

IDENTIFICAÇÃO DOS MECANISMOS DE ALÍVIO
DE TENSÕES NO SISTEMA $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

P. R. F. Ribas, V. Krishnamoorthy[†] e R. M. Park[†]

Instituto Militar de Engenharia - SE/4
Dept of MSE - University of Florida

RESUMO:

Camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ foram depositadas em substratos de (100) GaAs pelo método da epitaxia por feixe molecular. A composição dessas camadas variou na faixa entre $x = 0.07$ e $x = 0.50$, tendo sua espessura sido sempre muito superior à espessura crítica. Análise por microscopia eletrônica de transmissão em seções transversais revelou três tipos distintos de comportamento no alívio de tensões causadas pela diferença na constante de rede cristalina do substrato e da camada epitaxial. Sabe-se que o mecanismo básico de alívio de tensões ocorre pela geração de discordâncias na interface entre o substrato e a camada epitaxial. Verificou-se, no entanto, que para valores de $x \leq 0.16$, parte dessas discordâncias propagou-se para o substrato de GaAs. Materiais com $0.18 \leq x \leq 0.28$ apresentaram discordâncias tanto no substrato como na camada epitaxial. Em camadas com $x > 0.28$, ocorreu propagação de discordâncias somente na camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

1. INTRODUÇÃO

A liga ternária $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ tem uma variedade de aplicações potenciais em dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos tais como transistores de efeito de campo (FET) e lasers de diodo [1,2]. Entretanto, devido à diferença relativamente grande entre as constantes de rede cristalina desse material e de GaAs, o sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ tem recebido atenção apenas no que concerne ao crescimento epitaxial de super-redes de camadas tensionadas desses materiais. Tais estruturas consistem em camadas alternadas extremamente finas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ e GaAs [3,4], de modo a não serem gerados

defeitos cristalinos decorrentes da diferença nas constantes de rede. Tal diferença resulta em pequenos valores para a espessura crítica (h_c) mesmo para pequenos valores de x , como por exemplo, $h_c \approx 200 \text{ \AA}$ para $x = 0.1$ [5].

No presente trabalho, são discutidos os mecanismos de alívio de tensões que ocorrem no sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, na faixa de composições compreendendo $x = 0.07$ até 0.5. Análises por microscopia eletrônica de transmissão revelaram que camadas epitaxiais relativamente espessas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ podem se apresentar livres de discordâncias até uma composição "crítica" compreendida entre $x = 0.16$ e 0.18.

2. PROCEDIMENTOS EXPERIMENTAIS

As camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ foram depositadas em substratos de (100) GaAs semi-isolantes, num sistema de epitaxia por feixe molecular Varian GEN II. Os substratos foram preparados utilizando-se a técnica de luz ultravioleta e exposição ao ozônio com a remoção dos óxidos formados sendo efetuada dentro do sistema [6]. Antes do crescimento das camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, uma camada de 0.5 μm de GaAs foi depositada a 600°C. Camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ foram, então, depositadas, tendo as seguintes composições, uma para cada amostra: $x = 0.07, 0.12, 0.16, 0.18, 0.21, 0.28, 0.37$ e 0.5. A temperatura do substrato, durante o crescimento, foi mantida a 520°C para composições da liga igual a $x = 0.07$ e 0.12, a 500°C para $x = 0.16$ e 0.18 e 440°C para $x > 0.18$. A composição das camadas epitaxiais de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ foi determinada através de análise de difração de raios-X.

Análises das seções transversais de amostras foram realizadas num microscópio eletrônico de transmissão JEOL 200CX. As amostras foram preparadas por polimento mecânico até uma espessura aproximada de 50 μm , seguida de desbaste por moinho iônico de Ar.

3. RESULTADOS EXPERIMENTAIS E DISCUSSÃO

Observou-se que os processos de alívio de tensões são distintos para cada faixa de composição estudada. As camadas epitaxiais de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ foram classificadas em três categorias, em função da composição, definida por x, a fração molar de InAs:

x = 0.07 - 0.16, camadas com pequeno teor de índio;

x = 0.18 - 0.28, camadas com teor médio de índio;

x = 0.37 - 0.50, camadas com alto teor de índio.

Análise de seções transversais por microscopia eletrônica de transmissão (MET) em amostras com baixo teor de índio não revela presença de discordâncias nas camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, embora se observe que a relaxação das tensões provocadas pelas diferentes constantes de rede ocorre pela geração de discordâncias na interface entre as camadas epitaxiais de GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (figura 1). Parte dessas discordâncias propaga-se através da camada de GaAs, conforme indica a figura 2. Análise de camadas com teor médio de índio revela a propagação das discordâncias nas camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (figura 3). Uma grande densidade de discordâncias é observada em camadas com alto teor de índio (figura 4) e, em contrapartida, observa-se ausência de discordâncias na camada de GaAs.

Conforme se observa nas figuras 1 e 2, as discordâncias em camadas com pequeno teor de índio são nucleadas na interface $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Parte destas discordâncias propaga-se para a camada de GaAs devido ao fato de GaAs ter menor módulo de cisalhamento que $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. O pequeno número de discordâncias que inicia sua propagação na camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ experimenta tensões

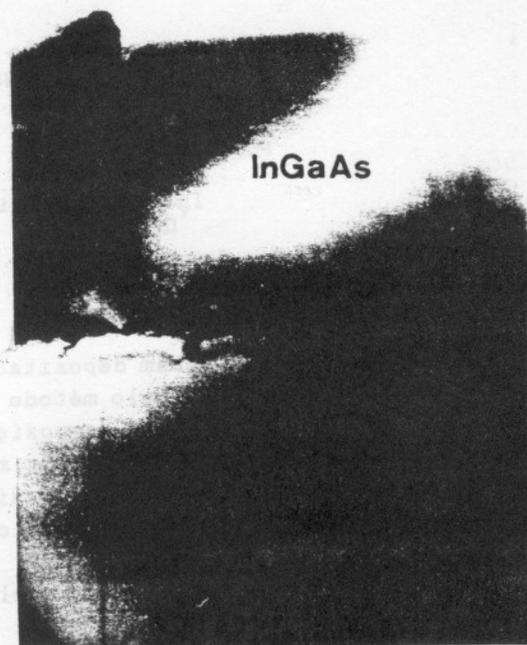


Figura 1. Micrografia da interface $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}/\text{GaAs}$ mostrando discordâncias geradas na interface e ausência de discordâncias na camada de InGaAs.

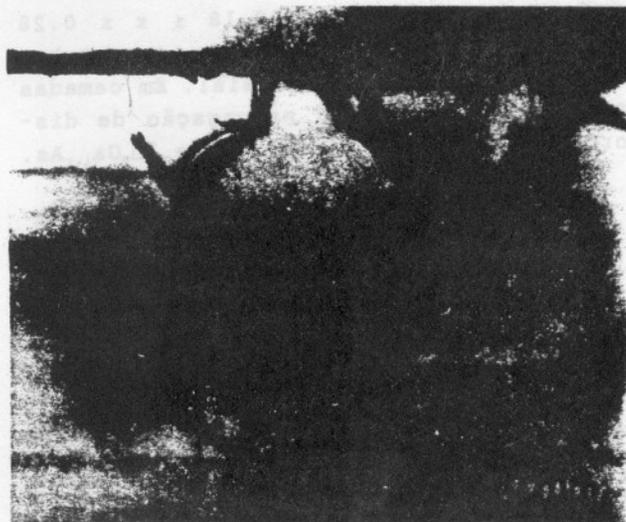


Figura 2. Camada "buffer" de GaAs numa heteroestrutura de $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}/\text{GaAs}$ apresentando discordâncias geradas na interface e propagadas através da camada de GaAs.

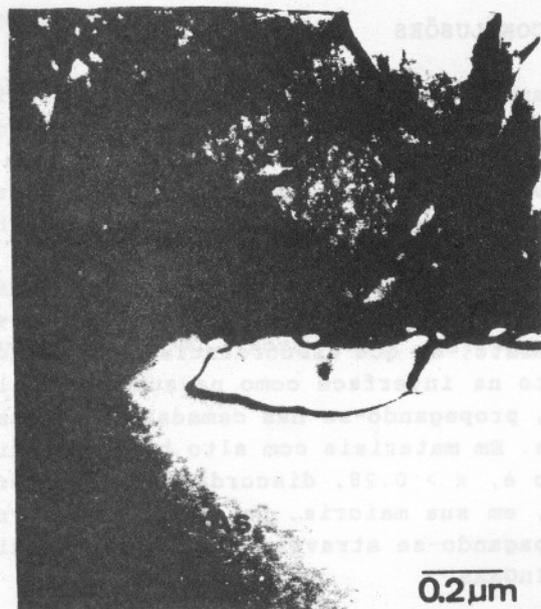


Figura 3. Camadas de $\text{In}_{0.21}\text{Ga}_{0.79}\text{As}$ e GaAs mostrando discordâncias originadas tanto na interface InGaAs/GaAs como na superfície livre.

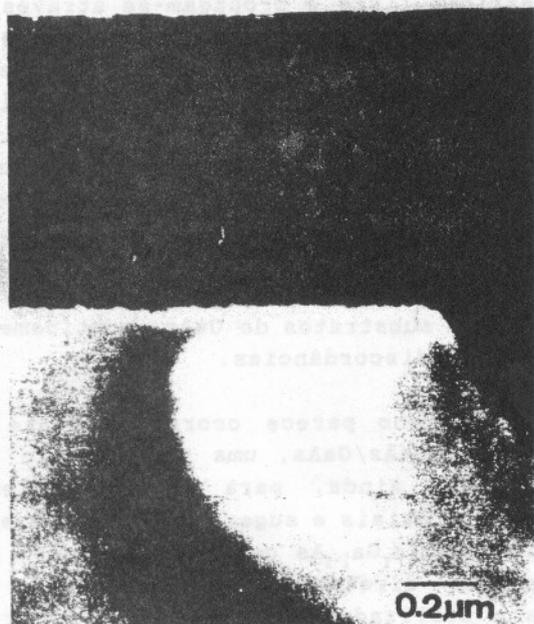


Figura 4. Camada epitaxial de $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ crescida em substrato de GaAs, apresentando uma alta densidade de discordâncias originárias, em sua maioria, da superfície livre.

compressivas bi-axiais em planos paralelos à interface e, em consequência, é repellido em direção às regiões laterais do material. As tensões compressivas na camada de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ originam-se do fato deste material possuir constante de rede maior que a do substrato de GaAs. O mecanismo de alívio de tensões predominante em camadas de pequeno teor de índio é a formação de discordâncias na interface e a deformação plástica da camada de GaAs pela propagação de parte dessas discordâncias nesta camada.

Discordâncias em camadas com teor médio de índio parecem nuclear-se tanto na interface $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ como na superfície livre de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. A nucleação de discordâncias na superfície é observada na figura 5. GaAs deforma-se inicialmente devido ao seu menor módulo de cisalhamento, fato que explica a observação de discordâncias na camada de GaAs. Entretanto, o alívio de tensões que ocorre por deformação plástica da camada de GaAs é insuficiente para neutralizar a deformação na rede cristalina de InGaAs, progressivamente maior devido ao aumento na espessura de InGaAs durante o crescimento desta camada. Desta forma, uma tensão crítica é atingida quando, então, discordâncias são nucleadas na superfície livre da camada de InGaAs. O alívio de tensões em camadas de teor médio de índio é devido a ambos os mecanismos, ou seja, formação de discordâncias na interface seguida de deformação plástica na camada de GaAs e propagação de discordâncias na camada de InGaAs, originadas na superfície livre.

Discordâncias em camadas de alto teor de índio parecem nuclear-se predominantemente na superfície livre. Durante os primeiros estágios do crescimento da camada de InGaAs, algumas discordâncias são geradas na interface. Entretanto, tais discordâncias experimentam forte atração exercida pelas forças de imagem associadas à proximidade da superfície livre, em decorrência dos pequenos valores da espessura crítica e, em consequência, propagam-se para aquela superfície. Este fato explica a ausência de discordâncias na camada de GaAs.

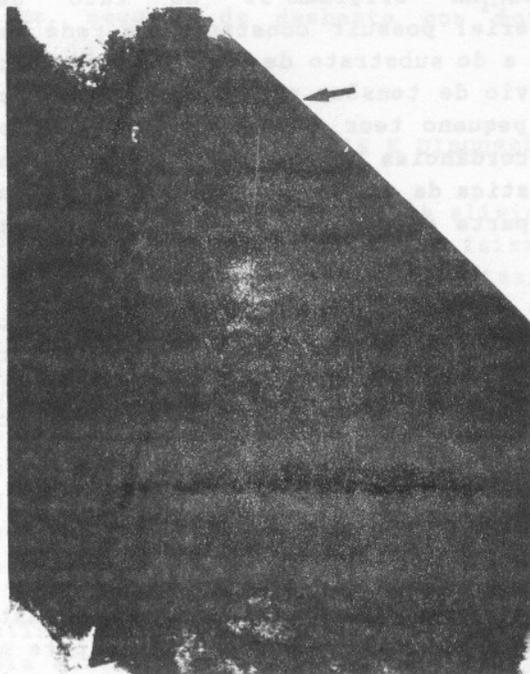


Figura 5. Camada de $\text{In}_{0,22}\text{Ga}_{0,78}\text{As}$ indicando a presença de discordâncias nucleadas na superfície livre e propagando-se através da camada epitaxial. A seta indica a superfície de crescimento do filme de InGaAs.

Como a espessura da camada de InGaAs aumenta progressivamente com o crescimento epitaxial, a tensão crítica necessária à nucleação superficial de discordâncias é atingida resultando, a seguir, na propagação dessas discordâncias em direção à interface InGaAs/GaAs. Desta forma, o alívio de tensões em camadas de alto teor de índio ocorre predominantemente pela geração das discordâncias na interface e superfície livre e sua propagação na camada de InGaAs.

4. CONCLUSÕES

Foram identificados três processos distintos de alívio de tensões durante o crescimento de camadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ em GaAs. O alívio de tensões, para $x \leq 0.16$, ocorre via deformação plástica da camada e substrato de GaAs, permanecendo a camada de InGaAs praticamente livre de discordâncias. Para x até ≈ 0.28 , ocorre um processo misto, em que discordâncias são geradas tanto na interface como na superfície livre, propagando-se nas camadas de InGaAs e GaAs. Em materiais com alto teor de índio, isto é, $x > 0.28$, discordâncias são geradas, em sua maioria, na superfície livre, propagando-se através da camada epitaxial de InGaAs.

Baseando-se na compreensão dos mecanismos acima descritos, é apropriado introduzir-se, aqui, o conceito de "composição crítica", definindo-se tal composição como o teor mínimo de índio no composto ternário $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, dado pela fração molar x de InAs, no qual discordâncias formam-se na superfície livre e propagam-se através da camada epitaxial até a interface entre as camadas de InGaAs e GaAs. No presente trabalho, verificou-se que tal composição corresponde a um valor de x entre 0.16 e 0.18. Abaixo deste valor crítico, discordâncias não são geradas ou propagadas na camada de InGaAs, até a faixa de espessura estudada ($\approx 1 \mu\text{m}$), sendo possível crescer-se camadas relativamente espessas de InGaAs em substratos de GaAs, praticamente livres de discordâncias.

Este fenômeno parece ocorrer somente no sistema InGaAs/GaAs, uma vez que não foi reportado, ainda, para outros sistemas heteroepitaxiais e sugere que camadas epitaxiais de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ com $x < 0.16$ podem ser crescidas diretamente em substratos de GaAs e utilizadas como "buffers" no crescimento de outras camadas com constante de rede correspondente ou como primeiro estágio num sistema de estágios múltiplos de bloqueio de discordâncias a ser usado para produzir-se camadas de InGaAs com alto teor de índio, com qualidade adequada para dispositivos optoeletrônicos.

