

и решеточная теплопроводности соответственно; в невырожденных полупроводниках $\kappa_p/\kappa_e \simeq 10^3$ [5]), а только электронная теплопроводность κ_e .

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность Ю. Г. Гуревичу за постоянное внимание к работе и полезные замечания.

Список литературы

- [1] Бочки В. С., Гуревич Ю. Г. // ФТП. 1983. Т. 17. В. 4. С. 728—730.
- [2] Гуревич Ю. Г., Логвинов Г. Н. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 10. С. 1715—1720.
- [3] Рацба Э. И., Грибников З. С., Кравченко В. Я. // УФН. 1976. Т. 119. В. 1. С. 3—47.
- [4] Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. М., 1975. 399 с.
- [5] Могилевский Б. М., Чудновский А. Ф. Теплопроводность полупроводников. М., 1972. 320 с.

Тернопольский
государственный педагогический институт
им. Я. О. Галана

Получено 4.02.1991
Принято к печати 14.05.1991

ФТП, том, 25, вып. 10, 1991

ВЛИЯНИЕ ПЛОСКОЙ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ШИРИНУ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Ga_{0.5}In_{0.5}P$

Сорокин В. С., Кузнецов В. В.

При сопряжении изоморфных твердых фаз со слабо различающимися межатомными расстояниями дилатационные несоответствия кристаллических решеток аккомодируются за счет плоской упругой деформации. Если толщина псевдоморфного эпитаксиального слоя в формируемой гетероструктуре достаточно мала, то деформацией подложки можно пренебречь [1]. Такое плоско-напряженное состояние эпитаксиальных слоев характеризуется отсутствием сдвиговых деформаций и по влиянию на зонную структуру полупроводникового материала эквивалентно одноосному растяжению или одноосному сжатию в зависимости от знака дилатационного рассогласования сопрягаемых решеток.

Как известно, одноосная деформация кубических кристаллов вызывает изменения в относительном расположении энергетических зон, а кроме того, приводит к снятию вырождения в валентной зоне в максимуме (000). В литературе имеются весьма ограниченные сведения о влиянии упругих напряжений на зонную структуру твердых растворов. Отчасти это связано с тем, что получение достаточно крупных гомогенных кристаллов концентрированных твердых растворов представляет собой весьма сложную технологическую задачу. При исследовании эпитаксиальных гетероструктур для исключения влияния подложки и обусловленных ею упругих напряжений обычно производят химическое отделение эпитаксиального слоя [2]. Однако подобные эксперименты весьма трудоемки и требуют высокой прецизионности. Между тем при наличии набора гетероструктур с различным рассогласованием решеток на гетерогранице при условии сохранения псевдоморфизма осаждаемых слоев влияние одноосной деформации на ширину запрещенной зоны твердого раствора может быть установлено без разрушения гетероструктуры, т. е. без отделения слоя от подложки. В настоящей работе такой подход использован при анализе деформированного состояния гетероструктур $Ga_xIn_{1-x}P/GaAs$.

Эпитаксиальные слои твердых растворов были получены методом жидкост-

фазной эпитаксии на подложках с ориентацией (111) A при температуре 800 °C по методике, изложенной в [3]. В выбранных для анализа гетероструктурах толщина слоев не превышала 2 мкм.

Для точного определения состава твердого раствора измеряли дилатационное рассогласование решеток на гетерогранице в направлении, перпендикулярном плоскости слоя. Измерения проводились с помощью микроанализатора JXA-5A по методу дифракции широко расходящегося пучка рентгеновских лучей [4]. При найденном несоответствии периодов решеток f_{\perp} состав твердого раствора определяли по правилу Бегарда с помощью выражения

$$f_{\perp} = \frac{3(C_{11} + 2C_{12})}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} f_0, \quad (1)$$

где $f_0 = \Delta a_0/a$ — химически обусловленное рассогласование решеток эпитаксиального слоя и подложки, C_{ij} — модули упругости твердого раствора. Их численное значение находили методом линейной интерполяции упругих постоянных исходных бинарных соединений. После преобразования (1) нетрудно получить следующее выражение для расчета состава твердого раствора:

$$x = \frac{a_{InP} - a_{GaAs}}{a_{InP} - a_{GaP}} \frac{(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}) a_{GaAs}}{3(C_{11} + 2C_{12})(a_{InP} - a_{GaP})} f_{\perp}. \quad (2)$$

Подстановка a_{ij} из [5] и C_{ij} из [6] дает

$$x = 0.516 - 8.854 f_{\perp}. \quad (3)$$

Рентгенодифракционные исследования показали, что во всех образцах с составом эпитаксиального слоя $x=0.48-0.52$ отсутствовали дислокации несоответствия на гетерогранице, т. е. в пределах погрешности измерений ($\Delta a/a$) ≈ 0 . Таким образом, все дилатационное несоответствие на гетерогранице в исследованных структурах аккомодировалось плоской упругой деформацией. Как видно из (3), погрешность в измерении $f_{\perp} \leq 10^{-4}$ дает ошибку в определении состава не более 0.1 %.

Ширину запрещенной зоны твердых растворов определяли по спектрам краевой фотолюминесценции, возбуждаемой при 77 K с помощью азотного лазера ЛГИ-21. Спектральный состав излучения исследовали с помощью решеточного монохроматора ДФС-12 и системы синхронного детектирования.

Результаты исследования гетероструктур систематизированы на рисунке. Там же приведены экспериментальные точки из работы [7], которые находятся в превосходном согласии с данными настоящей работы. При комнатной температуре условию изопериодичности сопрягаемых материалов отвечает $x=0.516$. Однако при $T=77$ K это условие не выполняется вследствие различия температурных коэффициентов линейного расширения α слоя и подложки. Простой расчет с использованием α из [8] показывает, что полное согласование решеток при 77 K обеспечивает твердый раствор с $x=0.519$, которому, как следует из рисунка, соответствует ширина запрещенной зоны $E_g^r=1.998$ эВ.

Как известно, в квазибинарных твердых растворах изменение энергетических зазоров от состава материала хорошо описывается квадратичной функцией вида

$$E(x) = xE_{AC} + (1-x)E_{BC} - cx(1-x), \quad (4)$$

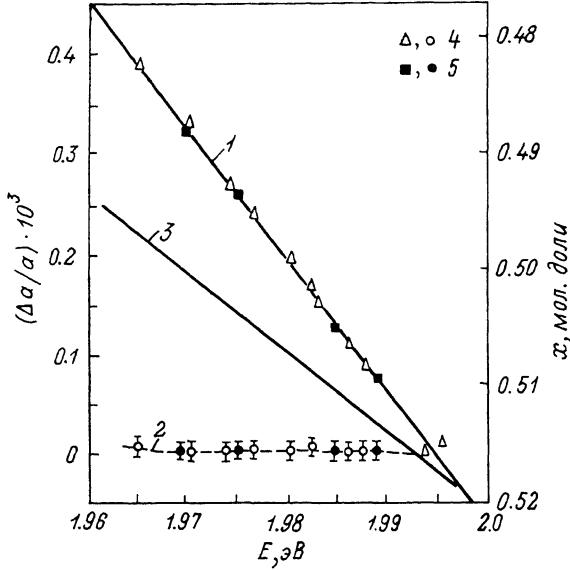
где нелинейный член отражает роль флуктуаций периодического потенциала решетки, обусловленных статистическими неоднородностями в распределении компонентов. Подстановка полученных выше значений в (4) вместе с параметрами зонной структуры бинарных соединений из [9] дает следующее выражение для прямого энергетического зазора при 77 K:

$$E_0^r(x) = 1.414 + 1.460x - 0.697x(1-x). \quad (5)$$

Полученный результат несколько отличается от данных [9], но существенно им не противоречит.

В диапазоне составов $x=0.48-0.52$ нелинейная поправка в (5) с точностью ± 0.2 мэВ остается постоянной. Поэтому зависимость $E_0^\Gamma(x)$ практически линейна. Она также показана на рисунке (прямая 3). Из проведенного анализа следует, что различия в зависимостях $E_1(x)$ и $E_0(x)$ обусловлены только влиянием упругих напряжений в эпитаксиальных слоях $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$.

При когерентном сопряжении фаз деформация в плоскости эпитаксиального слоя $\epsilon = -f_0$. Если эпитаксиальный слой ориентирован в плоскости (111), то псевдоморфизм вызывает ромбодрические искажения кристаллической решетки. Возникающее плосконапряженное состояние гетероструктуры характеризуется



Взаимосвязь между шириной запрещенной зоны твердых растворов (при 77 К) и дилатационным несоответствием решеток на гетерогранице (при 300 К) в эпитаксиальных структурах $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}/\text{GaAs}$ (111).

1 — $(\Delta a/a)_1$; 2 — $(\Delta a/a)_{||}$; 3 — $E_0(x)$; 4 — данные [?]; 5 — результаты настоящей работы.

разуется изотропностью упругих свойств. Решение упругой задачи позволяет установить следующую взаимосвязь между напряжением и деформацией в плоскости слоя:

$$\sigma = \frac{6C_{44}(C_{11} + 2C_{12})}{4C_{44} + 2C_{12} + C_{11}} \epsilon = -2f_\perp C_{44}. \quad (6)$$

С помощью этого соотношения и данных, представленных на рисунке, легко определить барический коэффициент ширины запрещенной зоны:

$$\frac{dE_0^\Gamma}{d\sigma} = \frac{E_1^\Gamma(x) - E_0^\Gamma(x)}{\sigma(x)} = 4.4 \cdot 10^{-8} \text{ мэВ/(Н} \cdot \text{м}^{-2}\text{)}.$$

Найденное значение барического коэффициента достаточно хорошо коррелирует с результатами работы [10], полученными для слоев с ориентацией (100), при их измерении в свободном и деформированном состояниях. Однако предполагаемая в настоящей работе методика анализа существенно упрощает поиск барических коэффициентов запрещенной зоны при одноосной деформации. Рассмотренный подход может быть применен при исследовании любых других эпитаксиальных гетероструктур на основе квазибиарных твердых растворов с малым рассогласованием решеток на гетерогранице. Единственным принципиальным критерием применимости метода является отсутствие пластической деформации в исследуемых гетероструктурах. В противном случае расчет упругих напряжений по измеренному дилатационному несоответствию решеток становится некорректным.

- [1] Ольсен Г. Х. // Рост кристаллов. М., 1981. В. 2. С. 9—76.
[2] Olsen G. H., Nuese C. J., Smith R. T. // J. Appl. Phys. 1978. V. 49. N 11. P. 5523—5529.
[3] Кузнецов В. В., Москвин И. П., Сорокин В. С., Ольховик Я. // Изв. АН СССР. Неорг. матер. 1986. Т. 22. В. 11. С. 1773—1778.
[4] Берт Н. А., Конников С. Г., Уманский В. Е. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 10. С. 1899—1903.
[5] Кейси Х., Паниш М. Лазеры на гетероструктурах. М., 1981. Т. 2. 364 с.
[6] Стрельченко С. С., Лебедев В. В. Соединения A^3B^5 . М., 1984. 144 с.
[7] Арсентьев И. Н., Конников С. Г., Мишурин В. А. и др. // ФТП. 1980. Т. 14. В. 12. С. 2343—2348.
[8] Пасынков В. В., Сорокин В. С. Материалы электронной техники. М., 1986. 367 с.
[9] Пихтин А. Н. // Автореф. докт. дис. Л., 1979.
[10] Уманский В. Е. // Автореф. канд. дис. Л., 1983.

С.-Петербургский электротехнический
институт им. В. И. Ульянова (Ленина)

Получено 15.04.1991
Принято к печати 17.05.1991

ФТП, том 25, вып. 10, 1991

**ПОВЕДЕНИЕ КИСЛОРОДА
В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ
ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБРАБОТКЕ В γ -ПОЛЕ**

Гроза А. А., Круликовская М. П., Старчик М. И., Антоненко Р. С.

Возможности геттерирования быстродиффундирующих металлических примесей на преципитатах кремниевых окислов обусловили в последние годы интенсивное изучение условий преципитации кислорода в кремнии [1—3]. Для контроля и управления геттерированием, являющимся ныне одним из звеньев технологического процесса при изготовлении полупроводниковых приборов, необходимо было изучение процессов кластерирования кислорода, зарождения и роста кислородокремниевых преципитатов. В настоящее время установлено, что эффективность выхода кислорода из раствора в фазу зависит от его концентрации в кремнии, температуры и длительности термообработки кристаллов, их термической предыстории, связанной с условиями роста и охлаждения, содержания углерода [4]. Установлено, что важную роль в процессе распада играют и радиационные дефекты: при электронном, протонном и нейtronном облучении кремния происходит существенное ускорение преципитации кислорода [5—6], обнаружено влияние величины флюенса нейтронного и протонного облучения на состав (структуре) образующихся кислородокремниевых комплексов [6].

С целью выяснения влияния γ -излучения на преципитацию кислорода в кремнии в настоящей работе термообработка кристаллов проводилась в γ -поле интенсивностью $3.2 \cdot 10^{12}$ кВ/см²·с от источников Co^{60} . Исследования проведены на бездислокационном монокристаллическом кремнии *n*-типа с $\rho \sim 2 \div 3$ Ом·см, выращенном методом Чохральского в направлении $\langle 100 \rangle$, с исходным содержанием кислорода $\sim (6 \div 8) \cdot 10^{17}$ см⁻³. Кристаллы отжигали при 1000 °C в потоке γ -квантов или в их отсутствие на протяжении 2 \div 120 ч. Методика облучения и контроля температуры описана в [7]. Кинетика выхода кислорода из растворенного состояния в фазу изучалась методом ИК поглощения подобно тому, как описано в [8]: концентрация межузельного кислорода на различных этапах изотермического отжига контролировалась по коэффициенту поглощения $\Delta\alpha$ в максимуме полосы 1110 см⁻¹ при комнатной температуре. Величину $\Delta\alpha$ можно считать пропорциональной концентрации межузельного кислорода, так как из общего значения поглощения в данной области спектра вычтены вклад двухфононного поглощения и изменяющийся со временем отжига фон, обусловленный поглощением на свободных носителях заряда.