

УДК 548.4

© 1991

## МЕХАНИЗМЫ СНИЖЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ В СОЕДИНЕНИЯХ $A_3B_5$ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСИ

*М. Ю. Мартисов, А. Е. Романов*

Показано, что проведение диффузии примеси в соединениях  $A_3B_5$  вызывает снижение плотности дислокаций при их переползании. Найдено, при каких плотностях дислокаций реализуются различные механизмы уменьшения их плотности путем аннигиляции или выхода из образца, и получены выражения для эффективности снижения плотности дислокаций в зависимости от концентрации примеси и глубины ее диффузии.

Развитие полупроводниковой технологии и в первую очередь технологии получения соединений  $A_3B_5$  на кремнии сделало весьма актуальной задачу снижения плотности наклонных дислокаций (НД) в эпитаксиальных слоях данных соединений. При использовании подобных эпитаксиальных слоев в качестве подложек плотность НД определяет важнейшие характеристики полупроводниковых приборов, выполненных на их основе: деградационную стойкость гетеролазеров [1], коэффициент полезного действия фотоприемников [2], коэффициент усиления гетеротранзисторов [3] и т. д. Кроме того, определенный интерес для развития микро-, опто- и силовой электроники представляет снижение плотности НД в подложках соединений  $A_3B_5$  и в первую очередь арсенида галлия.

В настоящее время разработано несколько технологических приемов, приводящих к снижению плотности дислокаций в эпитаксиальных слоях. Это получение в процессе роста напряженных сверхрешеток [4-6], термоциклирование [7], послеростовой отжиг [8], ультразвуковая обработка [9] и др. Одной из наиболее перспективных методик, приводящих к сильному снижению плотности дислокаций, является проведение диффузии примеси в эпитаксиальный слой. Авторами работы [10] было показано, что в результате проведения диффузии цинка в эпитаксиальный слой GaAs/Si и последующего отжига плотность дислокаций падала примерно на порядок. В настоящей работе будет дано количественное описание эффекта снижения плотности НД и сделаны оценки концентрации диффундирующей примеси и глубины диффузии, при которых этот эффект должен наблюдаться в гомо- и гетероэпитаксиальных слоях соединений  $A_3B_5$ .

Рассмотрим поведение дислокации в эпитаксиальном слое соединения  $A_3B_5$  (например, GaAs). Диффундируя в эпитаксиальный слой, примеси мигрируют к дислокациям, вызывая их переползание. Механизм переползания дислокаций с участием примесей впервые был описан в работе [11]. Переползая за время диффузии на некоторое расстояние, дислокация может выйти из образца или вступить в дислокационную реакцию с НД с иным вектором Бюргерса, что приводит к снижению их плотности (рис. 1).

Оценим величину силы осмотического давления, действующей на дислокацию на примере диффузии Zn в арсениде галлия. При переползании НД на одну постоянную решетки в ядро дислокации встраиваются межузельные атомы Zn и выделяются вакансии As. Обобщая выражение для осмо-

тической силы, приведенное в [12] на случай бинарного соединения, получаем

$$\frac{F_{осм}}{L} = \frac{G_{Zn} b_{кр}}{V_{Zn}} - \frac{\bar{G}_{As} b_{кр}}{\bar{V}_{As}}, \quad (1)$$

где  $L$  — длина отрезка дислокации;  $G_{Zn}$  и  $\bar{G}_{As}$  — химические потенциалы межузельного атома и вакансии;  $V_{Zn}$  и  $\bar{V}_{As}$  — объемы межузельного атома и вакансии;  $b_{кр}$  — краевая составляющая вектора Бюргера дислокации. Считая НД в эпитаксиальном слое 60-градусной (подобные дислокации доминируют в соединениях  $A_3B_5$  [12]) и взяв для оценки характерные величины химического потенциала межузельного атома и вакансии  $G_{Zn} \approx 3$ ,  $\bar{G}_{As} \approx 1$  эВ [13], а радиусы атома Zn и вакансии As примерно равными  $1.5 \text{ \AA}$ , получаем, что в эпитаксиальном слое GaAs толщиной 1 мкм, в кото-

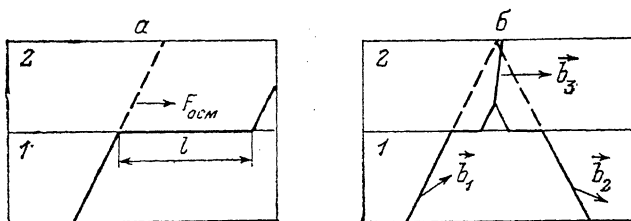


Рис. 1. Уменьшение плотности НД за счет переползания на длину  $l$  и выхода из образца (а) и дислокационной реакции (б).

ром межузельные атомы распределены равномерно, осмотическая сила, действующая на отрезок дислокации (рис. 1), равна 1.5 дин и существенно больше силы линейного натяжения дислокации несоответствия, возникающей в результате переползания НД и примерно равной  $5 \cdot 10^{-4}$  дин. (Выражение для силы линейного натяжения 60-градусной дислокации с учетом взаимодействия со свободной поверхностью приведено, например, в [6]). Отсюда следует, что длина переползания НД определяется исключительно концентрацией межузельных атомов, встраиваемых в кристаллическую решетку за счет переползания НД при диффузии.

Оценим теперь вероятность аннигиляции дислокаций при их переползании. Средняя длина, на которую в процессе диффузии переползает отрезок дислокации, равна

$$l = \frac{N_{im}^*}{2N_d} b^2, \quad (2)$$

где  $N_{im}^*$  — концентрация межузельных атомов, встраиваемых в решетку за счет переползания НД;  $N_d$  — плотность НД;  $b$  — постоянная решетки эпитаксиального материала (величина, в  $\sqrt{2}$  раз большая минимального расстояния между атомами одного сорта).

В зависимости от соотношения между длиной переползания и характерным размером (радиусом) образца  $R$  могут реализоваться два механизма снижения плотности НД: выход дислокаций за границы образца или их аннигиляция. Рассмотрим их по порядку.

### Выход дислокации за границу образца

Данный механизм снижения плотности дислокаций эффективен, когда  $l$  одного порядка с  $R$  и НД при переползании могут выходить за пределы образца ( $N_d \sim (N_{im}^*/2R) b^2$ ).

Ранее было показано, что выход дислокаций из образца энергетически выгоден в напряженной сверхрешетке при малой плотности дислокаций [14]. Вероятность аннигиляции в данном случае равна

$$W = 1 - S'/S, \quad (3)$$

где  $S$  — площадь образца;  $S'$  — площадь части образца, с которой дислокации не выходят (рис. 2). Считая образец круглым, после вычисления площади  $S'$  получаем

$$W = \frac{2\theta + \sin 2\theta}{\pi}, \quad (4)$$

где  $\theta = \arcsin(l/2R)$ . Очевидно, что в случае  $l \geq 2R$  все дислокации выходят из образца, т. е.  $W=1$ .

### Аннигиляция дислокаций при их переползании

В том случае, когда длина переползания  $l$  меньше радиуса образца  $R$  ( $N_d \gg (N_{im}^*/2R) b^2$ ), дислокации могут аннигилировать, взаимодействуя друг с другом при переползании. Для 60-градусных дислокаций, полагая, что междислокационная реакция, приводящая к снижению плотности НД, возможна лишь при непосредственном соприкосновении дислокаций (рис. 1, б), можно показать, что радиус аннигиляции, на котором возможна данная реакция, равен  $R = \sqrt{2}h$ , где  $h$  — толщина эпитаксиального слоя, в котором происходит переползание дислокаций под действием осмотической силы.

Полагая, что для расстояния между дислокациями в образце справедливо

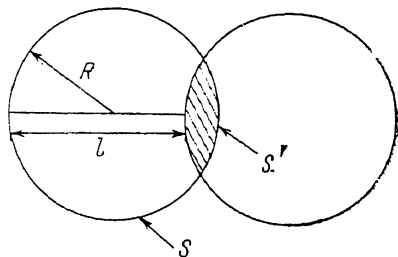


Рис. 2. Область площадью  $S'$ , из которой дислокации не выходят за границу образца при их переползании за длину  $l$ .

ливо распределение Пуассона и что вероятность аннигиляции дислокации примерно равна вероятности обнаружить НД в прямоугольнике со сторонами  $l$  и  $R$ , для вероятности  $W$  аннигиляции НД при однородном распределении встраиваемых примесей с концентрацией  $N_{im}^*$  в слое толщиной  $h$  получаем

$$W = 1 - \exp(-\alpha N_{im}^* b^2 h), \quad (5)$$

где  $\alpha$  — численный множитель порядка единицы, возникающий из-за отличия дислокаций от 60-градусных, а также из-за различия в типах дислокационных реакций, приводящих к снижению плотности НД.

Данную формулу можно обобщить на случай неоднородного распределения примесей по толщине образца, возникающего из-за диффузии

$$W = 1 - \exp(-\alpha N_1 b^2), \quad (6)$$

где  $N_1 = \int_0^{\infty} N_{im}^*(x) dx$ ;  $N_{im}^*(x)$  — профиль распределения межузельных примесей, встраиваемых в решетку в результате переползания дислокаций.

Получив выражения (4) и (6) для вероятностей аннигиляции НД в том и в другом случае, оценим концентрации диффундирующих примесей, а также характерные глубины, на которые следует проводить диффузию примесей для того, чтобы эффект снижения плотности дислокаций был бы существенным. Заметим также, что продолжительный отжиг, проводимый после диффузии, способствует дальнейшей миграции межузельных атомов к дислокациям, вызывая их интенсивное переползание и увеличение вероятности аннигиляции НД.

Для получения оценок необходимо найти  $\tau$  — время миграции межузельного атома к дислокации. Будем считать, что к дислокации мигрируют все межузельные атомы, находящиеся в круге, радиус которого  $R$  находится из условия  $N_2 \pi R^2 = 1$ . Тогда среднее расстояние от примеси до

дислокации  $\bar{R} = (2/3) R$ , а среднее время миграции примеси к дислокации, пренебрегая дрейфом межузельных атомов, можно получить из условия  $\tau = \bar{R}^2/D$ , где  $D$  — коэффициент диффузии, или после подстановки

$$\tau = 1/2\pi N_d D. \quad (7)$$

Рассмотрим теперь уравнение баланса межузельных атомов

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{im} = D \frac{\partial^2 N_{im}}{\partial x^2} - \frac{N_{im}}{\tau}, \quad (8)$$

где последний член соответствует встраиванию межузельных атомов в кристаллическую решетку при переползании НД, а начальные и граничные условия

$$\begin{aligned} N_{im}(x, t=0) &= 0, \\ N_{im}(x=0, t) &= N_0 \sigma(t), \\ N_{im}(x=\infty, t) &= 0 \end{aligned}$$

отвечают приближению бесконечно длинного образца и не зависящего от времени источника диффузии. Решение данного уравнения следующее:

$$N_{im}(x, t) = N_0 \left\{ \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) e^{-t/\tau} + \int_0^t \frac{dt'}{\tau} e^{-t'/\tau} \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt'}} \right) \right\}. \quad (9)$$

Зная распределение межузельных атомов в эпитаксиальном слое, оценим минимальные глубины, на которые следует проводить диффузию в эпитаксиальных слоях GaAs/GaAs ( $N_d \sim 10^4 \text{ см}^{-2}$ ), GaP/Si ( $N_d \sim 10^6 \text{ см}^{-2}$ ), GaAs/Si ( $N_d \sim 10^8 \text{ см}^{-2}$ ) для существенного снижения плотности дислокаций.

Гомоэпитаксиальный слой GaAs/GaAs (или другие соединения типа  $A_3B_5$ )

Считая, что глубина диффузии  $L$  много больше длины переползающего отрезка дислокации, из (9) получаем, что

$$N_{im}(x, t) \approx N_0, \quad (10)$$

а концентрация встраиваемых атомов равна

$$N_{im}^* \approx N_0 \frac{t}{\tau}. \quad (11)$$

Подставив данное выражение в формулу (2) (поскольку плотность НД мала), можно оценить время диффузии  $t'$ , а на его основании — глубину  $L$ , при проведении диффузии на которую дислокация переползает на расстояние  $l$

$$L = (Dt')^{1/2} = \left( \frac{l}{2\pi N_0 b^2} \right)^{1/2}. \quad (12)$$

Оценки глубины диффузии, выполненные по данной формуле для эпитаксиального слоя GaAs, приводят к тому, что для осуществления переползания отрезка НД на расстояние  $l=1$  см необходимо провести диффузию из источника с начальной концентрацией  $N_0=10^{19} \text{ см}^{-3}$  на глубину  $L$ , примерно равную 25 мкм.

В том случае, если радиус подложки  $R$  не превышает величины  $l$ , можно рассчитывать на существенное снижение плотности дислокаций. Отметим, что данная оценка выполнена для 60-градусных дислокаций, в то время как плотность винтовых дислокаций, которые также присутствуют в подложке, в результате проведения диффузии за счет действия данного механизма снижения плотности НД измениться не может, так как на винтовую дислокацию осмотическая сила не действует [13].

Поскольку плотность дислокаций в данных слоях велика ( $10^6$ — $10^8$  см $^{-2}$  и более), при диффузии примесей дислокации аннигилируют друг с другом при переползании. Тогда, зная зависимость  $N_{im}(x, t)$  (9), можно найти величину  $N_1$ , входящую в формулу (6) для вероятности аннигиляции дислокаций

$$N_1 = \int_0^{t'} \frac{dt}{\tau} \int_0^\infty dx N_{im}(x, t) = \frac{N_0}{(2\pi N_d)^{1/2}} F\left(\frac{t'}{\tau}\right), \quad (13)$$

где  $F(z) = \int_0^z \operatorname{erf}(x^{1/2}) dx$ , а из условия аннигиляции дислокаций  $N_1 b^2 \simeq 1$ , вытекающего из [6], можно получить оценку времени диффузии

$$t' = \tau z_0, \quad (14)$$

необходимого для эффективного снижения плотности дислокаций, где  $z_0$  — корень уравнения

$$F(z_0) = (2\pi N_d)^{1/2} / N_0 b^2. \quad (15)$$

Тогда глубина, на которую необходимо провести диффузию межузельных атомов для эффективного снижения плотности НД, равна

$$L = (D\tau z_0)^{1/2} = (z_0 / 2\pi N_d)^{1/2}. \quad (16)$$

Оценки длин диффузии, выполненные по формулам (15) и (16), приводят к тому, что при  $N_0 = 10^{19}$  см $^{-2}$  в эпитаксиальных слоях GaP/Si ( $N_d \simeq 10^8$  см $^{-2}$ )  $L \simeq 1.9$  мкм, а в эпитаксиальных слоях GaAs/Si ( $N_d \simeq 10^8$  см $^{-2}$ )  $L \simeq 0.4$  мкм.

Отметим, что данные оценки выполнены в приближении бесконечно больших толщин эпитаксиальных слоев и для их обоснованности необходимо, чтобы эти толщины были бы больше глубин диффузии, поскольку коэффициент диффузии примеси (например, Zn) в Si на несколько порядков больше коэффициента диффузии аналогичной примеси в соединениях  $A_3B_5$  [15] и кремниевая подложка является эффективным стоком для примесей.

Заканчивая рассмотрение процессов диффузии, приводящих к снижению плотности дислокаций в эпитаксиальных слоях, отметим высокую эффективность данного приема, особенно полезную в том случае, когда возможности технологии не позволяют реализовать широко применяемые методы, приводящие к снижению плотности НД: получение напряженных сверхрешеток, термоциклирование и т. д. Можно предположить, что применение диффузии примеси с последующим отжигом ускорит решение задачи получения слоев соединений  $A_3B_5$  на кремнии приборного качества.

#### Список литературы

- [1] Nam J. W., Holonjak N. (Jr.), Hsieh K. C., Kaliski A. M., Lee J. W. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 1. P. 398—410.
- [2] Itoh Y., Nishioka T., Yamamoto A., Yamaguchi M. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 19. P. 1617—1618.
- [3] Ma T., Lee W. S., Adkisson J. W., Harris J. S. // IEEE Electron. Device Lett. 1989. V. 10. N 10. P. 458—460.
- [4] El-Masry N. A., Tarn J. C. L., Bedair S. M. // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 55. N 14. P. 1442—1444.
- [5] Soga T., Jimbo T., Umeno M. // Appl. Phys. Lett. 1990. V. 56. N 15. P. 1433—1435.
- [6] Мартисов М. Ю., Романов А. Е. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 6. С. 1885—1887.
- [7] Okamoto H., Watanabe Y., Kadota Y., Ohmachi Y. // Jpn. J. Appl. Phys. 1987. V. 51. N 20. P. 1608—1610.
- [8] Pearton S. J., Malm D. L., Heimbrook L. A., Kovalnick J., Abernathy G. R., Caruso R. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 9. P. 682—684.

- [9] Панков Ю. М., Корчная В. Л., Семенова Г. Н., Тхорик Ю. А., Хазан Л. С., Шейнкман М. К. // Тез. докл. V Всес. конф. по физическим процессам в полупроводниковых гетероструктурах. Калуга, 1990. С. 128—129.
- [10] Berre D. G., Holonjak N., Hsieh K. C., Nam D. W., Plano W. E., Mathy R. J., H. Shichiyo // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 21. P. 1812—1814.
- [11] Petroff P. M., Kimerling L. C. // Appl. Phys. Lett. 1976. V. 29. N 8. P. 461—463.
- [12] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций: Пер. с англ. М., 1972. 600 с.
- [13] Орлов А. Н., Трушин Ю. В. Энергии точечных дефектов в кристаллах. М., 1983. 80 с.
- [14] Гуткин М. Ю., Романов А. Е. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 3. С. 836—839.
- [15] Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology. New Series, Group 111. V. 17. Springer—Verlag, 1982—1984.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
23 января 1991 г.