

ISSN 0207-3528

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ПОВЕРХНОСТЬ

**ФИЗИКА
ХИМИЯ
МЕХАНИКА**

1995 **2**

УДК 539.23

© 1995 г. ТРУХАНОВ Е. М.

ВЛИЯНИЕ ТИПА ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ НА ЭНЕРГИЮ И СТРУКТУРУ ТОЛСТЫХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК

Впервые разработан аспект теории дислокаций несоответствия для толсто-пленочных гетеросистем, учитывающий вклад винтовой компоненты вектора Бюргерса в энергию системы. Под толстыми понимаются пленки, толщина которых превышает расстояние между дислокациями несоответствия в пластически срелаксировавшей гетеросистеме. Показано, что в системах, содержащих семейства не чисто краевых дислокаций несоответствия, возможно возникновение далекодействующих сжимающе-растягивающих напряжений, энергия которых увеличивается пропорционально толщине пленки. Для широко используемых на практике (100) ориентаций подложек это может привести к возникновению чередующихся в шахматном порядке по-разному напряженных прямоугольных участков пленки. Релаксация указанных напряжений обсуждается на примере образования непрямолинейных трещин.

В рамках существующей теории дислокаций несоответствия (ДН) энергия гетеросистемы, содержащей предельную плотность ДН, является ограниченной при увеличении толщины пленки h . Целенаправленные исследования, посвященные проверке данного вывода, неизвестны. Выражения, позволяющие в аналитическом виде записать энергию гетеросистемы (ГС) как функцию от h , получены Мэтьюзом (см., например, [1]). Согласно его модели, при увеличении h упругие остаточные деформации пленки стремятся к 0, а энергия системы ДН при достижении некоторой толщины пленки становится постоянной. Данные выводы являются результатом использования следующих трех допущений.

1. Вместо энергии, обусловленной суммарными неоднородными деформациями в слоях ГС, вычисляют две энергии составляющих тензоров деформаций, одна из которых W_d — энергия обычной дислокации, а под второй понимают энергию остаточных упругих деформаций пленки. Такая процедура не согласуется с требованиями теории упругости, поскольку энергия не является аддитивной функцией деформаций.

2. Ошибку, обусловленную приведенным выше допущением, можно частично скомпенсировать, если принять, что поле упругих деформаций вокруг каждой дислокации распространяется на расстояние, не превышающее расстояние d между соседними ДН [2]. В результате выражение для W_d записывается в виде

$$W_d = Gb^2 (1 - \nu \cos^2 \alpha) [1 + \ln (h/b)] / [2\pi (1 - \nu)], \quad \text{при } h < d, \quad (1a)$$

$$W_d = Gb^2 (1 - \nu \cos^2 \alpha) [1 + \ln (d/b)] / [2\pi (1 - \nu)], \quad \text{при } h > d, \quad (1б)$$

где G — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, b — величина вектора Бюргерса ($\mathbf{b}$), α — угол между $\mathbf{b}$ и линией дислокации.

3. Для определения энергии $W_{дн}$ системы ДН используется еще одно допущение, согласно которому данная энергия вычисляется суммированием величин W_d [1], что, как и в случае первого допущения, неверно из-за неаддитивности энергии.

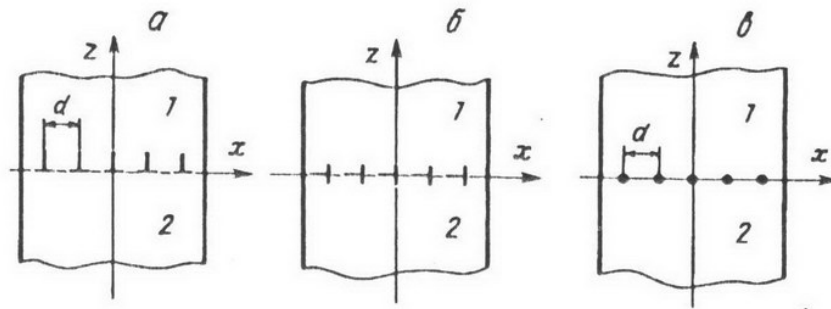


Рис. 1. Схематическое представление системы дислокаций несоответствия, которая помещена в границе раздела двух бесконечно толстых слоев гетеросистемы 1 и 2 и содержит: составляющую краевых ДН, скользящих параллельно границе раздела (а); краевых ДН, скользящих перпендикулярно границе раздела (б); винтовых ДН (в)

Суммирование дает $W_{\text{дн}} = 2fW_{\text{д}}/b_{\text{к}}$, где f — параметр несоответствия гетеросистемы, $b_{\text{к}}$ — проекция краевой составляющей вектора Бюргерса на границу раздела. Используя более удобные параметры, запишем

$$W_{\text{дн}} = fGb (1 - \nu \cos^2 \alpha) [1 + \ln (h/b)] / [2\pi (1 - \nu) \sin \alpha \cos \beta], \text{ при } h < d, \quad (2a)$$

$$W_{\text{дн}} = fGb (1 - \nu \cos^2 \alpha) [1 + \ln (d/b)] / [2\pi (1 - \nu) \sin \alpha \cos \beta], \text{ при } h > d, \quad (2б)$$

где β — угол между плоскостью скольжения ДН и границей раздела.

В полученном виде или его модификациях выражение для энергии ДН фактически стало классическим и до последнего времени используется в различных обзорах, изданиях справочного характера и оригинальных работах (см., например, [3, 4]). Экспериментальные определения критических толщин пленки находятся в удовлетворительном согласии с расчетными, что свидетельствует о сравнительной корректности выражения для $W_{\text{дн}}$ при анализе тонкопленочных ГС.

Корректность выражения для $W_{\text{дн}}$ в случае толстопленочных систем не изучена. В настоящей работе показано, что для системы чисто краевых ДН энергия $W_{\text{дн}}$ действительно является ограниченной величиной, но для ДН, имеющих винтовую составляющую, $W_{\text{дн}}$ может неограниченно возрастать при увеличении толщины пленки. Экспериментальные результаты обсуждаются на примере образования трещин в толстых эпитаксиальных пленках.

Возникновение дальнедействующих напряжений в толстых пленках, содержащих предельную плотность дислокаций несоответствия

Важным параметром, используемым в предлагаемой работе, является d_{∞} — расстояние между соседними ДН, когда h стремится к бесконечности. Под толстыми пленками будем понимать такие, для которых $h/d_{\infty} > 1$. Для сравнительно корректного определения $W_{\text{дн}}$ необходимо выполнить суммирование двух тензоров, один из которых характеризует распределение напряжений в псевдоморфной пленке, а второй — в слое однородного кристалла, содержащего систему дислокаций. Рассмотрение данной задачи начнем с простейшего варианта.

Случай чисто краевых дислокаций несоответствия. Пусть ГС состоит из двух полубесконечных кристаллов кубической сингонии, которые имеют одинаковые упругие постоянные, но различные параметры кристаллических решеток и сопрягаются по плоскости xOy . Распределения деформаций запишутся в виде $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = f/2$ для первого кристалла и $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = -f/2$ для второго.

Используя допущение $\sigma_{xz} = 0$, получим

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \pm fG (1 + \nu) / (1 - \nu), \quad (3)$$

где знаки «+» и «-» справедливы соответственно для первого и второго кристаллов. Напряжения, создаваемые системой прямолинейных краевых дислокаций, однородно распределенных в их плоскости скольжения (001) внутри бесконечного кристалла (рис. 1, а), рассмотрены в работе [5]. При увеличении z все компоненты тензора напряжений, кроме σ_{xx} , становятся исчезающе малыми, а $\sigma_{xx} = \pm Gbd^{-1}(1-\nu)^{-1}$. Примем реакцию среды в направлении y абсолютно жесткой, т. е. $\sigma_{yy} = -\nu\sigma_{xx}$. Тогда для двух взаимно перпендикулярных систем дислокаций, залегающих в общей плоскости скольжения и распределенных с одинаковой плотностью, напряжения σ_{xx} и σ_{yy} вдали от плоскости скольжения описываются выражением

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \pm (Gb/d) (1 + \nu)/(1 - \nu). \quad (4)$$

При полном снятии несоответствия, когда $d = d_{\infty} = b/f$, получим, что вдали от границы раздела поле псевдоморфных напряжений (3) и поле напряжений двух систем краевых дислокаций (4) полностью взаимно компенсируются, и, следовательно, дальнотействующие нормальные напряжения в ГС отсутствуют. Расчеты показывают, что компенсация компонент σ_{xx} и σ_{yy} практически полная уже на расстоянии $z = d$.

Из изложенного видно, что допущение об ограниченности энергии ДН качественно верно для чисто краевых дислокаций. Качественно верен и вывод о приближении к 0 остаточных упругих деформаций пленки. Проверка количественного согласия в задачи настоящей статьи не входит.

Случай смешанных дислокаций несоответствия. Рассмотрим в плоскости (001), разграничивающей два бесконечных толстых кристалла, систему эквидистантно расположенных смешанных ДН. Проекцию вектора Бюргерса на границу раздела разложим на винтовую b_v и краевую b_k компоненты. Еще одну краевую составляющую вектора Бюргерса, перпендикулярную границе раздела, обозначим b_{kt} . Разделим исходную систему смешанных ДН на составляющие, которым соответствуют компоненты b_k (рис. 1, а), b_{kt} (рис. 1, б) и b_v (рис. 1, в). В случае полного снятия несоответствия ($d = d_{\infty} = b_k/f$) на расстоянии $z > d$ поле напряжений псевдоморфной ГС полностью компенсируется полем напряжений системы дислокаций рис. 1, а. Система краевых дислокаций (рис. 1, б) не создает дальнотействующих напряжений [5]. Система же винтовых дислокаций (рис. 1, в) создает дальнотействующие сдвиговые напряжения $\sigma_{xy} = Gb_v/(2d)$, не зависящие от z .

Перпендикулярная система ДН создает идентичное или противоположное по знаку поле напряжений в зависимости от знака винтовой компоненты вектора Бюргерса. Таким образом, результирующее дальнотействующее поле сдвиговых напряжений либо исчезает, либо становится равным

$$\sigma_{xy} = Gb_v/d_{\infty}. \quad (5)$$

Отметим, что для используемых в электронной технологии ГС возможны как полная компенсация сдвиговых напряжений, создаваемых взаимно перпендикулярными системами ДН, так и усиление данных напряжений. При обсуждении распределения дальнотействующих σ_{xy} в ГС пленка — подложка примем обычно реализуемое на практике условие $h \ll H$ для толщин пленки h и подложки H . Тогда в подложке можно считать $\sigma_{xy} = 0$, а напряжения в пленке для $z > d_{\infty}$ — постоянными по толщине. Можно показать, что их величина становится удвоенной по сравнению со случаем неограниченно толстых компонент ГС (формула (5)). Учитывая, что $b_k = b \sin \alpha \cos \beta$ и $b_v = b \cos \alpha$, величина дальнотействующих напряжений в пленке запишется как

$$\sigma_{xy} = 2Gf/(\tan \alpha \cos \beta). \quad (6)$$

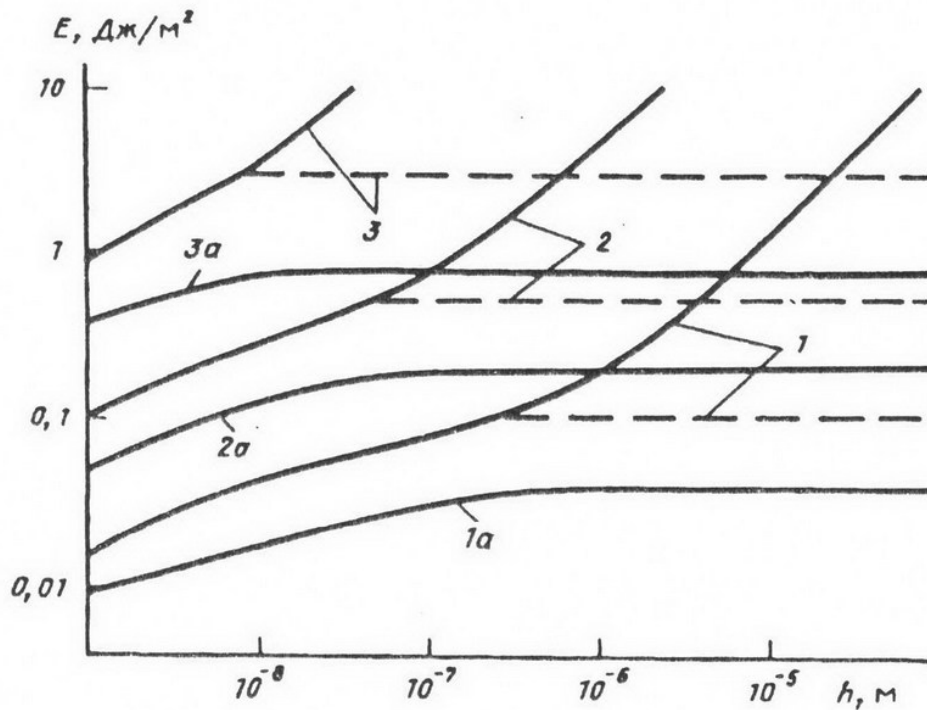


Рис. 2. Зависимость энергии пересекающихся систем дислокаций несоответствия от толщины слоя твердого раствора SiGe на кремниевой подложке; параметр несоответствия $f = 0,001$ для зависимостей 1 и 1a, 0,06 для 2 и 2a, 0,04 для 3 и 3a; 1, 2 и 3 — энергии для систем 60°-ных ДН (пунктирные линии — расчет в рамках классических представлений); 1a, 2a и 3a — энергии для систем чисто краевых ДН

Для толщин $h \gg d_\infty = b_x/f$ накопленная упругая энергия, приходящаяся на единицу площади гетерограницы, равна

$$W_{\text{ДН}} = 2Gf^2h/(\text{tg}^2 \alpha \cos^2 \beta). \quad (7)$$

Она увеличивается пропорционально h и может быть причиной различных структурных процессов в толстых пленках.

В случае более слабого условия $h > d_\infty$ зависимость (7) является приближенной, а корректным — лишь дифференциальный вариант данной формулы

$$\delta W_{\text{ДН}} = 2Gf^2\delta h/(\text{tg}^2 \alpha \cos^2 \beta). \quad (7a)$$

Величину $W_{\text{ДН}}$ при $h > d_\infty$ можно выразить в виде комбинации выражений (2) и (7) с учетом параллельного сдвига зависимости (7) из точки $h = 0$ в точку $h = d_\infty$. В результате получим, что при $h < d_\infty$ справедлива зависимость (2), а при $h > d_\infty$ имеет место

$$W_{\text{ДН}} = 2Gf^2(h - b \sin \alpha \cos \beta/f)/(\text{tg}^2 \alpha \cos^2 \beta) + fGb(1 - \nu \cos^2 \alpha) \times \\ \times [1 + \ln(d/b)]/[2\pi(1 - \nu) \sin \alpha \cos \beta]. \quad (8)$$

Таким образом, наличие винтовой составляющей у ДН является принципиальным при вычислении энергии толстых эпитаксиальных пленок. Для тонких пленок энергия одиночной смешанной ДН даже ниже энергии чисто краевой ДН, если дислокации имеют одинаковые b . Для толстых же пленок энергия системы смешанных ДН одного знака может неограниченно возрастать с увеличением h , а энергия системы чисто краевых ДН является ограниченной при любой толщине пленки. На рис. 2 это иллюстрируется на примере ГС, представляющей однородную пленку твердого раствора $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ на (001), кремниевой подложке и содержащей в границе раздела ортогональные системы либо 60°-ных

ДН (зависимости 1, 2 и 3), либо чисто краевых ДН (зависимости 1а; 2а и 3а). Состав пленки соответствует параметру несоответствия, равному 0,001 (зависимости 1 и 1а), 0,006 (зависимости 2 и 2а) и 0,04 (зависимости 3 и 3а для системы пленка германия на кремнии). Расчеты выполнялись по формулам (2) и (8), углы составляли $\alpha = 60^\circ$ и $\beta = 54,73^\circ$ или $\alpha = 90^\circ$ и $\beta = 0$. Видно, что каждая из зависимостей 1, 2 и 3 содержит по два участка с различными наклонами, соответствующими толщинам $h < d$ и $h > d$. Пунктирными линиями на кривых 1, 2 и 3 показана величина энергии ДН при $h > d$ в рамках классической теории ДН.

Разрушение гетеросистемы как результат релаксации дальнодействующих напряжений системы дислокаций несоответствия

ГС с алмазными или сфалеритными кристаллическими решетками, которые разделены (001) или (111) границами, являются наиболее распространенными среди используемых в полупроводниковой технологии систем. Для ГС с (111) границами раздела наиболее типичными являются системы 60° -ных ДН. В случае (001) границ в принципе возможны семейства чисто краевых (ломеровских) ДН, однако на практике гораздо чаще встречаются также системы 60° -ных ДН [10]. Для них величина винтовой составляющей b_v равна $b/2$. Укажем две важные особенности семейств ДН упомянутых выше гетеросистем. Первая состоит в том, что для любой плоскости скольжения $\{111\}$ возможны два семейства 60° -ных ДН с одинаковой краевой составляющей вектора Бюргерса, но взаимно противоположными винтовыми составляющими ($b_{v1} = -b_{v2}$). Так, для (111) плоскости скольжения (001) ГС первое семейство ДН имеет $b_1 = a/2[0\bar{1}1]$ и $b_{v1} = a/4[1\bar{1}0]$ и второе имеет $b_2 = a/2[\bar{1}01]$ и $b_{v2} = a/4[\bar{1}10]$.

Вторая особенность семейств ДН состоит в том, что для ГС с границами раздела (100) и (111) возможны случаи, когда ДН вводятся группами одного семейства, так что в границе раздела возникают области, в пределах которых подавляющее большинство ДН имеют идентичные b . Она следует из анализа представленных в литературе экспериментальных данных по введению ДН в данные ГС. Проявление указанной особенности проиллюстрируем на примерах дислокационной структуры, возникающей в пленках и подложках германия.

Установление факта идентичности векторов Бюргерса для параллельных ДН в пределах некоторой области может быть выполнено с помощью дифракционного анализа. Примером тонкого варианта подобного анализа является работа [6], в которой идентичность b в пределах групп параллельных 60° -ных ДН следует из наблюдения дифракционного электронно-микроскопического контраста и сверхструктурных рефлексов от периодической системы дислокаций, расположенных в границе раздела (001) Ge/Si ГС. Набор информации проводился с площади, близкой к площади сечения электронного пучка, диаметр которого составлял несколько десятков микрон.

В работе [7] вывод об идентичности векторов Бюргерса в двух группах пересекающихся ДН следует из анализа картины, возникающей в результате протекания дислокационных реакций в (111) подложке германия. В указанном случае вектор b одинаков для дислокаций обеих групп и лежит вдоль линии пересечения плоскостей скольжения данных групп. В результате реакций возникают так называемые Г-образные [8] (или L-образные дислокации [7]). Так, из представленного в работе [7] снимка дислокационной структуры германия видно, что данные реакции имели место между всеми пересекающимися дислокациями обеих групп. Следовательно, в данном случае на площади границы раздела $\sim 1 \text{ мкм}^2$ все ДН в двух пересекающихся группах имели идентичные b .

Совокупность двух указанных выше особенностей приводит к тому, что распределенные в плоскости границы раздела ДН можно схематично представить

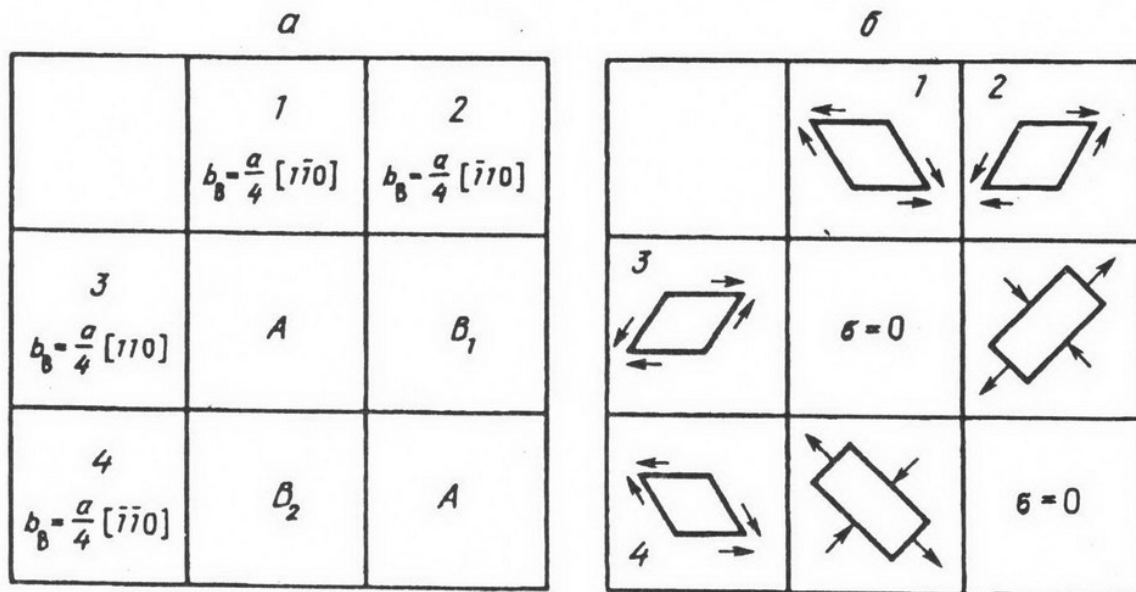


Рис. 3. Схемы, объясняющие возникновение ненапряженных (A) и по-разному напряженных (B₁ и B₂) участков пленки, которые созданы в результате суперпозиции дальнодействующих полей напряжений семейств дислокаций несоответствия (1—4); *a* — обозначение участков пленки; *b* — характер дальнодействующих напряжений, создаваемых отдельными семействами и их пересечением

в виде пересекающихся систем полос дислокаций. В пределах одной полосы подавляющее большинство дислокаций имеют одинаковые винтовые компоненты векторов Бюргерса. Значения же b_s дислокаций соседних полос являются противоположными по знаку. В случае (001) границы раздела — это две взаимно ортогональные системы полос. На рис. 3, *a* демонстрируется взаимодействие четырех семейств ДН (обозначены 1—4). Возле номеров семейств указаны соответствующие им винтовые составляющие векторов Бюргерса. В результате пересечения семейств 1 и 3, а также 2 и 4 возникают участки пленки (обозначены A), для которых дальнодействующие $\sigma = 0$. Пересечения семейств 1 и 4, а также 2 и 3 формируют участки B, упругодеформированные дальнодействующими напряжениями.

На рис. 3, *b* рядом с номерами семейств приведены схемы, поясняющие знак дальнодействующих сдвиговых напряжений, создаваемых индивидуально каждым семейством ДН. Видно, что параллельным семействам свойственны равные по модулю и противоположные по знаку дальнодействующие σ_{xy} . В результате на участках B₁ и B₂ возникают взаимно противоположные по знаку результирующие σ_{xy} . Величина данных напряжений является удвоенной по сравнению с напряжениями, создаваемыми семействами параллельных ДН. Приведя данные напряжения к главным направлениям, получим сжимающе-растягивающие напряжения (схематично показаны на рис. 3, *b*). Угол между главными направлениями и направлением чистого сдвига составляет 45°. Можно показать, что по модулю величины сжимающих и растягивающих напряжений равны и составляют $\sigma_0 = 2Gf/(\text{tg}\alpha \cos \beta)$. Из рис. 3, *b* видно, что схемы распределения указанных напряжений на участках B₁ и B₂ развернуты на 90°. Поэтому если, например, возникает релаксация растягивающих напряжений посредством введения трещин, то данным трещинам свойственно изменять направление на 90° при переходе от участка типа B₁ к участку типа B₂. На участках типа A вдали от границ с B-участками трещины должны останавливаться.

Иллюстрацией изложенного может служить полученный с помощью оптической микроскопии снимок распределения трещин в пленке германия толщиной 7 мкм на кремниевой подложке [9] (рис. 4). Видно, что трещинам характерны углы поворота на 90°. Важным результатом выполненных исследований является воз-

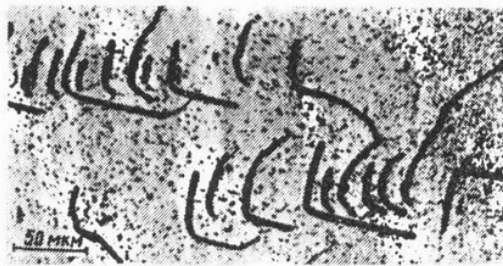


Рис. 4. Оптический снимок трещин в пленке германия, выращенной при 500° С на (100) кремниевой подложке [9]

возможность объяснения образования трещин в исходно сжатых пленках. Согласно изложенным выше рассуждениям, в таких пленках после полной пластической релаксации исходных напряжений несоответствия возможно возникновение дальнедействующих сжимающе-растягивающих напряжений, которые могут хрупко релаксировать при введении трещин. Пленка германия на кремниевой подложке (рис. 4) — пример ГС, в которой пленка в псевдоморфном состоянии (и на начальной стадии пластической релаксации) является сжатой. Согласно работе [10], анализ экспериментальных данных свидетельствует, что образование трещин в такого типа пленках мало вероятно. Настоящая работа показывает, когда это становится возможным.

По-видимому, отсутствует корректная модель для вычисления толщины пленки h_p , когда введение трещин, обусловленных дальнедействующими сжимающе-растягивающими напряжениями, становится энергетически выгодным. Использование модели Гриффитса для случая чисто растягивающих напряжений $\sigma_{nc} = 2Gf(1 + \nu)/(1 - \nu)$ псевдоморфной пленки позволяет записать [1] $h_p = 2\gamma G(1 + \nu)^2 / [\sigma_{nc}^2(1 - \nu^2)]$, где γ — удельная поверхностная энергия пленки. Для грубой оценки h_p в нашем случае проведем замену напряжений σ_{nc} на σ_0 в правой части записанной формулы и замену величины h_p на величину $h_p - d$ в ее левой части. Последняя замена обусловлена тем фактом, что дальнедействующие напряжения имеют место в пленке вне прилежащего к границе раздела слоя шириной d . В результате вычисленная величина h_p для эпитаксиальной пленки германия на кремниевой подложке оказывается приблизительно на три порядка величины ниже экспериментально наблюдаемой толщины (несколько микрометров).

Можно выдвинуть несколько факторов, приводящих к столь значительному расхождению экспериментального и теоретического значений h_p . Одним из возможных представляется увеличение значения эффективного расстояния d_∞ между дислокациями с одинаковыми значениями b_s в полосе ДН одного семейства (рис. 3, а), поскольку часть ДН может не принадлежать данному семейству. Если принять этот фактор за основной, то как показывает расчет, в полосе достаточно избытка дислокаций одного типа всего на несколько процентов, чтобы получить согласие между экспериментальным и теоретическим значениями h_p .

Отметим также, что расхождение расчетных и экспериментальных значений h_p может быть связано и с протеканием процессов пластической релаксации дальнедействующих сдвиговых напряжений. В ГС с (001) и (111) границами раздела в принципе возможно введение чисто винтовых дислокаций, параллельных ДН, которое происходит в слоях пленки, удаленных от границы раздела на расстояние, превышающее d_∞ . Анализ показывает, что возможен еще один вариант пластической релаксации дальнедействующих напряжений, когда происходит образование фрагментов пленки, разделенных дислокационными стенками.

В заключение отметим, что в настоящей работе разработан аспект теории дислокаций несоответствия для толсто пленочных гетеросистем, содержащих семейства не чисто краевых дислокаций несоответствия. Показано, что возможно возникновение дальнедействующих сжимающе-растягивающих напряжений, энергия которых увеличивается пропорционально толщине пленки. В (001) и (111) эпитаксиальных пленках возникновение данных дальнедействующих напряжений может происходить неоднородно по площади границы раздела. В результате возникают ненапряженные участки пленки и участки, в которых направления, например, растягивающих напряжений развернуты на 90° .

Влияние дальнедействующих напряжений на структуру пленки обсуждается на примере образования непрямолинейных трещин в слое германия на кремниевой подложке. Объясняется возможность возникновения трещин в пленках, которым в псевдоморфном состоянии характерны сжимающие напряжения. Возникновение данных трещин является лишь частным, хотя и наиболее неблагоприятным вариантом релаксации дальнедействующих напряжений.

Для границ раздела несингулярных ориентаций представляется принципиально важным определение условий, при которых дальнедействующие поля напряжений пересекающихся семейств дислокаций несоответствия полностью или частично компенсируются, а также определение условий, когда взаимное усиление данных напряжений оказывается неизбежным. Имеются в виду в первую очередь геометрические условия, в частности знак и величина винтовой составляющей вектора Бюргерса, а также углы пересечения дислокационных семейств.

Дополнительное значение приобретают поиски возможностей формирования протяженных чисто краевых дислокаций несоответствия, поскольку их системы не создают дальнедействующих напряжений.

Автор выражает благодарность О. П. Пчелякову и К. К. Зилингу за обсуждение результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Matthews J. W.* // J. Vac. Sci. and Technol. 1975. № 1. V. 12. P. 126.
2. Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967. 222 с.
3. *Herman M. A., Sitter H.* // Mol. Beam Epitaxy. Springer Series in Material Science. V. 7. London, Paris, Tokio, 1989. P. 221.
4. *Ball C. A. B., Van derMerwe J. H.* // Dislocations in Solids. North-Holland, Amsterdam, 1983. Ch. 27.
5. Хирт Дж., Ломе И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 496 с.
6. Пинтус С. М., Латышев А. В., Асеев А. Л., Карасев В. Ю. // Поверхность. 1984. № 8. С. 60.
7. *Trukhanov E. M., Gorokhov E. B., Stenin S. I.* // Phys. Stat. Sol. (a). 1976. V. 33. P. 435.
8. Стенин С. И., Пчеляков О. П., Труханов Е. М. // Свойства структур металл — диэлектрик — полупроводник. М.: Наука, 1976. С. 222.
9. Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. // Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев: Наук. думка, 1983. С. 135.
10. Мильвидский М. Г., Освенский Б. В. // Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. М.: Металлургия, 1985. С. 51.

Институт физики полупроводников СО РАН,
Новосибирск

Поступила в редакцию
31.V.1994
Принята в печать
7.VI.1994

INFLUENCE OF MISFIT DISLOCATION TYPE ON ENERGY
AND STRUCTURE OF EPITAXIAL FILMS

The aspect of the misfit dislocation theory taking into account the role of the misfit dislocation Burgers vector screw component is developed for the first time. For films with thickness exceeding the between-dislocation distance, the formation of long-distance compressive-tensile stresses is possible. Therefore, variously stressed rectangle areas can appear in used in the semiconductor technology (001) oriented heteroepitaxial films. The long-distance stress relaxation is discussed for the case of unstraight scratch formation.

УДК 539.23

© 1995 г. ТРУХАНОВ Е. М.

АНАЛИЗ ПРИРОДЫ ФРАГМЕНТАРНОЙ СТРУКТУРЫ В ГЕТЕРОЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ

Предложена модель образования фрагментарной структуры, экспериментально наблюдаемой при гетероэпитаксиальном росте сравнительно толстых пленок. Показано, что движущей силой процесса образования фрагментов является релаксация дальнедействующих сдвиговых напряжений в растущей эпитаксиальной пленке. Подобные напряжения возникают в системах, которые содержат группы дислокаций несоответствия с идентичными векторами Бюргерса, имеющими красную и винтовую составляющие. Анализ выполнен для (001) гетеросистемы, когда фрагменты имеют форму прямоугольников с границами, параллельными $\langle 110 \rangle$. Обсуждается общая природа фрагментарной структуры и неоднородно распределенных по площади пленки дислокационных отрезков, выходящих на поверхность пленки под большим углом. Обнаружено, что при эпитаксии на несингулярных срезах подложки возможно как возникновение дальнедействующих напряжений, так и их отсутствие.

При росте сравнительно толстых гетероэпитаксиальных пленок возможно образование так называемой фрагментарной структуры [1–3]. В развитом виде фрагменты представляют собой малодефектные участки пленки, разделенные дислокационными стенками. При дальнейшем увеличении толщины пленки в границах фрагментов возникают трещины, поэтому в литературе образование фрагментарной структуры иногда рассматривают как стадию структурных изменений, предшествующую образованию трещин. Данная структура экспериментально наблюдалась в системах Ge—Si [1–3], PbS—PbSe [4], InP—GaInAs [5], в различных гранатах [6]. Фрагментарная структура наиболее исследована для системы Ge—Si. На начальном этапе ее образования обнаруживается тенденция к полигонизации дислокаций, что вызывает возникновение малоугловых границ в плоскостях скольжения $\{111\}$ [2]. По мере роста пленки в границах продолжается накопление дислокаций.

В работе [2] в качестве основного фактора, ответственного за образование фрагментарной структуры, рассматривается наличие концентраторов напряжений на границе раздела или на свободной поверхности пленки, вблизи которых тормозятся вводимые дислокации несоответствия (ДН). Однако цельная физическая модель, объясняющая образование данной структуры, пока не разработана. Экспериментально установленная толщина пленки, при которой начинается полигонизация дислокаций, для системы Si—Ge составляет 1 мкм, что более чем на два порядка величины превышает критическую для введения ДН. В столь толстых пленках исходное несоответствие обычно полностью снято, и в рамках существующей теории дислокаций несоответствия остаточные упругие деформации в системе являются пренебрежимо малыми. Следовательно, должны отсутствовать и какие-либо причины для протекания процессов структурных превращений, в том числе образования фрагментарной структуры.

Движущая сила формирования данной структуры становится понятной, если рассмотреть напряженное состояние пленки, которая содержит группы ДН с идентичными векторами Бюргерса, имеющими краевую и винтовую составляющие. Такой анализ выполнен в настоящей работе. Показано, что в результате суперпозиции полей напряжений, которые создаются двумя пересекающимися под

прямым углом системами ДН, в толстой пленке может возникнуть чередование напряженных участков и участков, свободных от напряжений. Возникновение фрагментарной структуры объясняется протеканием процесса пластической релаксации напряженных участков. В работе под толстыми понимаются пленки, толщина которых превышает расстояние между дислокациями несоответствия в пластически сrelаксировавшей гетеросистеме.

**Факторы, обуславливающие возникновение
дальнодействующих сдвиговых напряжений
в полупроводниковых эпитаксиальных пленках**

Для системы эквидистантно расположенных в границе раздела смешанных ДН с идентичными векторами Бюргерса $\mathbf{b}$ разложим проекцию $\mathbf{b}$ на границу раздела на две компоненты: винтовую b_v и краевую b_k . Согласно работе [7], система таких дислокаций имеет дальнодействующее поле напряжений. Интересен случай полного снятия несоответствия, когда расстояние между соседними дислокациями $d = b_k/f$, где f — параметр несоответствия. Примем обычно реализуемую для систем с большим несоответствием ситуацию, когда d , толщина пленки h и толщина подложки H связаны соотношениями $H \gg h \gg d$.

Анализ показывает, что в пленке на расстоянии от границы раздела, превышающем величину d , возникает поле дальнодействующих сдвиговых напряжений $\sigma_{xy} = Gb_v/d$, обусловленное составляющей вектора Бюргерса b_v . Система ДН, залегающих в границе раздела перпендикулярно рассмотренной системе, создает идентичное или противоположное по знаку поле напряжений в зависимости от знака винтовой компоненты вектора Бюргерса. Таким образом, результирующее дальнодействующее поле сдвиговых напряжений либо исчезает, либо становится $\sigma_{xy} = 2Gb_v/d$. В последнем случае энергия дальнодействующих сдвиговых напряжений пленки пропорциональна h и теоретически неограниченно накапливается. Поскольку на практике такое накопление невозможно, то в данном случае неизбежны структурные превращения пленки. В настоящей работе образование фрагментарной структуры рассматривается как результат релаксации поля указанных дальнодействующих напряжений.

Гетеросистемы с алмазными или сфалеритными кристаллическими решетками, которые разделены (001) или (111) границами, наиболее распространены среди систем, используемых в полупроводниковой технологии. В большинстве случаев возникающие в них ДН являются 60°-ными. Из геометрического рассмотрения следует, что для данных гетеросистем возможны параллельные ДН с противоположными по знаку компонентами вектора Бюргерса b_v . Поэтому для систем, приготовленных на строго сориентированных подложках, можно предположить, что в произвольно взятой группе ДН в среднем половина дислокаций будет иметь компоненты b_v с положительным знаком и половина — с отрицательным.

В то же время анализ известных в литературе экспериментальных данных показывает, что в полупроводниковых пленочных системах наблюдаются случаи, когда в пределах некоторой области границы раздела введенные ДН имеют идентичные векторы Бюргерса. Например, для системы (001) Ge—Si данный вывод следует из результатов наблюдения дифракционного электронно-микроскопического контраста и сверхструктурных рефлексов от периодической системы ДН [8]. Набор информации проводился с площади, диаметр которой составлял несколько десятков микрон (площадь сечения электронного пучка). В работе [9] вывод об идентичности векторов Бюргерса в двух группах пересекающихся ДН следует из анализа картины, возникающей в результате протекания дислокационных реакций в (111) подложке германия. В указанном случае на площади границы раздела $\sim 1 \text{ м}^2$ все ДН в двух пересекающихся группах имели идентичные $\mathbf{b}$.

Электронно-микроскопическое наблюдение аналогичных дислокационных реакций в системе, содержащей слой InGaAsP на GaAs (111)А подложке [10],

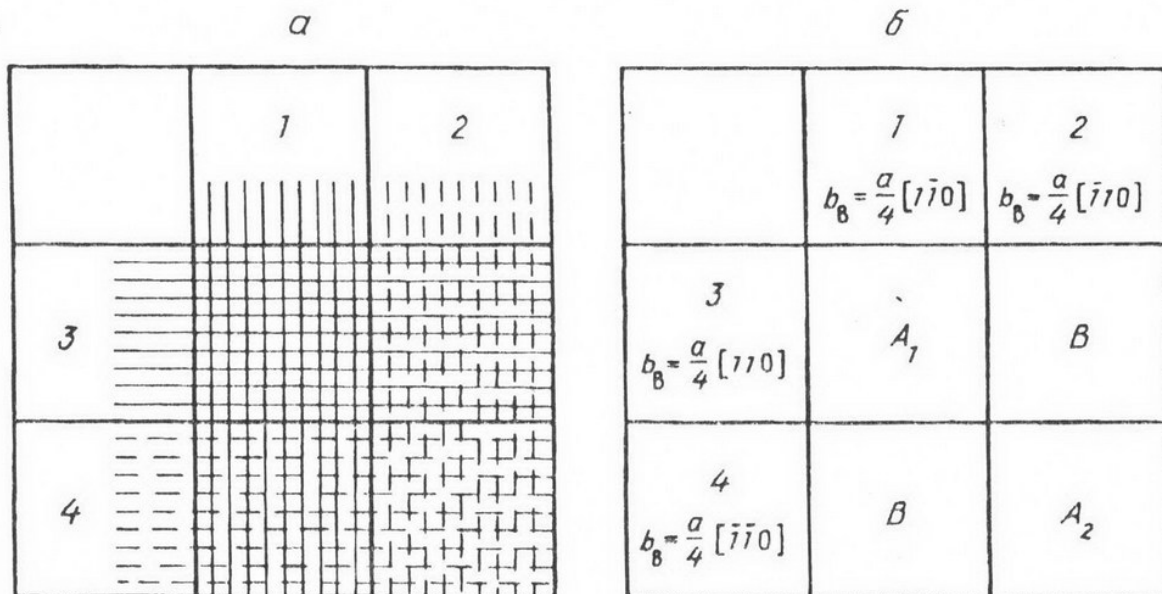


Рис. 1. Схема распределения 4 семейств ДН в (100) плоскости границы раздела (а) и возникшие в результате пересечения данных семейств ненапряженные (A_1 и A_2) и напряженные (B) участки пленки (б)

позволяет заключить, что на площади несколько квадратных микрометров наблюдаются 60° -ные ДН преимущественно одного знака.

Природа эффекта, когда в пределах некоторой области границы раздела введенные ДН имеют идентичные векторы Бюргерса, требует специального изучения. Отметим, что подобная особенность может, например, проявиться при образовании группы ДН из общего источника. Для возникновения дальнедействующих сдвиговых напряжений необходимо, чтобы размер упомянутой области границы раздела превышал толщину пленки.

Анализ условий возникновения фрагментарной структуры

Изложенные выше соображения позволяют проанализировать возможную природу образования фрагментарной структуры. Для простоты выполним исследование для (001) гетеросистемы, когда фрагменты имеют форму прямоугольников с границами, параллельными $\langle 110 \rangle$. Данной ориентации свойственны 8 систем скольжения с одинаковыми критическими толщинами пленки для введения ДН. В результате возможно формирование 60° -ных ДН в двух взаимно перпендикулярных направлениях по 4 семейства для каждого. В частности, для четырех семейств ДН, параллельных $[110]$, векторы Бюргерса равны $b_1 = (a/2) [011]$, $b_2 = (a/2) [\bar{1}01]$, $b_3 = (a/2) [0\bar{1}1]$, $b_4 = (a/2) [\bar{1}0\bar{1}]$. Легко убедиться, что все ДН имеют одинаковую проекцию краевой составляющей вектора Бюргерса на границу раздела, но два варианта винтовых компонент. Для семейств с векторами Бюргерса b_1 и b_3 величина $b_n = a/4 [\bar{1}10]$, для остальных $b_n = -a/4 [110]$. Аналогичная ситуация имеет место для четырех семейств ДН, параллельных $[\bar{1}10]$.

Поскольку исследуемые дальнедействующие сдвиговые напряжения определяются знаком b_n , то в смысле создания данных напряжений семейства ДН с векторами Бюргерса b_1 и b_3 являются эквивалентными. Аналогичным образом эквивалентны семейства ДН с векторами Бюргерса b_2 и b_4 . Для ДН, параллельных $[\bar{1}10]$, имеются также две пары эквивалентных семейств. Поэтому для простоты рассуждений вместо 8 семейств 60° -ных ДН, возможных в (100) гетеросистеме, будем рассматривать только 4 семейства.

Схематично можно представить распределение ДН в (100) плоскости границы раздела в виде периодически чередующихся четырех полос систем дислокаций (на рис. 1, а они обозначены 1—4). Сплошные и пунктирные линии символизируют дислокации со взаимно противоположными по знаку компонентами b_n . Здесь

учтена рассмотренная выше возможность введения групп ДН с идентичными векторами Бюргерса: в пределах одной полосы подавляющее большинство дислокаций имеют одинаковые $b_{\perp}$, но для соседних полос эти компоненты противоположны по знаку. В результате пересечения семейств 1 и 3, а также 2 и 4 возникают прямоугольные участки, обозначенные соответственно A_1 и A_2 (рис. 1, б), на которых отсутствуют дальнедействующие σ_{xy} . Участки типа B образованы пересечением систем полос разного вида, и в них данные напряжения возникают. На рис. 1, б указаны винтовые компоненты рассматриваемых 4 семейств.

Дислокационная структура, схематично изображенная на рис. 1, возникает при толщинах $h < d$ или сравнимых с величиной d , когда для участков типа A и B удельные энергии напряжений одного порядка величины. При $h > d$, когда на A -участках энергия $W_{\text{ДН}}$ становится постоянной, а на B -участках она возрастает пропорционально h , A -участкам оказывается энергетически выгодно увеличить свою площадь за счет B -участков. В результате B -участки должны выклиниваться, а участки A_1 и A_2 заполнить все пространство пленки. В рамках развитых в настоящей работе представлений, именно A -участки, увеличившие свою среднюю площадь в 2 раза, и являются фрагментами экспериментально наблюдаемой фрагментарной структуры. ДН каждого из фрагментов должны выходить на поверхность пленки на границах между фрагментами, формируя при этом дислокационные стенки. Это связано с тем, что ДН соседних фрагментов имеют противоположные винтовые компоненты, и дислокации, например, фрагмента A_1 повышают энергию фрагмента A_2 .

Механизм формирования дислокационных стенок в границах между фрагментами требует специального теоретического и экспериментального исследования. Пока можно лишь указать, что при пластической релаксации дальнедействующих сдвиговых напряжений возможно протекание, в частности, следующих двух процессов. Первый процесс — это введение чисто винтовых дислокаций с векторами Бюргерса, знак которых противоположен знаку $b_{\perp}$ в полосах, обусловивших возникновение дальнедействующих напряжений. Их введение возможно при толщинах h , по порядку величины сравнимых или превышающих d . Например, для полос 1 и 2 на рис. 1 вводимые винтовые дислокации должны иметь векторы Бюргерса, равные соответственно $b_1 = (a/2) [1\bar{1}0]$ и $b_2 = (a/2) [1\bar{1}0]$.

Второй процесс релаксации дальнедействующих сдвиговых напряжений — это замена на B -участках дислокаций одного типа на другой (дислокаций, обозначенных пунктирными линиями, на сплошные или наоборот). Рассмотрим это для нижнего левого участка B на рис. 1. При замене на данном участке горизонтальных дислокаций одного типа на другой участок A_1 увеличивает свою площадь, распространяясь вниз, а между участками B и A_2 формируется дислокационная стенка. При замене вертикальных дислокаций площадь увеличивает участок A_2 , распространяясь влево, а стенка формируется между B и A_1 .

На начальной стадии процесса замены на B -участках дислокаций одного типа на другой можно предположить выход исходных дислокаций на поверхность пленки. При этом должно иметь место преодоление высокого энергетического барьера, поскольку выход дислокации на поверхность пленки, толщина которой существенно превышает критическую для введения ДН, является в большей степени энергетически невыгодным процессом. Можно предположить двухстадийный вариант данного процесса, поскольку происходит уменьшение величины энергетического барьера, когда на первом этапе вводится 60° -ная дислокация, реагирующая с исходной и превращающая ее в ломеровскую, а на втором вводится еще одна 60° -ная дислокация, превращающая ломеровскую в 60° -ную с требуемой винтовой компонентой вектора Бюргерса.

Важной общей особенностью рассмотренных выше процессов пластической релаксации дальнедействующих сдвиговых напряжений (введение винтовых дислокаций и замена одного типа ДН на другой), является то, что на границах между участками B и A , направления которых параллельны $\langle 110 \rangle$, формируются

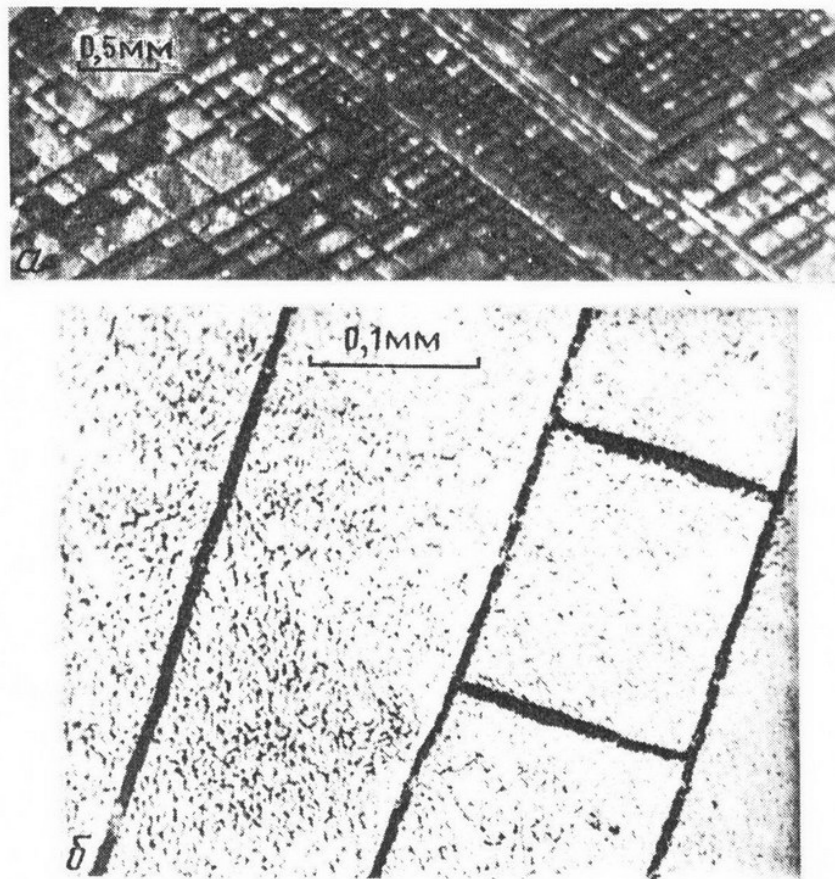


Рис. 2. Оптические микроснимки фрагментарной структуры в (100) системе Ge—Si, полученной при температуре $>600^\circ\text{C}$ и экспериментально исследованной в работах [3, 11] (а) и в работе [11] (б)

дислокационные стенки. Это согласуется с экспериментальными данными по образованию фрагментарной структуры. Для расчета толщин пленки, при которых протекание процессов формирования дислокационных стенок становится энергетически выгодным, необходим более детальный анализ процессов, что не входит в задачу настоящей работы. Отметим, что экспериментально установленная толщина пленки, при которой начинается пластическая релаксация дальнедействующих напряжений в гетеросистеме Si—Ge, составляет 1 мкм, что намного превышает величину d (для данной системы она ~ 10 нм), и в случае введения ДН полосами по модели рис. 1 означает высокую энергию, накопленную дальнедействующими напряжениями.

На рис. 2 представлены данные по наблюдению фрагментарной структуры в (100) пленках германия на кремниевой подложке [2, 11]. Границы фрагментов ориентированы в направлениях $\langle 110 \rangle$, типичные размеры фрагментов составляют 100—250 мкм [11].

Согласно предложенной модели, необходимым условием образования фрагментарной структуры является существование семейств параллельных ДН с противоположными по знаку компонентами вектора Бюргерса $b_{\parallel}$. Это условие находится в соответствии с экспериментальными данными, так как, согласно работе [2], фрагментарная структура наблюдалась в гетеросистемах с ориентациями границ раздела (100), (111) и (110), где указанные семейства дислокаций возможны. С экспериментальными данными согласуется также формирование границ фрагментов вдоль линий пересечения плоскостей $\langle 111 \rangle$ с поверхностью. По-видимому, наиболее важный результат предложенной модели — это определение, что движущей силой процесса образования фрагментов является релаксация дальнедействующих сдвиговых напряжений в толстых эпитаксиальных пленках. Тем не менее данную модель предлагается рассматривать как возможную и требующую

экспериментальной проверки. Прежде всего это относится к исследованию начальной стадии формирования фрагментарной структуры с целью установления, насколько выполняется приведенная на рис. 1 схема введения ДН.

Если приведенное на рис. 1 распределение семейств ДН выражено очень слабо или даже отсутствует, но имеет место флуктуация плотности ДН различных типов по площади гетеросистемы при постоянной их средней плотности, то по мере увеличения h в пленке могут возникать неоднородно распределенные по площади дальнотействующие сдвиговые напряжения, которые в процессе своей релаксации вызовут укорочение и удлинение ДН различных типов. В результате возникает слабо выраженный аналог фрагментарной структуры, проявляющийся в неоднородно распределенной по площади плотности дислокационных отрезков, выходящих на поверхность под большим углом. Следовательно, возникновение данных дислокационных отрезков, широко наблюдаемое в экспериментальной практике, возможно, является принципиально неизбежным при эпитаксиальном росте на сингулярных срезах подложек (например, (100), (111) и др.), когда равновероятно введение ДН, имеющих как положительные, так и отрицательные винтовые составляющие вектора Бюргерса.

По-видимому, для технологии приготовления эпитаксиальных структур имеет практическое значение использование срезов, отклоненных на несколько градусов от (100) плоскости вокруг направления $\langle 001 \rangle$, поскольку в результате данного отклонения критические толщины для введения различных дислокационных семейств изменяются по-разному и, как следствие, уменьшается вероятность возникновения фрагментарной структуры и дислокационных отрезков, выходящих на поверхность под большим углом. Примеры использования таких срезов имеются. Так, в работе [12] исследована дислокационная структура гетеросистемы GaInAs—GaAs, которая получена с использованием подложки, отклоненной на 2° от (001) вокруг [010].

В идеальном варианте эпитаксиальный рост на несингулярных срезах подложки должен обеспечить снятие исходного несоответствия гетеросистемы посредством введения только двух семейств ДН. Другими словами, при этом будет иметь место формирование единственного фрагмента, площадь которого равна площади границы раздела. Различные в данной работе представления позволяют установить, рост на каких несингулярных срезах должен сопровождаться возникновением дальнотействующих напряжений и на каких — их отсутствием.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Vasilevskaya V. N., Soldatenko N. N., Tkhorik Yu. A. // Thin Sol. Films. 1971. V. 7. № 2. P. 127.
2. Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев: Наук. думка, 1983. 135 с.
3. Datsenko L. I., Gureev A. N., Korotkevich N. F., Soldatenko N. N., Tkhorik Yu. A. // Thin. Sol. Films. 1971. V. 7. № 2. P. 117.
4. Matthews J. W. // Phil. Mag. 1971. V. 23. № 186. P. 1405.
5. Nagai H., Noguchi Y. // Appl. Phys. Lett. 1976. V. 29. № 11. P. 740.
6. Miller D. C., Caruso R. // J. Cryst. Growth. 1974. V. 27. № 1. P. 274.
7. Хирт Дж., Ломе И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 496 с.
8. Пинтус С. М., Латышев А. В., Асеев А. Л., Карасев В. Ю. // Поверхность. 1984. № 8. С. 60.
9. Trukhanov E. M., Gorokhov E. B., Stenin S. I. // Phys. Stat. Sol. (a). 1976. V. 33. P. 435.
10. Bolkhovityanov Yu. B., Vaulin Yu. D., Gutakovskiy A. K., Stenin S. I., Yudaev V. I. // Cryst. Res. and Technol. 1981. V. 16. № 8. P. 921.
11. Солдатенко Н. Н. Исследование механических напряжений и дефектов структуры в гетероэпитаксиальных системах Ge—Si и Ge—GaAs. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Киев, 1978. 89 с.
12. Kightley P., Goodhew P. J., Bradley R. R., Augustus P. D. // J. Cryst. Growth. 1991. V. 112. P. 359.

Институт физики полупроводников СО РАН,
Новосибирск

Поступила в редакцию
31.V.1994
Принята в печать 7.VI.1994

ANALYSIS OF THE FRACTURE FORMATION
IN HETEROEPITAXIAL FILMS

The model of the fracture formation during the heteroepitaxial growth is proposed. It is shown that fragments appear due to the long-distance stresses of the misfit dislocation system. Fragment formation occurs when the system consists of dislocation strips with the same screw component of the Burgers vector. The neighbour strips have the opposite values of these components. The fracture formation is in detail analysed for Ge—Si (001) structure and agree with experimental results. The common nature of the fracture of the inhomogeneous distribution of threading misfit dislocation segments is discussed.