

УДК 539.2

СВОЙСТВА ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ И ПСЕВДОДИСЛОКАЦИЙ, НЕ ТИПИЧНЫЕ ДЛЯ ДЕФЕКТОВ ОДНОРОДНЫХ КРИСТАЛЛОВ

© 2010 г. Е. М. Труханов

Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 15.01.2009 г.

Изучаются структурные свойства гетеросистем SiGe/Si со ступенчатой вицинальной границей раздела (ГР), полученной отклонением поверхности от плоскости (001) на несколько градусов поворотом вокруг оси [110]. Исследуются бездислокационные системы и системы, содержащие дислокации несоответствия (ДН). Для бездислокационных гетеросистем предлагается модель псевдодислокаций, описывающая взаимный разворот кристаллографических плоскостей (001) пленки и подложки. Псевдодислокациями являются упруго напряженные ступени ГР, величина их эффективного вектора Бюргерса определяется высотой ступени и параметром несоответствия сопрягаемых решеток. Для дислокационных систем рассматриваются дальнедействующие поля нормальных и сдвиговых напряжений в эпитаксиальной пленке. Обсуждается неоднозначность величины вектора Бюргерса ДН. Предложен механизм формирования малоугловой границы при введении ДН в вицинальную ГР. Получено выражение, которое позволяет на основе структурных параметров, определяемых с помощью кривой дифракционного отражения рентгеновских лучей, вычислять доли ДН, скользящих в плоскостях {111}, наклоненных к ГР под максимальным и минимальным углами.

ВВЕДЕНИЕ

Процесс пластической релаксации напряжений эпитаксиальной гетеросистемы сопровождается введением в границу раздела дислокаций несоответствия (ДН). Он описывается в рамках различных теоретических моделей. Впервые возможность возникновения ДН как линейных дефектов, снижающих уровень напряжений несоответствия, была предсказана Франком и Ван дер Мерве (1949 г.) [1]. Ван дер Мерве и Белл [2, 3] выполнили теоретический анализ, из которого следовало, что на начальной стадии эпитаксиального роста энергия гетеросистемы ниже, если пленка находится в псевдоморфном состоянии, когда она полностью упруго деформирована. При достижении критической толщины пленки H_c становится возможным протекание процесса пластической релаксации, в результате которого в границе раздела (ГР) накапливаются дефекты, аналогичные дислокациям в однородном кристалле. Величина H_c находится в обратной зависимости от величины f — параметра несоответствия сопрягаемых кристаллических решеток. Если обозначить модули базисных векторов кубических элементарных ячеек пленки и подложки через a_{ep} и a_s , то, $f = (a_{ep} - a_s)/a_s$. Впервые ДН были зарегистрированы в 1961 г. (две независимые статьи в одном журнале [4, 5]). Мэтьюз был автором одной из этих статей, он же в соавторстве с Джессером [6] предложил вариант описания процесса пластической релаксации. Значения H_c , выполненные как в рамках модели Ван дер Мерве, так и в рамках модели Мэтьюза, близки. Однако последняя модель намного нагляднее и использует существенно более простое

математическое описание. В дальнейшем появились как ее многочисленные модификации, так и оригинальные подходы к описанию процесса. В качестве очевидного условия было принято, что на завершающей стадии процесса введения ДН, когда их линейная плотность становится предельной ($1/D_{пр}$), среднее расстояние между соседними дислокациями равно $D_{пр} = b_k/f$, где b_k — проекция краевой составляющей вектора Бюргерса $\mathbf{b}$ на ГР.

Хотя первые ДН были зарегистрированы в гетеросистемах с металлическими слоями [4–6], в дальнейшем основными объектами, определившими развитие теории ДН, стали полупроводниковые системы. Для повышения структурного качества данных систем предпринимались активные попытки управления типом вводимых ДН, и к началу 80-х годов были рассчитаны и экспериментально подтверждены условия устранения микродвойников и дефектов упаковки, вводимых в пленку частичными ДН [7–9]. Было показано, что вероятность образования данных дефектов тем выше, чем больше параметр несоответствия, и для f около 1% были получены пленки, в которых указанные дефекты полностью отсутствовали. Для гетеросистем с ГР (111) это потребовало перехода к вицинальным ориентациям подложки [8, 9]. После решения рассмотренной важной экспериментально-технологической задачи основными дефектами, на устранение которых направлены попытки управления процессом снятия напряжений несоответствия, стали так называемые пронизывающие (или прорастающие) дислокации (ПД), которые соединяют концы ДН со свободной поверхностью пленки. Механизмы их

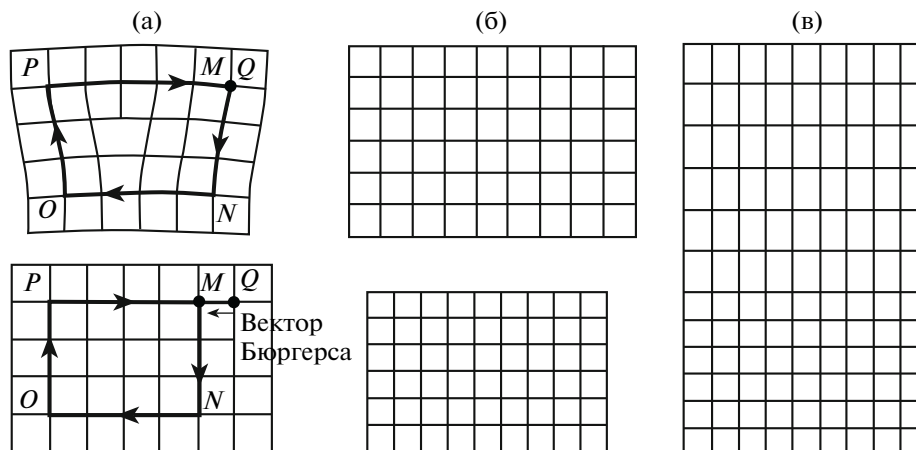


Рис. 1. Схемы для демонстрации возможности строгого определения вектора Бюргерса $\mathbf{b}$ дислокации в случае однородного кристалла (а) и неоднозначности такого определения в случае гетеросистемы (б и в).

образования тщательно изучаются [10–13]. При скользянии данные дефекты увеличивают длину ДН, что демонстрирует целесообразность их присутствия в эпитаксиальной пленке. Однако в результате взаимодействия между собой и с другими дефектами пленки возникают неподвижные ПД, которые ухудшают структурные и электронные свойства гетеросистем. В идеализированном варианте все подвижные ПД достигают боковой поверхности гетеросистемы и длина ДН сравнима с диаметром ГР. Отметим, что присутствие неподвижных ПД в растущем слое не позволяет успешно решить проблему эпитаксиального материаловедения и на подложках из высокосовершенного слитка кремния выращивать бездефектные слои различных материалов, сравнимые по качеству с объемными кристаллами. Получение таких кристаллов невозможно без дальнейшего научно-технического прогресса и, в частности, развития современных методов дифракционного анализа, которым были посвящены очередные школа и семинар [14, 15], организованные Новгородским университетом имени Ярослава Мудрого (1–10 сентября 2008 г.).

НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЬ ВЕКТОРА БЮРГЕРСА ДИСЛОКАЦИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ

Проблема устранения ПД в растущем эпитаксиальном слое требует всестороннего изучения свойств дислокаций несоответствия, в том числе тех их свойств, которые не типичны для дислокаций объемных кристаллов. Обсудим важнейшее фундаментальное свойство дислокации — ее вектор Бюргерса $\mathbf{b}$ в применении к ДН. Как известно, $\mathbf{b}$ является вектором трансляции кристаллической решетки, на который отличаются два контура Бюргерса, имеющие одинаковое число трансляций. Первый контур (верхний контур на рис. 1а) проводят вокруг

дислокации в искаженном кристалле, а второй (нижний на рис. 1а) — в совершенном кристалле [16]. Второй контур является перенесением первого контура в неискаженную решетку. В случае гетеросистемы для получения неискаженных кристаллов необходимо отделить одну от другой решетки, сопрягаемые по ГР (рис. 1б). Второй контур Бюргерса можно выполнить как в подложке (и получить вектор $\mathbf{b}_1$), так и в пленке (и получить $\mathbf{b}_2$). Относительная разность полученных значений равна $\delta b = f$, и в системах с большим несоответствием может заметно превышать единицы процента. Так, в гетеросистеме CdTe/Si эта величина близка к 20%. Если же проведенный вокруг дислокации контур Бюргерса переносить в упруго сопряженные кристаллические решетки подложки и псевдоморфной пленки (рис. 1в), то результат $\delta b = 0$ (т.е. $\mathbf{b}_1/\mathbf{b}_2 = 1$) получим только для векторов Бюргерса, параллельных ГР. Можно показать, что относительная разность вертикальных размеров ячеек пленки и подложки (рис. 1в) составляет

$$(a_{\text{ep}} - a_s)_{\text{верт}}/a_s = f(1 + \nu)/(1 - \nu), \quad (1)$$

где ν — коэффициент Пуассона. Поэтому в случае $\mathbf{b}$, перпендикулярного ГР, величина δb равна правой части формулы (1). Отметим, что при использовании кристаллических решеток (рис. 1б) векторы $\mathbf{b}_1$ и $\mathbf{b}_2$ являются строго параллельными, а при использовании решеток (рис. 1в) между направлениями векторов возникает угол, если $\mathbf{b}$ не параллелен, или не перпендикулярен ГР. Невозможность строго указать, по крайней мере, величину вектора Бюргерса ДН является важным свойством дислокаций несоответствия. Укажем еще одно отличие ДН от дислокаций однородных кристаллов. В объемном, сравнительно однородном кристалле дислокация является неравновесным дефектом, и при ее удалении на поверхность имеет место выигрыш энергии. В гетеросистеме ДН — равновесный дефект, позволяющий понизить энергию кристалла до некоторой минимальной величины. В нашем случае под одно-

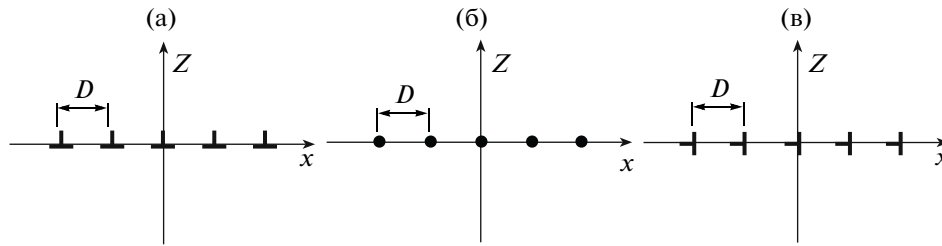


Рис. 2. Три системы дислокаций, действие которых эквивалентно действию семейства 60-градусной дислокаций несоответствия в границе раздела (001): а — система краевых дислокаций несоответствия; б — система винтовых дислокаций; в — система краевых дислокаций, формирующих малоугловую границу.

родным понимается кристалл, в котором отсутствуют зоны, где напряжения изменяют свой знак. При наличии таких областей и в объемном кристалле возможно возникновение равновесных дислокационных конфигураций, как это показано в [17] для нейтральной поверхности подложки, удаленной от ГР на расстояние, равное $2/3$ толщины подложки. Некоторые особенности когерентного и некогерентного сопряжения кристаллических решеток пленки и подложки, обусловленные указанными свойствами ДН, рассматриваются в следующих разделах статьи.

ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИЕ ПОЛЯ НАПРЯЖЕНИЙ, СОЗДАВАЕМЫЕ ДИСЛОКАЦИЯМИ НЕСООТВЕТСТВИЯ

Два взаимно перпендикулярных семейства ДН, расположенные в границе раздела (001), создают поле далекодействующих нормальных напряжений ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$), если для среднего расстояния между дислокациями D и толщины пленки H выполняется условие $D < H$. Ось z принята перпендикулярной ГР. Возникающее поле понижает уровень деформаций, обусловленных присутствием псевдоморфной пленки. Как показано в [18], в процессе снятия напряжений несоответствия величина D уменьшается, приближаясь к некоторому предельному значению $D_{пр}$, а компоненты σ_{xx} и σ_{yy} , соответственно, увеличиваются, стремясь к общему предельному значению $2Gb_k/[(1-\nu)D_{пр}]$. Здесь G — модуль сдвига, а b_k — проекция $\mathbf{b}$ на направление, лежащее в границе раздела перпендикулярно ДН. В результате совместного действия перпендикулярных дислокационных семейств возникает однородное плосконапряженное состояние, которое при выполнении условия $D_{пр} = b_k/f$ определяется как $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 2Gf/(1+\nu)/(1-\nu)$ и полностью компенсирует напряжения исходной псевдоморфной пленки. Для получения последнего выражения в работе [18] принимается допущение об абсолютно жесткой реакции среды в направлениях $0x$ и $0y$, что в реальных материалах не выполняется. Это тем более не выполняется в гетеросистемах, размеры которых существенно ограничены в направлении $0z$. Таким образом, равенство

$D_{пр} = b_k/f$, априори принятое еще на заре развития теории ДН, не является строгим, что требует дополнительного изучения и может быть предметом специального исследования.

Для дальнейшего анализа рассмотрим три следующие компоненты вектора Бюргерса ДН, две из которых являются чисто краевыми и одна — чисто винтовой. Во-первых, это уже обсуждавшаяся компонента $b_1 = b_k$, во-вторых, это винтовая компонента $b_2 = b_v$, возникающая при проектировании $\mathbf{b}$ на линию ДН. Третья краевая компонента типична для дислокаций, формирующих малоугловые границы ($b_3 = b_{MG}$), она является проекцией $\mathbf{b}$ на нормаль к ГР. Поскольку все три компоненты взаимно перпендикулярны, то для квадрата величины полного вектора Бюргерса исходного семейства дислокаций справедливо $b^2 = b_1^2 + b_2^2 + b_3^2$ и $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3$. Поэтому поле напряжений, создаваемое исходным семейством дислокаций, можно представить как суперпозицию полей трех систем дислокаций с векторами Бюргерса $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ и $\mathbf{b}_3$ (рис. 2). Для простоты на рисунке показаны только дислокации, параллельные оси $0y$, а аналогичные системы, параллельные $0x$, не изображены. В случае образования 60-градусных ДН — наиболее распространенного варианта введения ДН в границу раздела (001) — указанные компоненты равны: $b_1 = b_2 = 0.5b$ и $b_3 = (1/\sqrt{2})b$. Функцию дислокаций несоответствия выполняет только система, для которой $b_1 = b_k$ (рис. 2а), однако значения b_2 и b_3 составляют существенную часть величины b , поэтому анализ их вклада в протекающие процессы представляется важным.

В работах [18–22] сравнительно подробно исследовано влияние типа винтовой дислокационной компоненты системы (рис. 2б) на энергию и структурное состояние растущей эпитаксиальной пленки. Для двух взаимно перпендикулярных систем дислокаций (рис. 2б), которые параллельны осям $0x$ и $0y$ и имеют линейные плотности распределения $1/D_1$ и $1/D_2$ соответственно, установлено [20], что если одна из систем является левовинтовой, а вторая — правовинтовой, то далекодействующие сдвиговые напря-

Параметры 60-градусных дислокаций несоответствия, залегающих в границе раздела (001) гетероструктуры с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита. Типы винтовых дислокационных составляющих соответствуют случаю, когда параметр решетки пленки превышает параметр подложки ($a_{ep} > a_s$). В противном случае (если $a_{ep} < a_s$) типы винтовых составляющих необходимо изменить на противоположные

Номер семейства	Плоскость скольжения	Плоскость переползания	Направление вектора Бюргерса b	Направление дислокационной линии	Тип винтовой дислокационной составляющей
1	$(\bar{1}\bar{1}1)$	(111)	[101]	$[\bar{1}10]$	левая
2	$(\bar{1}\bar{1}1)$	(111)	[011]	$[\bar{1}10]$	правая
3	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[\bar{1}01]$	$[1\bar{1}0]$	левая
4	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[0\bar{1}1]$	$[1\bar{1}0]$	правая
5	$(1\bar{1}1)$	$(\bar{1}11)$	[011]	$[\bar{1}\bar{1}0]$	левая
6	$(1\bar{1}1)$	$(\bar{1}11)$	$[\bar{1}01]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$	правая
7	$(\bar{1}11)$	$(1\bar{1}1)$	$[0\bar{1}1]$	[110]	левая
8	$(\bar{1}11)$	$(1\bar{1}1)$	[101]	[110]	правая

жения, создаваемые каждой из систем, будут складываться и составят $\sigma_{xy} = 2Gb(1/D_1 + 1/D_2)$. Это справедливо, например, для систем дислокаций несоответствия 1 и 6 (таблица). В результате, в процессе роста пленки в ней будет накапливаться упругая энергия, величина которой становится приблизительно пропорциональной толщине пленки, когда величины D достигнут своих предельных значений. По порядку величины эта энергия сравнима с энергией псевдоморфной пленки. Поскольку в реальных гетеросистемах накопление столь значительной упругой энергии невозможно, то возникнут релаксационные процессы, ухудшающие структурное состояние растущего слоя. Возможно даже образование трещин в эпитаксиальной пленке [18, 19]. Наиболее благоприятным вариантом такого типа процессов является введение дополнительных семейств ДН (например, семейств 2 и 5 в дополнение к семействам 1 и 6, (таблица). Увеличение числа вводимых семейств ДН способствует образованию неподвижных ПД. Если взаимно перпендикулярные системы дислокаций (рис. 2б) являются «одинаково винтовыми», то при $D_1 = D_2$ суммарные дальнедействующие сдвиговые напряжения $\sigma_{xy} = 0$ и накопленная энергия E_n выходит на насыщение при толщине пленки, превышающей $D_{пр}$. Это справедливо, например, для систем дислокаций несоответствия 1 и 5 (таблица). В работе [22] показано, что величина E_n ниже, если каждая из перпендикулярных систем дислокаций (рис. 2б) содержит не идентичные дислокации, а чередующиеся левовинтовые и правовинтовые дислокации. Ярким примером влияния типа винтовой составляющей на снятие напряжений несоответствия является введение ДН в условиях формирования взаимно перпендикулярных семейств ДН, имеющих одинаковые векторы Бюргерса **b**. Это справедливо (таблица) для се-

мейств 1 и 8, 2 и 5, 3 и 6, а также 4 и 7. Поскольку возникающие ПД будут также иметь одинаковые **b**, то будет максимально облегчена их взаимная аннигиляция. Как видно из таблицы, винтовые составляющие взаимно перпендикулярных ДН, имеющих одинаковые **b**, оказываются противоположными, т.е. создаваемые семействами дислокаций дальнедействующие сдвиговые напряжения складываются. В результате столь удобный вариант устранения пронизывающих дислокаций оказывается возможным только на начальной стадии процесса снятия напряжений несоответствия, когда E_n слабо зависит от типа винтовой составляющей, как показано в [21].

Система дислокаций (рис. 2в) в объемных кристаллах известна как малоугловая граница (рис. 3а). Для прилегающих к границе кристаллических решеток угол их взаимного разворота α_{MG} вокруг оси, перпендикулярной плоскости чертежа, равен

$$\alpha_{MG} = b_{MG}/l, \quad (2)$$

где l — среднее расстояние между соседними дислокациями малоугловой границы [23]. Как показано в [24], данная система дислокаций не создает дальнедействующее поле напряжений. Влияние свойств дислокационной границы (рис. 2в) на протекание процесса снятия напряжений несоответствия в литературе мало изучено. Некоторым шагом в этом направлении является представленный в следующем разделе материал.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ МАЛОУГЛОВЫХ ГРАНИЦ ПРИ СНЯТИИ НАПРЯЖЕНИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ

Приведенная на рис. 1в схема сопряжения кристаллических решеток пленки и подложки справедлива только для сингулярной ГР (001). Эпитакси-

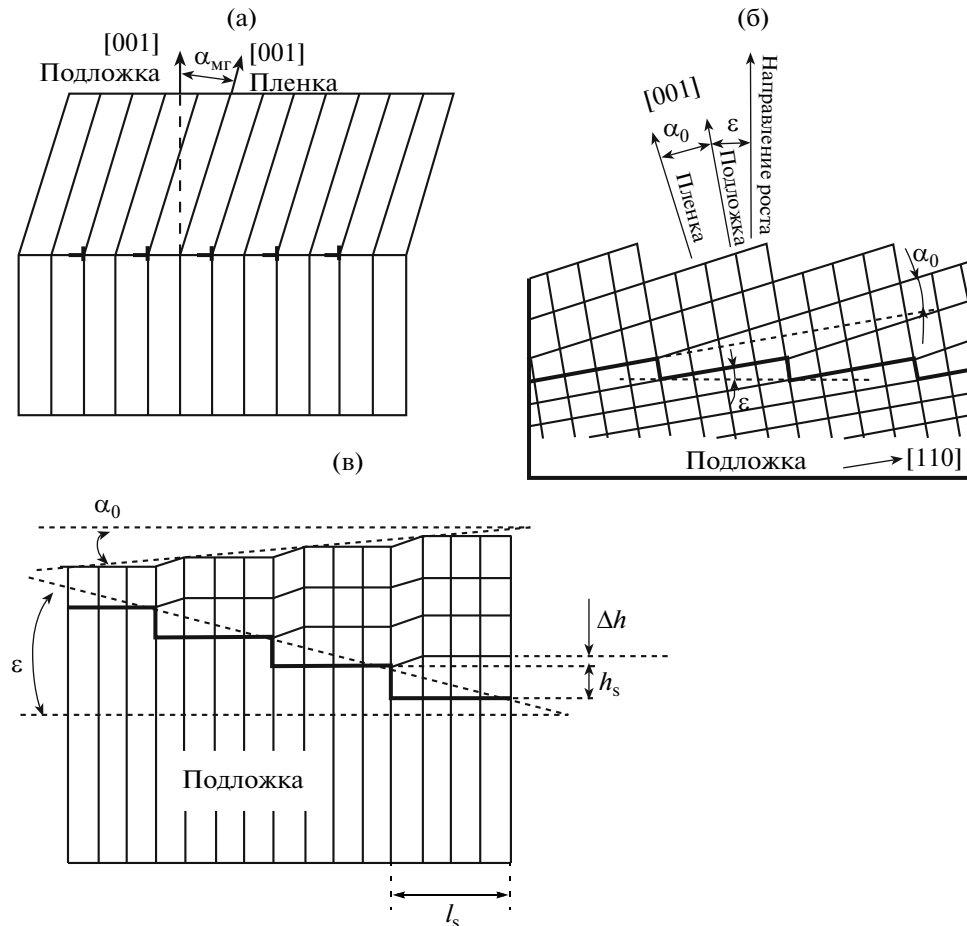


Рис. 3. Развороты атомных решеток двух граничащих кристаллов, обусловленные присутствием малоугловой границы (а), и развороты, обусловленные присутствием системы псевдодислокаций (б и в); б – данные работ [25, 26], в – данные работ [27, 30].

альная пленка находится в однородном плосконапряженном состоянии: всего две компоненты тензора напряжений ненулевые, и для них выполняется $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$. Для случая вицинальной границы, полученной поворотом на несколько градусов от сингулярной грани (001) вокруг оси $\langle 110 \rangle$, схематичный вариант чисто упругого сопряжения решеток представлен на рис. 3б [25, 26]. Из-за несоответствия высот ступеней пленки и подложки возникает вертикальная составляющая напряжений σ_{zz} , которая неоднородно распределена по площади ГР. Эта компонента тензора напряжений максимальна вблизи ступени и минимальна (или отсутствует) в средней части террасы. Неоднородное распределение напряжений обуславливает схематично представленные на рис. 3б искажения кристаллической решетки пленки. Как следствие, вдали от ГР атомные плоскости пленки (001) оказываются расположенными под углом к одноименным плоскостям подложки. Отметим, что сечение кристаллической решетки подложки на рис. 3б содержит не квадрат-

ную сетку, как на рис. 1в, а прямоугольную, поскольку срез выполнен в плоскости $(1\bar{1}0)$.

Обозначим на рис. 3б угол между плоскостями (001) пленки и подложки через α_0 , угол отклонения рассматриваемой вицинальной границы (001) от сингулярной – через ε , а высоты ступеней эпитаксиальной пленки и подложки – через $h_{ср}$ и h_s соответственно [25]. Тогда, согласно формуле Нагаи [27], имеет место $\text{tg} \alpha_0 = (\text{tg} \varepsilon)(h_{ср} - h_s)/h_s$. По причине малости угла примем $\text{tg} \alpha_0 = \alpha_0$. Согласно формуле (1) имеет место $(h_{ср} - h_s)/h_s = f(1 + \nu)/(1 - \nu)$, т.е.

$$\alpha_0 = [(1 + \nu)/(1 - \nu)]f \text{tg} \varepsilon. \quad (3)$$

Если обозначить среднее расстояние между соседними ступенями через l_s , то

$$\alpha_0 = [(1 + \nu)/(1 - \nu)]f h_s / l_s. \quad (3a)$$

Из сравнения формул (3a) и (2) видно, что если упруго напряженные ступени (рис. 3б) рассматривать как псевдодислокации, отстоящие друг от дру-

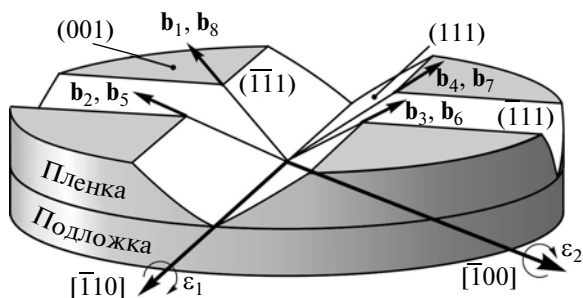


Рис. 4. Пространственное расположение всех возможных векторов Бюргерса $\mathbf{b} = (a/2)\langle 110 \rangle$ у 60-градусных дислокаций несоответствия, возникающих в границе раздела (001) гетеросистемы. Индексы при $\mathbf{b}$ соответствуют номерам дислокационных семейств, приведенным в таблице.

га на расстоянии $l_s = l$ и имеющие эффективный вектор Бюргерса $b_{\text{эф}} = hf(1 + \nu)/(1 - \nu)$, то

$$\alpha_0 = b_{\text{эф}}/l, \quad (36)$$

и вицинальная бездислокационная гетерограница подложка/псевдоморфная пленка (рис. 3б) аналогична дислокационной малоугловой границе (рис. 3а). Поскольку в направлении, перпендикулярном плоскости рисунка, картина (рис. 3б) не изменяется, то псевдодислокация, как и традиционная дислокация, является линейным дефектом, у которого однако отсутствует экстраполуплоскость и дислокационное ядро. Величина $b_{\text{эф}}$ прямо пропорциональна высоте ступени и значению параметра несоответствия.

При введении ДН чисто упругое взаимодействие кристаллических решеток (рис. 3б) изменяется, и, как следствие, изменяется величина угла α между направлениями [001] пленки и подложки. Результирующий угол разворота α обычно определяется по данным кривых дифракционного отражения (КДО). Как показано в [28], для гетеросистемы GeSi/Si угол α изменяется от исходного значения α_0 до нуля, принимает противоположный знак и по мере увеличения степени релаксации ρ монотонно возрастает. Величина ρ равна отношению $D_{\text{пр}}$ к среднему расстоянию D между ДН, вводимыми в процессе релаксации. Для установления природы обсуждаемого явления воспользуемся схемой рис. 4, где изображены плоскости скольжения и векторы Бюргерса в соответствии с данными таблицы. Дислокация, расположенная вдоль изображенной на рис. 4 оси поворота ε_1 (вдоль направления $[\bar{1}10]$), может скользить как в плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$, имея векторы Бюргерса $\mathbf{b}_1 = (a/2)[1\ 0\ 1]$ и $\mathbf{b}_2 = (a/2)[011]$, так и в плоскости (111), имея $\mathbf{b}_3 = (a/2)[\bar{1}\ 01]$ и $\mathbf{b}_4 = (a/2)[0\bar{1}\ 1]$. В случае сингулярной границы (001) возникновение ДН с любым из указанных $\mathbf{b}$ равновероятно. Если повернуть схему вокруг оси $[\bar{1}\ 10]$ против часовой стрелки

на небольшой угол ε_1 , то угол между плоскостью $(\bar{1}\bar{1}1)$ и ГР уменьшится и вероятность введения ДН, имеющих $\mathbf{b}_1$ и $\mathbf{b}_2$, увеличится.

Как видно из таблицы, семейства дислокаций 1 и 2, скользящие в $(\bar{1}\bar{1}1)$, имеют одну и ту же плоскость перемещения (111), в которой расположена экстраполуплоскость дислокации. В случае гетеросистемы GeSi/Si, когда $a_{\text{ep}} > a_s$, экстраполуплоскость (111) находится в подложке слева от линии ДН как у дислокации семейства 1, так и у дислокации семейства 2. Положение данной экстраполуплоскости соответствует схемам (рис. 1в) и (рис. 3а). Отметим, что на стадии псевдоморфной эпитаксиальной пленки, когда ДН отсутствуют, схема искажений кристаллической решетки пленки, обусловленных поворотом вокруг оси ε_1 , соответствует приведенной на рис. 3б. Из сравнения рис. 3а и рис. 3б видно, что на первой схеме направление [001] пленки повернуто относительно данного направления подложки по часовой стрелке, а на второй — наоборот.

В соответствии с изложенным выше для однородного кристалла величина угла разворота кристаллических решеток равна $\alpha = \alpha_{\text{МГ}}$ (рис. 3а), а для гетеросистемы эта величина равна $\alpha = \alpha_0 + \alpha_{\text{МГ}}$ и является результатом суперпозиции случаев (рис. 3а) и (рис. 3б). Поскольку ДН вводятся скольжением в плоскостях (111) и $(\bar{1}\bar{1}1)$, то величина $\alpha_{\text{МГ}} = \alpha - \alpha_0$ определяется долями ДН, скользящими в указанных плоскостях, и может немонотонно изменяться в течение релаксационного процесса. Если доли ДН одинаковы, то $\alpha_{\text{МГ}} = 0$. Если же скольжение в плоскости (111) отсутствует, то величина $\alpha_{\text{МГ}}$ максимальна и определяется по формуле $\alpha_{\text{МГ}} = b_3/D$. По мере развития релаксации значение максимума возрастает и становится предельным $\alpha_{\text{МГ}} = b_3/D_{\text{пр}}$ при $\rho = 1$. Зная величины ρ и α , можно установить доли ДН, скользящих в плоскостях $(\bar{1}\bar{1}1)$ и (111). Если обозначить эти доли, соответственно, через z и $(1 - z)$, то, как показывает анализ,

$$z = 0.5[1 + (\alpha - \alpha_0)D_{\text{пр}}/(\rho b_{\text{МГ}})]. \quad (4)$$

Угол α_0 вычисляется по формуле (3) или определяется экспериментально как $\alpha = \alpha_0$ при $\rho = 0$. При выводе формулы (4) угол α_0 принят отрицательным. Как следствие, угол α следует считать отрицательным на начальной стадии процесса пластической релаксации, когда взаимное расположение направлений [001] пленки и подложки качественно такое же, как при $\rho = 0$ (рис. 3б). В процессе релаксации угол α между указанными направлениями может измениться до нуля и стать положительным, когда взаимное расположение указанных направлений изменится на противоположное.

Экспериментальный анализ малоугловых границ, возникающих при релаксации напряжений несоответствия, выполнен на основе данных работы [28], которая, в свою очередь, обобщает и уточ-

няет результаты, ранее представленные в [22, 29]. В работе [28] для шести гетеросистем $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ с помощью КДО определены экспериментальные значения ρ , α и состава атомной доли германия x . Угол отклонения ГР от сингулярной грани (001) составлял около 6° ($\text{tg } \varepsilon = 0.1$) и был получен поворотом вокруг направления типа $\langle 110 \rangle$, лежащего в плоскости (001). Значение α , определенное при $\rho = 0$, характеризует α_0 . Эти значения измерены для двух образцов и составляют $\alpha_{03} = -232$ угл.с (образец № три, $x = 0.23$) и $\alpha_{06} = -116$ угл.с (образец № шесть, $x = 0.101$). Приняв $v = 0.27$ и $f = 0.04x$, по формуле (3) получаем расчетные величины α_0 равные $\alpha_{03} = -318$ и $\alpha_{06} = -140$ угл.с. По абсолютной величине расчетные значения больше экспериментальных. В некоторой мере это может быть обусловлено следующей причиной. Если величина пластической релаксации ρ близка к нулю, то точность определения с помощью КДО так называемых параллельных рентгеновских деформаций и, как следствие, ρ очень низка. В результате можно придать значение $\rho = 0$ образцу, в котором началось введение ДН. Для надежного установления факта $\rho = 0$ желательно использование рентгеновской топографии, позволяющей регистрировать одиночные дислокации.

Наиболее типичным по поведению является образец № 3, для которого измерено $\alpha = 519$ угл.с на стадии релаксации $\rho = 0.54$. Величина $D_{\text{пр}} = b/(2f) = 21.8$ нм. По формуле (4) определяем $z = 0.76$. В случае сингулярной ГР (001) все четыре плоскости $\{111\}$ наклонены к ГР под равными углами $\omega_0 = 54.7^\circ$. При повороте вокруг направления типа $\langle 110 \rangle$ на угол ε одна из плоскостей $\{111\}$ становится наклоненной к ГР под минимальным углом $\omega_1 = \omega_0 - \varepsilon$, и еще одна из плоскостей — под максимальным углом $\omega_2 = \omega_0 + \varepsilon$. Определенная для образца № 3 величина $z = 0.76$ означает, что из всего множества ДН, залегающих параллельно оси поворота, 76% дислокаций проскользили в плоскости, наклоненной под углом ω_1 и 24% — в плоскости, наклоненной под углом ω_2 . Наибольшая величина $\alpha = 1633$ угл.с зарегистрирована для образца № 5 ($x = 0.268$, $\rho = 0.81$); расчетные значения составляют $\alpha_0 = 371$ угл.с. и $z = 0.89$.

Для всех образцов, исследованных в [28], имело место $z > 0.5$. Если бы для какого-нибудь образца оказалось $z < 0.5$, то это означало бы, что в процессе пластической релаксации дислокации скользили бы преимущественно в плоскости $\{111\}$, наклоненной под максимальным углом ω_2 , и свидетельствовало бы о работе дислокационных источников, природа которых не связана с отклонением ориентации ГР. Вероятность таких явлений возрастает при уменьшении угла ε . Если малоугловая граница формируется дислокациями, скользящими в плоскости $\{111\}$, наклоненной под углом ω_1 , то с учетом принятого в формуле (4) знака α , угол границы $\alpha_{\text{МГ}} = \alpha - \alpha_0 > 0$. Если же подавляющее число ДН проскользило в плоскости, наклоненной под углом ω_2 , то $\alpha_{\text{МГ}} < 0$.

Определенные в настоящей работе величины $z_1 = 0.76$ и $z_2 = 0.89$ находятся в удовлетворительном согласии со значением $z = 0.97$, установленным в [22] с помощью рентгеновских топографических исследований. На основе анализа контраста дислокационного изображения в зависимости от дифракционного вектора $g_{\langle 220 \rangle}$ было обнаружено, что из 97% ДН, скользящих в плоскости $\{111\}$, наклоненной под углом ω_1 , 83% дислокаций имели вектор Бюргерса $\mathbf{b}_1$ и 14% — вектор $\mathbf{b}_2$ (рис. 4).

Отметим, что разворот кристаллических решеток сопрягаемых слоев гетеросистемы имеет более сложный характер, поскольку угол α между плоскостями (001) пленки и подложки заметно отличается от угла β между плоскостями (110), пересекающими (001) вдоль оси $[\bar{1}10]$, вокруг которой производится поворот вицинальной ГР. Согласно [28], в процессе введения ДН угол β монотонно возрастает от нулевой величины со скоростью, близкой к скорости изменения α . Как видно из схемы (рис. 3б), кристаллическая решетка пленки является не тетрагональной или ромбической, а моноклинной (одна из граней ячейки представляет собой параллелограмм). У параллелограмма соседние углы не совпадают, и разность этих углов равна $2\alpha_0$. На основании изложенного можно заключить, что величина угла параллелограмма моноклинной ячейки определяется плотностью псевдодислокаций и величиной их эффективного вектора Бюргерса (формула (36)). В процессе релаксации этот угол сохраняется, а вся ячейка поворачивается на величину угла возникающей малоугловой границы $\alpha_{\text{МГ}} = \alpha - \alpha_0 \approx \beta$. Поскольку угол моноклинной ячейки псевдоморфной пленки отличается от π на величину α_0 , то возникают сдвиговые деформации пленки, равные $\varepsilon_{xz} = \alpha_0/2$ (оси координат расположены как на рис. 2). Это означает, что поле напряжений псевдодислокации должно включать распределение сдвиговых напряжений $\sigma_{xz}(x, z)$, которое формирует дальнедействующие сдвиговые напряжения $\sigma_{xz} = G\alpha_0$, не типичные для дислокаций однородных кристаллов или ДН, расположенных в границе раздела. Природа данного явления изучается.

Укажем, что в литературе известны два варианта схематического изображения искажений псевдоморфной пленки на вицинальной (001) поверхности подложки. Это представленная на рис. 3б схема, демонстрирующая переход от исходной кубической решетки пленки к моноклинной [25, 26], и схема (рис. 3в), когда колонка элементарных ячеек решетки пленки, расположенная над краем ступени, претерпевает моноклинные искажения, а остальная часть решетки — тетрагональные [27, 30]. В настоящей работе использован вариант (рис. 3б), как согласующийся с анализируемыми экспериментальными результатами.

На рис. 5 кривая 1; 2 демонстрирует зависимость критической толщины пленки $H_c(\varepsilon)$ при введении

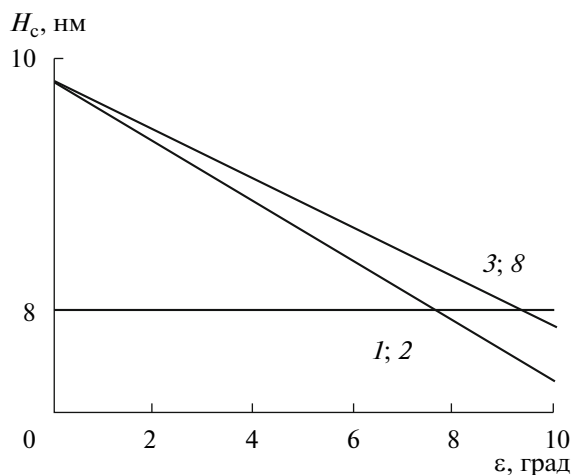


Рис. 5. Зависимость критической толщины пленки H_c при изменении углов ε_1 и ε_2 (рис. 4). Кривая 1; 2 отражает введение ДН семейств 1 и 2 (таблица) в вицинальную границу раздела (001), полученную поворотом вокруг оси $[\bar{1}10]$ в сторону плоскости $(\bar{1}\bar{1}0)$; кривая 3; 8 – семейства 3 и 8 вводятся в вицинальную границу (001), полученную поворотом вокруг оси $[100]$ в сторону плоскости (010).

ДН семейств 1 и 2 (таблица), которое имеет место при повороте ГР вокруг оси ε_1 на угол ε против часовой стрелки (рис. 4). Данный поворот ГР можно также охарактеризовать как получение вицинальной ориентации границы раздела (001) в результате поворота вокруг оси $[\bar{1}\bar{1}0]$ в сторону плоскости $(\bar{1}\bar{1}0)$. Зависимость $H_c(\varepsilon)$, приведенная на рис. 5, выполнена для гетеросистемы $\text{Ge}_{0.25}\text{Si}_{0.75}/\text{Si}$ в рамках модели [20]. В результате поворота вокруг оси ε_1 семейства 1 и 2 по сравнению со всеми остальными шестью семействами, представленными в таблице, имеют минимальную критическую толщину пленки для введения ДН. Тот факт, что определенная в настоящей работе величина z оказалась заметно больше 0.5, можно в рамках современной технологической терминологии назвать самоформированием ДН, принадлежащих семействам 1 и 2 (таблица), что обусловлено отклонением ГР от сингулярной ориентации. Если произвести поворот вокруг оси ε_2 , параллельной направлению $[\bar{1}00]$ в сторону плоскости (010) (рис. 4), то при толщине H_c будут вводиться ДН семейств 3 и 8 (таблица), которые имеют наименьшую критическую толщину пленки из всех семейств таблицы. Это демонстрируется кривой 3; 8 на рис. 5 [20]. Важно указать, что семейства 3 и 8 являются взаимно перпендикулярными. Поэтому может сложиться мнение, что с помощью поворота вокруг оси ε_2 и введения ДН указанных семейств можно сформировать две азимутально развернутые на 90° малоугловые границы, аналогичные возникающим при повороте вокруг оси ε_1 . Такое самоформи-

рование семейств 3 и 8 позволило бы реализовать требуемый уровень ρ и получить значения z , близкие к единице, как для семейства 3, так и для семейства 8. Однако, как видно из таблицы, семейства 3 и 8 имеют противоположные типы винтовых составляющих, и создаваемые ими дальнедействующие сдвиговые напряжения σ_{xy} складываются. Поэтому их введение без заметного увеличения упругой энергии гетеросистемы возможно только на начальной стадии релаксационного процесса [21, 31].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для дальнейшего изучения явлений, которые обуславливают протекание пластической релаксации гетеросистемы, содержащей вицинальную границу раздела (001), целесообразно использовать ориентации, которые получены поворотом образца вокруг оси ε_2 (рис. 4) и характеризуются зависимостью 3, 8 на рис. 5. С привлечением результатов работы [21] можно ожидать, что на начальной стадии релаксации ($\rho < 0.2$) будут возникать две развернутые на 90° малоугловые границы, для которых значения z_1 и z_2 будут заметно больше 0.5, а на завершающей стадии релаксации (когда ρ близко к единице) эти значения приблизятся к 0.5 из-за влияния дальнедействующих сдвиговых напряжений σ_{xy} , обусловленных винтовой составляющей ДН. Такое ожидаемое поведение зависимости $z(\rho)$ является особенностью вицинальных ориентаций (001), полученных поворотом вокруг оси ε_2 и не типично для ориентаций, исследованных в настоящей работе.

Для дальнейшего развития модели псевдодислокаций представляет интерес анализ искажений пленки в рамках суперпозиции двух деформационных полей: поля однородного плоского напряженного состояния гетеросистемы с сингулярной ГР (рис. 1в) и поля напряжений псевдодислокаций, включающего как деформационное поле традиционной дислокации, так и нетрадиционное поле сдвиговых деформаций $\varepsilon_{xz}(x, z)$, формирующее дальнедействующие напряжения $\sigma_{xz} = G\alpha_0$. Важной задачей дальнейших исследований является установление функциональной зависимости $\varepsilon_{xz}(x, z)$. Псевдодислокации, будучи концентраторами напряжений, могут выполнять роль источников ДН. Плотность псевдодислокаций n_p определяется величиной угла ε , а плотность дислокаций несоответствия $n_{\text{ДН}}$ — величиной f . По-видимому, целесообразно проведение экспериментальных исследований в условиях, когда $n_p < n_{\text{ДН}}$ и когда $n_p > n_{\text{ДН}}$.

Автор благодарит О.П. Пчелякова, А.В. Колесникова и А.С. Ильина за полезные обсуждения и помощь на отдельных этапах.

Работа выполнена при поддержке Совета по грантам Президента РФ (грант № НШ-1811.2008.2) и РФФИ (гранты № 08-02-01101-а и № 08-02-011051-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frank F.C., Van der Merwe J.H. // Proc. Roy. Soc. Ser. A. 1949. V. 98. № 1053. P. 216.
2. Ван дер Мерве Дж.Х. Несоответствие кристаллических решеток и связи на поверхности раздела между ориентированными пленками и подложками. // Монокристаллические пленки. М.: Мир, 1966. С. 172.
3. Ball C.A.B., Van der Merwe J.H. // Phys. Status Solidi. 1970. V. 38. № 1. P. 335.
4. Matthews J.W. // Philos. Mag. 1961. V. 6. № 71. P. 1347.
5. Delavignette P., Tourier J., Amelinckx S. // Philos. Mag. 1961. V. 6. № 71. P. 1419.
6. Jesser W.A., Matthews J.W. // Philos. Mag. 1967. V. 15. № 138. P. 1097.
7. Roitburd A.L. // Phys. Status Solidi. A. 1976. V. 34. № 1. P. 329.
8. Гутаковский А.К., Пчеляков О.П., Стенин С.И. // Кристаллография. 1980. Т. 25. № 4. С. 806.
9. Gutakovskii A.K., Stenin S.I., Zakharov B.G. // Phys. Status Solidi. A. 1981. V. 67. P. 299.
10. Fitzgerald E.A. // Mater. Sci. Rep. 1991. V. 7. № 3. P. 87.
11. Тхорик Ю.А., Хазан Л.С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев: Наук. думка, 1983. 135 с.
12. Болховитянов Ю.Б., Пчеляков О.П., Чикичев С.И. // УФН. 2001. Т. 171. № 7. P. 689.
13. Болховитянов Ю.Б., Пчеляков О.П. // ФТП. 2008. Т. 42. № 1. С. 3.
14. Матер. 2-й Межд. молодежной науч. школы-семинара "Современные методы анализа дифракционных данных (рентгенотопография, дифрактометрия, электронная микроскопия)". Великий Новгород, 2008. 173 с.
15. Матер. 4-го Межд. науч. семинара "Современные методы анализа дифракционных данных (рентгенотопография, дифрактометрия, электронная микроскопия)". Великий Новгород, 2008. 244 с.
16. Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир, 1967. 644 с.
17. Trukhanov E.M. // Phys. Status Solidi. A. 1983. V. 76. P. 437.
18. Труханов Е.М. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1995. № 2. С. 13.
19. Труханов Е.М. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1995. № 2. С. 22.
20. Trukhanov E.M., Kolesnikov A.V. // Appl. Surf. Sci. 1998. V. 123/124. P. 669.
21. Труханов Е.М., Колесников А.В., Василенко А.П., Гутаковский А.К. // Физика и техника полупроводников. 2002. Т. 36. № 3. С. 309.
22. Труханов Е.М., Колесников А.В., Ильин А.С. и др. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2007. № 5. С. 28.
23. Халл Д. Введение в дислокации (структура и свойства кристаллов). М.: Атомиздат, 1968. 280 с.
24. Хирт Дж., Ломе И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 600 с.
25. Auvray P., Baudet M., Regreny A., d'Anterrockes C. // J. Cryst. Growth. 1989. V. 95. P. 288.
26. Krost A., Bauer G., Woitok J. // Optical Characterization of Epitaxial Semiconductor Layers. // High Resolution X-ray Diffraction / Eds Bauer G., Richter W. Berlin: Springer, 1996. P. 286–422.
27. Nagai H.J. // Appl. Phys. 1974. V. 45 № 9. P. 3789.
28. Колесников А.В., Труханов Е.М. // Сб. матер. 2-й Межд. молодежной науч. школы-семинара. "Современные методы анализа дифракционных данных (рентгенотопография, дифрактометрия, электронная микроскопия)". Великий Новгород, 2008. С. 109.
29. Колесников А.В., Красотин А.Ю., Труханов Е.М. и др. // Тез. докл. III Рос. совещ. по росту кристаллов и пленок (Кремний-2006). Красноярск, 2006. С. 48.
30. Дроздов Ю.Н. Рентгеновская дифрактометрия гетероэпитаксиальных слоев и многослойных структур на их основе. Дис. ... д-ра физ.-мат. наук: 01.04.07; 01.04.01. Нижний Новгород: Институт физики микроструктур РАН, 2006. 404 с.
31. Kolesnikov A.V., Vasilenko A.P., Trukhanov E.M., Gutakovskiy A.K. // Appl. Surf. Sci., 2000. V. 166. P. 57.

Properties of Misfit Dislocations and Pseudodislocations not Typical for Homogeneous Crystal Defects

E. M. Trukhanov

The long range normal and shear stresses in the epitaxial film arising due to presence of misfit dislocation (MD) arrays are considered. For MDs, the ambiguity of their Burgers vector value is discussed. The model of pseudodislocations forming the small angular boundary in a nondislocated heterosystem with stepped vicinal interface is proposed. The Burgers vector value of a pseudodislocation is determined by the values of the step height and the lattice misfit parameter. The releasing process associated with evolution of a small angular boundary due to MD introduction in the interface is theoretically and experimentally analyzed. The equation allowing to determine the quota of sliding in various {111} planes MDs is obtained on the base of parameters registered by X-ray rocking curve.