

07,12

Релаксация напряжений несоответствия в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ при образовании дислокаций несоответствия

© А.М. Смирнов¹, А.В. Кремлева¹, Ш.Ш. Шарофидинов², В.Е. Бугров¹, А.Е. Романов^{1,2}

¹ Университет ИТМО,
Санкт-Петербург, Россия

² Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: smirnov.mech@gmail.com

Поступила в Редакцию 12 февраля 2021 г.

В окончательной редакции 12 февраля 2021 г.

Принята к публикации 12 февраля 2021 г.

Предложена теоретическая модель релаксации напряжений несоответствия в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ типа пленка/подложка с учетом анизотропии кристаллических решеток материалов гетероструктуры. Рассмотрено зарождение дислокаций несоответствия в результате базисного или призматического скольжения в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с различной ориентацией пленки. Получены зависимости критической толщины h_c (толщина пленки, выше которой выгодно зарождение дислокаций несоответствия) от угла ϑ между полярной осью c и нормалью к плоскости роста пленки для гетероструктур $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Показано, что учет упругой константы C_{14} излишен в рассмотренных моделях релаксации в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.

Ключевые слова: широкозонные полупроводники, оксид галлия, сапфир, релаксация напряжений несоответствия, дислокации несоответствия.

DOI: 10.21883/FTT.2021.06.50941.029

1. Введение

В последние годы широкозонные полупроводниковые материалы все чаще заменяют традиционные полупроводники, например, Si в устройствах силовой электроники, в том числе для космической и ядерной промышленности, в фотоэлектропреобразователях для ультрафиолетовой области спектра, в высокомошных радиочастотных устройствах [1–5]. Благодаря большому, чем у Si, величинам запрещенной зоны эти материалы обладают рядом преимуществ: повышенными рабочими температурами, высокими значениями поля пробоя, большой радиационной стойкостью, возможностью создания светоизлучающих приборов в видимой области спектра, возможностью создания солнечно слепых детекторов. Примерами таких широкозонных материалов могут служить SiC, GaN, AlN и их возможные твердые растворы, которые активно исследуются с начала 2000-х г. [1,2]. Недавно к этим материалам добавился еще один перспективный широкозонный полупроводник — оксид галлия (Ga_2O_3) [6]. По сравнению с AlN, GaN и SiC, Ga_2O_3 обладает большей шириной запрещенной зоны ($4.6 \div 5.2$ eV в зависимости от полиморфной формы, при этом наибольшее значение ширины запрещенной зоны (5.2 eV) характерно для α -фазы [7,8]). Данное преимущество позволяет использовать Ga_2O_3 в высокомошных устройствах, работающих с большими напряжениями. Так, например, ряд недавних работ был посвящен изготовлению и исследованию диода Шоттки на основе гетероструктуры $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с различ-

ными металлическими контактами на основе Au, Pt, Ti или их сплавов [9–11]. Максимальное напряжение пробоя такого диода составило 855 V, а сопротивление в открытом состоянии $0.4 \text{ m}\Omega \cdot \text{cm}^2$ [9]. Особенностью Ga_2O_3 является то, что его α -фаза относится к тригональной сингонии [12,13] и, соответственно, имеет сходство в кристаллической структуре с нитридами металлов III группы, что предоставляет возможность взаимной интеграции этих материалов в единое устройство с улучшенными характеристиками [14,15].

Отметим, что производство современных полупроводниковых приборов на основе перспективных материалов невозможно без изготовления качественных приборных структур, физические свойства которых зависят не только от их химического состава, но и от геометрии сопряжения фаз, наличия внутренних механических напряжений, а также от присутствия дефектов, например, дислокаций несоответствия (ДН), проникающих дислокаций (ПД), трещин, пор и т.п. Внутренние механические напряжения могут быть вызваны, как различием параметров кристаллической решетки материалов, составляющих гетероструктуру, (напряжения несоответствия), так и различием в коэффициентах термического расширения этих материалов (термоупругие напряжения). Высокий уровень механических напряжений может приводить к образованию нежелательных дефектов в гетероструктурах. Например, для вышеупомянутой гетероструктуры диода Шоттки характерна высокая плотность ПД $\sim 10^9 \text{ cm}^{-2}$, а их влияние на электрические

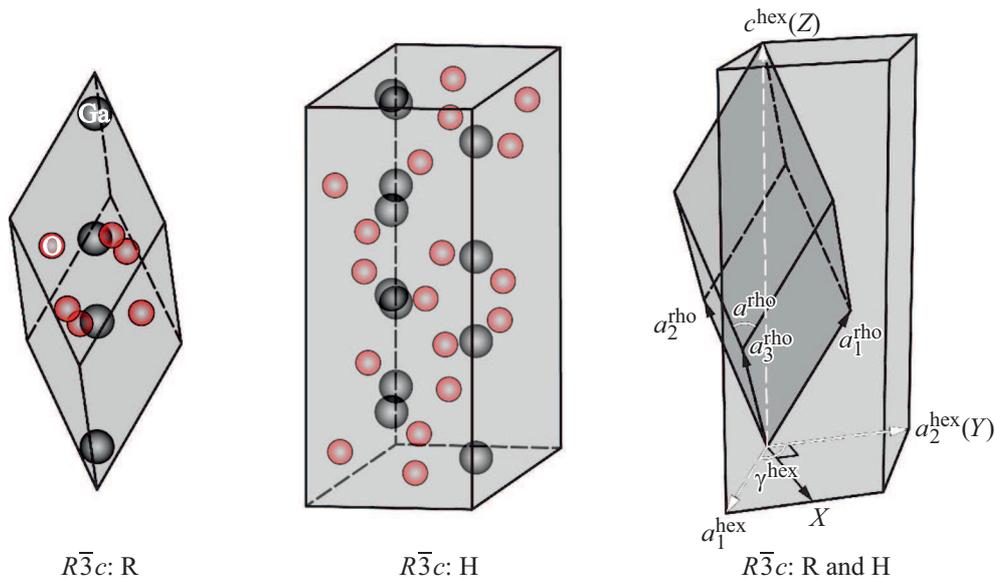


Рис. 1. Кристаллическая ячейка $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Слева — ромбоэдрическая элементарная ячейка, по центру — 1/3 гексагональной элементарной ячейки, справа — обе ячейки вместе. Серыми кружками обозначены атомы Ga, красными — O. (Рис. в цвете см. в электронной версии журнала).

свойства, в частности, на ток утечки, до сих пор до конца не определено [11]. ДН, образующиеся на границе раздела пленка/подложка в процессе роста той же гетероструктуры, могут приводить к отслаиванию подложки $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ от пленки $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ [9].

Контроль механических напряжений, позволяет добиться лучшего кристаллического качества гетероструктуры путем снижения плотности дефектов, и, как следствие, позволяет получать гетероструктуры высокого приборного качества с прогнозируемыми физическими свойствами. На данный момент уже существуют модели, описывающие релаксацию напряжений несоответствия в композитных гетероструктурах GaN/Ga₂O₃ путем образования ДН, однако данные модели построены в рамках изотропной теории упругости и не учитывают кристаллическую симметрию материалов гетероструктуры [16]. Таким образом, в настоящей работе предложена теоретическая модель, описывающая критические условия формирования ДН в гетероструктуре $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с учетом анизотропии материалов.

2. Особенности кристаллической структуры $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$

Как было отмечено во введении по своему кристаллическому строению, как $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$, так и $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, относятся к тригональной сингонии и имеют кристаллическую решетку корунда (пространственная группа симметрии $R\bar{3}c$). Хорошо известно, что кристаллы с тригональной сингонией можно описать с помощью ромбоэдрической или гексагональной элементарной ячейки [17,18] (см. рис. 1). Как правило, в этом случае

используются элементарные ячейки со следующим соотношением осей: ось c гексагональной ячейки направлена параллельно кристаллографическому направлению [111] в ромбоэдрической ячейке. Ромбоэдрическая и гексагональная ячейки дают различные способы описания одного и того же уникального атомного порядка тригонального кристалла. Выбор описания структуры материала не влияет на его глобальные свойства. Например, тензор четвертого ранга упругих констант C_{ijkl} тригонального кристалла состоит из 6 линейных независимых компонент C_{ijkl} для обоих кристаллических представлений. Упругие константы для $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ в обозначениях Фойгта с использованием базисной декартовой системы координат (X, Y, Z) , см. рис. 1, имеют вид

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ -C_{14} & C_{14} & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & -C_{14} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -C_{14} & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $C_{11} = 381.5$ GPa, $C_{12} = 173.6$ GPa, $C_{13} = 126$ GPa, $C_{14} = 17.3$ GPa, $C_{33} = 345.8$ GPa, $C_{44} = 79.7$ GPa [19]. Обычно в литературе обсуждается приближение, когда $C_{14} = 0$. Подобное решение объясняется тем, что значение C_{14} достаточно мало по сравнению с другими константами. В этом случае число линейно независимых компонент тензора упругих констант уменьшается до пяти. Данное число линейно независимых упругих констант характерно для материалов с гексагональной структурой, что позволяет рассматривать $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$, как

материал с подобной структурой. Анализ выражения (1) показывает, что константа $C_{14} \neq 0$ изменяет соотношение между компонентами тензоров упругой деформации и механических напряжений в законе Гука. Это обуславливает разный отклик гетероструктуры на наличие несоответствия при использовании приближенного гексагонального, либо точного ромбоэдрического описаний. Поэтому целью настоящей работы является исследование влияния константы C_{14} на критические условия формирования ДН в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.

3. Модель

В предлагаемой ниже модели мы реализуем подход, развитый для описания релаксации напряжений несоответствия в гетероструктурах с решеткой вюрцита [20,21], используя гексагональную геометрию элементарной ячейки контактирующих фаз $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ и $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, но вводя дополнительную константу C_{14} в соответствующие уравнения. Рассмотрим процесс релаксации напряжений несоответствия в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с различной ориентацией роста пленки за счет образования ДН в геометрии и с обозначениями, показанными на рис. 2. В таких гетероструктурах образование ДН возможно в результате призматического скольжения (ДНПС), когда вектор Бюргерса \mathbf{b} и линия дислокации DL лежат в призматической плоскости (рис. 2, *a, c* и *e*) или в результате базисного скольжения (ДНБС), когда вектор Бюргерса \mathbf{b} и линия дислокации DL лежат в базисной плоскости (рис. 2, *b, d* и *f*). На рис. 2 приведены системы координат, необходимые для описания геометрии и дальнейших расчетов: ось Z базисной системы координат (X, Y, Z) направлена вдоль оси c гексагональной элементарной ячейки; ось Z' лабораторной системы координат (X', Y', Z') перпендикулярна подложке. Оси X и X' совпадают. Базисная система координат повернута на угол ϑ относительно лабораторной системы координат. Ось X'' дислокационной системы координат (X'', Y'', Z'') направлена вдоль линии ДНПС, а оси Z' и Z'' совпадают: лабораторная система координат повернута вокруг оси Z'' (или Z') на угол β относительно дислокационной системы координат. Вспомогательные угол φ — это угол между вектором Бюргерса \mathbf{b} и линией дислокации DL, угол ψ — угол между осью c (Z) и линией дислокации DL. Схемы на рис. 2 иллюстрируют случай наклона оси c относительно направлений типа $\langle 1\bar{2}10 \rangle$ или $\langle 1\bar{1}00 \rangle$. Отметим, что ДНПС и ДНБС в общем случае являются смещенными дислокациями, т. е. имеют винтовую и краевую составляющие.

Применяемый нами подход для описания процесса релаксации напряжений несоответствия основан на энергетическом критерии и учитывает анизотропию кристаллических решеток материалов гетероструктуры. Зарождение ДН энергетически выгодно, если полное изменение

энергии гетероструктуры ΔW будет отрицательным

$$\Delta W = W_d + W_{int} < 0. \quad (2)$$

Полное изменение энергии ΔW состоит из упругой энергии формирующейся дислокации W_d , включая энергию ее ядра, и энергии взаимодействия ДН с упругим полем напряжений несоответствия гетероструктуры W_{int} . Энергия W_d может быть рассчитана на основе решения, предложенного в работе [22]:

$$W_d = \frac{1}{4\pi} b^2 K(\psi, \varphi, C_{ij}), \quad (3)$$

где C_{ij} — упругие константы пленки, записанные в базисной системе координат (X, Y, Z) , см. выражение (1); $K(\psi, \varphi, C_{ij})$ — энергетический фактор, заданный в работе [22], не приводится здесь из-за его громоздкости.

Энергия W_{int} может быть определена, как работа по зарождению ДН в упругом поле напряжений несоответствия гетероструктуры:

$$\begin{aligned} W_{int} &= (\sigma_{y''y''} b_{y''} + \sigma_{z''y''} b_{z''} + \sigma_{x''y''} b_{x''}) h, \\ \sigma_{y''y''} &= \sigma_{x'x'} \sin^2 \beta + \sigma_{y'y'} \cos^2 \beta + \sigma_{x'y'} \sin 2\beta, \\ \sigma_{x''y''} &= (\sigma_{x'x'} - \sigma_{y'y'}) \sin 2\beta / 2 + \sigma_{x'y'} \cos 2\beta, \\ \sigma_{z''y''} &= \sigma_{x'z'} \sin \beta + \sigma_{y'z'} \cos \beta, \\ b_{x''} &= b_x \cos \beta - b_y \cos \vartheta \sin \beta, \\ b_{y''} &= b_x \sin \beta + b_y \cos \vartheta \cos \beta, \\ b_{z''} &= b_y \sin \vartheta, \end{aligned} \quad (4)$$

где $b_{x''}$, $b_{y''}$, $b_{z''}$ и $\sigma_{y''y''}$, $\sigma_{z''y''}$, $\sigma_{x''y''}$ — это компоненты вектора Бюргерса и тензора напряжений несоответствия в дислокационной системе координат (X'', Y'', Z'') , а b_x , b_y , b_z — проекции вектора Бюргерса в базисной системе координат (X, Y, Z) .

Напряженно-деформированное состояние в гетероструктуре $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с учетом анизотропии материалов и произвольной ориентации пленки рассматривалось в работе [23]. Однако в работе [23] не были приведены аналитические формулы, для напряжений несоответствия в пленке $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$, поэтому в наших расчетах мы используем тензор напряжений несоответствия, который был определен в работе [24]:

$$\sigma_{x'x'} = C_{11} \varepsilon_{x'x'} + C_{12} \varepsilon_{y'y'} + C_{13} \varepsilon_{z'z'} - 2C_{14} \varepsilon_{y'z'}, \quad (5)$$

$$\sigma_{y'y'} = C_{12} \varepsilon_{x'x'} + C_{11} \varepsilon_{y'y'} + C_{13} \varepsilon_{z'z'} + 2C_{14} \varepsilon_{y'z'}, \quad (6)$$

$$\sigma_{y'z'} = -C_{14} \varepsilon_{x'x'} + C_{14} \varepsilon_{y'y'} + 2C_{44} \varepsilon_{y'z'}, \quad (7)$$

$$\sigma_{x'z'} = 2(C_{44} \varepsilon_{x'z'} - C_{14} \varepsilon_{x'y'}), \quad (8)$$

$$\sigma_{x'y'} = -2C_{14} \varepsilon_{x'z'} + \varepsilon_{x'y'} (C_{11} - C_{12}), \quad (9)$$

$$\sigma_{z'z'} = C_{13} \varepsilon_{x'x'} + C_{13} \varepsilon_{y'y'} + C_{33} \varepsilon_{z'z'}, \quad (10)$$

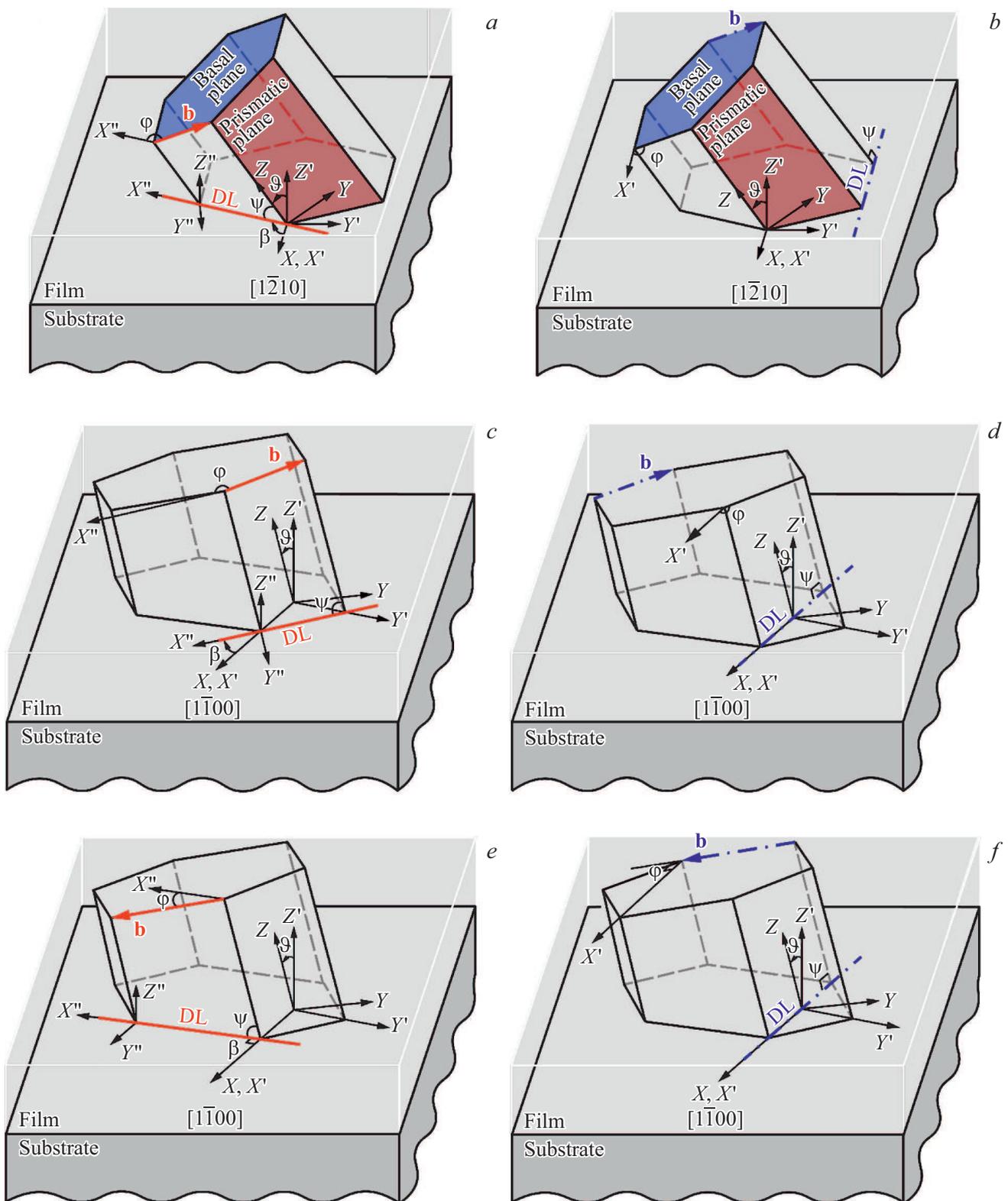


Рис. 2. Схематичное изображение дислокаций несоответствия в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с использованием гексагональной геометрии элементарной ячейки. *a, c, e* — соответствуют ДНПС; *b, d, f* — ДНБС. \mathbf{b} — вектор Бюргерса, DL — линия дислокации

$$\varepsilon_{x'x'} = \frac{a_s - a_f}{a_f},$$

$$\varepsilon_{y'y'} = \frac{a_s c_s - \sqrt{(a_f c_s)^2 \cos^2 \vartheta + (a_s c_f)^2 \sin^2 \vartheta}}{\sqrt{(a_f c_s)^2 \cos^2 \vartheta + (a_s c_f)^2 \sin^2 \vartheta}},$$

$$\varepsilon_{z'z'} = \frac{(B_{41} \varepsilon_{x'x'} + B_{42} \varepsilon_{y'y'}) A_{32} - (B_{31} \varepsilon_{x'x'} + B_{32} \varepsilon_{y'y'}) A_{42} + R_1 \varepsilon_{x'x'} + R_2 \varepsilon_{y'y'}}{A_{31} A_{42} - A_{32} A_{41} + R_3},$$

$$\varepsilon_{y'z'} = \frac{(B_{31} \varepsilon_{x'x'} + B_{32} \varepsilon_{y'y'}) A_{41} - (B_{41} \varepsilon_{x'x'} + B_{42} \varepsilon_{y'y'}) A_{31} + R_4 \varepsilon_{x'x'} + R_5 \varepsilon_{y'y'}}{A_{31} A_{42} - A_{32} A_{41} + R_3},$$

$$\varepsilon_{x'z'} = 0, \quad \varepsilon_{x'y'} = 0,$$

где

$$A_{31} = C_{11} \sin^4 \vartheta + (C_{13}/2 + C_{44}) \sin^2 2\vartheta + C_{33} \cos^4 \vartheta,$$

$$A_{32} = [C_{11} \sin^2 \vartheta + (C_{13} + 2C_{44}) \cos 2\vartheta - C_{33} \cos^2 \vartheta] \sin 2\vartheta,$$

$$A_{41} = 0.5[(C_{11} - C_{13}) \sin^2 \vartheta + 2C_{44} \cos 2\vartheta + (C_{13} - C_{33}) \cos^2 \vartheta] \sin 2\vartheta,$$

$$A_{42} = [(C_{11} + C_{33})/2 - C_{13}] \sin^2 2\vartheta + 2C_{44} \cos^2 2\vartheta,$$

$$B_{31} = C_{12} \sin^2 \vartheta + C_{13} \cos^2 \vartheta,$$

$$B_{32} = C_{11}(\sin^4 \vartheta + \cos^4 \vartheta) + [(C_{11} + C_{33})/4 - C_{44}] \sin^2 2\vartheta,$$

$$B_{41} = 0.5(C_{12} - C_{13}) \sin 2\vartheta,$$

$$B_{42} = [C_{11} \cos^2 \vartheta - (C_{13} + 2C_{44}) \cos 2\vartheta - C_{33} \sin^2 \vartheta] \sin 2\vartheta/2,$$

$$R_1 = \frac{C_{14} \sin \vartheta}{2} [(C_{11} + C_{12} - 9C_{13} + 3C_{33}) \cos \vartheta - (C_{11} + C_{12} + 3C_{13} - C_{33}) \cos 3\vartheta + 2(\sin 3\vartheta - \sin \vartheta) C_{14}],$$

$$R_2 = \frac{C_{14}}{4} (-C_{14} + C_{14} \cos 4\vartheta - 2(C_{13} + C_{33}) \sin 4\vartheta),$$

$$R_3 = C_{14} \sin \vartheta [(C_{13} + C_{33}) \cos 3\vartheta - (C_{13} - 3C_{33}) \cos \vartheta - 2C_{14} \sin^3 \vartheta],$$

$$R_4 = \frac{C_{14}}{8} [3(C_{33} + C_{13} - C_{11} - C_{12}) + 4(C_{33} + C_{11} + C_{12}) \cos 2\vartheta - (3C_{13} + C_{11} + C_{12} - C_{33}) \cos 4\vartheta - 16C_{14} \cos \vartheta \sin^3 \vartheta],$$

$$R_5 = \frac{C_{14}}{2} [(C_{13} - C_{33}) \cos 2\vartheta - (C_{13} + C_{33}) \cos 4\vartheta + 4C_{14} \cos \vartheta \sin^3 \vartheta],$$

a_s, c_s и a_f, c_f — параметры гексагональной ячейки подложки и пленки, соответственно, $a_f = 4.997 \text{ \AA}$,

$c_f = 13.447 \text{ \AA}$ (для $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$) [19] и $a_s = 4.759 \text{ \AA}$, $c_s = 12.991 \text{ \AA}$ (для $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$) [18]. В случае $C_{14} = 0$ формулы (5)–(10) принимают тот же вид, что и для материалов с гексагональной структурой [25]. Таким образом, для расчета энергии взаимодействия W_{int} необходимо подставить в выражение (4) соответствующие компоненты тензора напряжений несоответствия (5)–(9).

Отметим, что подход, предложенный в работе [23], позволяет определить напряженно-деформированное состояние в гетероструктуре $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с учетом не только угла ϑ , но и азимутального угла ϕ . Нами в работе [24] проанализирован частный случай: $\phi = 0^\circ$. Однако, как было показано в работе [26] на примере пленок $\alpha\text{-(Al}_{0.9}\text{Ga}_{0.1})_2\text{O}_3$, полученных на подложке $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с различными плоскостями роста: $(1\bar{1}02)$ при $\phi = -30^\circ$ и $(10\bar{1}2)$ при $\phi = 30^\circ$, учет азимутально угла ϕ приводит к незначительным изменениям в поле упругих деформаций пленки (не более 7%). В недавней работе [27] приведены аналитические формулы для тензора деформаций в частном случае, когда рассматривалась гетероструктура $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ с $\vartheta = \phi = 90^\circ$.

Вспомогательные углы β , ψ и φ , входящие в соотношения (3) и (4) для ДНБС и ДНПС, показанные на рис. 2, определяются по следующими формулам (согласно порядку следования на рис. 2):

$$\beta = \frac{\pi}{2} + \arccos \sqrt{\frac{3}{3 + \cos^2 \vartheta}},$$

$$\psi = \arcsin \frac{2 \cos \vartheta}{\sqrt{3 + \cos^2 \vartheta}}, \quad \varphi = \frac{\pi}{2} + \psi. \quad (11)$$

$$\beta = 0, \quad \varphi = \frac{2\pi}{3}, \quad \psi = \frac{\pi}{2}. \quad (12)$$

$$\beta = \frac{\pi}{2} - \arccos \frac{1}{\sqrt{1 + 3 \cos^2 \vartheta}},$$

$$\psi = \arcsin \frac{2 \cos \vartheta}{\sqrt{1 + 3 \cos^2 \vartheta}}, \quad \varphi = \frac{\pi}{2} + \psi. \quad (13)$$

$$\beta = 0, \quad \varphi = \frac{5\pi}{6}, \quad \psi = \frac{\pi}{2}. \quad (14)$$

$$\beta = \frac{\pi}{2}, \quad \psi = \frac{\pi}{2} - \vartheta, \quad \varphi = \vartheta. \quad (15)$$

$$\beta = 0, \quad \varphi = \frac{\pi}{2}, \quad \psi = \frac{\pi}{2}. \quad (16)$$

Таким образом, найдены все неизвестные величины, входящие в неравенство (2), и необходимые для определения критических условий релаксации напряжений несоответствия в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$.

4. Обсуждение результатов

Исследование влияние константы C_{14} на релаксацию напряжений несоответствия в гетероструктурах $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ было проведено на основе зависимостей критической толщины пленки h_c образования

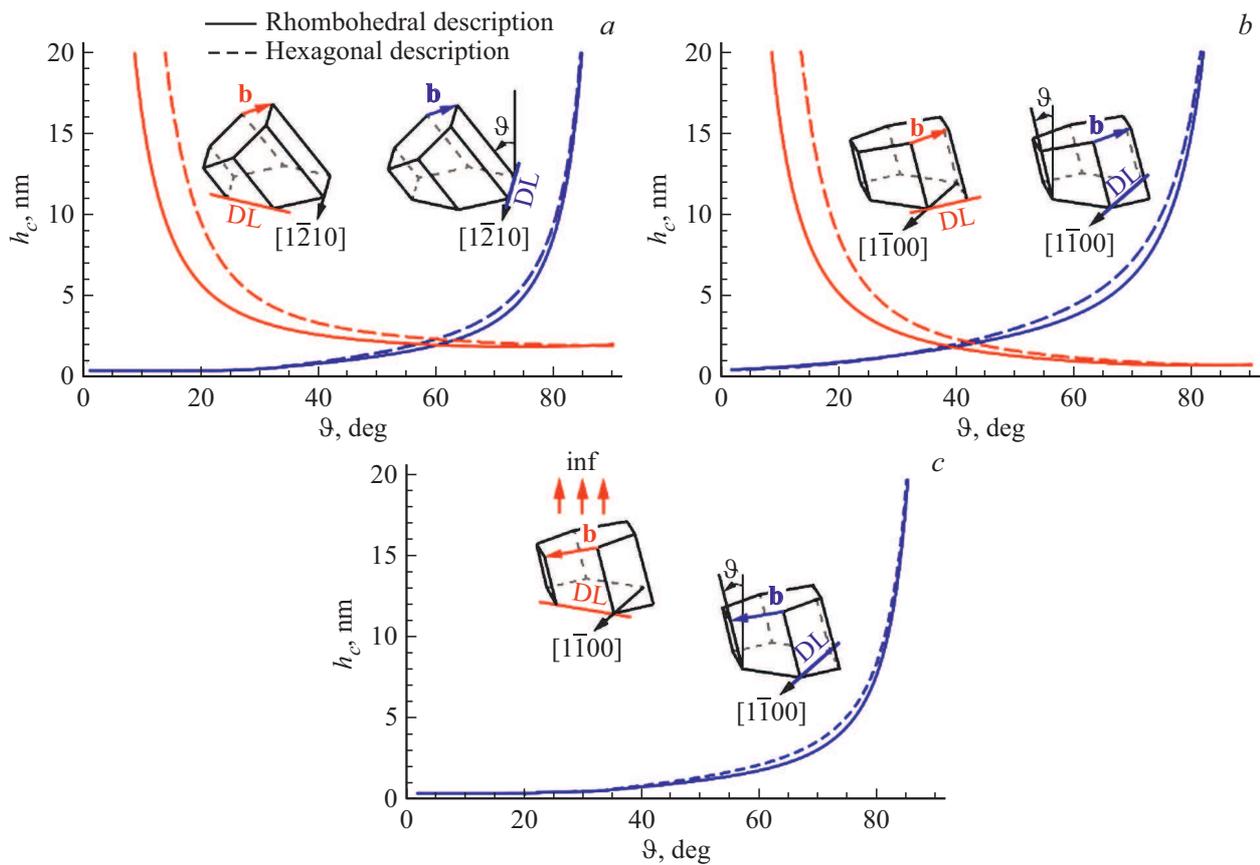


Рис. 3. Зависимости критической толщины h_c от угла ϑ для гетероструктур $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Гетероструктуры типа $\langle 1\bar{1}210 \rangle$ (a) и $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ (b, c). Синие и красные кривые соответствуют ДНБС и ДНПС соответственно. Сплошные кривые соответствуют ромбоэдрическому способу описания ($C_{14} \neq 0$), а пунктирные кривые — гексагональному ($C_{14} = 0$). Вставки на рисунке показывают гексагональную геометрию ячейки с вектором Бюргерса \mathbf{b} и линией дислокации DL. (Рис. в цвете см. в электронной версии журнала).

ДНБС или ДНПС от угла ϑ [28]. Критическая толщина h_c может быть получена из выражения (2) путем приравнивания его левой части нулю. Данные зависимости $h_c(\vartheta)$ прежде всего интересны с практической точки зрения, поскольку позволяют теоретически предсказать критические параметры гетероструктуры при образовании ДН, которые легко сравнить с экспериментальными данными.

На рис. 3 изображены зависимости критической толщины h_c от угла ϑ для гетероструктур $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Зарождение ДН становится энергетически выгодным при толщинах пленки больших критических и соответствует областям на графиках, расположенным выше построенных кривых. Сплошные кривые соответствуют ромбоэдрическому способу описания, когда константа C_{14} не равна нулю ($C_{14} \neq 0$), а пунктирные — гексагональному, когда константа C_{14} равна нулю ($C_{14} = 0$). Красные кривые соответствуют образованию ДНПС, синие — ДНБС. Как видно из рис. 3 в случае ДНБС кривые достаточно хорошо совпадают в обоих описаниях. В случае ДНПС различия между описаниями тем сильнее, чем ближе ориентация пленки к полярной ($\vartheta \rightarrow 0^\circ$).

Подчеркнем, что зарождение ДНПС в гетероструктуре с полярной ориентацией пленки ($\vartheta = 0^\circ$) одинаково невыгодно в обоих описаниях.

Из рис. 3 видно, что при определенных критических значениях угла ϑ_c возможна смена механизмов релаксации напряжений несоответствия. Так, например, для случая, изображенного на рис. 3, a, $\vartheta_c \sim 60^\circ$ для обоих описаний. При $\vartheta < \vartheta_c$ более выгодно зарождение ДНБС, а при $\vartheta > \vartheta_c$ — наоборот, более выгодно зарождение ДНПС. В случае, изображенном на рис. 3, b, критическое значение угла ϑ для ромбоэдрического описания примерно равно $\vartheta_c \sim 39^\circ$, а для гексагонального $\vartheta_c \sim 42^\circ$. Также из рис. 3 видно, что зарождение ДН энергетически выгодно для достаточно тонких пленок, в частности для пленок толщиной в несколько межатомных расстояний. Прежде всего это связано с высоким уровнем напряжений несоответствия в рассматриваемой гетероструктуре. В работе [24] было показано, что уровень деформаций в гетероструктуре $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ примерно в два раза выше, чем в гетероструктуре $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$. Образование ДНПС в конфигурации, изображенной на рис. 3, c, невыгодно, поскольку в этом

Сравнение результатов теоретических расчетов с экспериментальными данными

Гетероструктура	Плоскость подложки*	Экспериментально зафиксированная толщина пленки h , nm	Теоретически рассчитанная критическая толщина пленки h_c , nm	Присутствие ДН	Источник
α -Ga ₂ O ₃ / α -Al ₂ O ₃	(0001)	4500	0.5	да	[29]
	(0001)	686	0.5	да	[30]
	(0001)	350	0.5	да	[31]
	(0001)	35–90	0.5	да	[32]
	(10 $\bar{1}2$)	1	1.8	нет	[33]

Примечание. * Плоскость подложки, на которой осуществлялся рост пленки. Зарождение ДН энергетически выгодно, если толщина пленки превышает критическую толщину $h > h_c$.

случае винтовая компонента ДН, которая не вносит вклад в релаксацию, превалирует над краевой [21].

5. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными

Экспериментальные данные свидетельствуют о присутствии ДНБС с вектором Бюргера $[\bar{1}\bar{1}20]$ и линией дислокации $[1\bar{1}00]$ в гетероструктуре α -Ga₂O₃/ α -Al₂O₃ с толщиной пленки 4.5 μ m [29]. Также ДН наблюдались в гетероструктурах α -Ga₂O₃/ α -Al₂O₃ с толщиной пленки 686 nm [30], 350 nm [31] и 35–90 nm [32]. Значения толщин пленок α -Ga₂O₃, наблюдаемые экспериментально, лежат выше соответствующих кривых, изображенных на рис. 3, с, что согласуется с теоретическими расчетами и указывает на справедливость построенных моделей. Кроме того, как было отмечено ранее, зарождение ДНПС в конфигурации, изображенной на рис. 3, с, энергетически невыгодно. Присутствие этих ДНПС не было зафиксировано и экспериментально даже в достаточно толстых пленках 4.5 μ m. С другой стороны, в работе [33] сообщается о бездислакационном росте сверхрешетки α -Ga₂O₃/ α -Al₂O₃ с когерентными границами, полученной на r -плоскости сапфира с ~ 1 nm слоем α -Ga₂O₃ и ~ 8 nm слоем α -Al₂O₃. Расчеты в рамках нашей модели показывают, что зарождение ДН возможно при толщине пленки больше, чем 1.8 nm (см. рис. 3, а при $\vartheta = 57^\circ$), что также свидетельствует об адекватности построенной модели. Сравнение экспериментальных данных и результатов теоретических расчетов суммировано в таблице.

6. Заключение

Нами предложена теоретическая модель релаксации напряжений несоответствия путем зарождения дислокаций несоответствия в результате базисного (ДНБС) или призматического (ДНПС) скольжения в гетероструктурах α -Ga₂O₃/ α -Al₂O₃ типа пленка/подложка с учетом анизотропии материалов гетероструктуры и различной кристаллографической ориентации пленки. Показано, что существует некоторое критическое значение угла ϑ

между осью c и направлением роста пленки, которое отвечает за смену механизмов релаксации напряжений несоответствия: ДНБС должны смениться на ДНПС. Это означает, что для направлений роста пленки близких к критическим возможна двухосная релаксация напряжений несоответствия в гетероструктурах α -Ga₂O₃/ α -Al₂O₃.

Установлено, что константа C_{14} практически не влияет на критические условия релаксации напряжений несоответствия путем образования ДНБС. В случае образования ДНПС в гетероструктурах близких к полярной ориентации, учет этой константы может существенно влиять на критические условия релаксации, однако вклад константы C_{14} в релаксацию путем образования ДНПС в гетероструктурах близких к неполярной ориентации пренебрежимо мал. Исходя из того, что в гетероструктурах близких к полярной ориентации зарождение ДНБС энергетически выгоднее зарождения ДНПС следует, что учет константы C_{14} в рассмотренных моделях релаксации в гетероструктурах α -Ga₂O₃/ α -Al₂O₃ излишен.

В заключение отметим, что существующие на данный момент экспериментальные данные о наблюдении дислокаций несоответствия в гетероструктурах α -Ga₂O₃/ α -Al₂O₃ согласуются с результатами теоретических расчетов.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-79-00349).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] А.А. Лебедев, В.Е. Челноков. ФТП **33**, 9, 1096 (1999).
- [2] Т.В. Бланк, Ю.А. Гольдберг. ФТП **37**, 9, 1025 (2003).
- [3] J. Millan, P. Godignon, X. Perpina, A. Perez-Tomas, J. Rebollo. IEEE Trans. Power Electron. **29**, 5, 2155 (2014).
- [4] M. Kim, J.-H. Seo, U. Singiseti, Z. Ma. J. Mater. Chem. C **5**, 33, 8338 (2017).

- [5] M.A. Mastro, A. Kuramata, J. Calkins, J. Kim, F. Ren, S.J. Pearton. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* **6**, 5, P356 (2017).
- [6] S.I. Stepanov, V.I. Nikolaev, V.E. Bougrov, A.E. Romanov. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **44**, 63 (2016).
- [7] S.J. Pearton, J. Yang, P.H. Cary, F. Ren, J. Kim, M.J. Tadjer, M.A. Mastro. *Appl. Phys. Rev.* **5**, 011301 (2018).
- [8] J. Zhang, J. Shi, D.-C. Qi, L. Chen, K.H.L. Zhang. *APL Mater.* **8**, 2, 020906 (2020).
- [9] M. Oda, R. Tokuda, H. Kambara, T. Tanikawa, T. Sasaki, T. Hitora. *Appl. Phys. Express* **9**, 021101 (2016).
- [10] K. Shiojima, H. Kambara, T. Matsuda, T. Shinohe. *Thin Solid Films* **685**, 17 (2019).
- [11] T. Maeda, M. Okigawa, Y. Kato, I. Takahashi, T. Shinohe. *AIP Adv.* **10**, 12, 125119 (2020).
- [12] W.H. Zachariasen. *Vid. Akad. Skr. Oslo* **4**, 1 (1928).
- [13] M. Marezio, J.P. Remeika. *J. Chem. Phys.* **46**, 5, 1862 (1967).
- [14] C.-T. Lee, H.-W. Chen, H.-Y. Lee. *Appl. Phys. Lett.* **82**, 24, 4304 (2003).
- [15] P. Li, H. Shi, K. Chen, D. Guo, W. Cui, Y. Zhi, S. Wang, Z. Wu, Z. Chen, W. Tang. *J. Mater. Chem. C* **5**, 40, 10562 (2017).
- [16] М.Ю. Гуткин, А.М. Смирнов. *ФТТ* **58**, 8, 1558 (2016).
- [17] M.L. Kronberg. *Acta Met.* **5**, 9, 507 (1957).
- [18] W.E. Lee, K.P.D. Lagerlof. *J. Electron Microsc. Tech.* **2**, 3, 247 (1985).
- [19] J. Furthmüller, F. Bechstedt. *Phys. Rev. B* **93**, 115204 (2016).
- [20] A.M. Smirnov, E.C. Young, V.E. Bougrov, J.S. Speck, A.E. Romanov. *APL Mater.* **4**, 1, 016105 (2016).
- [21] A.M. Smirnov, E.C. Young, V.E. Bougrov, J.S. Speck, A.E. Romanov. *J. Appl. Phys.* **126**, 245104 (2019).
- [22] M.M. Savin, V.M. Chernov, A.M. Stroková. *Phys. Status Solidi* **35**, 2, 747 (1976).
- [23] M. Grundmann. *J. Appl. Phys.* **124**, 18, 185302 (2018).
- [24] A.M. Smirnov, A.V. Kremleva, S.S. Sharofidinov, V.E. Bougrov, A.E. Romanov. *Appl. Phys. Exp.* **13**, 7, 075502 (2020).
- [25] A.E. Romanov, T.J. Baker, S. Nakamura, J.S. Speck. *J. Appl. Phys.* **100**, 2, 023522 (2006).
- [26] M. Grundmann, M. Lorenz. *APL Mater.* **8**, 2, 021108 (2020).
- [27] M. Grundmann. *Phys. Status Solidi* **257**, 12, 2000323 (2020).
- [28] J.W. Matthews, A.E. Blakeslee. *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).
- [29] T.C. Ma, X.H. Chen, Y. Kuang, L. Li, J. Li, F. Kremer, F.-F. Ren, S.L. Gu, R. Zhang, Y.D. Zheng, H.H. Tan, C. Jagadish, J.D. Ye. *Appl. Phys. Lett.* **115**, 182101 (2019).
- [30] Y. Cheng, Y. Xu, Z. Li, J. Zhang, D. Chen, Q. Feng, S. Xu, H. Zhou, J. Zhang, Y. Hao, C. Zhang. *J. Alloys Compd.* **831**, 154776 (2020).
- [31] Y. Yao, S. Okur, L.A.M. Lyle, G.S. Tompa, T. Salagaj, N. Sbrockey, R.F. Davis, L.M. Porter. *Mater. Res. Lett.* **6**, 5, 268 (2018).
- [32] K. Kaneko, H. Kawanowa, H. Ito, S. Fujita. *Jpn. J. Appl. Phys.* **51**, 020201 (2012).
- [33] T. Oshima, Y. Kato, M. Imura, Y. Nakayama, M. Takeguchi. *Appl. Phys. Express* **11**, 065501 (2018).

Редактор Т.Н. Василевская