

## МЕХАНИЗМ РЕЛАКСАЦИИ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ SiGe

О.Ю. Смирнова, В.Ф. Стельмах, Ю.М. Покотило, А.В. Мазаник, О.В. Королик, Д.И. Бринкевич  
Белорусский государственный университет,  
пр. Независимости, 4, Минск, 220050, Беларусь, pokotilo@bsu.by

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света исследовалась зависимость параметра решетки твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  ( $x = 0 - 0.123$ ) от их состава. Показано, что релаксация упругих напряжений в растворе, обусловленная заменой атомов кремния атомами германия, происходит путем изменения длин связей и угла между ними.

### Введение

Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) является экспрессной, информативной и неразрушающей методикой для определения оптических свойств и анализа состава твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  [1]. Однако на положение пиков КРС существенное влияние оказывают механические напряжения, связанные с несоответствием ковалентных радиусов атомов германия и кремния [2, 3]. В настоящей работе исследуется механизм релаксации напряжений.

### Методика эксперимента

Исследования проводились на объемных монокристаллических образцах твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  ( $x = 0 - 0.123$ ), выращенных методом электронно-лучевой плавки. Спектры КРС записывались при комнатной температуре с помощью Nanofinder High End (Lotis TII) – микрорамановского спектрометра, совмещенного с 3D сканирующим конфокальным микроскопом. Регистрация спектров осуществлялась по схеме обратного рассеяния, разрешение спектрометра составляло  $0.3 \text{ см}^{-1}$ . Подводимая к образцу мощность составляла 2 мВт, а диаметр возбуждающего пучка – около 1 мкм. Использовалось возбуждение излучением твердотельного лазера с длиной волны 532 нм.

### Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис. 1а представлен спектр комбинационного рассеяния света практически в чистом кремнии с небольшой долей ( $x = 0.012$ ) примеси германия. Видно, что в этом случае доминирует однофононный пик, обусловленный колебаниями связи Si=Si вблизи  $520 \text{ см}^{-1}$ .

С другой стороны при увеличении содержания германия спектр КРС трансформируется (рис. 1б) начинает доминировать пик вблизи  $300 \text{ см}^{-1}$ , обусловленный колебаниями на связи Ge=Ge, резко уменьшается амплитуда пика Si=Si и появляется новый пик вблизи  $400 \text{ см}^{-1}$ , связанный с колебаниями на связи Ge=Si. Однако следует отметить, что по мере увеличения доли X однофононные пики Si=Si и Ge=Ge плавно смещаются в область более низких частот, а пик Ge=Si в область более высоких частот. Действительно, на рис. 2 представлена эта зависимость для пика Si=Si, из которой видно, что частота пика уменьшается от  $519.64 \text{ см}^{-1}$  до

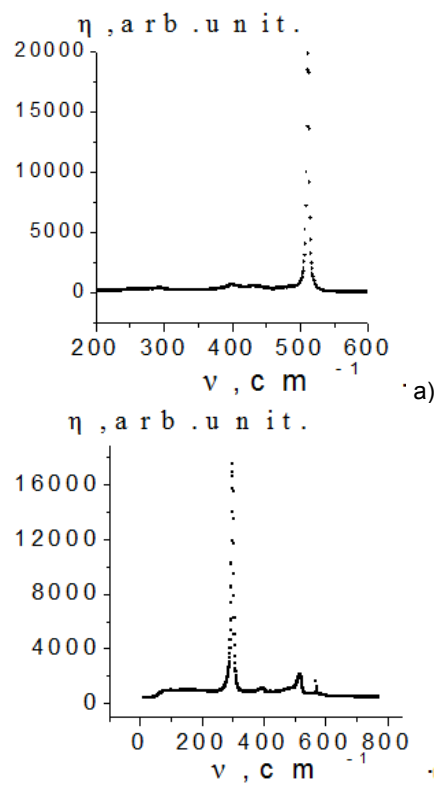


Рис. 1. Спектры КРС в твердом растворе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ : а -  $x = 0.012$ ; б -  $x = 0.94$ .

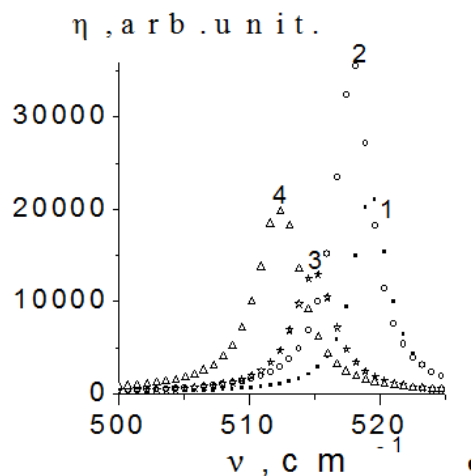


Рис. 2. Смещение пика Si=Si в зависимости от содержания германия X в твердом растворе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ . X: 1 - 0.0058, 2 - 0.029, 3 - 0.076, 4 - 0.123.

512.36 см<sup>-1</sup> в диапазоне изменения  $X = (0.0058-0.123)$ . Зависимость частоты пика от  $X$  может быть объяснена в модели ангармонического кристалла за счет изменения длины связи между атомами при релаксации решетки в процессе образования твердого раствора. Действительно, в ангармоническом приближении следует учитывать, что возвращающая сила не подчиняется закону Гука, а нелинейно зависит от смещения в соответствии с выражением:

$$F = -\beta \cdot x + \gamma \cdot x^2.$$

Тогда для частоты максимума пика можно получить соотношение:

$$\Delta\omega/\omega = \gamma(x-x_0)/\beta,$$

из которого видно, что только в ангармоническом приближении, когда величина  $\gamma$  не равна нулю будет наблюдаться изменение частоты пика при изменении длины связи.

В рассмотренном приближении ангармонического кристалла может быть получено соотношение Грюнайзена:

$$(\omega_0 / \omega) = (V / V_0)^{\alpha},$$

где  $V_0$  - объем недеформированной элементарной ячейки,  $V$  - объем элементарной ячейки в твердом растворе,  $\omega_0$  - частота оптического фонона в объемном недеформированном материале,  $\omega$  - частота оптического фонона того же материала в твердом растворе,  $\alpha$  - параметр Грюнайзена. Для германия эти параметры имеют следующие значения:  $\alpha$  (постоянная решетки) = 0,56579 нм;  $\alpha = 1.12$ ;  $\omega_0 = 300$  см<sup>-1</sup>; для кремния -  $\alpha = 5.388$  ангстрем;  $\alpha = 1,0$ ;  $\omega_0 = 520$  см<sup>-1</sup>. Из данных рис. 3 на основании соотношения Грюнайзена может быть найдена зависимость постоянной решетки в твердом растворе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  от  $X$ , которая представлена на рис. 3. Сплошной линией на этом рисунке приведен линейный закон Вегарда:

$$a = a_{\text{Si}}(1-X) + a_{\text{Ge}} \cdot X.$$

Как известно [4, 5], кристаллический релаксированный раствор  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  при комнатной температуре является термодинамически стабильным случайным раствором. В связи с этим возникает вопрос о зависимости длин связей Si-Si, Si-Ge и Ge-Ge от состава.

В теории твердых растворов обычно рассматривают два предельных случая [5].

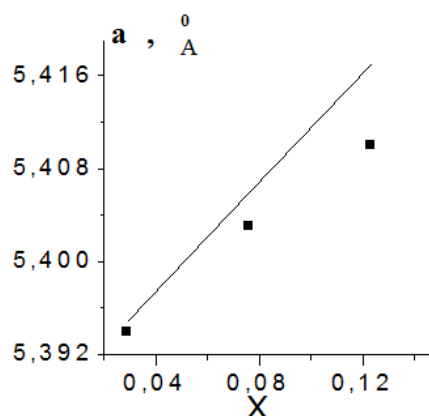


Рис. 3. Зависимость постоянной решетки твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  от  $X$ .

1. Длина связи между атомами есть величина постоянная, равная сумме радиусов составных элементов, и не зависит от состава, т.е. релаксация упругих напряжений происходит за счет незначительного искажения углов между связями (предел Паулинга).

2. Если энергетически более выгодно, длины связей изменяются с составом линейно, без искажения углов между связями (предел Вегарда).

Для определения вклада указанных механизмов снятия упругих напряжений, связанных с различием в размерах атомов, анализируется степень отклонения зависимости  $a = a(x)$  от линейной [5]. В нашем случае угол наклона экспериментальной зависимости можно оценить 0.65.

Таким образом, полученные результаты подтверждают, что релаксация упругих напряжений в  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  происходит как за счет изменения длин связей, так и угла между ними.

### Список литературы

1. Володин В.А., Ефремов М.Д., Дерябин А.С., Соколов Л.В. // ФТП. 2006. Т. 40. № 11. С. 1349.
2. Васин А.С., Вихров О.В., Василевский М.И. // Вестн. Нижегородского университета им Н.И.Лобачевского. 2011. № 5. С.62.
3. Wenli Z., Tinghui Li. // J. of Semiconductors. 2012. V. 33. № 11. P.112001.
4. Tzoumanekas C., Kelires P.C. // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. P. 193202.
5. Васин А.С. // Вестн. Нижегородского университета им. Н.И.Лобачевского. 2010. № 5. С. 371.

## MECHANISM OF RELAXATION OF ELASTIC STRESSES IN SiGe SOLID SOLUTIONS

O.Yu. Smirnova, G.F. Stelmakh, Yu.M. Pokotilo, A.V. Mazanik, O.V. Korolik, D.I. Brinkevich  
Department of Physics, Belarusian State University  
Nezavisimosti ave., 4, 220030 Minsk, Belarus, pokotilo@bsu.by

Dependence of the lattice parameter of solid solutions of  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  ( $x = 0 - 0.123$ ) on their composition has been investigated by Raman spectroscopy. It is shown that the relaxation of elastic stresses in the solution due to the replacement of silicon atoms of germanium atoms occurs by changing the bond lengths and angles between them.