

Гетероэпитаксия пленок $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x \sim 0.4-0.5$) на подложках $\text{Si}(001)$, отклоненных к (111) : формирование только коротких краевых дислокаций несоответствия в направлении отклонения

© Ю.Б. Болховитянов, А.С. Дерябин, А.К. Гутаковский, Л.В. Соколов

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
Новосибирск, Россия

E-mail: bolkhov@isp.ncs.ru

(Поступила в Редакцию 27 апреля 2009 г.
В окончательной редакции 27 мая 2009 г.)

Исследовалась релаксация механических напряжений несоответствия в эпитаксиальных пленках $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x \sim 0.4-0.5$), выращиваемых методом молекулярной эпитаксии на подложках Si, отклоненных от точной ориентации (001) на угол 6° . Рассмотрены возможные варианты наведенного зарождения и взаимодействия 60° дислокаций несоответствия (ДН), распространяющихся в направлении отклонения с образованием отрезков коротких краевых ДН, проведена их классификация и приведены экспериментально обнаруженные с помощью ПЭМ различные формы таких конфигураций. Показано, что образование коротких краевых ДН происходит по двум различным механизмам: *A* — коррелированное или наведенное зарождение комплементарной 60° дислокационной полупетли и затем образование отрезка краевой дислокации; *B* — образование 90° сегмента ДН при пересечении уже существующих комплементарных 60° ДН, скользящих в противоположно наклонных плоскостях $\{111\}$. Показана неэквивалентность взаимодействия 60° ДН, распространяющихся в противоположных направлениях вдоль направления отклонения подложки.

1. Введение

В ходе пластической релаксации пленок GeSi, выращиваемых на подложках Si (001), формируются в основном подвижные 60° дислокации несоответствия (ДН) с векторами Бюргерса (**b**) $a/2\langle 110 \rangle$ (a — параметр решетки), наклонными к гетерогранице. При скольжении двух 60° дислокаций по наклонным взаимно пересекающимся в плоскости гетерограницы плоскостям $\{111\}$ возможно их взаимодействие по реакциям, известным из теории дислокаций, например $a/2[\bar{1}01] + a/2[01\bar{1}] = a/2[\bar{1}10]$. Такие 60° дислокации были названы комплементарными [1]. В результате такой реакции по линии пересечения наклонных плоскостей $\{111\}$ (например, в направлении $[110]$) формируется чисто краевая ДН (или дислокация Ломера, L-MD), вектор Бюргерса которой перпендикулярен дислокационной линии и лежит в плоскости (001). При выращивании пленок с содержанием Ge 40–50% в большинстве случаев наблюдаемые краевые дислокации расположены точно в границе раздела пленка–подложка и обнаруживаются на начальных стадиях пластической релаксации. Это предполагает наличие механизмов их образования, не основанных на случайной встрече двух комплементарных 60° ДН.

Квам с соавторами [1] предложили как вариант зарождение комплементарной 60° дислокационной полупетли на поверхности тонкого слоя под воздействием поля напряжений уже существующей в границе раздела 60° ДН. Gosling [2] теоретически показал, что акт зарождения такой полупетли в районе уже существующей 60° ДН (с последующим превращением в 90° ДН) имеет существенно меньший энергетический барьер,

чем при зарождении одиночной дислокационной полупетли в отсутствие ДН. Назовем такой процесс механизмом наведенного зарождения комплементарной 60° ДН.

Если подложка отклонена от грани (001) вокруг оси $[\bar{1}10]$ так, как показано на рис. 1, то направление $[110]$ (вдоль которого образуются краевые дислокации) уже не лежит в границе раздела, а пересекает ее под углом отклонения. Поэтому длинные краевые ДН не могут существовать в направлении отклонения подложки, так как их окончания при удлинении дислокации удаляются от границы раздела. Нами ранее было показано [3,4], что на отклоненной подложке краевые ДН, лежащие в направлении отклонения, образуются на

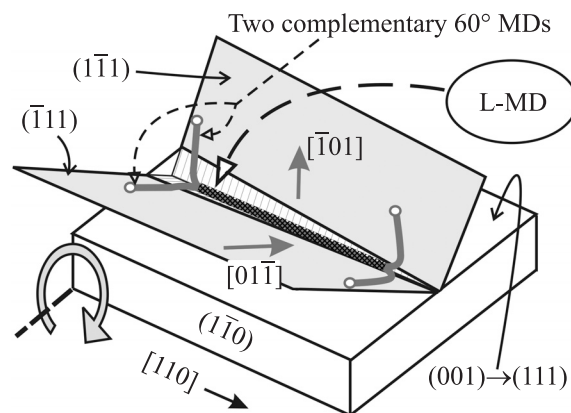


Рис. 1. Формирование короткой краевой ДН (L-MD) в направлении отклонения. 60° ДН, которые лежат на пересечениях наклонных плоскостей $\{111\}$ с подложкой, разделены на две подгруппы, распространяющиеся под углом друг к другу, как это видно из рис. 2 и 5.

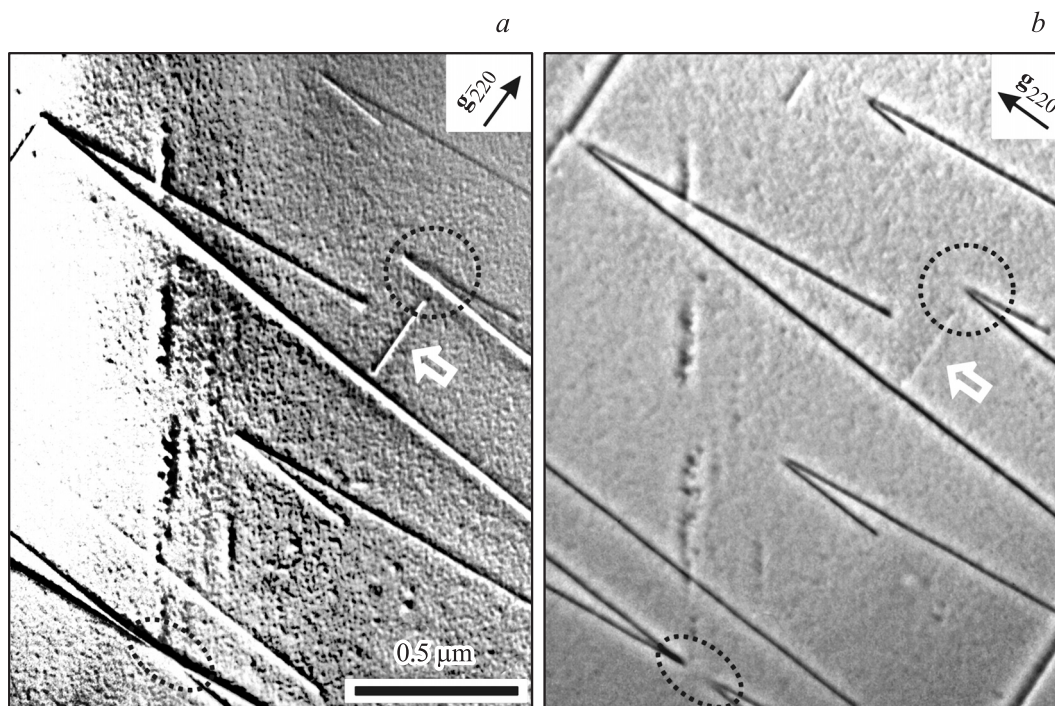


Рис. 2. Двухволновые темнопольные ПЭМ-изображения дислокационной сетки пленки Ge_xSi_{1-x}/Si с долей $x \sim 0.5$. Пунктирными овалом и окружностью выделены участок с перекрестием 60° ДН и один из Y -центров соответственно.

пересечениях 60° ДН, принадлежащих к разным подсистемам. Была также обнаружена дислокационная конфигурация (Y -центр), состоящая из короткого отрезка краевой ДН и расходящихся от него вдоль направления отклонения двух 60° ДН.

В настоящей работе рассмотрены возможные варианты наведенного зарождения и взаимодействия 60° ДН, распространяющихся в направлении отклонения с образованием отрезков краевых ДН, проведена их классификация и приведены экспериментально обнаруженные с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) различные формы таких конфигураций.

2. Методика эксперимента

Слои твердого раствора Ge_xSi_{1-x} $x \sim 0.4-0.5$ выращивались в установке молекулярно-лучевой эпитаксии „Катунь“. Подложки Si были отклонены на 6° вокруг оси (011) . Толщина пленок была около 20 nm , и поэтому они находились на начальной стадии пластической релаксации. Основные условия выращивания пленок $GeSi$ описаны в [5]. Тип структурных дефектов и их пространственное распределение изучались с помощью ПЭМ на микроскопе JEM-400EX. Изображения продольных срезов образцов анализировались по стандартной методике дифракционного анализа в режиме двухволновой дифракции с использованием условия погасания изображения дислокаций, когда $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$, где \mathbf{g} и \mathbf{b} — векторы дифракции и Бюргера соответственно.

3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Отклонение подложки от сингулярной грани (001) , приводя к расщеплению одной из систем, параллельных 60° ДН на две подсистемы пересекающихся ДН, позволило выявить новые особенности образования и зарождения ДН, как 60° , так и 90° . На отклоненной подложке краевые ДН, лежащие в направлении отклонения, образуются на пересечениях 60° ДН, принадлежащих к разным подсистемам. Обнаружена дислокационная конфигурация (Y -центр), состоящая из короткого отрезка краевой ДН и расходящихся от него вдоль направления отклонения двух 60° ДН. Обе конфигурации приведены на рис. 2. Отрезки краевых ДН, распространяющиеся в направлении отклонения и видимые на рис. 2, а,

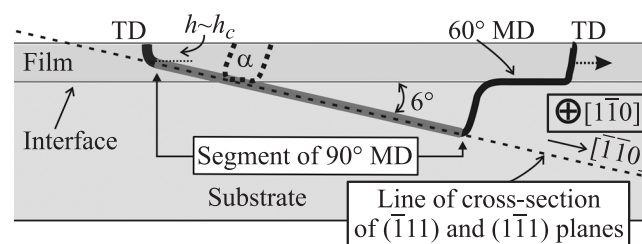


Рис. 3. Схема скольжения пронизывающих дислокаций (threading dislocations — TD), образующих сегмент краевой дислокации, распространяющейся в направлении $[110]$.

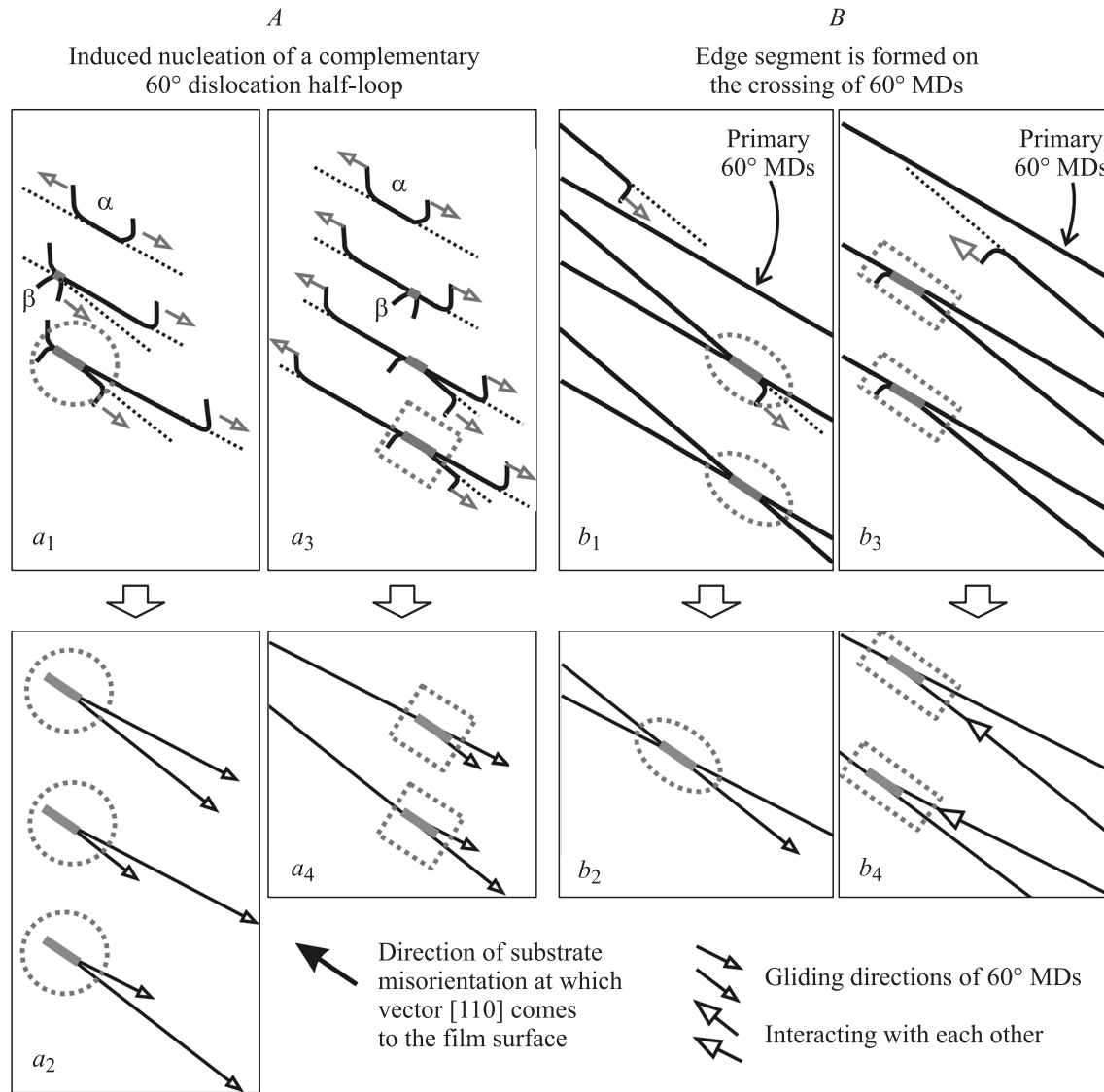


Рис. 4. Схемы зарождения 60° ДН, их скольжения и взаимодействия, при которых может наблюдаться формирование коротких краевых ДН в направлении отклонения. Стрелками показывают направления, в которых скользят 60° ДН. Внизу (варианты a_2, a_4 и b_3, b_4) показаны формы дислокационных конфигураций, соответствующие видимым на ПЭМ-изображениях пленок GeSi/Si.

становятся неконтрастными на рис. 2, *b* вследствие выполнения условия $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$. Это отчетливо видно на примере конфигурации, окаймленной пунктирным кругом. Короткая 60° ДН, распространяющаяся в направлении оси отклонения (отмечена светлой стрелкой) и видимая на обоих изображениях, может служить тестовым объектом для сравнения левого и правого изображений.

Формирование конфигурации, названной нами в [3] Y -центром, можно объяснить, взяв за основу предположение о коррелированном (одновременном) образовании комплементарных полупетель 60° ДН, которые формируют краевой отрезок ДН по приведенной выше реакции, либо наведенном образовании 60° полупетли вблизи уже существующей 60° ДН так, как ранее предположили Kvam с соавторами [1]. На рис. 3 представлена схема образования такой конфигурации. Комплементар-

ные полупетли 60° ДН (α на рис. 3) расширяется каждая в своей наклонной плоскости $\{111\}$ в противоположных направлениях, образуя на пересечении этих плоскостей в направлении $[\bar{1}\bar{1}0]$ отрезок краевой ДН. Так как это направление пересекает границу раздела пленка–подложка, то условия скольжения 60° дислокаций, тянущих за собой отрезок краевой ДН в обе стороны, будут неэквивалентными при их скольжении в противоположных направлениях. При распространении влево ветвь 60° ДН, выходящая на поверхность пленки и являющаяся пронизывающей дислокацией (ТД на рис. 3), становится все более короткой. При расстоянии до поверхности пленки, близком к h_c — критической толщине по Matthews и Blakeslee [6], ее скольжение прекращается, поскольку увеличение длины дислокации становится энергетически невыгодным. Изучение в

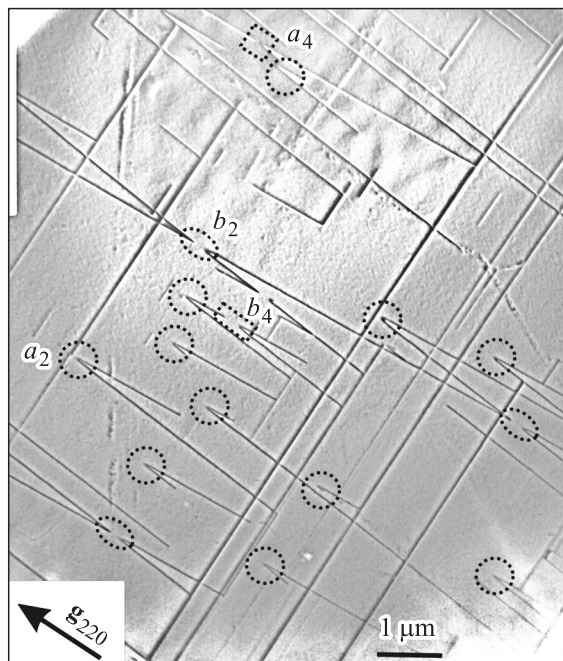


Рис. 5. Двухлучевое темнопольное ПЭМ-изображение пленки $\text{GeSi}/\text{Si}(001)$ 6° к (111) . Толщина пленки 20 nm. Все краевые дислокационные сегменты, параллельные вектору дифракции, находятся вне контраста. Большинство из них показано пунктирными фигурами (такими же, как на рис. 4). Буквы у дислокационных форм также соответствуют схемам на рис. 4.

настоящей работе ПЭМ-изображений других образцов показало, что конфигурации типа Y -центра формируются не только при одновременном зарождении двух комплементарных полупетель 60° дислокаций (как было сообщено в работах [3–5]), но и путем „наведенного“ зарождения 60° дислокационной полупетли фронтом уже сформированной 60° ДН, комплементарной этой полупетле. В этом случае лучи 60° ДН, отходящие от сегмента краевой ДН, на ПЭМ-изображениях имеют разную длину (рис. 4 и 5).

Исходя из анализа часто встречающихся дислокационных конфигураций, наблюдаемых на ПЭМ-изображениях, можно выделить два механизма образования краевых ДН в направлении отклонения подложки: *A* — коррелированное или наведенное зарождение комплементарной 60° дислокационной полупетли и затем образование отрезка краевой ДН; *B* — образование 90° сегмента ДН при пересечении уже существующих комплементарных 60° ДН, скользящих в противоположно наклонных плоскостях $\{111\}$.

Как было отмечено выше, при отклонении подложки противоположные направления скольжения 60° ДН при их взаимодействии становятся неэквивалентными в силу того, что дислокация, идущая в направлении $[\bar{1}10]$, отклоняясь от плоскости границы раздела, заглубляется в подложку, а идущая в противоположном направлении $[110]$ отклоняется в объем пленки. Разумно предположить, что в каждом из механизмов существуют два

варианта, обусловленные этой неэквивалентностью. На рис. 4 представлены схемы образования и возможные дислокационные конфигурации как результат зарождения и взаимодействия 60° ДН, распространяющихся вдоль направления отклонения.

3.1. Механизм А. В основе этого механизма лежит наведенное зарождение комплементарной 60° полупетли либо первичной 60° полупетли (одновременное зарождение пары комплементарных ДН), либо уже сформированной 60° ДН. Если вторичная (комплементарная) полупетля (вариант a_1 на рис. 4, полупетля β) зарождается под влиянием фронта поля напряжений 60° ДН, движущейся вдоль $[110]$ в направлении выхода из границы раздела в объем пленки (для варианта a_1 влево), то после образования краевого сегмента ДН наблюдается остановка распространения обеих 60° ДН в этом направлении. Соответствующие конфигурации указанного взаимодействия, такие как a_2 на рис. 4, наблюдались нами в большом количестве на изображениях ПЭМ (рис. 2 и 5). Если же вторичная (комплементарная) полупетля зарождается под влиянием уже сформированной 60° ДН (вариант a_3 на рис. 4, полупетля β), то в результате образования краевого сегмента ДН только одна ветвь вторичной 60° ДН, распространяющейся влево для варианта a_3 , может быть остановлена по описанному ранее механизму. Соответствующие конфигурации такого взаимодействия представлены на рис. 4 (вариант a_4).

3.2. Механизм В. При пересечении уже существующих комплементарных 60° ДН также должна наблюдаться разница, обусловленная направлением скольжения более поздней, т.е. пересекающей 60° ДН. Эта разница отражена на рис. 4 (варианты b_1 и b_3). Если пересекающая 60° ДН „набегает“ на пересекаемую в направлении заглубления в подложку (вариант b_1), то образуется конфигурация, подобная b_2 на рис. 4. Описанная выше, такая конфигурация наблюдалась нами на изображениях ПЭМ в больших количествах [3–5]. Если направление „набегания“ обратное (как показано для варианта b_3 на рис. 4), то в результате образования краевого сегмента ДН скольжение набегавшей ДН останавливается. Соответствующие конфигурации такого взаимодействия представлены на рис. 4 (вариант b_4). Из-за большой плотности Y -центров, стопорящих скольжение 60° ДН в направлении $[110]$, плотность таких „набегающих“ дислокаций, т.е. 60° ДН, скользящих в направлении $[110]$ (влево на рис. 4), понижена, и соответственно конфигурация типа b_4 (рис. 4) должна встречаться реже, чем конфигурация типа b_3 .

На рис. 5 приведено одно из электронно-микроскопических изображений, где реальные конфигурации таких взаимодействий обнаружены на одной фольге одновременно. На основе этого рисунка, а также других наблюдений вычисленная плотность дислокационных конфигураций для вариантов a_1 и b_1 составляет $10^7-10^9 \text{ cm}^{-2}$, а варианты a_3 и b_3 встречаются на порядок реже.

При увеличении толщины пленки GeSi в процессе роста „затягивание“ краевого сегмента ДН в объем

пленки прекращается, так как уменьшается энергетическая выгода от объединения комплементарных 60° ДН. С дальнейшим ростом толщины пленки неподвижные пронизывающие ветви 60° ДН, ранее застопоренные из-за их малого расстояния до поверхности пленки, вновь могут прийти в движение. Дислокационная конфигурация, на малых толщинах имеющая форму Y -центра, преобразуется в форму перекрестия.

Представляется очевидным, что в тех случаях, когда в качестве подложки используется пластина, слабо отклоненная от плоскости (001) (отклонение стандартных пластин не превышает 0.5°), длина отрезков краевых дислокаций увеличится по крайней мере на порядок. Вследствие этого вполне сформировавшиеся дислокационные конфигурации рассмотренных типов будут образовываться при большей степени релаксации. Однако их наблюдение будет затруднено из-за высокой плотности взаимно пересекающихся дислокационных линий. Тем не менее у нас нет оснований предполагать, что описанные в настоящей работе закономерности взаимодействия 60° ДН не будут выполняться в случае слабо отклоненной подложки при сохранении условий роста неизменными.

4. Заключение

Предложены два механизма образования краевых ДН в направлении отклонения подложки: коррелированное или наведенное зарождение комплементарной 60° дислокационной полупетли и затем образование отрезка краевой ДН. В большинстве случаев проявлением такого механизма является дислокационная конфигурация типа Y -центра; образование 90° сегмента ДН при пересечении уже существующих комплементарных 60° ДН, скользящих в противоположно наклонных плоскостях $\{111\}$. Большая плотностью Y -центров на начальной стадии пластической релаксации пленок GeSi/Si свидетельствует о массовом характере образования краевых сегментов ДН путем взаимодействия наведенных комплементарных 60° ДН. Отсюда следует вывод: образование краевых ДН путем коррелированного или наведенного зарождения комплементарных 60° ДН является доминирующим в пленках GeSi/Si с долей Ge 0.4–0.5.

Список литературы

- [1] E.P. Kvam, D.M. Maher, C.J. Humphreys. *J. Mater. Res.* **5**, 1900 (1990).
- [2] T.J. Gosling. *J. Appl. Phys.* **74**, 5415 (1993).
- [3] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. *Appl. Phys. Lett.* **92**, 131 901 (2008).
- [4] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. *J. Cryst. Growth* **310**, 3422 (2008).
- [5] Ю.Б. Болховитянов, А.К. Гутаковский, А.С. Дерябин, Л.В. Соколов. *ФТТ* **50**, 1783 (2008).
- [6] J.W. Matthews, A.E. Blakeslee. *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).