

Особенности упругой деформации поверхности Ge (111) при механическом нагружении

© В.Е. Корсуков, С.А. Князев, А.С. Лукьяненко, Б.А. Обидов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 15 мая 1998 г.

В окончательной редакции 18 сентября 1998 г.)

Получены оценки различных составляющих упругой деформации в поверхностном слое Ge(111) при изотропном латеральном растяжении. Их совпадение с обратимыми составляющими разуплотнения поверхности, полученными по энергетическим сдвигам объемного и поверхностного плазменных пиков, позволяет сделать заключение об упругом характере последних. Высказано предположение о том, что аномально высокое значение деформации в тонком поверхностном слое обусловлено частично квазиупругим эффектом вариации рельефа деформированных поверхностей полупроводников.

В наших работах [1–6], посвященных изучению воздействия механической нагрузки на структуру грани Ge(111), а также в работах других авторов [7–9], обнаружен ряд значительных эффектов механического воздействия. Мы делим эти эффекты на две группы — обратимые и необратимые относительно нагрузки. В данной работе будут рассмотрены эффекты механического воздействия на грань Ge(111). Выбор объекта исследования — поверхности германия — диктуется этой задачей: полупроводниковые кристаллы характеризуются широкой областью упругости, так что при разработанной авторами методике нагружения удавалось достичь значительных нагрузок $\sigma \sim 1 \text{ GPa}$ и более без макроразрушения образца. При этом обнаружена значительная обратимая составляющая механического воздействия на поверхность, которая, как мы считаем, связана (в основном) с ее упругой деформацией. Связь обратимых эффектов механического воздействия с упругой деформацией поверхности Ge(111) представляется очевидной из общих соображений, однако до сих пор она не была установлена количественно достаточно последовательно.

Устранению этого пробела посвящена данная работа. Здесь получены оценки упругой деформации в поверхностном слое Ge(111) в рамках макроскопической теории упругости, которые сопоставляются с обратимыми составляющими разуплотнения, полученными по энергетическим сдвигам объемного и поверхностного плазмонов от нагрузки, а также с данными LEED (Low energy electron diffraction) [10].

1. Методика эксперимента и экспериментальные результаты

Действие механической нагрузки на поверхностные атомные слои грани Ge(111) изучалось с помощью специально разработанных методик нагружения, позволяющих получать хорошо воспроизводимые состояния их изотропного латерального растяжения в широком интервале нагрузок $0 < \sigma < 2 \text{ GPa}$. Образцами служили

круглые пластинки Ge диаметром 20 и толщиной 0.2 mm, вырезанные из монокристаллической заготовки так, что их плоская поверхность отличалась от кристаллографической плоскости (111) не более чем на 0.5° (угол вицинальности); этот угол контролировался с помощью рентгеновской дифракции. Подготовка исследуемой поверхности производилась традиционным методом, сочетающим механическую и химическую полировки, а также распыление ее ионами Ar^+ и отжига в сверхвысоком вакууме [1,2,6]. Нагружающее устройство снабжено рядом нагревательных элементов, позволявших производить эффективный отжиг образцов непосредственно в вакуумной камере спектрометра на любой стадии эксперимента.

В наших экспериментах использовались две схемы нагружения (рис. 1, *a, b*). Образец верхней поверхностью упирался в неподвижную внешнюю кольцевую опору 1, а снизу на образец давил силой F либо кольцевой пуансон 2 (схема *a*), либо шар 3 (схема *b*). Исследовались центральные области верхней поверхности (на рисунке они заштрихованы).

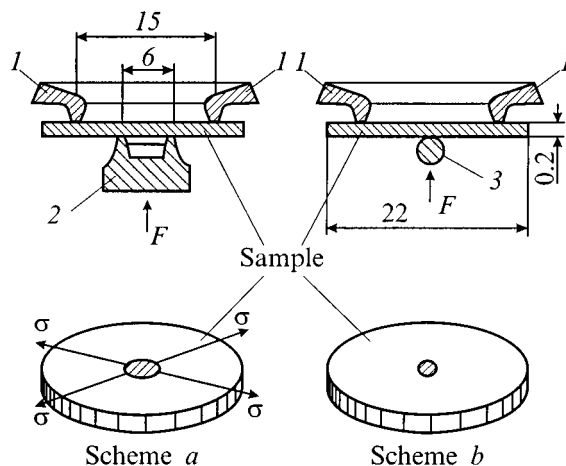


Рис. 1. Схемы нагружения образцов: 1 — внешняя кольцевая опора, 2 — кольцевой пуансон, 3 — шаровой пуансон, F — приложенная сила, σ — растягивающая напряжения.

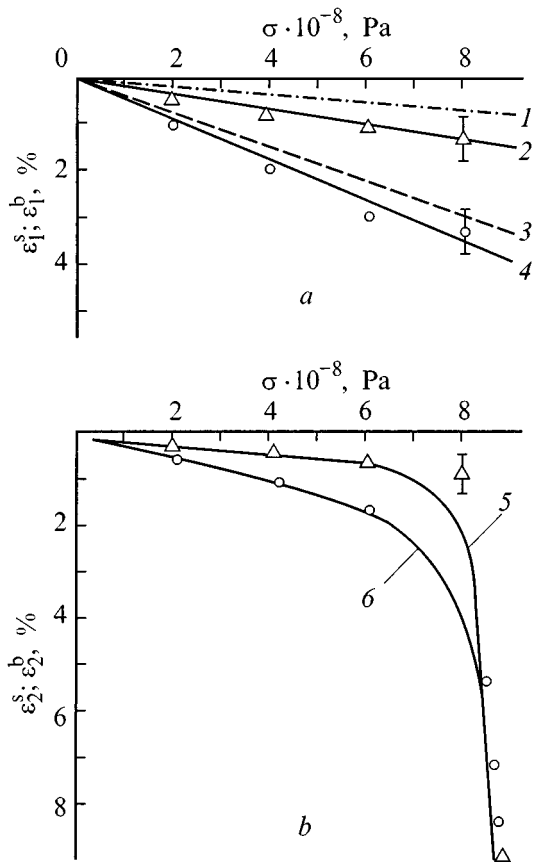


Рис. 2. Зависимость обратимых $\varepsilon_1^s, \varepsilon_1^b$ (a) и необратимых $\varepsilon_2^s, \varepsilon_2^b$ (b) разуплотнений поверхностных слоев толщиной 1 и 3 нм от напряжения σ в Ge(111): 1 — рассчитанная квазиупругая деформация для слоя толщиной 3 нм, 2 — ε_1^b — обратимое разуплотнение слоя толщиной 3 нм, 3 — рассчитанная квазиупругая деформация для слоя толщиной 1 нм, 4 — ε_1^s — обратимое разуплотнение слоя толщиной 1 нм (a), 5 — ε_2^s — необратимое разуплотнение слоя толщиной 3 нм, 6 — ε_2^b — необратимое разуплотнение слоя толщиной 1 нм (b).

Характерная особенность используемых схем нагружения состоит в том, что образцы имеют свободные, незакрепленные края, что позволило исключить краевые эффекты при нагружении и увеличить результирующие напряжения в центральной части образца [11].

Схема (a) позволяла в центральной части поверхности образца создавать двухосное центрально симметричное растяжение [11]. Наибольшее напряжение, достигнутое в наших опытах по этой схеме, составляло величину более 1 ГПа. По этой схеме производились основные измерения спектров LEED и EELS (Electron energy loss spectroscopy), а также она использовалась для градуировки измерения напряжений по схеме (b).

Необходимо отметить, что понятие механического напряжения применимо и хорошо рассчитывается не только для объема, но и для поверхностных слоев, толщина которых много больше межатомных расстояний. Именно

для таких слоев в работах [12,13] было показано хорошее совпадение расчетных напряжений с экспериментально измеренными методами дифракции рентгеновских лучей при отражении от поверхности Si(111).

В работах [12,13] был предложен способ измерения напряжений в приповерхностных слоях Ge и Si методом рамановской спектроскопии при отражении от поверхности. Оценка напряжений производилась по сдвигу и расщеплению частоты LO и TO решеточных колебаний. В своих экспериментах для определения напряжений мы использовали расчет и оба экспериментальных метода аналогично [13].

При использовании схемы (b) в центральной части образца реализуется большой градиент напряжения. Наибольшая достигнутая величина напряжения σ составляла величину больше 2 ГПа для Ge(111). Оценка производилась по градуировке схемы (a). Необходимо отметить, что в случае схемы (b) напряжения и в более толстом поверхностном слое трудно поддаются расчету, но они могут быть измерены по сдвигу и расщеплению LO и TO фононов от нагрузки методом рамановской спектроскопии на отражение от поверхности Si [13].

Результаты по обратимому и необратимому разуплотнениям, полученные методом EELS [14], приведены на рис. 2, a, b, где $\varepsilon_1^s, \varepsilon_1^b$ — обратимые разуплотнения слоев 1 и 3 нм, а $\varepsilon_2^s, \varepsilon_2^b$ — необратимые разуплотнения слоев 1 и 3 нм соответственно. Разделение разуплотнений на обратимую и необратимые составляющие производилась путем записи положения плазменных пиков (исходного образца, нагруженного до нагрузки σ_i и после разгрузки) [14]. Причем σ_i менялась в пределах $0 < \sigma_i < 1$ ГПа при нагружении по схеме (a). В настоящей работе рис. 2, b обсуждаться не будет. Далее будем рассматривать только обратимые составляющие разуплотнения $\varepsilon_1^s, \varepsilon_1^b$. Для сопоставления этих величин с упругой деформацией поверхности оценим в рамках макроскопического приближения различные составляющие упругой деформации в слоях 3 и 1 нм.

2. Упругая деформация поверхностных слоев Ge(111). Макроскопическое приближение

Начнем с оценки деформации в более толстом поверхностном слое 3 нм, который включает порядка десяти атомных монослоев. Статическая релаксация кристаллической решетки (изменение геометрических параметров элементарной ячейки), а также отличие параметров межатомного взаимодействия на поверхности от их объемных значений существенны для более тонкого слоя, а здесь воспользуемся объемными значениями соответствующих параметров. Нас интересует упругая деформация объема элементарной ячейки ε_v^b в рассматриваемом слое, которая, очевидно, должна быть сопоставлена с разуплотнением ε_1^b , определяемым по сдвигу объемного

плазмона. В макроскопическом приближении

$$\varepsilon_v^b \equiv \delta V/V = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \equiv \text{Tr} \hat{\varepsilon}, \quad (1)$$

где ε_{xx} , ε_{yy} , ε_{zz} — составляющие тензора деформаций ε , $\text{Tr} \hat{\varepsilon}$ — след тензора деформаций. Для кристаллов с кубической симметрией элементарной ячейки находим

$$\varepsilon_v^b = (s_{11} + 2s_{12}) \text{Tr} \hat{\sigma}, \quad (2)$$

где S_{11} , S_{12} — постоянные упругой податливости, $\text{Tr} \hat{\sigma}$ — след тензора напряжений. Для изотропного латерального растяжения $\text{Tr} \hat{\sigma} = 2\sigma$, где σ — напряжения в сечениях перпендикулярных плоскости поверхности. Постоянные упругой податливости S_{11} , S_{12} вычисляем по табличным значениям постоянных упругой жесткости C_{11} , C_{12} с использованием соотношения [15]

$$(S_{11} + 2S_{12}) = (C_{11} + 2C_{12})^{-1}. \quad (3)$$

Таким образом, в макроскопическом приближении получаем

$$\varepsilon_v^b [\%] = 2(C_{11} + 2C_{12})^{-1} \sigma = 8.4 \cdot 10^{-10} \sigma [\text{Pa}]. \quad (4)$$

Эта линейная зависимость представлена на рис. 2, *a* штриховой линией. Она в пределах погрешности совпадает с $\varepsilon_1^b(\sigma)$, что обосновывает наш вывод о том, что измеряемое по сдвигу объемного плазмона разуплотнение $\varepsilon_1^b(\sigma)$ есть упругая деформация в поверхностном слое толщины 3 нм. Несколько более высокое экспериментально наблюдаемое значение разуплотнения ε_1^b можно объяснить влиянием поверхностных эффектов в деформации, которые обсуждаются далее.

Рассмотрим теперь упругую деформацию в более тонком слое 1 нм. Как следует из рис. 2, *a*, разуплотнение здесь $\varepsilon_1^s(\sigma)$, измеренное по сдвигу энергии поверхностного плазмона, примерно втрое превышает упругую деформацию в объеме кристалла. Для объяснения этого различия следует предположить, что на поверхности структура решетки и упругие константы отличаются от таковых в объеме кристалла. В данном случае, хотя толщина слоя уменьшилась лишь втрое при переходе от $\varepsilon_1^b(\sigma)$ к $\varepsilon_1^s(\sigma)$ (это несколько межплоскостных расстояний), полагаем, что как раз начинают сказываться поверхностные эффекты в структуре и динамике решетке.

Во-первых, нарушается кубическая симметрия элементарной ячейки за счет эффекта статической релаксации [16], так что число упругих постоянных уже не ограничивается тройкой C_{11} , C_{12} , C_{44} [15]. Во-вторых, значения этих упругих постоянных отличаются от объемных значений. Все эти отличия максимальны на самой поверхности и убывают экспоненциально в глубь кристалла. Усредняем теперь упругие характеристики решетки по более тонкому слою 1 нм, в котором по-прежнему будем пользоваться макроскопическим приближением.

Сам факт отличия упругих свойств решетки на поверхности от объема кристалла хорошо установлен и не вызывает сомнений. В данном случае необходимо

объяснить значительно более высокую деформацию объема элементарной ячейки в слое 1 нм по сравнению с объемом кристалла. Для анализа этого эффекта привлечем также результаты работы [10], где механическая деформация поверхности Ge(111) изучалась методом LEED. Метод LEED позволяет детализировать деформацию самого верхнего (1–2 постоянных решетки) поверхностного слоя, а именно — определить латеральную $\varepsilon_{\parallel}^s$ и перпендикулярную плоскости поверхности ε_{\perp}^s составляющие деформации. Что касается латеральной деформации, точность ее определения методом LEED невысока. По результатам работы [10] можно, однако, утверждать, что ее величина не превышает 0.5% при максимальной достигнутой нагрузке $\sigma \sim 300$ МПа. Нет оснований ожидать, что на поверхности латеральная деформация превышает объемное значение. Поэтому будем полагать ее равной расчетному значению линейной деформации в объеме. Для $\sigma = 300$ МПа

$$\varepsilon_{\parallel}^s \cong \varepsilon_{\parallel}^b \cong 0.25\%. \quad (5)$$

В таком случае особый интерес представляет деформация ε_{\perp}^s . В работе [10] для этой деформации получено положительное (аномальное) значение $\varepsilon_{\perp}^s \sim 0.5\%$. В [10] показано, что указанная аномалия деформации возможна без потери устойчивости решетки. Однако для надежной фиксации результата необходимо его независимое подтверждение. Отметим, что в работе [7] на грани Si(110) такой аномалии деформации не обнаружено. Подтверждением обнаруженной аномалии мы видим обсуждаемые здесь особенности деформации на Ge(111), представленные на рис. 2, *a* и наша задача теперь — найти соответствие между результатами этих независимых экспериментов. Соответствие устанавливается следующими оценками деформации. В объеме кристалла нормальная к плоскости поверхности составляющая деформации ε_{\perp}^b с учетом (4) и (5) может быть оценена следующим образом (для $\sigma = 300$ МПа):

$$\varepsilon_{\perp}^b \cong \varepsilon_v^b - 2\varepsilon_{\parallel}^b \sim -0.25\%. \quad (6)$$

Это отвечает нормальному эффекту Пуассона — сжатию кристалла в направлении, перпендикулярном плоскости действия нагрузки. На самой поверхности эта составляющая деформации, согласно [10], имеет противоположный знак и вдвое большую величину. Тогда получаем искомую оценку величины деформации ε_v^s (для $\sigma = 300$ МПа)

$$\varepsilon_v^s \cong 2\varepsilon_{\parallel}^s + \varepsilon_{\perp}^s \sim 1\%. \quad (7)$$

Эта оценка в пределах погрешности совпадает с экспериментальным значением разуплотнения ε_1^s , полученным по сдвигу энергии поверхностного плазмона. Таким образом, экспериментальные результаты, представленные на рис. 2, *a*, согласуются с результатами работы [10] и, рассматриваемые совместно, они дают достаточно полную картину деформации в поверхностных слоях Ge(111) при латеральном механическом растяжении этой поверхности.

Хорошее совпадение полученных выше оценок деформаций ε_v^s , ε_v^b с экспериментально измеряемыми разуплотнениями ε_1^s , ε_1^b в поверхностных слоях 1 и 3 nm соответственно делает вывод об упругом характере этих эффектов более обоснованным.

Для объяснения высокого значения разуплотнения ε_1^s в слое 1 nm был учтен аномальный характер деформаций ε_\perp^s — эффект, обнаруженный ранее методом LEED [10] и названный аномальным эффектом Пуассона. Полагаем, что и этот эффект получает тем самым дополнительное подтверждение. Остается открытым вопрос о природе этого эффекта. Поскольку аномальный характер деформации ε_\perp^s относится к самому верхнему атомному слою, можно предположить, что имеется определенная связь этой деформации с изменением электронной структуры, а также с изменением рельефа поверхности в механическом силовом поле [8,17]. Действительно, в [9] под действием механической нагрузки обнаружено образование системы атомных ступенек на поверхности Si(001). В [9] показано, что атомные ступеньки служат границами доменов с чередующимися суперструктурами (21) и (12). Под действием внешней нагрузки наблюдается изменение относительной доли площадей доменов (12) и (21) в зависимости от знака приложенной нагрузки. Такой переход происходит за счет сдвигов границ доменов. При исчезновении одной из суперструктур ширина террас удваивается, а граница между ними преобразуется из одноатомной в двухатомную ступеньку. Все эти эффекты носят квазиобратимый характер относительно приложенной нагрузки.

Полагаем, что аномально высокое значение деформации, обнаруженное нами в самом тонком поверхностном слое, обусловлено указанными вариациями рельефа грани Ge(111) и носит частично квазиупругий характер. Однако связь квазиупругой вариации рельефа с упругой деформацией грани Ge(111) требует дополнительного обсуждения.

Список литературы

- [1] В.Е. Корсуков, С.А. Князев, А.С. Лукьяненко, Р.Р. Назаров, Б.А. Обидов, Е.В. Степин, В.Н. Светлов. ФТТ **38**, 1, 113 (1996).
- [2] Р.Р. Назаров, В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, М. Шерматов. Поверхность **1**, 97 (1990).
- [3] В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, П.В. Патриевский, В.Н. Светлов. Поверхность **5**, 27 (1987).
- [4] В.Е. Корсуков. Сб. Физика прочности и пластичности / Под ред. С.Н. Журкова. Наука, Л. (1986). С. 28.
- [5] В.Е. Корсуков, А.С. Лукьяненко, Р.Р. Назаров, П.В. Патриевский, Я.Е. Чивиксин. Поверхность **2**, 69 (1988).
- [6] В.Е. Корсуков, С.А. Князев, А.С. Лукьяненко, Р.Р. Назаров, П.В. Патриевский, М. Шерматов. ФТТ **30**, 8, 2380 (1988).
- [7] Б.А. Нестеренко, А.В. Бровий, А.И. Сороковых. Поверхность **5**, 81 (1986).
- [8] К. Cho, J.D. Joannopoulos, A.N. Berker. Phys. Rev. **B53**, 3, 1002 (1996).
- [9] B.S. Swartzentruber, Y.M. Mo, M.B. Webb, M.G. Lagally. J. Vac. Sci. and Techn. A. Second Ser. **8**, 1, 210 (1990).
- [10] А.С. Лукьяненко. Автореф. канд. дис. Л.(1988). 170 с.
- [11] Ф.Ф. Витман, Я.С. Уфлянд, Б.С. Иоффе. Прикл. механика **6**, 5, 122 (1970).
- [12] И.И. Новак, В.В. Баптизманский, Ю.Ф. Титовец. Опт. и спектр. **49**, 2, 322 (1980).
- [13] И.И. Новак, В.В. Баптизманский, Л.В. Жога. Опт. и спектр. **43**, 2, 252 (1977).
- [14] V. Korsukov, A. Lukyanenko, B. Obidov. Surface Review and Letters **6**, 5, (1998).
- [15] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. Наука, М. (1978). 790 с.
- [16] Б.А. Нестеренко, О.В. Снитко. ФТТ **6**, 10, 2913 (1964).
- [17] Б.А. Нестеренко, А.В. Бровий, А.И. Сороковых. Поверхность **8**, 81 (1986).