

## Начальные стадии эпитаксии Ge на Si(111) в квазиравновесных условиях роста

C. A. Тийс<sup>1)</sup>, E. M. Труханов, A. С. Ильин, A. K. Гутаковский, A. В. Колесников

Институт физики полупроводников Сибирского отд. РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 4 августа 2010 г.

Представлены результаты структурных и морфологических исследований роста Ge на поверхности Si(111) на начальных стадиях эпитаксии с помощью сканирующей туннельной микроскопии и просчитывающей электронной микроскопии высокого разрешения. Эпитаксия Ge осуществлялась в диапазоне температур 300–550 °C в квазиравновесных условиях роста при малых скоростях осаждения  $10^{-3}$ – $10^{-2}$  бислой в минуту. Для нанокластеров экспериментально зарегистрированы стадии их образования и распада в результате перераспределения атомов Ge в двумерные псевдоморфные островки Ge до образования сплошного смачивающего слоя. Выполнен анализ мест преимущественного зарождения трехмерных островков Ge на смачивающем слое, образующемся после срастания двумерных островков. При изменении напряженного состояния трехмерных островков Ge на их поверхности происходят фазовые переходы  $c2 \times 8 \rightarrow 7 \times 7 \rightarrow c2 \times 8$ , обусловленные латеральным разрастанием островков и пластической релаксацией напряжений несоответствия. В процессе релаксации в границе раздела накапливаются дислокации несоответствия, а также образуются два типа ступеней высотой ниже 1 бислой на поверхности трехмерных островков

Тонкие пленки Ge на Si представляют интерес как альтернативные подложки для полупроводниковых соединений  $\text{Al}_\text{III}\text{B}_\text{V}$ . Хорошо известно, что рост Ge на Si в режиме эпитаксии происходит по механизму Странского-Крастанова [1–3]. Сначала формируется смачивающий слой (СС) Ge, затем при достижении критической толщины СС начинается рост трехмерных (3D) островков Ge. Наблюдаемые с помощью метода дифракции быстрых электронов три–четыре затухающие осцилляции зеркально-отраженного пучка электронов [4–6] свидетельствуют о слоевом росте Ge на стадии формирования СС. Однако с появлением сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) выяснилось, что в процессе образования СС на террасах Si(111)- $7 \times 7$  происходит самоорганизованный рост нанокластеров иnanoостровков Ge [7–11]. Максимальная высота двумерных nanoостровков треугольной формы ограничена тремя бислоями (ЗБС) [7, 9, 10, 12]. В условиях квазиравновесного роста при малых скоростях осаждения Ge треугольные nanoостровки формируются по многослойному механизму роста [9, 12, 13]. Нами экспериментально установлено, что чем ниже скорость роста, тем больше образуется островков, высота которых равна ЗБС [10, 12]. Формирование СС герmania завершается слиянием трехбислойных островков и сменой поверхностной структуры  $7 \times 7$  на структуру  $5 \times 5$  [1, 2, 7, 8]. Как нами показано в работах

[12, 14], поверхности структуре  $5 \times 5$  соответствует возросшая скорость поверхности диффузии атомов Ge по сравнению со структурой  $7 \times 7$  (приблизительно в 6 раз при температуре роста 350 °C). Это одна из причин, приводящая к снижению плотности зародышей 3D островков на 2–3 порядка величины по сравнению с плотностью nanoостровков треугольной формы. В литературе появляется все больше подробностей формирования Ge на Si(111), тем не менее, остается не ясным влияние условий роста и напряженного состояния СС на атомные механизмы зарождения и эволюции трехмерных островков Ge. Цель данной работы – детальное исследование последовательных стадий формирования Ge на поверхности Si(111) в квазиравновесных условиях роста.

Получение атомарно-чистой поверхности Si(111)- $7 \times 7$  и эпитаксиальный рост Ge проводился в условиях сверхвысокого вакуума в установке СТМ производства OMICRON. Образцы кремния размером  $12 \times 3 \times 0.4$  мм<sup>3</sup> вырезались из кремниевых шайб *n*-типа с сопротивлением 0.5 Ом·см. Отклонение поверхности от плоскости (111) не превышало пол-градуса. Перед установкой в камеру СТМ образцы обрабатывались в водном растворе смеси азотной кислоты и перекиси водорода для формирования тонкого защитного окисла. Его последующее удаление в вакууме проводилось с целью очистки поверхности. В вакуумной камере образцы обезгаживались не менее 4 ч при температуре около 600 °C, затем поверхность кремния очищалась прогревом 1250 °C несколько секунд

<sup>1)</sup> e-mail: teys@isp.nsc.ru

при давлении не более  $(1 - 2) \cdot 10^{-10}$  торр. Образец прогревался прямым пропусканием тока. Калибровка температуры образца проводилась с помощью оптического пирометра. Обычно охлаждение образца осуществлялось ступенчатым понижением тока нагала со скоростью  $50^\circ\text{C}/\text{мин}$  в диапазоне температур  $900 - 350^\circ\text{C}$ .

Источник Ge представлял собой вольфрамовый испаритель в виде полоски с закрепленной навеской Ge. Скорость напыления варьировалась в диапазоне  $10^{-3} - 10^{-2}$  БС/мин ( $1\text{БС}_{Ge} = 1.44 \cdot 10^{15}$  ат/ $\text{см}^2$ ). Величина покрытия Ge оценивалась по суммарному объему Ge в двумерных трехбислойных островках [10], образовавшихся на террасах вдали от ступеней и междоменных границ (МГ). Рост проводился при температурах подложки  $300 - 550^\circ\text{C}$ , оптимальная температура роста для большинства экспериментов составляла  $400^\circ\text{C}$ .

Изображения СТМ поверхности записывались при комнатной температуре. Для всех изображений СТМ светлые участки на рисунках соответствуют выступающим частям рельефа поверхности, а темная расцветка соответствует углублениям. В качестве СТМ зонда использовались вольфрамовые иглы, полученные электролитическим травлением в растворе щелочи. При анализе и обработке изображений СТМ использовалось свободно распространяемое программное обеспечение WSxM 4.0 [15, 16].

После роста и анализа образцов в камере СТМ проводились исследования дефектов в объеме пленок с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Анализ методом ПЭМ проводился на электронном микроскопе JEM-4000EX (JEOL) при ускоряющем напряжении  $300\text{ кВ}$ . Образцы для ПЭМ препарировались методом химического струйного травления в виде тонких фольг, параллельных поверхности роста (111). Использовались режимы дифракционного контраста в условиях двухволнового приближения: "светлое" и "темное поле" и "слабый пучок". Для наблюдения атомного строения использовалась высокоразрешающая электронная микроскопия (ВРЭМ). Анализировались изображения, полученные в направлениях [111] (направление роста) и [112], угол между которыми равен  $19.5^\circ$ .

Для начальных стадий формирования Ge на поверхности Si(111) можно выделить шесть этапов (рис.1).

(а) Возникновение нанокластеров Ge в половинах элементарных ячеек поверхностной структуры Si(111)- $7 \times 7$  и зарождение двумерных треугольных островков.

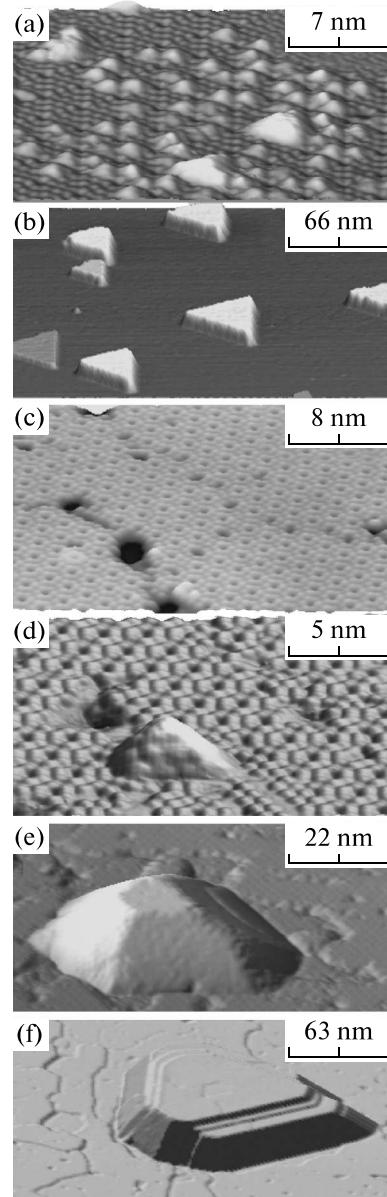


Рис.1. Изображения СТМ последовательных стадий формирования Ge на Si(111) при  $400^\circ\text{C}$ , потоке германия  $9 \cdot 10^{-3}$  БС/мин. (а) нанокластеры и зародыши наностровков Ge; (б) трехбислойные островки Ge на Si(111)- $7 \times 7$ ; (в) поверхность смачивающего слоя с поверхностной структурой  $5 \times 5$ ; (г) островершинный зародыш 3D островка Ge на смачивающем слое; (д) 3D островок Ge в виде усеченной пирамиды; (е) 3D островок Ge с выходом частичных дислокаций на плоскую вершину

(б) Распад нанокластеров Ge и формирование массива двумерных треугольных островков Ge высотой 3БС непосредственно на чистой поверхности Si(111) в результате диффузационного перераспределения Ge из нанокластеров в двумерные островки.

(с) Коалесценция треугольных островков в сплошной СС с формированием поверхностной фазы  $5 \times 5$ , приводящей к увеличению поверхностной диффузии атомов Ge.

(д) Зарождение новых островершинных 3D островков Ge на поверхности СС, предположительно в местах наименьшей деформации кристаллической решетки Ge.

(е) Увеличение объема островершинных пирамид Ge и формирование плоских вершин пирамидальных островков со структурой Ge(111)-c2 × 8.

(ф) Разрастание усеченных пирамид Ge в плоскости подложки, переход структуры поверхности плоской вершины из  $c2 \times 8$  в  $7 \times 7$ , затем снова в  $c2 \times 8$ , а также пластическая релаксация напряжений несоответствия, реализуемая скольжением дислокаций по плоскостям {111} и их выходом на плоские вершины 3D островков.

(а). На первой стадии эпитаксии происходит упорядоченное накопление Ge в половинах элементарных ячеек поверхностной структуры Si(111)-7 × 7 в виде нанокластеров, состоящих из 10–40 атомов германия (рис.1(а)). Из наших экспериментальных данных следует, что в половинах ячеек 7 × 7 существуют относительно мелкие потенциальные ямы для дифундирующих по поверхности атомов Ge. При высоких температурах роста ( $> 500^{\circ}\text{C}$ ) и малых потоках Ge адсорбированные атомы не задерживаются в мелких потенциальных ямах полужеек  $7 \times 7$ , пробегая значительные расстояния и встраиваясь в более глубокие потенциальные ямы, такие как края ступеней и дефекты МГ. Увеличивая поток Ge и уменьшая температуру роста, мы повышаем вероятность образования кластеров в полуячейках  $7 \times 7$ , вплоть до их максимально возможной концентрации. Зная размеры треугольной половины ячейки  $7 \times 7$  не трудно определить, что максимально возможная концентрация нанокластеров не может превысить  $3.2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ .

(б). Слияние четырех соседних нанокластеров приводит к образованию треугольного островка минимального размера, занимающего по площади 2 ячейки структуры  $7 \times 7$  и высотой в один бислой. Максимально возможная концентрация островков минимального размера на поверхности Si(111)-7 × 7 не может превышать величину  $4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ . Появление островка высотой в один бислой равносильно образованию дополнительной ступени на террасе (111), которая имеет более глубокую потенциальную яму для встраивания атомов Ge по сравнению с глубиной ямы в полуячейке  $7 \times 7$ . Об этом свидетельствует зона пониженной концентрации кластеров, всегда присутствующая вдоль ступени при росте

[17], и исчезновение кластеров вокруг островков на террасах при отжиге поверхности после выключения потока Ge [10]. С момента возникновения 1БС островков начинается перераспределение атомов Ge из кластеров в ближайшие островки, вплоть до полного исчезновения нанокластеров [12, 14]. В квазиравновесных условиях роста большинство треугольных островков достигает высоты 3БС (рис.1(б)). В спектрах комбинационного рассеяния света от массива таких 3БС напряженных наноостровков Ge с плотностью  $2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  наблюдалась серия линий, связанная с размерным квантованием фононного спектра перпендикулярно поверхности роста [14, 18]. Ограничение высоты двумерных островков тремя БС связано с особенностями строения краев треугольных островков алмазоподобных полупроводников, поскольку такой же “трехбислойный рост” двумерных островков наблюдается и в ненапряженной гомосистеме Si на Si(111) [13]. Следовательно, на ранних стадиях псевдоморфного роста до формирования смачивающего слоя морфологические изменения поверхности практически не зависят от напряженного состояния Ge и повторяют картину гомоэпитаксиального роста Si на Si(111).

Нормали к сторонам треугольных островков ориентированы в направлениях  $\langle\bar{1}12\rangle$ ,  $\langle\bar{1}2\bar{1}\rangle$  и  $\langle2\bar{1}1\rangle$ . На ступенях Si высотой в один БС с нормалью в направлениях  $\langle\bar{1}12\rangle$  в процессе роста происходит “заброска” атомов Ge в верхние слои [17], что способствует образованию второго и третьего слоев островков. Известно также, что способность поглощать атомы у 3БС ступеней на поверхности Si выше, чем у 1БС ступеней [17]. Можно утверждать, что 3БС ступень обладает более глубокой потенциальной ямой для дифундирующих атомов по сравнению с 1БС ступенью. Вероятно, 3БС ступени островков Ge имеют атомную конфигурацию, подобную 3БС ступеням Si [19] с продольными и поперечными димерами, которые характерны для поверхности (100). Таким образом, можно предположить, что при достижении островками Ge высоты в 3БС резко возрастает скорость встраивания атомов в края 3БС ступеней, ограничивающих двумерные островки. Формирование четвертого слоя островка становится маловероятным, поскольку атомы Ge, попадающие из потока на вершину островка и на подложку рядом с островком, активно встраиваются в края 3БС ступеней.

В условиях квазиравновесного роста на плоских вершинах 3БС островков Ge сначала возникает поверхностная структура  $7 \times 7$  [7, 9, 10, 12]. По мере разрастания островков в плоскости подложки на вершинах появляются домены со структурой  $5 \times 5$ ,

площадь которых начинает доминировать с увеличением покрытия. Так, например, при эффективном покрытии 0,4БС Ge доля структуры  $5 \times 5$  на вершинах островков достигает 30% при температуре роста  $400^\circ\text{C}$  и потоке Ge  $2 \cdot 10^{-3}$  БС/мин. При слиянии 3БС островков в сплошной смачивающий слой на всей поверхности наблюдается только структура  $5 \times 5$  [7, 8, 10]. Необходимо заметить, что при температурах роста выше  $500^\circ\text{C}$  поверхностная структура  $5 \times 5$  начинает доминировать уже при образовании первых слоев островков, что приводит к подавлению “трехбислойного” роста и завершению формирования СС при меньшей толщине. Раннее формирование структуры  $5 \times 5$  авторы [8] связывают с диффузионным перемешиванием Ge и Si при высоких ( $> 500^\circ\text{C}$ ) температурах роста.

(c). При эффективной толщине пленки Ge от 1БС до 2,5БС трехбислойные островки сливаются в сплошной СС. В рамках моделей теории упругости уровень механических напряжений сплошного псевдоморфного слоя может быть выше, чем в отдельных островках, так как в островках происходит частичная релаксация напряжений на свободных боковых гранях. Поэтому объединение островков сопровождается переходом более плотной поверхностной структуры  $7 \times 7$  в менее плотную структуру  $5 \times 5$ , при этом снимается часть напряжений в пленке Ge и высвобождается около 3.6% адатомов, которые встраиваются в края островков. Частичному снятию напряжений способствует также образование множества междоменных границ МГ и незаполненных ямок глубиной до 2-3БС (рис.1(c)). На рисунке ямки выглядят как темные округлые участки, размер которых превышает размер периодически повторяющихся угловых вакансий ячеек  $7 \times 7$ . Отметим, что при зарождении двумерных островков Ge на чистой поверхности Si(111)- $7 \times 7$  (стадия (b)) зародыши островков возникают на каждой МГ. В противоположность этому, при зарождении 3D островков Ge на СС практически все МГ структуры  $5 \times 5$  свободны от зародышей.

(d). Первые зародыши новых трехмерных (3D) островков обнаружены нами впервые при эффективном покрытии  $\sim 2$ БС еще до образования сплошного СС. Зародыши имеют форму островершинных пирамид высотой  $1.3 \pm 0.3$  нм (рис.1(d)). Анализ многочисленных СТМ изображений новых зародышей на поверхности СС показал, что места зарождения характеризуются повышенной дефектностью в области пересечения нескольких МГ (рис.2а) или наличием элементов структуры  $c2 \times 8$ , характерной для ненапряженной поверхности Ge(111) (рис.2б). Можно

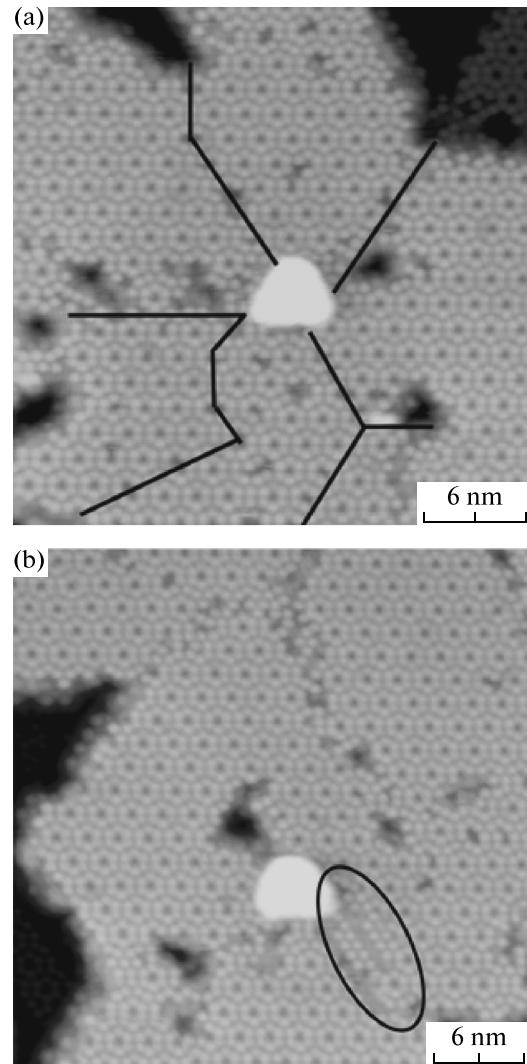


Рис.2. Изображения СТМ характерных мест зарождения островершинных 3D островков Ge на поверхности смачивающего слоя, выращенного при температуре  $400^\circ\text{C}$  и потоке германия  $9 \cdot 10^{-3}$  БС/мин. (а) Островок на пересечении междоменных границ структуры  $5 \times 5$ , черными линиями обозначены междоменные границы; (б) островок на участке смачивающего слоя со структурой  $2 \times 2$ , являющейся элементом структуры  $c2 \times 8$ , участок обведен черным контуром

предположить, что и при пересечении МГ возникают ненапряженные места решетки Ge, в которых возникают зародыши.

С появлением зародышей трехмерных островков на поверхности вновь начинается перераспределение атомов Ge из напряженного СС в 3D островки [3, 20]. Дополнительный поток Ge из участков СС, окружающих островок [8], и увеличенная область сбора адатомов за счет повышения поверхностной диффузии по структуре  $5 \times 5$  способствуют ускоренному росту

3D островков. При этом нельзя исключить возникновение более глубоких потенциальных ям для встраивания адатомов Ge на новых гранях 3D зародышей, отличных от ориентации подложки (111).

(e). Разрастание зародышей приводит к появлению двух видов 3D островков [21]. Одни достигают высоты 6–8 нм и разрастаются в плоскости подложки, причем их боковые поверхности не имеют ограничения. Таких островков было не более 5% от общего числа островков в наших условиях роста. Подавляющее большинство 3D островков по мере латерального и вертикального разрастания превращается из остро-вершинных пирамид в усеченные пирамиды с плоской вершиной (рис.1(e)) при высотах около  $10 \pm 2$  нм. Плоская вершина островков параллельна плоскости подложки (111) [7, 22]. В начальный момент поверхностная структура плоских вершин усеченных пирамид по нашим данным представляет собой смесь структур  $2 \times 2$ ,  $2 \times \sqrt{3}$  и  $c2 \times 8$ , характерных для ненапряженной поверхности Ge(111). Поскольку структуры  $2 \times 2$  и  $2 \times \sqrt{3}$  являются фрагментами структуры  $c2 \times 8$ , в дальнейшем всю группу этих германиевых структур будем называть структурами, родственными  $c2 \times 8$ .

Боковые грани пирамидальных островков Ge впервые были определены как {113}, причем авторы [7] сообщили, что наблюдали на СТМ изображениях поверхностную структуру  $1 \times 3$ . Позднее наличие фасеток {113} подтвердили авторы [23], указав угол наклона граней  $28 \pm 2^\circ$  к плоскости подложки (111). Наши исследования показывают, что боковые грани, пересекающиеся с плоскостью (111) вдоль направлений типа ⟨110⟩, наклонены к границе раздела под углом  $38 \pm 4^\circ$ . Это соответствует граням {115}, которые по данным литературы [24], являются атомно-гладкими и характеризуются поверхностной структурой Ge(115)- $3 \times 3$ . Вблизи наклонных ребер усеченных пирамид формируются дополнительные боковые грани типа {102} (рис.3a). Как правило, две грани {102} располагаются симметрично относительно каждого ребра пирамиды и пересекают плоскость (111) вдоль направлений типа ⟨123⟩. На рис.3a показано формирование только одной грани (102), на которой виден узор поверхностной фазы. По данным литературы [24], грань Ge(102) также является атомно-гладкой и имеет поверхностную структуру с элементарной ячейкой  $2 \times 2$ . Наблюдение с помощью СТМ разнообразных наклонов боковых граней 3D островков в различных публикациях, по-видимому, связано с разными условиями роста Ge (поток германия, температура и качество поверхности подложки).

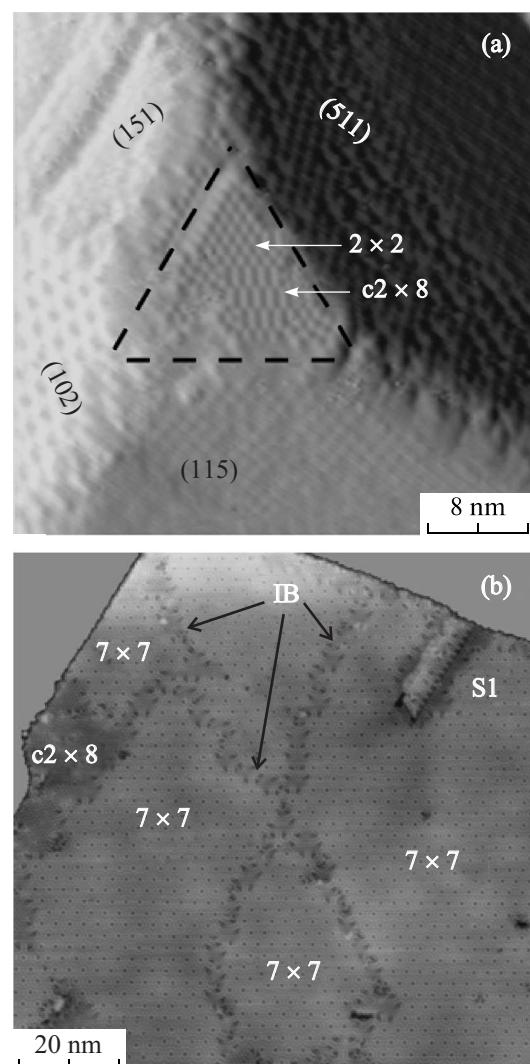


Рис.3. Изображение СТМ вершин 3D островков Ge, выращенных при температуре  $400^\circ\text{C}$ . (а) Изображение 3D островка высотой 13 нм на начальной стадии формирования плоской вершины (111) с поверхностными структурами  $2 \times 2$  и  $c2 \times 8$  после напыления 2.5БС германия, в скобках указаны ориентации боковых граней островка; (б) изображение вершины 3D островка высотой 6 нм с доменами структуры  $7 \times 7$ , стрелками показаны междоменные границы – interdomain boundaries (IB),  $S_1$  – выход частичной дислокации Шокли на вершину островка в виде суббислойной ступени

(f). На плоских вершинах (111) пирамидальных островков Ge при температурах роста ниже  $450^\circ\text{C}$  в работе [7] наблюдали фрагменты поверхностных структур  $2 \times 2$ ,  $c2 \times 4$  и  $c2 \times 8$ , характерные для ненапряженной поверхности Ge(111), при более высоких температурах роста на вершинах 3D островков формировалась структура  $7 \times 7$ . Структуру  $7 \times 7$  на островках наблюдали и в других работах [8, 25, 26].

Возникновение структуры  $7 \times 7$  авторы [25, 26] связывают с существенным перемешиванием Ge и Si при температурах роста  $460\text{--}560^\circ\text{C}$ . В нашей работе при одной и той же температуре роста  $400^\circ\text{C}$  на плоских вершинах 3D островков наблюдалась переходы структур типа  $\text{c}2 \times 8 \rightarrow 7 \times 7 \rightarrow \text{c}2 \times 8$ . Если средний размер верхней площадки (111) островка не превышает  $\sim 30$  нм, то на ней наблюдаются фрагменты родственных структур  $\text{c}2 \times 8$ . По мере увеличения площади и высоты островка напряжения в островке возрастают, начинается введение дислокаций несоответствия в границу раздела и на вершине наблюдается фазовый переход  $\text{c}2 \times 8 \rightarrow 7 \times 7$  (рис.3б).

На рис.3б видны несколько доменов фазы  $7 \times 7$ , разделенных междоменными границами, участки которых содержат преимущественно фазу  $2 \times 2$ . Наличие доменов структуры  $7 \times 7$ , сдвинутых относительно друг друга на нецелое значение вектора трансляции поверхности структуры  $7 \times 7$  (рис.3б), свидетельствует о независимом зарождении фазы  $7 \times 7$  на различных участках плоской вершины островка Ge. Перестроение германьевых структур, родственные  $\text{c}2 \times 8$ , в менее плотную структуру  $7 \times 7$  происходит в результате возрастания уровня напряжений в приповерхностном слое вершины островка при увеличении ее площади. При фазовом переходе происходит частичная релаксация этих напряжений за счет формирования менее плотной упаковки адатомов верхнего слоя и образования глубоких угловых вакансий в элементарной ячейке  $7 \times 7$ . Структура  $7 \times 7$  содержит на 7% меньше атомов, чем  $\text{c}2 \times 8$  и родственные ей структуры поверхности Ge. На рис.3б видны квазипериодические волнообразные искажения кристаллической решетки Ge на верхней площадке 3D островка. Такая модуляция поверхности Ge на Si(111) впервые была обнаружена с помощью метода анализа профилей дифракционных рефлексов медленных электронов (SPA LEED) в работе [27] и интерпретировалась как результат формирования сетки дислокаций несоответствия, скользящих в границе раздела Ge-Si. Позднее модуляцию поверхности визуализировали методом СТМ на островках Ge [21], объяснив ее присутствием частичных дислокаций в границе раздела (ГР). Средний период волнообразных искажений на рис.3б составляет около 15 нм, что должно соответствовать такому же среднему расстоянию между дислокациями в ГР. Следовательно, в островке (рис.3б) имеет место частичная релаксация напряжений несоответствия  $\rho \sim 30\%$ . В предельном случае при релаксации напряжений  $\rho$  на уровне 100% период расположения дислокаций –  $P$  должен составлять от 5 до

10 нм, в зависимости от природы дислокаций несоответствия.

В работе [28] нами показано, что при  $H \geq P$  напряжения в пленке распределены однородно, как по площади, так и по глубине верхнего слоя толщиной  $\Delta h = H - P$ . Уже при  $H = P$  неоднородности напряжений по площади составляют около 1%. Соответственно с уменьшением  $H$ , при  $H < P$ , неоднородности усиливаются. При  $\rho=100\%$  верхние слои островка являются свободными от напряжений, то есть на поверхности (111) растущей пленки должна отсутствовать модуляция поверхности и регистрироваться поверхностьная фаза  $\text{c}2 \times 8$ , типичная для ненапряженных кристаллов Ge. Из наших экспериментальных данных следует, что по мере увеличения высоты островка возникает обратный переход сверхструктур  $7 \times 7$  в структуры Ge, родственные  $\text{c}2 \times 8$ . Этот переход мы связываем с уменьшением напряжений в приповерхностном слое островка с ростом высоты и введением в ГР максимального количества дислокаций несоответствия.

Одновременно с фазовыми переходами  $\text{c}2 \times 8 \rightarrow 7 \times 7 \rightarrow \text{c}2 \times 8$  на поверхностях островков с помощью СТМ можно наблюдать ступени от выхода дислокаций (рис.1(f)). В упруго напряженный островок Ge дислокации могут вводиться как по наклонным плоскостям скольжения {111}, так и скольжением в плоскости ГР (111). По наклонным плоскостям могут вводиться как полные  $60^\circ$ -е дислокации, так и частичные дислокации Шокли с  $30^\circ$ -й или  $90^\circ$ -й (краевой) ориентацией вектора Бюргерса. При образовании дислокаций Шокли в наклонных плоскостях возникают дефекты упаковки (ДУ), которые обнаружены в некоторых островках с помощью ПЭМ (рис.4). Выход ДУ на поверхность островка приводит к образованию ступеней высотой меньше толщины бислоя ( $h_{\text{БС}}$ ). Нами обнаружено два типа суббислойных ступеней:  $S_1$  и  $S_2$ , высотой  $(1/3)h_{\text{БС}}$  и  $(2/3)h_{\text{БС}}$ , соответственно (рис.5.). Ступени  $S_1$  в литературе известны [7], а  $S_2$  обнаружены нами впервые. Ступени всегда расположены вдоль направлений типа  $\langle 110 \rangle$ , нормалью к фронту ступени  $S_1$  является направление типа  $\langle 11\bar{2} \rangle$ , а нормалью к фронту  $S_2$  – направление  $\langle \bar{1}12 \rangle$ .

Статистическая обработка изображений плоских вершин островков Ge показала, что при условиях роста  $400^\circ\text{C}$ , потоке Ge  $5 \cdot 10^{-3}$  БС/мин и покрытии ЗБС на вершинах островков преимущественно наблюдаются ступени типа  $S_1$ , а доля ступеней типа  $S_2$  не превышает 6%. При увеличении покрытия Ge всего на 0.5БС доля ступеней  $S_2$  возрастает до 40%. Кроме того, ступени  $S_1$  возникают как в центральной части

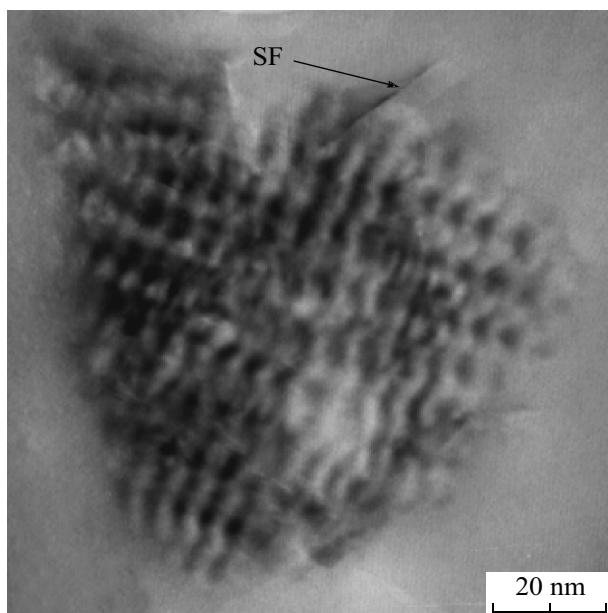


Рис.4. Изображение ПЭМ островка Ge в режиме съемки “plan view” с наклонным дефектом упаковки SF (stacking fault)

поверхности островка, так и на его крае, а ступени  $S_2$  – только в центральной части вершины островка и только имея одну или две общие (угловые) точки со ступенями  $S_1$  (рис.5). Возможной причиной образования таких ступеней является скольжение с поверхности напряженного островка частичных дислокаций Шокли с векторами Бюргерса типа  $(a/6)\langle 112 \rangle$ , которые наклонены к линии ступени под углом 30 или  $90^\circ$ , в результате высоты ступеней отличаются в 2 раза. Наклонные плоскости  $\{111\}$ , проходящие через ступени  $S_1$ , содержат ДУ вычитания, поэтому от концов ступеней в глубь островка простираются частичные дислокации. Укажем, что доля частичных дислокаций, скользящих в наклонных плоскостях скольжения 111 и формирующих ступени типа  $S_1$  и  $S_2$  (рис.5), является незначительной относительно основного количества дислокаций несоответствия, обусловливающих протекание релаксационного процесса.

На рис.4 показано изображение ПЭМ 3D островка Ge. Оно содержит ДУ, расположенный в плоскости  $(1\bar{1}\bar{1})$ . Изображение получено в полюсе  $[211]$ , для чего образец был наклонен на  $19.5^\circ$  вокруг направления  $[0\bar{1}1]$ . Изображение (рис.4) содержит также чередующиеся светлые и темные участки, демонстрирующие картину дилатационного муара. Период муара, равный  $\sim 90$  нм, свидетельствует о релаксации напряжений несоответствия, обусловленной присутствием дислокаций несоответствия в гетерогра-

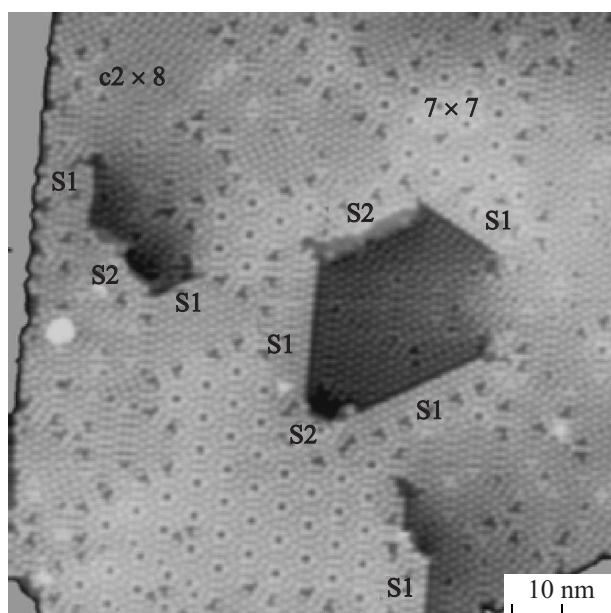


Рис.5. Изображение СТМ вершины островка Ge высотой 12 нм после осаждения трех бислоев германия на поверхность Si(111) при температуре  $400^\circ\text{C}$ ,  $S_1$  – прямолинейные ступени высотой  $0.13 \pm 0.02$  нм,  $S_2$  – ступени высотой  $0.24 \pm 0.02$  нм

нице Ge-Si на уровне  $\rho \sim 30\%$ . Видно, что верхний участок ДУ расположен вне картины дилатационного муара. Следовательно, периферийная часть островка  $> 10$  нм является псевдоморфной, а латеральный параметр кристаллической решетки Ge согласован с параметром подложки.

На рис.6 показаны полученные в рефлексе  $g_{2\bar{2}0}$  изображения двух островков, которые демонстрируют картину дилатационного муара (рис.6a) и сетку дислокаций несоответствия (рис.6b). Изображение сетки получено в режиме слабого пучка. Периоды дилатационного муара и дислокационной сетки ( $\sim 90$  нм) с точностью до 10% совпадают. Это позволяет предположить два возможных варианта природы основного количества дислокаций несоответствия, залегающих в плоскости ГР (111) островка Ge. 1) Дислокации являются  $60^\circ$ -ми и образованы по механизму скольжения по наклонным плоскостям 111. 2) Дислокации скользят и залегают в плоскостях (111) ГР и являются расщепленными на частичные дислокации Шокли. Анализ изображений, полученных в режиме съемки “plan view” не позволяет разделить эти два случая, и необходимы исследования с использованием поперечных срезов.

В работе установлены 6 стадий (a–f) начального роста Ge на Si(111), отличающиеся структурным и морфологическим состоянием растущего эпитакси-

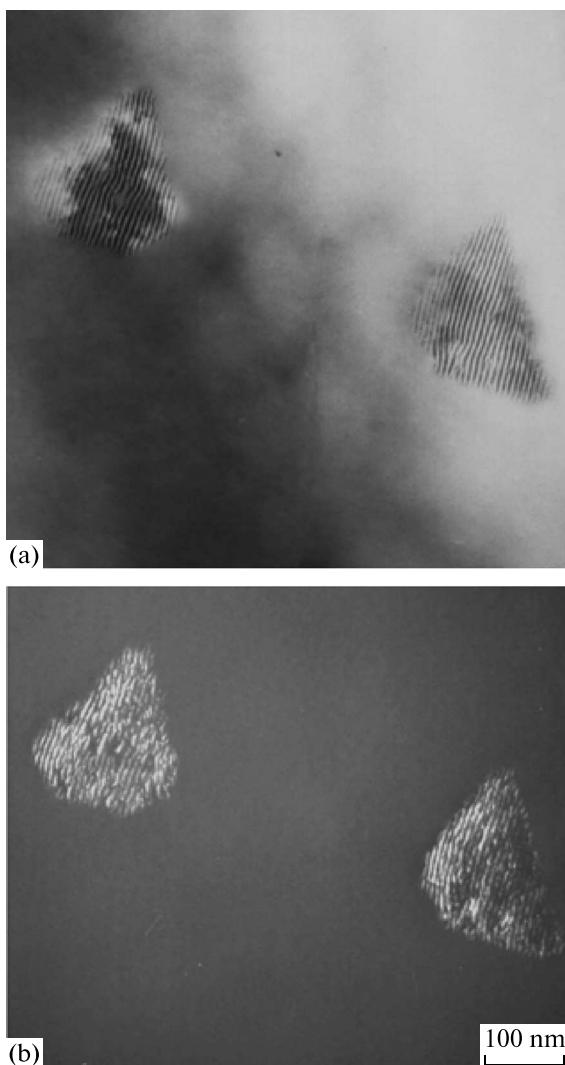


Рис.6. Изображения ПЭМ островков Ge, полученные в рефлексе  $g_{2\bar{2}0}$ . (а) Картина дилатационного муара; (б) сетка дислокаций несоответствия, расположенных в границе раздела

ального слоя. На стадиях (а)–(с), когда происходит возникновение кластеров, образование двумерных островков и срастание последних в сплошной смачивающий слой, морфологические изменения поверхности слабо зависят от напряженного состояния Ge и, в целом, повторяется картина гомоэпитаксиального роста на Si(111). Единственным отличием стадий (б) и (с) от роста Si является переход поверхности структуры Ge(111)- $7 \times 7$  в менее плотную структуру Ge(111)- $5 \times 5$ , который обусловлен возрастанием напряжений несоответствия.

Зарегистрированы островершинные зародыши 3D островков Ge на поверхности смачивающего слоя. Анализ потенциально возможных центров их зарождения показал, что они возникают в местах с предпо-

ложительно минимальной деформацией кристаллической решетки Ge.

При дальнейшем квазиравновесном росте островершинные 3D островки трансформируются в усеченные пирамиды с боковыми гранями {115} и {102}. Дальнейшая эволюция морфологического и деформационного состояния островков сопровождается протеканием двух фазовых переходов  $c2 \times 8 \rightarrow 7 \times 7 \rightarrow c2 \times 8$ . Первый из них обусловлен увеличением напряжений в центральной части верхней площадки (111) усеченной пирамиды, а второй – пластической релаксацией напряжений за счет введения дислокаций несоответствия в границу раздела. Незначительная доля частичных дислокаций Шокли, скользящих по наклонным плоскостям {111}, приводит к образованию дефектов упаковки, выходящих на верхнюю площадку с формированием двух видов суббислойных ступеней  $S_1$  и  $S_2$  высотой, соответственно,  $(1/3)h_{BC}$  и  $(2/3)h_{BC}$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Роснауки (контракт 02.552.11.7056) и грантов Российского фонда фундаментальных исследований № 10-02-00902-а и № 08-02-01101.

1. T. Narusawa and W. M. Gibson, Phys. Rev. Lett. **47**, 1459 (1981).
2. T. Ichikawa and S. Ino, Surf. Sci. **136**, 267 (1984).
3. S. M. Pintus, S. I. Stenin, A. I. Toropov et al., Thin Solid Films **151**, 275 (1987).
4. H. Hibino, N. Shimizu, K. Sumitomo et al., J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 23 (1994).
5. A. Daniluk, P. Mazurek, and P. Mikolajczak, Surf. Sci. **369**, 91 (1996).
6. B. A. Марков, О. П. Пчеляков, ФТТ **38**, 3152 (1996).
7. U. Koehler, O. Jusko, G. Pietsch et al., Surf. Sci. **248**, 321 (1991).
8. N. Motta, A. Sgarlata, R. Calarco et al., Surf. Sci. **406**, 254 (1998).
9. B. Voigtlaender, Surf. Sci. Rep. **43**, 127 (2001).
10. S. A. Teys and B. Z. Olshanetsky, Phys. Low-Dimen. Struct. **1/2**, 37 (2002).
11. Y. P. Zhang, L. Yan, S. S. Xie et al., Surf. Sci. **498**, L60 (2002).
12. S. A. Teys, A. B. Talochkin, and B. Z. Olshanetsky, J. Cryst. Growth **311**, 3898 (2009).
13. B. Voigtlaender and A. Zinner, Surface Sci. **351**, L233 (1996).
14. С. А. Тийс, А. Б. Талочкин, К. Н. Романюк, Б. З. Ольшанецкий, ФТТ **46**, 83 (2004).
15. WSXM free software at [www.nanotec.es](http://www.nanotec.es).
16. I. Horcas, R. Fernandez, J. M. Gomez-Rodriguez et al., Rev. Scient. Instrum. **78**, 013705 (2007).

17. К. Н. Романюк, С. А. Тийс, Б. З. Ольшанецкий, ФТТ **48**, 1716 (2006).
18. А. Б. Талочкин, С. А. Тийс, Письма в ЖЭТФ **74**, 314 (2002).
19. S. A. Teys, K. N. Romanyuk, R. A. Zhachuk, and B. Z. Olshanetsky, Surf. Sci. **600**, 4878 (2006).
20. B. Voigtlaender and M. Kastner, Appl. Phys. A **63**, 577 (1996).
21. S. N. Filimonov, V. Cherepanov, N. Paul et al., Surf. Sci. **599**, 76 (2005).
22. B. Voigtlaender and A. Zinner, Appl. Phys. Lett. **63**, 3055 (1993).
23. G. Capellini, N. Motta, A. Sgarlata, and R. Calarco, Solid State Commun. **112**, 145 (1999).
24. B. Z. Olshanetsky, V. I. Mashanov, and A. I. Nikiforov, Surf. Sci. **111**, 429 (1981).
25. F. Ratto, F. Rosei, A. Locatelli et al., Appl. Phys. Lett. **84**, 4526 (2004).
26. F. Ratto, F. Rosei, A. Locatelli et al., J. Appl. Phys. **97**, 043516 (2005).
27. M. Horn-von Hoegen, A. Al-Falou, H. Pietsch et al., Surf. Sci. **298**, 29 (1993).
28. E. M. Trukhanov, K. B. Fritzler, G. A. Lyubas et al., Appl. Surf. Sci. **123/124**, 664 (1998).