

На правах рукописи



Лошкарев Иван Дмитриевич

**НАПРЯЖЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ДИСЛОКАЦИОННАЯ СТРУКТУРА
ПЛЕНОК GaAs, GaP и GeSi НА КРЕМНИИ**

Специальность 01.04.07

(физика конденсированного состояния)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск – 2013

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук

Научный руководитель:

Труханов Евгений Михайлович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ведущий научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Плясова Людмила Михайловна, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук.

Торопов Александр Иванович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

Защита состоится « 5 » ноября 2013 года в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 003.037.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, пр. академика Лаврентьева, 13.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук.

Автореферат разослан « 3 » октября 2013 года

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук



Погосов Артур Григорьевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

На сегодняшний момент наиболее широко используемым полупроводниковым материалом в электронике является кремний. Большинство полупроводниковых приборов изготавливаются на подложках кремния, которые относительно недороги, имеют высокую теплопроводность, малую массу и большой диаметр. Во многих областях, таких как оптоэлектроника, фотовольтаика, сверхвысокочастотное приборостроение, целесообразно использование материалов с более выгодными электрофизическими свойствами. Такими материалами являются, например $A^{III}B^V$ и Ge, поскольку имеют высокую подвижность носителей заряда, по сравнению с распространенным кремнием. Поэтому важной задачей является получение качественных пленок Ge и $A^{III}B^V$ на подложках кремния.

Из-за различия параметров решеток и коэффициентов термического расширения пленки и подложки в гетероструктурах возникают механические напряжения, которые могут релаксировать путем введения и перемещения дислокаций. Вследствие этого ухудшается структура пленок и прилегающего к границе раздела слоя подложки, что изменяет электрофизические свойства пленок и приборов на их основе. Изменение зонной структуры под влиянием упругой деформации приводит к изменению ширины запрещенной зоны полупроводника, концентрации неосновных носителей заряда, подвижности электронов и дырок. Поэтому знание о напряженном состоянии кристаллической решетки пленки очень важно.

Введенные дислокации несоответствия (ДН) в границе раздела формируют дислокационную сетку, которая создает в пленке поле механических напряжений. В общем случае это поле содержит нормальные и сдвиговые компоненты, однако только первые из них компенсируют напряжения несоответствия псевдоморфной пленки. Поле сдвиговых напряжений является избыточным. Оно оказывает влияние на электрофизические свойства структуры, а также находится в связке с причинами образования пронизывающих дислокаций. Изучение напряженного состояния решетки пленки является актуальной задачей, направленной на получение высокосовершенных эпитаксиальных слоев.

Использование вичинальных подложек позволяет избежать образования антифазных границ в пленках $A^{III}B^V$. Сетка ДН в вичинальной границе раздела не только формирует поля напряжений, но и создает разворот кристаллической решетки пленки относительно решетки подложки. Выявление взаимосвязи между наблюдаемым разворотом, структурой дислокационной границы раздела и распределением напряжений в пленке является одной из задач диссертационной работы.

Цель диссертационной работы. Изучение напряженного состояния и дислокационной структуры пластически релаксированных эпитаксиальных пленок с кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита на вицинальных подложках кремния. Установление закономерностей, характеризующих процесс снятия напряжений несоответствия.

Для достижения цели решались следующие задачи.

1. Накопление систематической информации о структурном состоянии пленок $A^{III}B^V$ на отклоненных подложках кремния в зависимости от способа зарождения первых монослоев.
2. Установление основных характеристик структурного состояния кристаллических решеток пленок $A^{III}B^V$, в зависимости от механизма формирования первого монослоя.
3. Экспериментальное определение величины разворота кристаллической решетки пленки ψ относительно решетки подложки и установление природы явлений, обуславливающих этот разворот.
4. Расчет равновесных расстояний между ДН для введенных в область границы раздела (ГР) дислокационных семейств и определение соответствующих им углов разворота решеток.
5. Установление сочетаний винтовых составляющих неортогональных дислокационных семейств, при которых имеет место компенсация дальнедействующих сдвиговых напряжений.
6. Расчет предельной накопленной энергии гетеросистемы для различных комбинаций дислокационных семейств, участвующих в процессе релаксации.
7. Установление возможных вариантов однородного распределения напряжений в приповерхностном слое эпитаксиальной пленки и определение размеров этого слоя.

Научная новизна

В диссертации впервые получены следующие экспериментальные результаты и теоретически установлены следующие оригинальные зависимости.

1. Получено справедливое для произвольной ориентации границы раздела выражение, которое отражает связь между параметрами дислокационных семейств, обеспечивших снятие напряжений несоответствия. Из данного выражения вычисляется параметр D , позволяющий разделить слой пленки толщиной $h > D$ на два субслоя с различным распределением напряжений. Слой толщиной D , расположенный вблизи границы раздела, является неоднородно напряженным. В приповерхностном слое толщиной $h - D$ возможны следующие варианты однородного распределения напряжений: полностью ненапряженное состояние; поле нормальных напряжений; поле сдвиговых напряжений; комбинация перечисленных вариантов.

2. На примере ГР (001) установлены две, имеющие различную природу, составляющие приповерхностного поля сдвиговых напряжений. Первая составляющая обусловлена неодинаковой плотностью взаимно перпендикулярных дислокаций несоответствия, так что степень релаксации в этих направлениях разная. Вторая – сочетанием винтовых компонент дислокаций, вводимых в границу раздела. Главные направления тензоров напряжений этих двух составляющих поля взаимно развернуты на 45° .

3. Для гетеросистемы GaAs/Si с границей раздела (1 1 13), отклоненной на 6° от сингулярной плоскости (001) экспериментально установлено, что механизм формирования первого монослоя As на Si определяет направление поворота кристаллической решетки GaAs относительно решетки Si. В случае зарождения по механизму замещения кристаллографическая ориентация поверхности слоя GaAs в процессе снятия напряжений несоответствия приближается к ориентации (1 1 12), а в случае зарождения по механизму осаждения – приближается к ориентации (1 1 14). Углы поворота кристаллических решеток GaAs относительно решетки Si составляют один – два десятка угловых минут.

Практическая значимость

Установленная в диссертации взаимосвязь параметров дислокационных семейств позволяет анализировать дислокационную структуру границы раздела произвольной ориентации. Выполнение расчета возможно для любых углов залегания дислокационных семейств в гетерогранице. В диссертации практическая значимость такого анализа продемонстрирована на примере ориентации (7 7 10), которая является вицинальной границей раздела (111).

Установлено, что для выращивания ненапряженных эпитаксиальных слоев произвольной толщины на несогласованных подложках необходимо выполнение двух следующих условий. Во-первых, должно выполняться условие $D < h$, где h – толщина эпитаксиальной пленки, а параметр D равен наибольшему из средних междислокационных расстояний (D_i) всех участвующих в релаксационном процессе семейств ДН. Во-вторых, суммарный тензор поля дальнедействующих напряжений, которые созданы в приповерхностном слое пленки сеткой дислокаций несоответствия, должен быть равен тензору напряжений псевдоморфной пленки, взятому с противоположным знаком. Знание этих требований необходимо, в частности, для выращивания на высокосовременных подложках Si толстых, качественных, практически объемных слоев GeSi, GaAs и других монокристаллов.

В диссертации показано, что измерение угла поворота решетки пленки относительно решетки подложки ψ является чувствительным методом контроля технологических режимов получения эпитаксиальной пленки GaAs на вицинальной подложке Si(001). Знак угла поворота

связан с полярностью осажденной пленки. Полярность определяется механизмом формирования первого монослоя пленки.

Представленные результаты позволили впервые реализовать в ИФП СО РАН трехосевую схему измерений на двухкристальном рентгеновском дифрактометре ДСО-1Т. Это дает возможность получать карты распределения интенсивности рентгеновских лучей в обратном пространстве вблизи узлов обратной решетки. С их применением для гетеросистемы GaAs/GaP/Si установлено, что прослойка GaP находится в практически псевдоморфном состоянии. Получить данный результат на основе кривых дифракционного отражения не представлялось возможным.

На защиту вынесены следующие положения.

1. Направление поворота кристаллической решетки эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001) зависит от механизма формирования первого монослоя. Решетка пленки поворачивается относительно решетки подложки вокруг направления ступеней $\langle 110 \rangle$ вицинальной границы раздела. Если зарождение начинается осаждением As, то ориентация пленки приближается к сингулярному направлению [001]. Если при зарождении As замещает Si, то решетка пленки поворачивается в противоположном направлении.

2. Поворот кристаллической решетки пленки GaAs обусловлен введением дислокаций несоответствия, параллельных ступеням. В случае зарождения пленки по механизму осаждения доля Ломеровских ДН, которые наиболее эффективно снимают напряжения несоответствия, не превышает 60% всех дислокаций, параллельных ступеням. В случае зарождения по механизму замещения эта доля Ломеровских дислокаций может достигать 100%.

3. Для гетеросистемы с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита при полном снятии напряжений несоответствия справедливо выражение

$$\sum_{i=1}^n (b_i^e / D_i) = 2f. \quad (*)$$

Здесь b_i^e - проекция краевой компоненты вектора Бюргерса на границу раздела, D_i - среднее расстояние между дислокациями несоответствия i -го семейства, n – число семейств, участвующих в снятии напряжений несоответствия. Выражение отражает удельный вклад каждого семейства дислокаций несоответствия в дислокационную границу раздела. Оно справедливо для произвольной ориентации границы раздела.

4. Поле сдвиговых напряжений приповерхностного слоя пленки с границей раздела (001) является суммой полей двух видов, которые имеют различную природу своего образования. Главные направления тензора напряжений поля первого вида параллельны кристаллографическим направлениям [110] и [1-10], а поля второго вида – параллельны направлениям [100] и [010]. Поле

сдвиговых напряжений первого вида установлено впервые, компоненты его тензора напряжений равны $\tau_{xy}=\tau_{yx}=Gb^e/D_x-Gb^e/D_y$. В экспериментальной практике поля сдвиговых напряжений первого и второго вида возникают в процессе снятия напряжений несоответствия и характеризуют неоптимальное протекание процесса.

Личный вклад соискателя в представленную работу состоит в получении экспериментальных результатов, представленных во второй и третьей главах диссертации. Выращивание образцов и их ДБЭ in-situ контроль выполнялся в группе В.В. Преображенского ИФП СО РАН. Теоретический анализ и подготовка материалов к публикации осуществлялась совместно с научным руководителем и соавторами. Лично диссертантом получены следующие теоретические результаты, представленные в четвертой главе. Сформулированы критерии, позволяющие различать оптимальное и неоптимальное протекание релаксационного процесса. Предложена гипотеза существования приповерхностного поля чистого сдвига. Получено математическое выражение для составляющей этого поля, обусловленной неодинаковой плотностью взаимно перпендикулярных ДН.

Апробация работы

Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях.

Вторая международная молодежная научная школа - семинар «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород, (2008); VI Международная конференции по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе «Кремний 2009». Новосибирск (2009); 11th International Conference and Seminar on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices, Erlagol, (2010); Второй международный междисциплинарный симпозиум «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-2), г.Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 3-8 сентября, 2010; Первый междисциплинарный, международный симпозиум «Кристаллография фазовых переходов при высоких давлениях и температурах (СРТ HP&T)-2011», г.Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 9-13 июня, 2011; Первый междисциплинарный, международный симпозиум «Свойства вещества при высоких давлениях и температурах. Физика, геология, механика, химия» (PSHP&T-2011), Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 13-17 июня, 2011; IX Международная конференция и VIII Школа молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург, (2012); Третий международный междисциплинарный симпозиум «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-3), г.Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 18-23 сентября, 2012.

Публикации

По теме диссертации опубликованы 8 статей и 13 тезисов докладов на Международных и Российских конференциях.

Структура и объем диссертации

Диссертационная работа состоит из четырех глав, выводов и списка литературы из 117 наименований. Она содержит 135 страниц, включает 39 рисунков и 10 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Диссертация содержит обзор литературы, методическую главу №2 и две оригинальные исследовательские главы. Для экспериментальных исследований использовались гетеросистемы GaAs/GaP/Si и GaAs/Si, полученные методами атомно-слоевой эпитаксии (АСЭ) и молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на вицинальных подложках Si (001). Были использованы два режима роста первого монослоя As [1]: осаждением – когда атомы As встраиваются на поверхности террас Si и замещением – когда атомы As, начиная от края террас, замещают верхний монослой Si. Подложки отклонялись на углы 6° или 4° от сингулярной ориентации (001) поворотом вокруг направления типа <110>, что формировало поверхность роста с индексами (1 1 13) или (1 1 20), соответственно. Для рентгено-структурных исследований применялось излучение $\text{CuK}_{\alpha 1}$, а также кристаллы-монокроматоры Ge(004) и Si(224). Регистрировались серии кривых дифракционного отражения (КДО) [A4]. Преимущественно использовалась геометрия ассиметричного рефлекса (115). Для предварительной оценки качества эпитаксиальных пленок КДО записывались в симметричном рефлексе (004).

Важным методом исследований являлась регистрация карт распределения отраженного рентгеновского излучения в обратном пространстве, что детально описано в **главе 2**. Методика регистрации реализована на основе базовой установки – рентгеновский дифрактометр ДСО-1Т [A19-21] (изготовлен в 2007г. на ООО «Радикон», Санкт-Петербург). Построение карт обратного пространства является инструментом наглядного отображения дилатационных и ориентационных искажений кристаллической решетки пленки. В качестве анализатора использовалась щель перед счетчиком шириной 0.05-0.1 мм, расположенная на расстоянии 200-300 мм от точки падения пучка на образец. Такая геометрия формировала среднюю угловую апертуру щели ~50 угл.с., что являлось оптимальным для обеспечения достаточного углового разрешения за приемлемое время накопления сигнала.

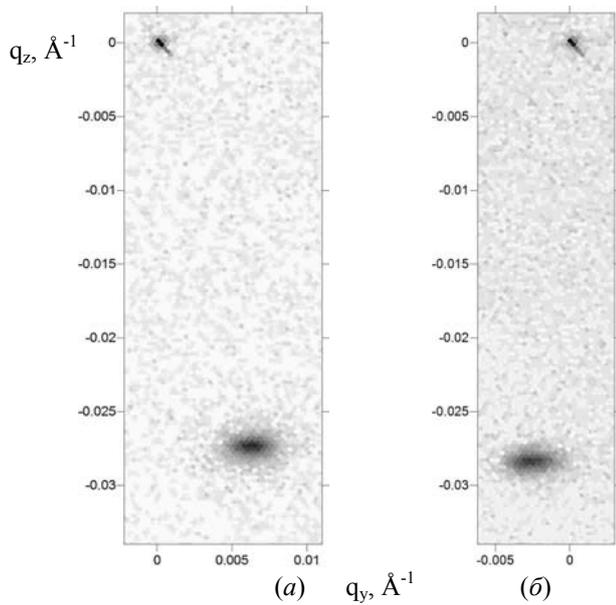


Рис.1. Карты обратного пространства вблизи узла 004 для двух вариантов структурного состояния эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001) в зависимости от способа формирования первого монослоя: (а)- осаждение As на Si и (б)- замещение верхнего монослоя Si атомами As. Верхний пик является узлом 004 обратной решетки подложки, а нижний – аналогичным узлом решетки пленки [A9].

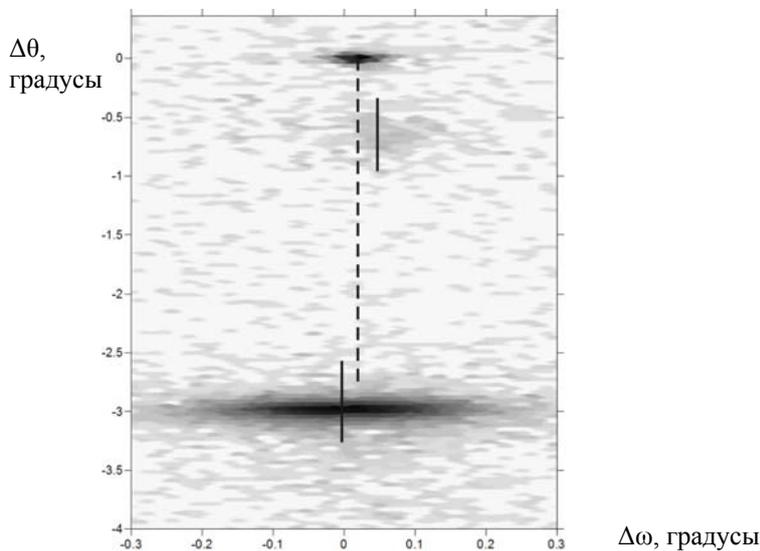


Рис.2. Карта $\omega/2\theta$ в угловых координатах для эпитаксиальной гетеросистемы GaAs/GaP/Si(001). Вертикальными линиями показаны положения пика подложки Si (самый верхний), слоя GaP и слоя GaAs (самый нижний).

Для гетеросистемы GaAs/Si типичные карты вблизи узла обратной решетки 004 приведены на рис.1. С их помощью установлено, что в зависимости от режима роста первого монослоя As (осаждение или замещение) кристаллическая решетка пленки поворачивается относительно решетки подложки в противоположных направлениях [A1]. В случае гетеросистемы GaAs/GaP/Si надежная регистрация пика GaP на КДО затруднена. Построение карт вблизи узла обратной решетки Si(004) позволило не только зарегистрировать узел (пик) от прослойки GaP(004), как показано на рис.2, но и установить, что прослойка находится в псевдоморфном состоянии [A6].

В главе 3 детально исследована экспериментально установленная диссертантом зависимость пластической релаксации пленок GaAs от способа зарождения первого монослоя на отклоненной подложке Si(001). Атомы мышьяка, встраиваясь на место монослоя кремния, наследуют его ориентацию связей, что определяет ориентацию димеров. В результате, в случае зарождения по

механизму осаждения димеры As на террасах растущей пленки GaAs располагаются перпендикулярно ступеням (рис.3а), а в случае зарождения по механизму замещения – параллельно (рис.3б). В обоих способах зарождения решетка пленки поворачивается вокруг оси, параллельной ступеням $\langle 110 \rangle$, расположенным на вицинальной подложке Si(001). В случае зарождения осаждением поворот объясняется большей плотностью тех дислокационных семейств, которым соответствует пониженная критическая толщина пленки h_c для введения ДН. Расстояние между этими дислокациями около 90 ангстрем, а расстояние между дислокациями с повышенной критической толщиной – 120 ангстрем. В таком случае наблюдается разворот решетки пленки на угол порядка 1000 угл.с. в направлении приближения вицинальной ориентации поверхности пленки к сингулярной ориентации (001), как показано на рис.3в. Разворот в этом направлении характерен для релаксированных гетеросистем GeSi/Si, GaP/Si [2], InGaAs/GaAs [3]. Однако в случае зарождения замещением возникает противоположный поворот кристаллической решетки (рис.3г), и вицинальная ориентация поверхности пленки удаляется от сингулярной ориентации (001).

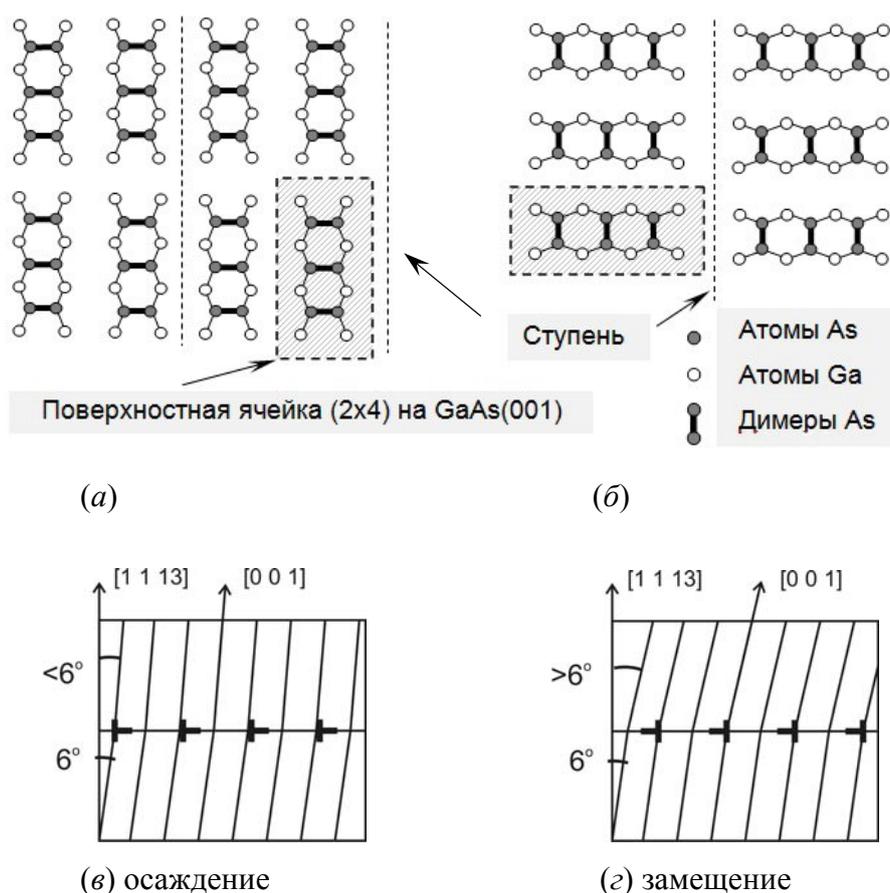


Рис.3. Ориентация димеров As (а, б) и повороты кристаллической решетки пленки относительно решетки подложки (в, г) при зарождении GaAs осаждением (а, в) и при зарождении замещением (б, г). Поверхностная ячейка (2x4) параллельна ступеням (а) и перпендикулярна им (б) [A9].

Величина поворота порядка 1000 угл.с. соответствует почти равной плотности 60° -ДН, имеющих пониженное и повышенное значения h_c . Эту величину поворота можно также объяснить пластической релаксацией в результате образования Ломеровских дислокаций несоответствия (ЛДН) вдоль направления ступеней. Они имеют минимальную критическую толщину, но их образование в рассматриваемых гетеросистемах возможно в результате реакции между двумя 60° -ДН с пониженным и повышенным значением h_c [4]. Выполненные в диссертации расчеты свидетельствуют, что измеренному развороту соответствует междислокационное расстояние около 100 ангстрем для 60° -ДН, имеющих как повышенную, так и пониженную h_c . Если в границе раздела вдоль ступеней присутствуют только Ломеровские ДН, то расстояние между ними также равно ~ 100 ангстрем.

На рис.4 приведены два высокоразрешающих электронно-микроскопических (ЭМ) изображения поперечных срезов гетеросистемы GaAs/Si(001) для обоих способов формирования первого монослоя: осаждение As на Si (рис.4а) и замещение верхнего монослоя Si атомами As (рис.4б). На каждом снимке зарегистрированы ЛДН, которые указаны стрелками. Установить, какую долю всех дислокаций несоответствия они составляют по ЭМ изображениям, не представилось возможным [A11]. Рентгеновские дифракционные данные, полученные на основе КДО и карт обратного пространства, свидетельствуют, что в случае зарождения пленки замещением доля ЛДН может составлять до 100%, однако в случае зарождения осаждением эта доля не превышает 60%.

Обсуждаются следующие две вероятные причины облегченного зарождения ДН с повышенной h_c для образования Ломеровских дислокаций: (1) наличие эшелонов ступеней (фасеток $(2 \times 2 \times 13)$, показанных на рис.5), которые выступают в качестве концентраторов напряжений; и (2) повышенная подвижность дислокаций, залегающих в этом направлении. В пленке, зародившейся в режиме замещения, вдоль ступеней залегают только дислокации α -типа,

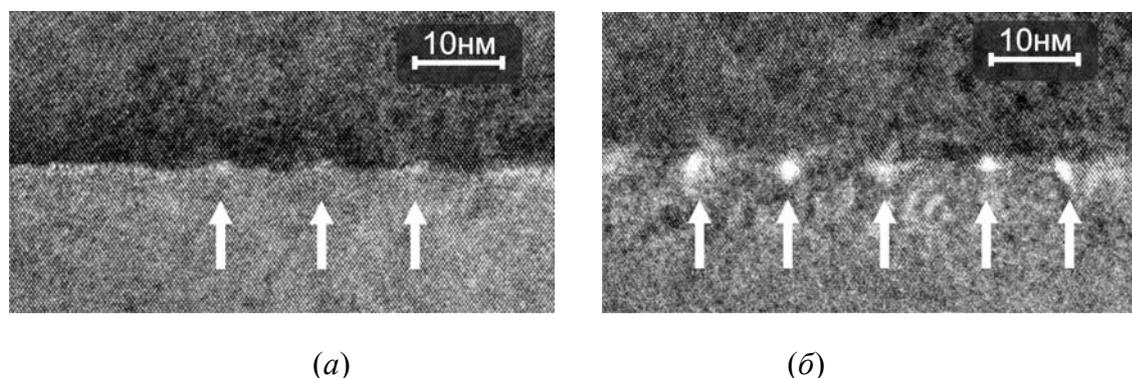


Рис.4. Электронно-микроскопические изображения поперечных срезов гетеросистемы GaAs/Si(001) для обоих способов формирования первого монослоя: осаждение (а) и замещение (б). Стрелками указаны Ломеровские ДН. Изображение получено в режиме многолучевой дифракции.

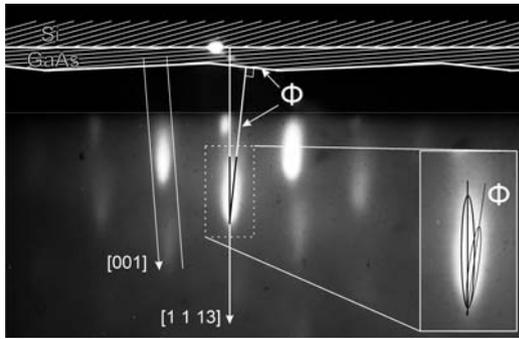


Рис.5. Картина дифракции быстрых электронов на отражение от поверхности пленки GaAs толщиной 3 монослоя на вицинальной подложке Si(001). Первый слой As выращен путем замещения [A5].

которые имеют более высокую подвижность [5], чем дислокации β -типа (залегают вдоль ступеней в пленке, зарожденной в режиме осаждения). Поэтому в режиме замещения образование ЛДН вдоль ступеней более вероятно.

Глава 4 посвящена установлению оригинальных закономерностей, имеющих место при протекании процесса снятия напряжений несоответствия. Согласно [A3], каждое семейство не чисто краевых ДН в приповерхностном слое эпитаксиальной пленки формирует поле дальнедействующих нормальных напряжений (ДаНН), описываемое тензором с двумя ненулевыми компонентами $\sigma_{xx} = 2Gb_i^e/[D_i(1-\nu)]$ и $\sigma_{yy} = 2\nu Gb_i^e/[D_i(1-\nu)]$, а также поле дальнедействующих сдвиговых напряжений (ДаСН) $\tau_{xy} = \tau_{yx} = Gb_i^s/D_i$. Первое поле обусловлено краевой, а второе – винтовой компонентой вектора Бюргерса \mathbf{b}_i дислокаций несоответствия [A7]. Здесь G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, b_i^s и b_i^e – проекции вектора \mathbf{b}_i на ДН и на перпендикуляр к ДН, лежащий в границе раздела (ГР), соответственно, D_i – среднее междислокационное расстояние для i -го семейства ДН ($1 \leq i \leq n$), и n – число семейств, участвующих в релаксационном процессе.

Если релаксационный процесс завершился оптимально, то суммарный тензор напряжений ($\Sigma\sigma_i$), созданных всеми семействами ДН, равен тензору напряжений несоответствия, взятому с обратным знаком ($-\sigma_0$). Здесь и далее суммирование Σ осуществляется по i от 1 до n . Для гетерограниц (001), (111) и (013) значения n изменяются, соответственно, в пределах ($2 \leq n \leq 8$), ($3 \leq n \leq 9$) и ($3 \leq n \leq 12$). Если сумму всех первых инвариант тензоров σ_i приравнять инварианте тензора $-\sigma_0$, то получим оригинальное выражение (*), которое представлено в положении №3, вынесенном на защиту. В этом выражении через D_i обозначено среднее расстояние между дислокациями несоответствия i -го семейства. Наибольшее из значений D_i в выражении (*) обозначено D .

В диссертации выполнены расчеты, позволившие установить следующие два условия, обеспечивающие рост ненапряженного верхнего слоя эпитаксиальной пленки. Первым условием является $D < h$, где h – толщина пленки, а вторым – выполнение равенства $\Sigma\sigma_i = -\sigma_0$. Слой вблизи

границы раздела толщиной D является неоднородно напряженным, а верхний слой толщиной $h-D$ - ненапряженным. Сформулированные два условия являются достаточными, чтобы характеризовать релаксацию напряжений несоответствия как оптимальную. С помощью расчетов установлено существование комбинаций неортогональных дислокационных семейств $a/2\langle 110 \rangle \{111\}$, которые обеспечивают оптимальную пластическую релаксацию. Расчет выполнен на примере границы раздела (013).

В случае неоптимально завершившейся релаксации напряжений несоответствия $\Sigma \sigma_i \neq -\sigma_0$, но условие (*) выполняется. В этом случае приповерхностный слой ($h-D$) содержит однородное поле сдвиговых напряжений. Это значит, что указанный слой пленки находится в состоянии чистого сдвига, когда первая инварианта тензора напряжений строго равна нулю. В результате, тензор напряжений, повернутый на 45° от главных направлений вокруг перпендикуляра к ГР, содержит всего две отличные от нуля компоненты $\tau_{xy} = \tau_{yx}$.

Для приповерхностного поля чистого сдвига в диссертации на примере ГР (001) впервые установлены две составляющие этого поля, имеющие различную природу образования. Первая вызвана неодинаковой плотностью взаимно перпендикулярных ДН, в результате чего степень пластической релаксации в этих направлениях различна. Такие результаты известны в литературе [3, 6], а также получены нами [A4]. В диссертации установлены ненулевые компоненты тензора напряжений первой составляющей, которые определяются как $\tau_{xy} = \tau_{yx} = Gb^e/D_x - Gb^e/D_y$. Показано, что величина этих компонент может уменьшаться в результате реакций между пронизывающими дислокациями. Это приближает релаксационный процесс к оптимальному. Вторая составляющая обусловлена типом винтовой компоненты вводимых в ГР дислокаций несоответствия. Главные направления тензоров напряжений составляющих полей взаимно развернуты на 45° . Если процесс снятия напряжений несоответствия не завершен (т.е. степень пластической релаксации $\rho < 1$), то правая часть выражения (*) содержит дополнительный множитель ρ , а приповерхностный слой ($h-D$) включает дополнительное поле однородных нормальных напряжений.

Для ГР (001) и (111) частным случаем (*) является выражение $D = kb^e / f$, где $k=1$ в случае ГР (001) и $k=3/2$ в случае ГР (111). В работе [A3] нами продемонстрировано, что использование множителя $k=3/2$ для определения D кардинально изменяет интерпретацию исследуемых дислокационных сеток. Авторы [7], приняв $k=1$ для ГР(111), сделали вывод, что исследованные ими дислокационные семейства содержат полные 60° -ДН. Нами показано [A3], что на электронно-микроскопических снимках авторами [7] зарегистрирована сетка частичных 90° -ДН.

Основные выводы.

1. Механизм зарождения эпитаксиальной пленки GaAs на Si(1 1 13) является фактором, характеризующим структурное состояние пластически релаксированной пленки. В процессе релаксации кристаллическая решетка пленки поворачивается относительно решетки подложки. Поворот происходит вокруг оси $\langle 110 \rangle$, параллельной ступеням, на угол порядка 10^3 угл.с. В результате поворота ориентация поверхности пленки удаляется от сингулярной плоскости (001), если первый монослой GaAs формируется замещением атомов кремния мышьяком; и ориентация этой поверхности приближается к (001), если первый монослой GaAs формируется осаждением атомов мышьяка.

2. С помощью регистрации карт распределения интенсивности рентгеновских лучей в обратном пространстве установлено деформационное и структурное состояние слоев GaP и GaAs гетеросистемы GaAs/GaP/Si(1 1 20). Слой GaP (50 нм) находится в псевдоморфном состоянии, а пленка GaAs (1000 нм) – в полностью релаксированном. Сетка дислокаций несоответствия расположена в границе, разделяющей эти слои.

3. В диссертации впервые получено справедливое для произвольной ориентации границы раздела выражение

$$\sum_{i=1}^n (b_i^e / D_i) = 2f, \quad (*)$$

которое устанавливает взаимную связь между параметрами дислокационных семейств. Здесь b_i^e - проекция краевой компоненты вектора Бюргера на границу раздела, D_i - среднее расстояние между дислокациями несоответствия i -го семейства, n – число семейств, участвующих в снятии напряжений несоответствия. Выражение (*) позволило показать, что сетка частичных 90° -ДН Шокли формируется как в сингулярной, так и в вичинальной границах раздела (111) гетеросистемы Ge/Si.

4. С использованием выражения (*) установлено существование комбинаций неортогональных дислокационных семейств $a/2\langle 110 \rangle\{111\}$, которые обеспечивают полную пластическую релаксацию напряжений несоответствия и отсутствие дальнедействующих сдвиговых напряжений.

5. Величина D , равная наибольшему из значений D_i в выражении (*), позволяет охарактеризовать распределение напряжений в эпитаксиальной пленке толщиной $h > D$. Расположенная вблизи границы раздела область пленки шириной D содержит неоднородное поле напряжений. Выше лежащая приповерхностная область пленки является либо ненапряженной, либо однородно напряженной.

6. Установлены 4 варианта однородного напряженного состояния приповерхностного слоя толщиной $h-D$: (1) поле сдвиговых напряжений, (2) поле нормальных напряжений, (3) поле, содержащее сдвиговые и нормальные напряжения, а также (4) полностью ненапряженное состояние. Варианты (2) и (3) характеризуют развивающиеся релаксационные процессы, а варианты (1) и (4) – завершённые процессы. Релаксационный процесс является оптимальным, если в приповерхностном слое отсутствуют сдвиговые напряжения (варианты 2 и 4).

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах.

Статьи

A1. Лошкарёв И.Д., Василенко А.П., Труханов Е.М., Колесников А.В., Путятю М.А., Семягин Б.Р., Преображенский В.В., Пчеляков О.П. Зависимость пластической релаксации плёнок GaAs от способа зарождения первого монослоя As на Si(001) // Известия РАН, серия физическая. – 2013. – Т.77, №3. – С.264-267.

A2. Лошкарёв И.Д., Труханов Е.М., Романюк К.Н., Качанова М.М. Теоретическое и экспериментальное определение начальной стадии пластической релаксации напряжений несоответствия в гетеросистеме подложка(111)–островки плёнки // Изв. РАН, серия физическая. – 2012. – Т.76, №3. – С.425-428.

A3. Труханов Е.М., Лошкарёв И.Д., Романюк К.Н., Гутаковский А.К., Ильин А.С., Колесников А.В. Структурное состояние гетеросистем Ge/Si с интерфейсами (001), (111) и $(7\ 7\ 10)$ // Известия РАН, сер.физ. – 2012. – Т.76, №3. – С.373-376.

A4. Колесников А. В., Ильин А. С., Труханов Е. М., Василенко А. П., Лошкарёв И. Д., Дерябин А. С. Рентгенодифракционный анализ искажений эпитаксиальной плёнки на отклонённых подложках (001) // Изв. РАН, серия физическая. – 2011. – Т.75, №5. – С.652-655.

A5. Емельянов Е.А., Коханенко А.П., Пчеляков О.П., Лошкарёв И.Д., Селезнев В.А., Путятю М.А., Семягин Б.Р., Преображенский В.В., Zhicuan Niц, Haiqiao Ni Морфология поверхности и кристаллографические свойства плёнок GaAs, выращенных методом МЛЭ на vicинальных подложках Si(001) // Изв. Вузов. Физика. – 2013. – Т.56, №1. – С.49-54.

A6. Loshkarev I.D., Vasilenko A.P., Putyato M.A., Semyagyn B.R., Preobrazhensky V.V. Effects of Early Monolayers Formation Technique on Strain State of GaAs Films on Vicinal Si(001) Substrate // Proceeding 11th International Conference and Seminar on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices, Erlagol. – 2010. – P.84-86.

A7. Труханов Е.М., Лошкарёв И.Д., Романюк К.Н., Ильин А.С., Гутаковский А.К., Колесников А.В., Качанова М.М. Напряжённое состояние и дислокационная структура гетеросистем германий/кремний с интерфейсами (001), (111) и $(7\ 7\ 10)$ // Электронный журнал «Фазовые

переходы, упорядоченные состояния и новые материалы» – 2011. – http://ptosnm.ru/_files/Moduls/catalog/items/T_catalog_items_F_download_I_669_v1.pdf

A8. Труханов Е.М., Лошкарев И.Д., Качанова М.М., Василенко А.П. Начало пластической релаксации эпитаксиальной фазы высокого давления скольжением дислокаций несоответствия в плоскости интерфейса (111) // Электронный журнал «Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы» – 2011. – http://ptosnm.ru/_files/Moduls/catalog/items/T_catalog_items_F_download_I_668_v1.pdf

Тезисы и материалы конференций

A9. Лошкарев И.Д., Василенко А.П., Труханов Е.М., Колесников А.В., Ильин А.С., Пчеляков О.П., Путято М.А., Семягин Б.Р., Преображенский В.В. Ориентация ячеек поверхностной фазы 2x4 и разворот кристаллической решетки эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001) // Материалы Международного Симпозиума «Физика низкоразмерных систем», Ростов-на-Дону – пос.Лео. – 2012. – С.113-115.

A10. Василенко А.П., Колесников А.В., Лошкарев И.Д., Труханов Е.М., Путято М.А., Семягин Б.Р., Преображенский В.В. Зависимость деформационного состояния пленок GaAs на вицинальных подложках Si(001) от способа формирования первых монослоев // Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.136.

A11. Пчеляков О.П., Путято М.А., Семягин Б.Р., Емельянов Е.А., Феклин Д.Ф., Василенко А.П., Лошкарев И.Д., Паханов Н.А., Преображенский В.В. Гетероструктуры $A^{III}B^V$ на кремнии // Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.56.

A12. Труханов Е.М., Колесников А.В., Лошкарев И.Д. Возникновение дальнедействующих полей нормальных и сдвиговых напряжений при введении дислокаций несоответствия // Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.84.

A13. Колесников А.В., Труханов Е.М., Ильин А.С., Лошкарев И.Д. "Роль дислокаций несоответствия при образовании малоугловых границ в гетеросистемах с несингулярными ориентациями". Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.146.

A14. Лошкарев И.Д., Качанова М.М., Труханов Е.М., Романюк К.Н., "Начало пластического процесса снятия напряжений несоответствия скольжением дислокаций в плоскости границы раздела (111)". Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.172.

- A15.** Труханов Е.М., Лошкарев И.Д., Романюк К.Н., Ильин А.С., Гутаковский А.К., Колесников А.В., Качанова М.М. Напряженное состояние и дислокационная структура гетеросистем германий/кремний с интерфейсами (001), (111) и (7 7 10) // Материалы международного симпозиума «Конденсированные среды при высоких давлениях и температурах» г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. – 2011. – С.74-77.
- A16.** Труханов Е.М., Лошкарев И.Д., Качанова М.М., Василенко А.П. Начало пластической релаксации эпитаксиальной фазы высокого давления скольжением дислокаций несоответствия в плоскости интерфейса (111) // Материалы международного симпозиума «Конденсированные среды при высоких давлениях и температурах» г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. – 2011. – С.169-172.
- A17.** Колесников А.В., Ильин А.С., Труханов Е.М., Василенко А.П., Лошкарев И.Д., Дерябин А.С. Влияние ступеней гетерограницы на структурное состояние эпитаксиальной пленки // Материалы международного симпозиума «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-2) г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. – 2010. – С.271-273.
- A18.** Труханов Е.М., Колесников А.В., Ильин А.С., Василенко А.П., Лошкарев И.Д., Дерябин А.С. Кристаллическое и структурное состояние эпитаксиальных пленок GeSi на кремниевых подложках различной ориентации // Материалы международного симпозиума «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-2) г. Ростов-на-Дону – п.Лоо. – 2010. – С.267-270.
- A19.** Лошкарев И.Д., Василенко А.П., Колесников А.В., Труханов Е.М. Характеризация деформационного состояния эпитаксиальных пленок на вичинальных подложках с использованием автоматизированной системы управления дифрактометром // Тезисы докладов VI Международной конференции «Кремний-2009», Новосибирск. - 2009. – С.187.
- A20.** Лошкарев И.Д., Василенко А.П., Труханов Е.М. Разработка программного обеспечения автоматизированной системы управления рентгеновским трехосевым дифрактометром // Сборник материалов Второй международной молодежной научной школы - семинара «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород. – 2008. – С.113-114.
- A21.** Василенко А.П., Лошкарев И.Д., Разумовский А.Ю., Труханов Е.М., Чернов М.А. Автоматический двухкристальный рентгеновский дифрактометр ДСО-1Т // Сборник материалов Второй международной молодежной научной школы - семинара «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород. – 2008. – С.76-78.

Список цитируемой литературы

1. Путьято М. А., Семягин Б. Р., Емельянов Е. А., Паханов Н. А., Преображенский В. В. Молекулярно-лучевая эпитаксия структур GaAs/Si(001) для высокоэффективных тандемных АЗВ5-преобразователей солнечной энергии на активной кремниевой подложке // Известия ВУЗов. – 2010. – Т.53, №9. – С.26 – 32.
2. Yasufumi Takagi, Yuzo Furukawa, Akihiro Wakahara, Hirofumi Kan Lattice relaxation process and crystallographic tilt in GaP layers grown on misoriented Si(001) substrates by metalorganic vapor phase epitaxy // J. Appl. Phys. – 2010. – Vol.107. – P.063506-1-8.
3. Goldman R. S., Kavanagh K. L., Wieder H. H., Ehrlich S. N., Feenstra R. M. Effects of GaAs substrate misorientation on strain relaxation in InGaAs films and multilayers // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol.83, №10. – P.5137-5149.
4. Bolkhovityanov Yu.B., Sokolov L.V. Ge-on-Si films obtained by epitaxial growing: edge dislocations and their participation in plastic relaxation // Semicond. Sci. Technol. – 2012. – Vol.27,N.4. – P.043001-1-12.
5. Yonenaga I., Sumino K. Behaviour of dislocations in GaAs revealed by etch pit technique and X-ray topography // J. Cryst. Growth. – 1993. – Vol.126. – P.19-29.
6. Аргунова Т.С., Рувимов С.С., Сорокин Л.М., Шульпина И.Л. 60° дислокации несоответствия в гетероструктурах типа InGaAs/GaAs (001) // ФТТ. – 1985. – Т.27№10. – С.2960-2964.
7. Пинтус С.М., Латышев А.В., Асеев А.Л., Карасев В.Ю. Дислокационная структура границы раздела Ge–Si (111) // Поверхность. – 1984. – №8. – С.60-65.