

УДК 548.4 : 620.187 : 539.26 / 27

## ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ДИФРАКЦИОННЫЙ КОНТРАСТ СТЕРЖНЕОБРАЗНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ

*К. Л. Мальшев, М. Ю. Гуткин, А. Е. Романов,  
А. А. Ситникова, Л. М. Сорокин*

Рассматривается электронно-микроскопический контраст от стержнеобразных дефектов, возникающих в кислородосодержащем кремнии после низкотемпературного отжига. При помощи дислокационных решений теории упругости построены модели дефекта и произведен расчет интенсивности рассеяния в случае двухволновой динамической дифракции электронов. Результаты представлены в виде теоретических электронно-микроскопических изображений, которые сопоставляются с экспериментальными микрофотографиями. Расчетный контраст для одной из предложенных упругих моделей оказывается достаточно близким к экспериментальному, что позволяет сделать предположение о взаимной ориентации решеток матрицы и включения.

В последние годы в области исследования реальных полупроводниковых структур сформировался интерес к так называемым стержнеобразным дефектам (СД). Этот вид дефектов возникает при тепловых и радиационных воздействиях на полупроводниковые монокристаллы (германий, кремний), например: а) при ионной имплантации с последующим отжигом [1-3], б) при облучении высокоэнергетическими электронами в условиях повышенной температуры [4, 5], в) при низкотемпературном отжиге кремния с высоким содержанием кислорода [6, 7].

Основным средством получения информации о детальной структуре дефектов в кристаллах является просвечивающая электронная микроскопия. На основе экспериментальных электронно-микроскопических изображений (ЭМИ) было установлено, что один из характерных размеров СД на несколько порядков превышает остальные. Именно длина СД исчисляется микронами, а размер поперечного сечения порядка нескольких десятков ангстрем. Этот факт и послужил основой при выборе названия для дефекта. СД всегда вытянут в направлении типа  $\langle 110 \rangle$ , и его рост сопровождается не только увеличением длины, но и некоторым уширением поперечного сечения. Таким образом, можно говорить о направлении залегания и плоскости залегания (плоскости габитуса) дефекта. Практически во всех работах, посвященных исследованию условий возникновения СД, было установлено, что вектор нормали к габитусу может совпадать с одним из направлений типа  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 11\bar{3} \rangle$ ,  $\langle 11\bar{6} \rangle$ .

К настоящему времени сделан ряд попыток выяснить механизм возникновения, структуру и предполагаемый состав СД [8, 9]. Наиболее достоверным с точки зрения экспериментальных фактов является предположение, что дефекты образованы в основном собственными межузельными атомами, но в их состав могут входить и фоновые примеси полупроводниковых монокристаллов, например кислород. Возникает задача, связанная с проверкой и уточнением природы СД. Один из возможных путей ее решения состоит в изучении электронно-микроскопического контраста СД, с одной стороны, и машинного моделирования контраста — с другой. Решение уравнений динамической дифракции электронов с использованием соотношений для полей деформаций вокруг СД дает результат, представимый в виде расчетных ЭМИ (РЭМИ). Сравнение экспериментальных

микрофотографий с РЭМИ позволяет оценить приемлемость предложенных моделей и выбрать наиболее близкую к реальной ситуации.

Экспериментальные данные свидетельствуют, что наличие СД вызывает в матрице деформацию сжатия. Это позволяет получить упругую модель дефекта способом, предложенным Эшелби [10]. Если пренебречь возможным изменением углов разворота в материале СД и учитывать только изменение линейных размеров, то модель можно описать с помощью поверхностных виртуальных дислокаций (ВД). Размещая ВД и призматические петли на поверхности, ограничивающей объем СД, можно построить три модели: I) дефект образован коаксиальными призматическими дислокационными петлями; II) краевые дислокации, линии которых параллельны оси дефекта, равномерно размещены по периметру сечения СД; III) суперпозиция случаев «I» и «II».

Предположим, что СД находится в неограниченной изотропной среде и имеет бесконечную протяженность. Поперечное сечение дефекта выберем в виде прямоугольника со сторонами  $2l_1$  и  $2l_2$ . Модуль сдвига  $\mu$  и коэффициент Пуассона  $\nu$  матрицы и включения одинаковы. Для нахождения упругих полей, соответствующих предложенным моделям, воспользуемся известными выражениями для тензоров напряжений краевой дислокации [11] и бесконечно малой петли [12]. (Предлагаемые модели условно изо-

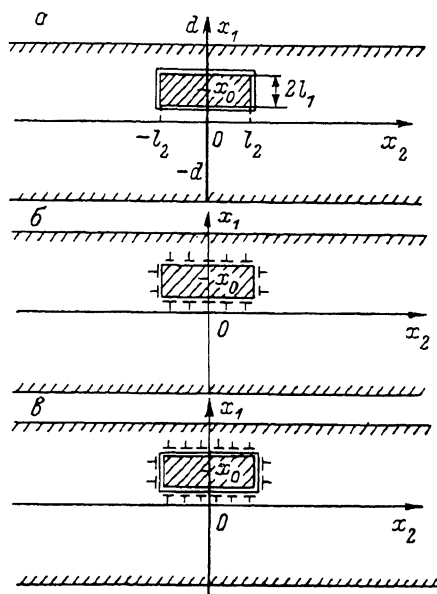


Рис. 1. Дислокационные модели стержнеобразного дефекта.

а, б и в отвечают соответственно моделям I, II, III. Плоскость рисунка совпадает с плоскостью поперечного сечения дефекта.  $Ox_1$  и  $Ox_2$  — оси декартовой системы координат,  $d$  — полутолщина пластины.

бражены на рис. 1). Интегрируя указанные поля по всем входящим в модель скоплениям дислокаций и петель, получим тензоры напряжений СД. В [13] полностью приведены формулы для полей напряжений и деформаций вокруг дефекта, при помощи карт изолиний исследовано распределение напряжений в неограниченном пространстве, решена задача об учете влияния свободной поверхности на распределение полей вокруг СД, помещенного в пластину. Ниже приведены соотношения только для тензора напряжений  $\sigma$ . Результат выражается через вспомогательные функции  $S_{ij}$  ( $i$  и  $j$  везде пробегает значения 1, 2). Для случая  $x_0 = 0$

$$\begin{aligned}
 S_{11}(x_1, x_2) &= \arctg \frac{l_1 + x_1}{l_2 + x_2} + \arctg \frac{l_1 - x_1}{l_2 + x_2} + \arctg \frac{l_1 - x_1}{l_2 - x_2} + \arctg \frac{l_1 + x_1}{l_2 - x_2}, \\
 S_{12}(x_1, x_2) &= \frac{1}{2} \left[ \ln \frac{(l_1 + x_1)^2 + (l_2 - x_2)^2}{(l_1 + x_1)^2 + (l_2 + x_2)^2} + \ln \frac{(l_1 - x_1)^2 + (l_2 + x_2)^2}{(l_1 - x_1)^2 + (l_2 - x_2)^2} \right], \\
 S_{22}(x_1, x_2) &= \arctg \frac{x_2 + x_2}{l_1 + x_1} + \arctg \frac{x_2 + x_2}{l_1 - x_1} + \arctg \frac{l_2 - x_2}{l_1 - x_1} + \arctg \frac{l_2 - x_2}{l_1 + x_1}. \quad (1)
 \end{aligned}$$

Тензор напряжений  $\sigma$  (индекс  $m = I, II, III$  нумерует модели)

$$\sigma_{ij} = -\frac{\mu\omega}{\pi} \Theta_m S_{ij}, \quad \sigma_{i3} = 0. \quad (2)$$

Компоненту  $\sigma_{33}$  для каждого  $m$  представим отдельно

$$I) \quad \sigma_{33} = -\frac{\mu\omega}{\pi} \Theta_I \frac{q}{\nu}, \quad II) \quad \sigma_{33} = -\frac{\mu\omega}{\pi} \Theta_{II} \nu q, \quad III) \quad \sigma_{33} = -\frac{\mu\omega}{\pi} \Theta_{III} q.$$

В (2) приняты обозначения

$$\theta_I = \nu/(1 - \nu), \quad \theta_{II} = 1/(1 - \nu), \quad \theta_{III} = (1 + \nu)/(1 - \nu),$$

$$q = \begin{cases} 0, & |x_1| > l_1, \quad |x_2| > l_2, \\ 2\pi, & |x_1| \leq l_1, \quad |x_2| \leq l_2. \end{cases}$$

В представленных формулах фигурирует параметр  $\omega$ , который называется параметром несоответствия решеток матрицы и СД и определяется как  $\Delta a/a$ , где  $a$  — постоянная решетки матрицы (вкладом в  $\omega$  различия

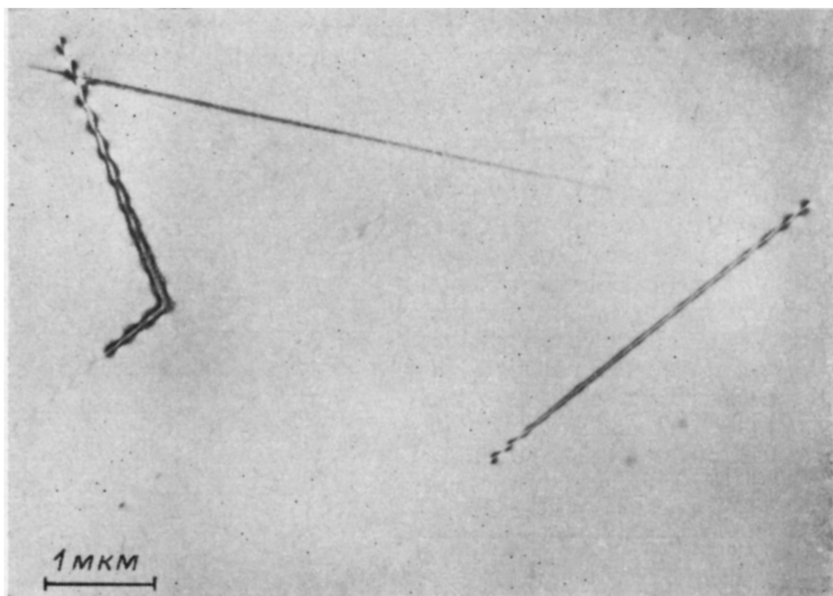


Рис. 2. Стержнеобразные дефекты в кислородосодержащем кремнии после низкотемпературной обработки (750 °С, 1 ч).

термических коэффициентов расширения решеток пренебрегаем). Из (2) видно, что во всех трех случаях тензор  $\sigma$  один и тот же с точностью до умножения на постоянную (кроме  $\sigma_{33}$ ).

Для описания дифракции электронов в дефектном кристалле воспользуемся системой обыкновенных дифференциальных уравнений [14, 15], которая в матричной записи имеет вид

$$\frac{d}{dz} \Phi = i\pi W(z) \Phi - \xi_g \pi \tilde{W} \Phi, \quad (3)$$

$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_0(z) \\ \varphi_g(z) \end{pmatrix}, \quad W(z) = \begin{pmatrix} -w(z) & 1 \\ 1 & w(z) \end{pmatrix}, \quad \tilde{W} = \begin{pmatrix} 1/\xi'_0 & 1/\xi'_g \\ 1/\xi'_g & 1/\xi'_0 \end{pmatrix},$$

$$w(z) = s\xi_g + d/dz(g, \mathbf{R}) \quad (4)$$

координата  $z$  выражена в единицах  $\xi_g$ . В (3) и (4) приняты следующие обозначения:  $\varphi_0$  и  $\varphi_g$  — амплитуды прошедшей и дифрагированной волн;  $d/dz$  — производная вдоль направления просвечивания образца;  $\xi_g$ ,  $\xi'_0$ ,  $\xi'_g$  — экстинкционные параметры;  $s$  — ошибка возбуждения;  $\mathbf{g}$  — вектор действующего отражения;  $\mathbf{R}$  — смещения атомов из идеального положения;  $i$  — мнимая единица. Явное решение (3) можно выписать только при  $d/dz(g, \mathbf{R}) = \text{const}$ . В остальных случаях требуется численное интегрирование. Уравнения (3) содержат переменный параметр  $w(z)$ , второе слагаемое которого имеет смысл производной по направлению просвечивания от фазового угла  $\beta_g = 2\pi(g, \mathbf{R})$  [14, 15]. Этот факт позволяет выразить  $w(z)$  через компоненты тензора упругой дисторсии, которые для рассмат-

риваемых моделей легко восстанавливаются по тензору малых деформаций [13].

Для получения экспериментальных изображений СД были взяты монокристаллы кремния с ориентацией (001), выращенные методом Чохральского и содержащие  $\sim 1.2 \cdot 10^{18}$  см<sup>-3</sup> кислорода. Образцы термообработаны при 750 °С в вакууме в течение 1 ч. При этой термообработке в кристалле в результате распада пересыщенного твердого раствора образуются СД [7] (рис. 2). По существующим данным описанный дефект может быть представлен как фаза высокого давления — коэсит (одна из модификаций SiO<sub>2</sub>) [16]. В расчете использованы следующие кристаллографические данные. Коэсит: элементарная ячейка моноклинная,  $a=c=7.23$  Å,  $b=12.52$  Å,

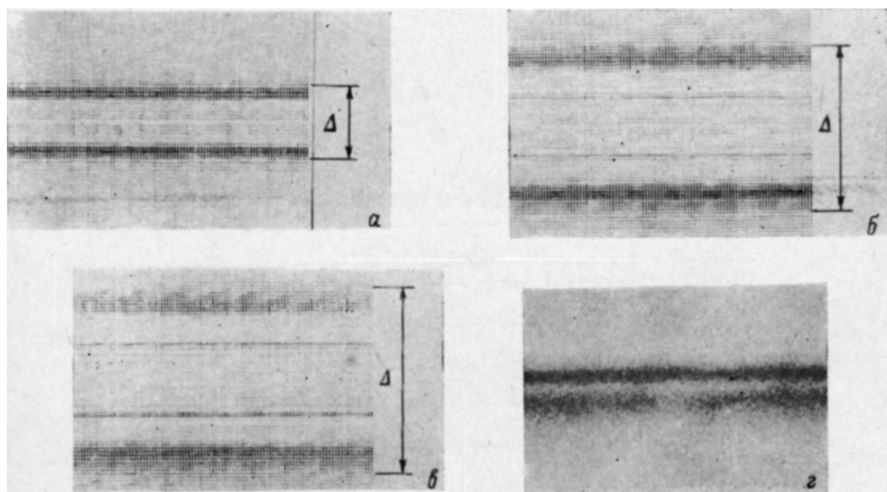


Рис. 3. Расчетные электронно-микроскопические изображения (*a*, *b*, *в* соответствуют моделям I, II, III) и экспериментальная микрофотография стержнеобразного дефекта в кремнии (*z*).

$\alpha=\gamma=90^\circ$ ,  $\beta=120^\circ$ . Кремний (матрица): решетка типа алмаза,  $a=5.43$  Å; в изотропном приближении  $\nu=0.215$ ,  $\mu=6.41 \cdot 10^{11}$  дин/см<sup>2</sup>. Габитусная плоскость СД параллельна поверхности исследуемого тонкого кристалла кремния (001). В кристаллографических обозначениях [001] — нормаль к габитусу, [110] — направление залегания дефекта, [001] — направление просвечивания, (220) — вектор дифракции. СД расположен в середине фольги,  $d=1.5\xi_g$  (рис. 1),  $\xi_g=757$  Å,  $\xi_g/\xi'_g=\xi_0/\xi'_0=0.035$ . Приняты размеры дефекта:  $2l_1=25$  Å,  $2l_2=100$  Å, расчетное значение  $\omega=0.33$ .

Результат интегрирования (3) — распределение  $\varphi_0$  и  $\varphi_g$  на нижней поверхности кристалла. Интенсивности пучков определяются как  $|\varphi_0|^2$  и  $|\varphi_g|^2$  (светло- и темнопольные изображения). Соотношение (4) для  $w(z)$  принимает с учетом (1) и (2) следующий вид:

$$w(z) = s\xi_g + 2\sqrt{2}\omega\Theta_m S_{12}(x_1, x_2), \quad (5)$$

характеризуется функцией  $S_{12}$  и в разных моделях отличается множителем  $\Theta_m$  (для данной кристаллографической ситуации). Результат интегрирования (3) приведен на рис. 3, где представлены светлопольные РЭМИ и экспериментальная микрофотография, полученные при ошибке возбуждения  $s\xi_g=0.35$  и дифракционном векторе  $g(220)$ . Для получения РЭМИ используется способ полутоновой цифрпечати, предложенный в [17, 18].

Из анализа расчетных изображений видно, что три предложенные модели упругих полей СД приводят к близким по структуре изображениям. Это можно связать с тем, что для разных моделей величина  $w(z)$  отлича-

ется только коэффициентом  $\Theta_m$ . При наибольшем из допустимых  $\Theta_{III}$  ширина изображения  $\Delta$  максимальна. Для  $\Theta_I=0.274$   $\Delta=0.81\xi_g$ , для  $\Theta_{II}=1.274$   $\Delta=2.09\xi_g$ , для  $\Theta_{III}=1.548$   $\Delta=2.35\xi_g$ . Оценка  $\Delta$  для экспериментального ЭМИ дает  $\sim 0.33\xi_g$ . При сопоставлении РЭМИ с экспериментальными изображениями СД следует сделать два замечания. Во-первых, представленный на микрофотографии СД «гаснет», когда вектор отражения  $g$  направлен вдоль его оси. В рассматриваемой геометрии расчет для всех трех выбранных моделей подтверждает этот факт. Во-вторых, в эксперименте глубина залегания дефекта не определялась и при расчете нужно контролировать зависимость контраста от положения СД по тол-

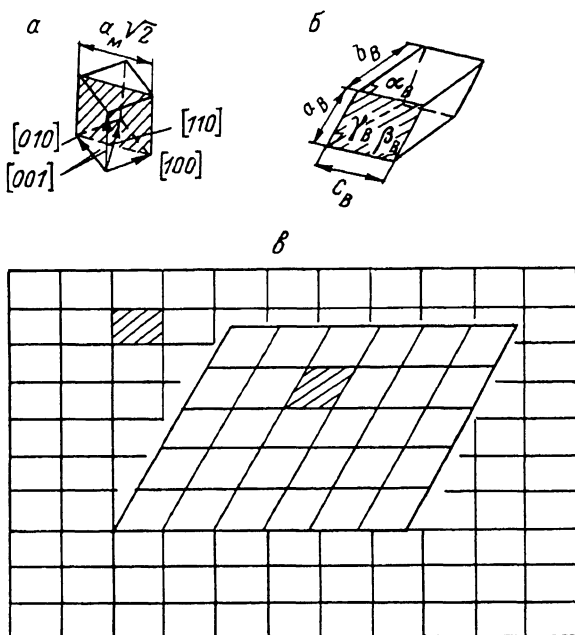


Рис. 4. Кристаллографическая модель.

*a* и *b* — схематичные изображения элементарных ячеек кремния и коэсита, *B* — сечение матрицы с дефектом плоскостью (110).

щине образца. Соответствующие вычисления показывают, что представленные РЭМИ делаются асимметричными при изменении глубины залегания (для выбранной толщины кристалла  $3\xi_g$ ). При этом происходит ослабление почерпчения одной из полос в зависимости от того, вверх или вниз из среднего положения в образце сдвигается СД. Можно заключить, что наиболее близкой к экспериментальному изображению СД оказывается РЭМИ для модели, учитывающей несоответствие решеток матрицы и включения только вдоль оси СД, т. е. модель I более предпочтительна.

Этот результат будет более понятен, если рассмотреть его с позиций реальных кристаллографических соотношений между матрицей и возможной фазой выделения (коэситом). Известно, что если размеры сечения меньше, чем длина экстинкции (25 и 100 Å по сравнению с 757 Å), то форма сечения несущественна для вида ЭМИ [19]. Выбор прямоугольника в сечении СД был в большой степени модельным, и теперь можно попытаться уточнить форму СД.

С матрицей кристалла, являющегося кремнием, связана кристаллографическая система координат, в основе которой лежит кубическая элементарная ячейка (ЭЯ) (рис. 4). Для удобства параметры ячеек ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ) снабжены индексами М (матрица) и В (включение):  $a_M$  или  $\beta_B$ . ЭЯ материала включения является прямой призмой с ромбом в основании (на рис. 3 отмечено штриховкой). В работе рассматриваются СД, вытянутые

вдоль направления типа  $\langle 110 \rangle$ . В этой связи можно заметить, что сечение ЭЯ матрицы плоскостью (110) — прямоугольник, размер которого  $5.43 \text{ \AA} \times 7.68 \text{ \AA}$  (также выделен штриховкой на рис. 4). Получается, что плоская сетка решетки матрицы (проекция на плоскость (110)) составлена из прямоугольников. Кроме того, длины сторон ромба в основании ЭЯ стержнеобразного дефекта  $a_B$  и  $c_B$  довольно близки к  $a_M \sqrt{2} \approx 7.68 \text{ \AA}$ . Допустим, что решетка коэсита внутри СД ориентирована так, что ребро  $b_B$  параллельно направлению [110] матрицы. Тогда в плоскости (110) матрицы проекция решетки коэсита даст ромб (рис. 4). Пусть сечение дефекта имеет форму ромба и решетки матрицы и включения сопряжены когерентно. Тогда параметр несоответствия  $\omega_T = 0.5 (0.062 + 0.153) = 0.108$  (вычислено среднее значение для ребер  $a_B$  и  $c_B$ ) мал, что, вероятно, соответствует возможности «сшивания» решеток с относительно небольшим искажением. Величина же  $\omega_L$  вдоль оси дефекта составляет  $0.63 (\approx 5.8 \omega_T)$ . Различие  $\omega_T$  и  $\omega_L$  в условиях описанной кристаллографии может послужить основой того, что учет несоответствия только вдоль оси дефекта (при помощи призматических петель) приводит к модели I, лучше всего согласующейся с экспериментом.

Из предложенной кристаллографической модели очевидно, что в расчетах ЭМИ следовало бы учесть контраст, обусловленный относительным разворотом кристаллографических плоскостей включения и матрицы. Однако, поскольку размеры дефекта  $2l_1, 2l_2 \ll \xi_g$ , здесь этим вкладом пренебрегаем.

Таким образом, рассмотренная кристаллографическая схема взаимной ориентации матрицы и выделения позволяет отдать предпочтение модели из призматических петель, которая, однако, требует дальнейшего уточнения и проверки, что может дать более исчерпывающую информацию о природе СД.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] *Madden P. K., Davidson S. M. Rad. Eff.*, 1972, vol. 14, N 2, p. 271—273.
- [2] *Wu W. K., Washburn J. Cryst. Latt. Def.*, 1977, vol. 7, N 1, p. 39—43.
- [3] *Bartsch H., Hoehl D., Kästner G. Phys. St. Sol. (A)*, 1984, vol. 83, N 2, p. 543—551.
- [4] *Asev A. L., Astakhov V. M., Pchelyakov O. P. et al. Krist. und Technol.*, 1979, vol. 14, N 11, p. 1405—1411.
- [5] *Solisbury J. G., Loretto M. H. Phil. Mag.*, 1979, vol. 39, N 3, p. 317—323.
- [6] *Tempelhoff K., Spiegelberg F., Gleichmann R., Wruck D. Phys. St. Sol. (A)*, 1979, vol. 56, N 1, p. 213—223.
- [7] *Кюмм П. Н., Сутникова А. А., Сорокин Л. М. ФТТ*, 1985, т. 27, № 3, с. 673—677.
- [8] *Pasemann M., Hoehl D., Asev A. L., Pchelyakov O. P. Phys. St. Sol. (A)*, 1983, vol. 80, N 1, p. 135—139.
- [9] *Tan T. Y. Phil. Mag.*, 1981, vol. 44, N 1, p. 101—125.
- [10] *Эшлби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИЛ*, 1963. 258 с.
- [11] *Вит Де Р. Континуальная теория дисклинаций. М.: Мир*, 1977. 208 с.
- [12] *Kroupa F. Czech. J. Phys. (B)*, 1962, vol. 12, N 3, p. 191—201.
- [13] *Мальшев К. Л., Гуткин М. Ю., Романов А. Е. и др. Препринт ФТИ, № 1109. Л., 1987. 43 с.*
- [14] *Амелинкс С. Методы прямого наблюдения дислокаций. М.: Мир*, 1968. 440 с.
- [15] *Томас Г., Гориндж М. Просвечивающая электронная микроскопия материалов. М.: Наука*, 1983. 317 с.
- [16] *Bourret A., Thibault-Desseaux V., Seidman D. N. J. Appl. Phys.*, 1984, vol. 55, N 4, p. 825—836.
- [17] *Петрашень П. В. В сб.: Алгоритмы и математическое обеспечение для физических задач. Л., 1978, № 3, с. 80—92.*
- [18] *Head A. K., Humble P., Clarebrough L. M. et al. Computed electron micrographs and defects identification. Amst.: North-Holl P. C.*, 1973. 400 p.
- [19] *Lepski D. In: Probleme der Elektronenbengungskontrastes von Gitterfehlern. Wissenschaftliche Berichte. Dresden, 1976, N 6, p. 1—29.*