

Образование краевых дислокаций несоответствия в пленках $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x \sim 0.4-0.5$), выращенных на отклоненных подложках $\text{Si}(001) \rightarrow (111)$

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

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

E-mail: bolkhov@isp.nsc.ru

(Поступила в Редакцию 6 февраля 2008 г.)

Изучена дислокационная структура пленок $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x \sim 0.4-0.5$), выращенных методом молекулярной эпитаксии на подложках $\text{Si}(001)$, отклоненных на 6° вокруг оси $\langle 011 \rangle$. Показано, что в направлении отклонения краевые дислокации несоответствия (ДН) возникают только в виде коротких отрезков на пересечениях 60° ДН. Как следствие, суммарная длина краевых ДН в направлении отклонения подложки становится меньше, чем в направлении оси отклонения. Отклонение подложки от сингулярной грани позволило обнаружить дислокационную конфигурацию, состоящую из короткого отрезка краевой ДН и расходящихся от него в направлении отклонения двух 60° ДН. Предполагается, что образование отрезка начинается с одновременного зарождения комплементарных дислокационных полупетель, образующих на границе раздела короткую краевую ДН и затем распространяющихся в одну сторону в виде двух расходящихся лучей 60° ДН.

PACS: 61.72.Lk, 81.05.Cy, 81.15.-z

1. Введение

В ходе пластической релаксации пленок GeSi , выращиваемых на подложках $\text{Si}(001)$, формируются в основном подвижные 60° дислокации несоответствия (ДН) с векторами Бюргерса (\mathbf{b}) $a/2\langle 110 \rangle$ (a — параметр решетки), наклоненными к гетерогранице. Образуются также краевые дислокации Ломера (L ДН), векторы Бюргерса которых лежат в плоскости гетерограницы (001), и поэтому такие дислокации являются „сидячими“. Тем не менее доля последних в общем количестве ДН тем выше, чем больше несоответствие и чем выше степень релаксации гетероэпитаксиальных напряжений [1]. Общепринятый механизм образования L ДН [2–4] заключается в следующем. При скольжении двух 60° дислокаций по наклонным, взаимно пересекающимся в плоскости гетерограницы плоскостям $\{111\}$ возможно их взаимодействие по классической реакции, известной из теории дислокаций,

$$a/2[101] + a/2[01\bar{1}] = a/2[110]. \quad (1)$$

Такие 60° дислокации были названы комплементарными (complementary) [5]. В результате такой реакции по линии пересечения плоскостей $\{111\}$ формируется чисто краевая ДН, вектор Бюргерса которой перпендикулярен дислокационной линии и лежит в плоскости (001). Такая L ДН своими окончаниями образует два тройных узла с прореагировавшими наклонными 60° дислокациями.

В случае отклонения подложки от грани (001) в одном из направлений распространения ДН появляется неэквивалентность работы этого механизма образования краевых ДН в ортогональных направлениях. Краевая ДН, образованная скольжением 60° ДН по наклонным плоскостям $\{111\}$, должна лежать на пересечении

этих плоскостей, являющемся одним из направлений $\langle 110 \rangle$. Однако из-за отклонения подложки от (001) это направление уже не лежит в плоскости границы раздела, а пересекает ее под углом отклонения. Это делает невозможным существование длинных краевых ДН в направлении отклонения подложки. Несмотря на обширный круг исследований механизмов пластической релаксации напряженных пленок, проведенных в конце прошлого века на примере GeSi/Si [5–10], аналогичные исследования в пленках, выращенных на отклоненных подложках, практически отсутствуют. Настоящая работа посвящена экспериментальному анализу дислокационной структуры, возникающей при гетероэпитаксии пленок $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ срединных составов ($x \sim 0.4-0.5$) на отклоненных подложках $\text{Si}(001) \rightarrow (111)$. Основное внимание акцентировано на выявлении неэквивалентности зарождения и распространения ДН, лежащих в направлении отклонения и ортогонально ему.

2. Методика эксперимента

Слой твердого раствора $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ с $x \sim 0.4-0.5$ выращивались в установке молекулярно-лучевой эпитаксии „Катунь“. Основные детали проведения эксперимента опубликованы ранее [11]. В настоящей работе использовалась сурьма как сурфактант, и поэтому температура роста была выбрана равной 450°C [12]. Тип структурных дефектов и их пространственное распределение изучались методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) с помощью микроскопа JEM-400EX. Образцы для ПЭМ препарировались в виде тонких фольг, параллельных поверхности роста (001). 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 Бюргерса соответственно. Были проанализированы два образца: L10 ($x = 0.4$, толщина 25 nm) и A1 ($x = 0.5$, толщина 20 nm).

3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

На рис. 1 представлены ПЭМ-изображения дислокаций в пленках L10 и A1 на начальной стадии пластической деформации, составляющей 4 и 10% соответственно. Характерные особенности дислокационной структуры на рис. 1, *a* обведены пунктирным овалом и пунктирными кружками. В первом случае наблюдается очень слабый контраст на изображениях дислокационных линий на пересечениях ДН, распространяющихся в направлении отклонения подложки. Пунктирные кружки фиксируют места зарождения 60° ДН, которые в виде двух расходящихся лучей распространяются в направлении отклонения. При переходе к пленке с большей долей Ge такая форма зарождения ДН в направлении отклонения становится доминирующей (рис. 1, *b*).

Особенности дислокационной структуры, обусловленные разориентацией подложки, показаны на рис. 2. Изображения на рис. 2, *a* и *b* получены в условиях двухволновой дифракции для $\mathbf{g} = 220$ и $\bar{2}20$ соответственно. Цифрами 1–5 на этих изображениях отмечены красные

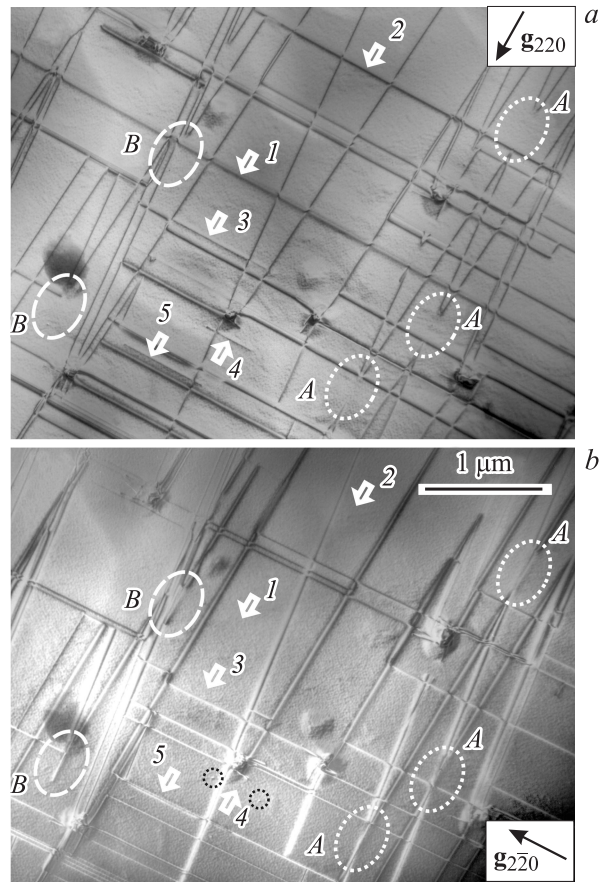


Рис. 2. Темнопольные ПЭМ-изображения ДН в условиях двухволновой дифракции: $\mathbf{g} = 220$ (*a*) и $\bar{2}20$ (*b*). Образец L10.

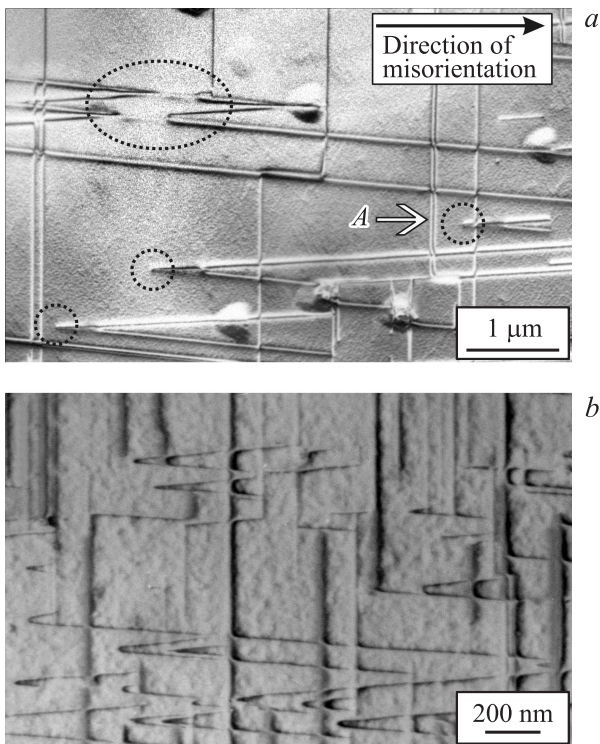


Рис. 1. Дислокации несоответствия в пленках L10 (*a*) и A1 (*b*) на начальной стадии пластической деформации.

дислокации Ломера, расположенные в направлении оси отклонения (рис. 1, *a*). Контраст от них исчезает при выполнении условия $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ (рис. 2, *b*). Как видно из рис. 2, *a*, наблюдаются как длинные L ДН, выходящие за края изображения (например, дислокация, отмеченная цифрой 1), так и короткие, которые либо ограничены дислокациями ортогональных семейств (дислокации 2, 3), либо изолированы (4). В последнем случае характерной особенностью изображения таких дислокаций является наличие остаточного контраста на краях дислокации в условиях, когда сама дислокация невидима (ср. изображения дислокации 4 на рис. 2, *a* и *b*, края этой дислокации обведены пунктирными кружками). Наличие остаточного контраста, по нашему мнению, связано с присутствием наклонных дислокационных ветвей, выходящих на поверхность пленки. В силу малой толщины пленки не удастся детально визуализировать эти наклонные дислокационные сегменты, но логично предположить, что это сегменты двух 60° дислокаций, проскользивших по пересекающимся в гетерогранице плоскостям $\{111\}$ и образовавших по линии пересечения этих плоскостей краевую L ДН по классической дислокационной реакции (1). Все рассмотренные выше краевые ДН лежат ортогонально направлению разориен-

тации подложки и могут распространяться вдоль границы раздела на большие расстояния. В образце L10 их доля составила около 25% от суммарной длины 60° ДН, лежащих вдоль оси отклонения.

Иная картина наблюдается в направлении отклонения подложки. Погасание дислокационных линий в соответствии с условием $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$, наблюдаемое на рис. 2, *a* в обведенных пунктирными овалами местах, происходит на пересечениях дислокационных линий и не превышает в длину $0.2-0.3 \mu\text{m}$ (области A). Доля таких коротких L ДН составила менее 5% от суммарной длины 60° ДН, распространяющихся в направлении отклонения. Обратим особое внимание на области B (рис. 2), окаймленные штриховыми овалами. Из рис. 2, *b* видно, что на начальных участках зарождения двух 60° ДН, расходящихся в направлении отклонения, обнаруживаются короткие отрезки L ДН. Такая дислокационная конфигурация, по нашему мнению, является новой формой зарождения как 60° , так и 90° ДН, проявляющейся в гетероструктурах на отклоненных подложках. Назовем такую конфигурацию Y-центром. Такая форма образования дислокаций несоответствия в направлении отклонения подложки стала доминирующей в пленке с 50% содержанием Ge (образец A1, рис. 1, *b*; плотность Y-центров $\sim 10^9 \text{cm}^{-2}$).

На рис. 3, *a, b* представлен фрагмент одного из пересечений 60° ДН, скользящих в направлении отклонения подложки. Отрезок ДН, изображение которой отсутствует на рис. 3, *a* и присутствует на рис. 3, *b*, является краевой дислокацией с вектором Бюргерса, направленным перпендикулярно линии этого отрезка. Как видно из рис. 3, *b*, этот отрезок расположен вдоль биссектрисы угла между расходящимися 60° ДН после их пересечения. На рис. 3, *c* представлена схема расположения дислокаций вдоль оси отклонения $[1\bar{1}0]$. Отрезок L ДН, образующийся на пересечении двух 60° ДН, параметры которых удовлетворяют выражению (1), лежит в направлении $[\bar{1}\bar{1}0]$, которое отклонено от границы раздела. Поэтому такая L ДН частично поднимается в пленку, а частично опускается в подложку. При затягивании такой L ДН в подложку (равно как и в пленку) энергетическая выгода реакции (1) уменьшается, так как L ДН удаляется от границы раздела. Соответственно ее длина будет ограниченной, зависящей от угла отклонения подложки и величины ее рассогласования с пленкой. В данном случае отрезки таких L ДН имеют длину $0.2-0.3 \mu\text{m}$. Глубина опускания в подложку легко оценивается при знании угла отклонения и при 6° составляет около 20nm . Суммарная длина таких L ДН составляет существенно меньшую часть по сравнению с общей длиной L ДН, распространяющихся ортогонально направлению отклонения. Так, на рис. 2 это соотношение равно 1 к 5. Таким образом, важным следствием отклонения подложки от плоскости (001) является то, что последнее может существенно ограничивать суммарную длину L ДН в одном из направлений их расположения по сравнению с другим.

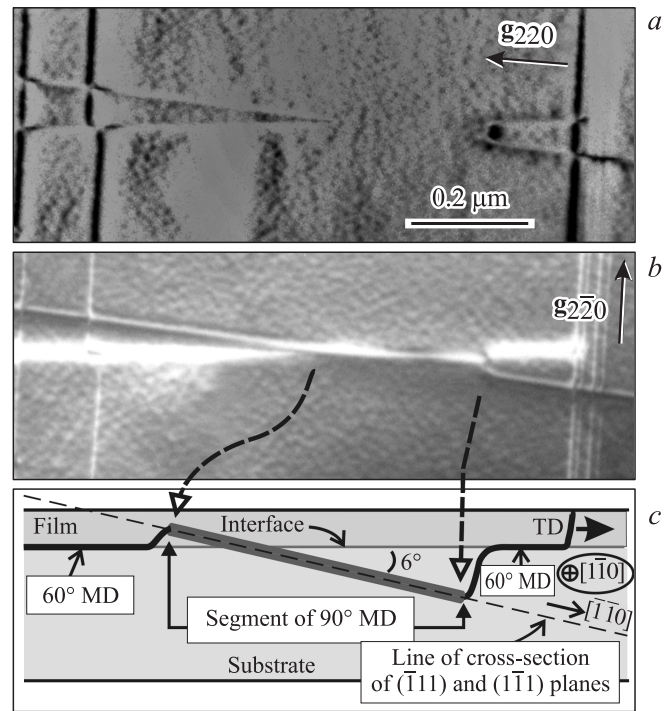


Рис. 3. Темнопольные двухволновые ПЭМ-изображения продольного среза образца $\text{Ge}_{0.4}\text{Si}_{0.6}$ (*a, b*) и схема расположения ДН в районе гетерограницы, отклоненной на 6° от (001) вокруг оси $[1\bar{1}0]$ (*c*). Район перекрестия комплементарных 60° ДН. Выходящая на поверхность наклонная часть 60° ДН — пронизывающая дислокация — обозначена как TD.

На рис. 4, *a, b* представлена дислокационная конфигурация Y-типа. Видно, что при съемке с вектором дифракции, направленным вдоль оси отклонения, обнаруживается отрезок L ДН, по длине подобный тем, что наблюдаются на пересечениях 60° ДН. Однако в данном случае расходящиеся от этого отрезка 60° ДН распространяются только в одну сторону. На рис. 4, *c* представлена предлагаемая схема работы такого механизма. Основной модели является предположение об одновременном зарождении двух комплементарных 60° дислокационных полупетель, находящихся рядом. Эти полупетли (α на рис. 4, *c*) расширяются каждая в своей наклонной плоскости в противоположных направлениях, образуя на пересечении этих плоскостей в направлении $[\bar{1}\bar{1}0]$ отрезок L ДН в соответствии с моделью [5]. Так как это направление пересекает границу раздела пленка-подложка, условия скольжения ветвей 60° дислокаций, выходящих на поверхность и „тянущих“ за собой L ДН в обе стороны, будут неэквивалентными при их скольжении в противоположных направлениях. При распространении их влево эти ветви, являющиеся пронизывающими дислокациями (threading dislocations — TD на рис. 4, *c*), становятся все более короткими. При расстоянии до поверхности пленки, близком к h_c — критической толщине [13], их скольжение прекращается. На ряде изображений, полученных в условиях $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$,

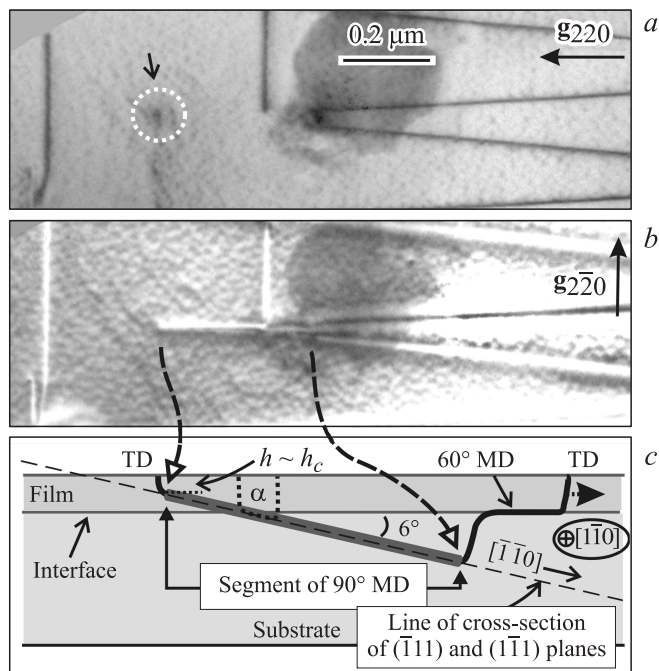


Рис. 4. Темнопольные двухволновые ПЭМ-изображения Y -центра в образце $\text{Ge}_{0.4}\text{Si}_{0.6}$ (a, b) и схема расположения дислокаций (c). TD — пронизывающие дислокации.

наблюдался точечный контраст от выхода на поверхность пленки этих дислокационных ветвей. На рис. 4, a такой выход в виде слабо видимой точки отмечен пунктирным кружком. Это место соответствует левому окончанию отрезка L ДН, видимой на рис. 4, b .

При скольжении наклонных ветвей 60° ДН в противоположном направлении они также „ведут“ за собой краевую ДН, которая углубляется в подложку вплоть до равновесной глубины. Несмотря на остановку реакции взаимодействия комплементарных 60° ДН, по выражению (1), наклонные ветви 60° ДН, распространяющиеся вправо, по-прежнему пересекают всю толщину пленки (рис. 4, c). Вследствие этого движущая сила, действующая на них, продолжает определять их скольжение вдоль наклонных плоскостей $\{111\}$ (на рис. 4, c — вправо). Такой Y -центр становится источником двух 60° ДН, распространяющихся в одну сторону вдоль направления отклонения подложки.

В модели [5] зарождение комплементарной 60° дислокационной петли на поверхности тонкого слоя происходит под воздействием поля напряжений уже существующей в границе раздела 60° ДН. Позднее в работе [6] теоретическими расчетами было показано, что акт зарождения такой петли в районе уже существующей 60° ДН (с последующим превращением в 90° ДН) имеет существенно меньший энергетический барьер, чем при зарождении одиночной петли в отсутствие ДН. Как отмечалось в [5], такая L ДН соединена с поверхностью пленки четырьмя наклонными отрезками — TD, по два с каждого конца краевой дислокации. Эти отрезки про-

должают скользить вдоль наклонных плоскостей $\{111\}$ в противоположных направлениях, формируя краевую ДН, которая может таким путем удлиняться [5]. Такое предположение объясняет обнаружение длинных L ДН, лежащих в границе раздела пленка/подложка.

Наличие центров зарождения Y -типа свидетельствует в пользу того, что реализуется механизм одновременного зарождения двух комплементарных 60° ДН в одном месте. Изучение ПЭМ-изображений показало, что центров Y -типа много (как было отмечено выше, в образце A1 плотность Y -центров составила около 10^9 cm^{-2}), и это указывает на присутствие закономерных условий, необходимых для парного зарождения дислокационных полупетель. По-видимому, одновременность зарождения двух комплементарных 60° ДН имеет место и при зарождении длинных краевых дислокаций, распространяющихся вдоль оси отклонения. Подтверждением этого является существование L ДН (подобных L ДН под номером 4 на рис. 2), не являющихся частью дислокационных линий, включающих отрезки 60° ДН.

Если плавно уменьшать угол отклонения подложки, то длина отрезка L ДН, лежащего в основе Y -центра зарождения ДН, будет увеличиваться. В предельном случае, когда угол отклонения подложки равен нулю, расщепление системы 60° ДН на две подсистемы отсутствует, и появляются равные условия удлинения L ДН в противоположных направлениях. При этом оба ортогональных направления распространения ДН становятся эквивалентными.

4. Заключение

Отклонение подложки от сингулярной грани (001), приводящее к расщеплению одной из систем параллельных 60° ДН на две подсистемы пересекающихся ДН, позволило выявить новые особенности образования и зарождения как 60° , так и 90° ДН. На отклоненной подложке L ДН, лежащие в направлении отклонения, образуются на пересечениях 60° ДН, принадлежащих разным подсистемам. Так как направление пересечения не совпадает с плоскостью границы раздела пленка/подложка, L ДН имеют ограниченную длину, зависящую от величины разницы параметров пленки и подложки и угла отклонения подложки. Как следствие, суммарная длина L ДН в направлении отклонения подложки становится существенно меньшей, чем в направлении оси отклонения.

Обнаружена дислокационная конфигурация (Y -центр), состоящая из короткого отрезка L ДН и расходящихся от него вдоль направления отклонения двух 60° ДН. Предполагается, что его образование начинается с одновременного зарождения двух комплементарных дислокационных петель, образующих в границе раздела короткую краевую ДН и затем распространяющихся в одну сторону в виде двух расходящихся 60° ДН.

Список литературы

- [1] D.C. Houghton, D.D. Perovic, J.-M. Baribeau, G.G. Weatherty. *J. Appl. Phys.* **67**, 1850 (1990).
- [2] E.A. Fitzgerald, D.G. Ast. *Appl. Phys.* **63**, 693 (1988).
- [3] V.Yu. Karasev, N.A. Kiselev, E.V. Orlova, M.A. Gribelyuk, A.K. Gutakovsky, Yu.O. Kanter, S.M. Pintus, S.V. Rubanov, S.I. Stenin, A.A. Fedorov. *Ultramicroscopy* **35**, 11 (1991).
- [4] V.I. Vdovin. *J. Cryst. Growth* **172**, 58 (1997).
- [5] E.P. Kvam, D.M. Maher, C.J. Humphreys. *J. Mater. Res.* **5**, 1900 (1990).
- [6] T.J. Gosling. *J. Appl. Phys.* **74**, 5415 (1993).
- [7] R. Hull, J.C. Bean, D.J. Werder, R.E. Leibenguth. *Phys. Rev. B* **40**, 1681 (1989).
- [8] D.C. Houghton. *J. Appl. Phys.* **70**, 2136 (1991).
- [9] C.G. Tuppen, C.J. Gibbins. *J. Appl. Phys.* **68**, 1526 (1990).
- [10] F.K. LeGoues. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 876 (1994).
- [11] Yu.B. Bolkhovityanov, A.K. Gutakovskii, V.I. Mashanov, O.P. Pchelyakov, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *J. Appl. Phys.* **91**, 4710 (2002).
- [12] Ю.Б. Болховитянов, А.С. Дерябин, А.К. Гутаковский, А.В. Колесников, Л.В. Соколов. *ФТП* **41**, 1251 (2007).
- [13] J.W. Matthews, A.E. Blakeslee. *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).