [5,6], которое требуется моделью [1]. Поэтому вопрос о том, какой из подходов: [2,3] или [7,8] — является адекватным для трехкомпонентных соединений, нуждается в экспериментальной проверке. Выявление адекватной модели модуляции позволит разрешить противоречия [7,9,10] относительно энергетики поверхности и обосновать достоверную модель атомного упорядочения ([7] или [9,10]).

В модели [7,8] состав изменяется в 4 стадии: а) доля компонента B растет по параболическому закону, б) на 1-й границе эта доля возрастает

скачком, в) доля компонента A увеличивается по параболе, г) на 2-й границе доля A возрастает скачкообразно до значения, превышающего его концентрацию у 1-й границы. В слоях возникают асимметричные поля упругих деформаций [11]. На границах меняются скорость изменений состава и градиент поля смещений; существуют границы двух типов, различающиеся знаками локализованных вблизи них деформаций [11].

При спинодальном распаде возникают две фазы постоянного состава, разделенные переходной областью (градиентной границей) протяженностью $\Delta x \approx 1 \text{ nm}$ [12]. При этом также возникают границы двух типов, однако поля смещений относительно границ в приближении закона Вегарда трансляционно инверсны [12].

Вариации состава проявляются на просвечивающих электронномикроскопических изображениях (ЭМИ) через связанные с ними поля смещений и деформационную компоненту w_e ошибки возбуждения w [11,13]. Поля смещений могут изучаться с помощью метода наклонных границ [14,15], на ЭМИ которых наблюдается осцилляция интенсивности, обусловленная интерференцией волн, рассеянных объемами, разделенными границей [14,15]. При таком изучении экспериментальные ЭМИ сопоставляются с расчетными, соответствующими различным моделям вариаций состава.

Мы пытаемся установить адекватность одной из моделей автомодуляции путем анализа вариаций состава для автомодулированного $\text{GaAsP}/(001)\text{GaAs}$ [5]. На рис. 1 приведены экспериментальные профили интенсивности вдоль направления модуляции на ЭМИ указанной композиции в рефлексах $1\bar{1}1$ и $20\bar{2}$.

Прослеживаются два масштаба осцилляции интенсивности. Крупномасштабная осцилляция отвечает периодичности изменений состава [11] в $\approx 400 \text{ nm}$. Осцилляция между точками B , C (B' и C' для рефлекса $1\bar{1}1$) принадлежит изображению границы между композиционными доменами и является "интерференционной" (ИОИ) [13–15]. Все индивидуальные осцилляции ИОИ укладываются в одну систему осцилляций. Направление крупномасштабной осцилляции и ИОИ совпадают. Присутствуют ЭМИ границ только одного типа. Тип изображаемых границ определяется взаимной ориентацией направлений модуляции, дифракционного вектора \mathbf{g} и проекции.

Период ИОИ в рефлексе $1\bar{1}1$ в ≈ 1.5 раза больше, чем для $20\bar{2}$. Протяженность зоны ИОИ для $1\bar{1}1$ на 30% больше, чем для $20\bar{2}$. ЭМИ в $1\bar{1}1$ и $20\bar{2}$ принадлежат одной и той же плоскости проекций (121) , т. е.

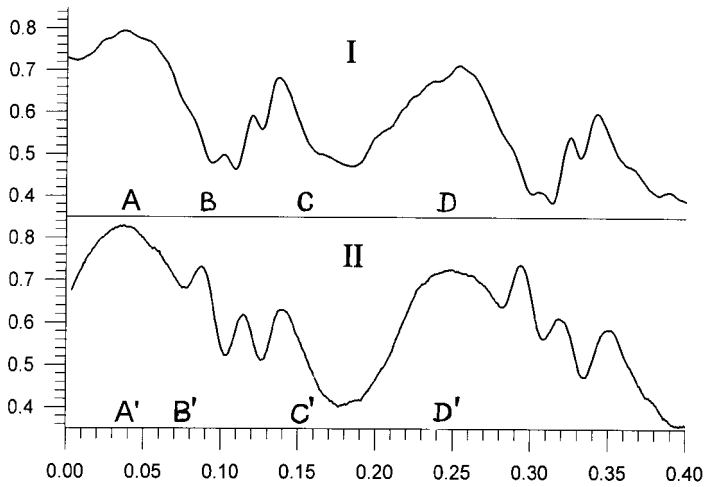


Рис. 1. Экспериментальные профили интенсивности для ПЭМИ композиции GaAsP/(001)GaAs вдоль [101]. Осреднение по > 500 сканированиям. Проекция [121]. I — $\mathbf{g} = [202]$; II — $\mathbf{g} = [111]$; AD (A'D' для $\mathbf{g} = [111]$) — границы повторяющегося мотива; BC (B'C') — границы зоны интерференционной осцилляции. По оси y — относительная интенсивность; x — расстояние в долях микрона.

по крайней мере для рефлекса $20\bar{2}$ ИОИ наблюдается только для части изображения междоменной границы. Число ИОИ осцилляций на ЭМИ при переходе от $1\bar{1}1$ к $20\bar{2}$ остается неизменным и не превышает трех, а толщина фольги (по числу осцилляций на ЭМИ наклонных дислокаций) $> 10\xi_g$ (ξ_g — расстояние экстинкции [13]).

При переходе через границу изменяются величина и направление \mathbf{g} , а также величина и знак w_e . Вариации \mathbf{g} и w_e возрастают при приближении направления \mathbf{g} к направлению модуляции [14,15]. ИОИ обусловлена суперпозицией двух видов контраста: муарового и полос смещения [13–15], каждому из которых отвечает своя система осцилляций. Периодичность муара $\sim 1/|\Delta\mathbf{g}|$ и для рефлексов $1\bar{1}1$, $20\bar{2}$, $11\bar{3}$ варьируется как 1:0.5:0.33. Контраст полос смещения осциллирует при изменении глубины залегания границы с периодом $(\xi_g)_w = \xi_g/\sqrt{1+w^2}$. Оценки w_e с помощью выражений [11] при несоответствии исходных параметров $\Delta a = 1\%$ дают $(w_e)_{1\bar{1}1} \approx 2.0$ и $(w_e)_{20\bar{2}} \approx 4.0$. Экспери-

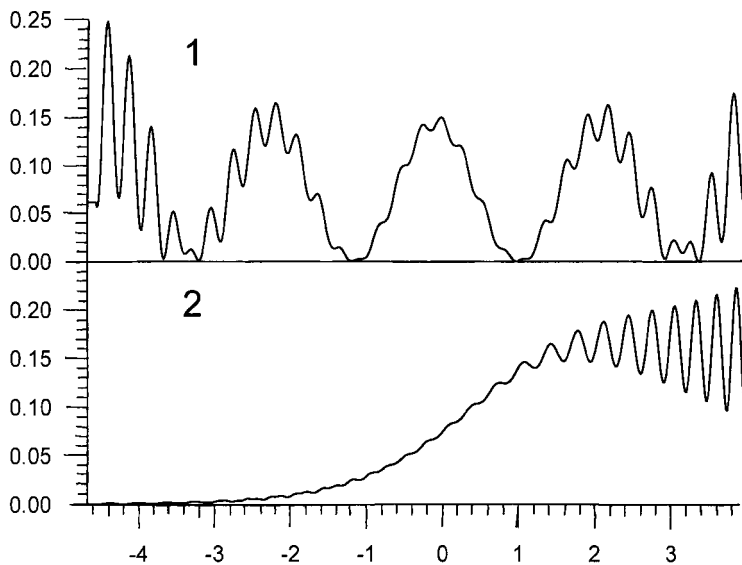


Рис. 2. Расчетные профили для ЭМИ границ; параметры решетки, nm: $\langle a \rangle = 0.555$, $\Delta a_{\max} = \pm 0.0015$; проекция [121], модуляция вдоль [001], $\mathbf{g} = [20\bar{2}]$, т.п. 1 — спиновальный распад, $\Delta a = 0.003\text{th}(206\chi)$; 2 — модель [6,7] слева от границы $\Delta a = 0.003 - 0.00054\chi - 0.000075\chi^2$; справа $\Delta a = 0.0024 - 0.0054(2/\pi)\arctg\sqrt{\chi}$ (χ в долях ξ_g), на границе $\Delta a = 0.0003$ nm, $\xi_g = 70$ nm, $\xi_g/\xi'_g = 0.05$. Толщина фольги $10.0\xi_g$. По оси y — относительная интенсивность, x — расстояние от центра фольги в ξ_g . Профиль 1 — на осцилляцию муара накладывается осцилляция смещения, особенно выраженная для приповерхностных областей; асимметричный профиль 2 — только осцилляция смещения.

ментальное направление ИОИ соответствует двум типам контраста, но экспериментальные вариации периода ИОИ при смене \mathbf{g} не отвечают закономерностям муара.

Возбуждение блоховских волн на входе в кристалл определяется знаком и величиной w : при $w < 0$ доминирует поглощающаяся блоховская волна, а при $w > 0$ — проходящая [13]. Для границ разных типов w_e имеют разные знаки, и достаточный уровень интенсивности обеспечивается только для границ одного типа.

При моделировании ЭМИ установлено.

Если состав в пределах доменов постоянен, а на границах меняется скачком или существуют градиентные границы с $\Delta x = 1 \text{ nm}$ (модель [12]), то возникают две системы ИОИ: муара и полос смещения, при этом результирующая ИОИ наблюдается по всему ЭМИ (рис. 2). Интенсивность на ЭМИ границ разных типов различна, и уровень контраста превышает 5% (условие различимости деталей на ЭМИ [13]) только для границ одного типа. ИОИ по всему ЭМИ сохраняется при отклонении кристалла от брэгговского положения вплоть до $w = 10$. С ростом протяженности градиентной границы при $\Delta x > 1 \text{ nm}$ ИОИ подавляется; при этом муар исчезает первым, а результирующая ИО ослабляется, но одновременно по всей площади ЭМИ.

Если состав композиции изменяется в соответствии с [7,8], а на скачкообразные изменения состава на границах приходится $> 50\%$ от общей амплитуды вариаций, то ИОИ наблюдается по всему ЭМИ. Возрастание роли внутридоменных вариаций ведет к подавлению муаровой компоненты ИОИ и нарушениям периодичности полос смещения $\sim (\xi_g)_w$. Если внутридоменные вариации превышают изменения на границах, то ИОИ наблюдается только для участков границы, локализованных у одной из поверхностей кристалла (рис. 2), причем зона ИОИ сокращается с ростом толщины фольги.

Таким образом, только расчеты на основе модели [7,8] объясняют всю совокупность "аномалий" ИОИ: изменения периодичности осцилляции при переходе от $\mathbf{g} = [1\bar{1}1]$ к $\mathbf{g} = [20\bar{2}]$, отсутствие проявлений муара, присутствие ИОИ только на ЭМИ приповерхностных участков границ, противоречие между наблюдаемым числом осцилляций и ожидаемым из толщины фольги, неизменность числа осцилляций при смене \mathbf{g} . Все это подтверждает вывод [11] об адекватности модели [7,8].

Этот вывод переводит объяснение эффектов упорядочения в трехкомпонентных композициях A_3B_5 из термодинамической плоскости в плоскость кинетических (синергетических) явлений, подтверждает достоверность единого механизма [7,8] возникновения автомодуляции и атомного порядка, позволяет усомниться в модельных оценках энергетики реконструированных поверхностей A_3B_5 работы [9].

Список литературы

- [1] *Ипатова И.П., Малышкин В.Г., Маслов А.Ю., Шукин В.А.* // ФТП. 1993. Т. 27. В. 2. С. 285–298.
- [2] *Gonzalez L., Gonzales Y., Aragon G. et al.* // J. Appl. Phys. 1996. V. 80. N 6. P. 3327–3332.
- [3] *Mahajan S.* // Materials Sc.&Eng. B. Solid State 1995. V. 32. N 3. P. 187–196.
- [4] *Gratton M.F., Wooley J.C.* // J. Electron. Matter. 1973. V. 2. P. 455–469.
- [5] *Максимов С.К., Нагдаев Е.Н.* // ДАН СССР. 1979. Т. 245. С. 1369–1372.
- [6] *Максимов С.К.* // Кристаллография. 1997. Т. 42. № 1. С. 157–164.
- [7] *Максимов С.К., Максимов К.С., Ильичев Э.А.* // Письма в ЖЭТФ. 1996. Т. 63. В. 6. С. 412–417.
- [8] *Максимов К.С., Максимов С.К.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. В. 4. С. 60–63.
- [9] *Bernard J.E., Froyen S., Zunger A.* // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 11178–11201.
- [10] *Chevalier J.-P., Portier R.* // Proc. Inst. Phys. Conf. 1991. V. 117. P. 453–461.
- [11] *Максимов К.С., Максимов С.К.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 10.
- [12] *Хачатурян А.Г.* Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974. 384 с.
- [13] *Хириш П., Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М.* Электронная микроскопия тонких кристаллов. М.: Мир, 1968. 574 с.
- [14] *Maksimov S.K., Nagdaev E.N.* // Phys. stat. sol. (a). 1981. V. 68. N 2. P. 645–652.
- [15] *Maksimov S.K., Nagdaev E.N.* // Phys. stat. sol. (a). 1982. V. 72. N 1. P. 135–145.