Исследование кристаллической структуры наноостровков кремния на сапфире

© Н.О. Кривулин[¶], А.В. Пирогов, Д.А. Павлов, А.И. Бобров

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 23 мая 2014 г. Принята к печати 16 июня 2014 г.)

В работе представлены результаты исследований кристаллической структуры наноразмерных островков кремния на сапфире. Показано, что основными дефектами в наноостровках кремния на сапфире являются дефекты двойникования. В результате формирования таких дефектов в островках кремния на сапфире формируются различные кристаллографические ориентации. На начальных стадиях молекулярно-лучевой эпитаксии кремния на сапфире присутствуют две основные ориентации — (001) параллельно поверхности и (001) под углом 70° к поверхности.

Нанокристаллический кремний интересен тем, что, в отличие от обычного кристаллического кремния, способен эффективно излучать свет в видимой и ближней инфракрасной областях спектра [1]. Ранее нами была показана возможность формирования плотных массивов наноостровков кремния на *r*-срезе сапфира (01 $\overline{1}2$) и построена модель их роста [2,3]. Поверхностная плотность наноостровков может достигать величин $\sim 10^{11}\,{
m cm^{-2}},$ что сравнимо с результатами, получаемыми в системе кремний-германий [4,5]. При этом размеры островков измеряются единицами нанометров. Нанокристаллический кремний на сапфире представляет собой совершенно новую, мало изученную разновидность самоорганизованных структур на основе кремния, и любая информация о ней представляется актуальной, в первую очередь с фундаментальной точки зрения. В данной работе приводятся результаты исследования кристаллической структуры наноостровков кремния на сапфире.

Для получения наноостровковых структур кремния на сапфире использовался метод сублимационной молекулярно-лучевой эпитаксии, подробно описанный в [2,6]. Исследование поперечного среза полученных образцов проводилось в просвечивающем электронном микроскопе JEM-2100F (JEOL, Япония) в режиме высокого разрешения, ускоряющее напряжение составляло 200 кВ.

Согласно данным просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на начальных стадиях молекулярнолучевой эпитаксии (МЛЭ) в островках не содержится никаких дефектов. При этом по форме наноостровки представляют собой сегмент сферы. Когда высота островка достигает 8 нм, он начинает расти преимущественно в латеральных направлениях. Начиная с этого момента островок по форме становится похожим на усеченный купол. На некоторых островках шириной 25 нм и более были обнаружены дефекты двойникования. На рис. 1 представлен типичный островок кремния на сапфире с таким дефектом. Двойники ориентированы под углом 70° по отношению к подложке сапфира — это двойники по плоскости (111), типичные для эпитаксиального слоя кремния с ориентацией (001) [7]. При этом непонятно, являются ли данные дефекты крупных островков следствием коалесценции более мелких островков, или это ростовые дефекты, которые возникают в них при укрупнении. Таким образом, мы можем предположить, что при коалесценции двух и более островков дефекты формируются в местах их соприкосновения, либо наличие таких дефектов можно объяснить релаксацией напряжений в кремниевых островках. Так как постоянная решетки кремния больше, чем постоянные решетки сапфира в плоскости *r*-среза, кремниевый островок оказывается сжатым. При росте островка напряжения, образующиеся в результате сжатия, накапливаются, и в какойто момент происходит релаксация этих напряжений с образованием дефекта. Второй механизм образования дефектов на самых ранних стадиях более вероятен, так как расстояния между островками составляют в среднем 10-15 нм. К тому же этот механизм считается основным в системе кремний-сапфир [8,9].



Рис. 1. ПЭМ-снимок высокого разрешения поперечного среза островка кремния с дефектом двойникования.



Рис. 2. Быстрое фурье-преобразование от островка кремния с дефектом двойникования. Двойными квадратными скобками обозначены индексы плоскостей Si.

Следует обратить внимание на то, что кристаллографическая ориентация сплошных слоев кремния на *r*-срезе сапфира есть (001). Доля других кристаллографических ориентаций незначительна [10]. На рис. 1 видно, что даже в пределах одного островка практически в равных долях присутствуют по крайней мере две ориентации. Для выявления кристаллографических ориентаций и оценки объемной доли каждой ориентации, мы использовали фурье-преобразование.

Преобразование Фурье — это операция, сопоставляющая одной функции другую функцию. Новая функция описывает коэффициенты ("амплитуды") при разложении исходной функции на элементарные составляющие — гармонические пространственные колебания с различными пространственными частотами. Таким образом, представляя распределение интенсивности на любом изображении размерами x, y в виде некоторой функции $I(\mathbf{r})$, где \mathbf{r} — двумерный вектор, описывающий положение на изображении, можно представить его в виде набора периодических функций. Если применять фурьепреобразование к ПЭМ-снимку высокого разрешения, то получится картина, идентичная картине дифракции. Данный метод широко применяется и подробно описан в литературе (см., например, [11,12]). На рис. 2 представлена картина, получившаяся в результате быстрого фурье-преобразования от островка кремния на сапфире с дефектом двойникования, изображенного на рис. 1. Точно так же выглядела бы и электронограмма от этого участка. Преимущество фурье-преобразования перед электронографией в том, что картину дифракции можно получать от участков, размеры которых ограничены единицами нанометров. В случае наноразмерных островков (рис. 1), мы проводили фурье-преобразования отдельно для каждой части каждого островка относительно дефекта двойникования и для сапфировой подложки. Всего было исследовано 3 образца. На каждом образце проводились такие операции для 8–10 островков. На рис. 2 белыми окружностями отмечены рефлексы, принадлежащие правой области островка относительно двойника, черными — левой, а квадратами — рефлексы от подложки из сапфира.

Как видно из рис. 2, симметрия рефлексов обеих частей островка одинакова, однако ориентация различна, т. е. рефлексы повернуты друг относительно друга на угол 70°. Таким образом, в плоскости среза ориентация обеих частей островка одна — (110). В направлении же роста ориентация (001) одной из частей островка повернута относительно [110] на угол 70.6°.

Далее можно выделить отдельные семейства рефлексов на картине дифракции и провести обратное фурьепреобразование. Таким образом, можно выделить отдельные семейства плоскостей на ПЭМ-снимке островка кремния и вычислить объемную долю каждой ориентации.

На рис. 3 показана картина пространственных частот после наложения маски, соответствующей положению рефлексов правой части островка. После обратного фурье-преобразования получаем картину распределения семейств плоскостей на снимке (рис. 4). То же самое сделано и для левой части островка, а также для сапфировой подложки.

В обеих частях островка имеется одно семейство плоскостей типа {111}, остальные же семейства располагаются под углом друг к другу. Выявляя различные семейства плоскостей, определяли кристаллографические направления различных частей наноостровков. На рис. 1 показаны эти направления. Справа от границы двойникования мы видим 2 семейства плоскостей



Рис. 3. Наложение маски рефлексов правой части островка на картину пространственных частот.



Рис. 4. Фильтрация картины высокого разрешения по рефлексам правой части островка.

типа {111}. Угол между ними составляет 70.6°. Направление [001] этой части островка совпадает с нормалью к поверхности. Слева от границы двойникования также присутствует 2 семейства плоскостей типа {111}, угол между ними тот же. Однако направление типа [001] для данной области уже не совпадает с нормалью, а отклоняется от нее на угол 70.6°. Такие исследования проведены для серии образцов. При этом на каждом образце вычислялись объемные доли каждой ориентации. Было получено соотношение: 60% — ориентация (001), 40% — ориентация (001) под углом 70.6° к поверхности.

Таким образом, на начальных стадиях молекулярнолучевой эпитаксии кремния на сапфире, присутствуют две основные ориентации — (001) параллельно поверхности ($\sim 60\%$) и (001) под углом 70.6° к поверхности ($\sim 40\%$).

Список литературы

- [1] L.T. Canham. Appl. Phys. Lett., 57 (10), 1046 (1990).
- [2] Д.А. Павлов, Е.В. Коротков, П.А. Шиляев, Н.О. Кривулин. Письма ЖТФ, **36** (12), 16 (2010).
- [3] Н.О. Кривулин, Д.А. Павлов, П.А. Шиляев. ФТП, 47 (12), 1621 (2013).
- [4] A. Portavoce, K. Hoummada, I. Berbezier, A. Ronda, D. Mangelinck. Appl. Phys. Lett., 100, 164 105 (2012).
- [5] A.I. Nikiforov, V.A. Timofeev, S.A. Teys, A.K. Gutakovsky, O.P. Pchelyakov. Thin Sol. Films, **520**, 3319 (2012).
- [6] Д.А. Павлов, П.А. Шиляев, Н.О. Кривулин и др. Вестник ННГУ им. Н.И. Лобачевского. Физика твердого тела, № 4 (1), 38 (2013).
- [7] П.Д. Браун, Ю.Ю. Логинов, У.М. Стоббс, К. Дж. Хамфрейс. ФТТ, 38 (1), 284 (1996).

- [8] M.S. Abrahams, V.L. Hutchison, G.R. Booker. Phys. Status Solidi A, 63 (1), K3 (1981).
- [9] M.E. Twig, E.D. Richmond, J.G. Pellegrino. Appl. Phys. Lett., 54 (18), 1766 (1989).
- [10] С.А. Денисов, С.П. Светлов, В.Ю. Чалков и др. Вестник ННГУ им. Н.И. Лобачевского. Физика твердого тела, 1 (9), 185 (2006).
- [11] M.J. Hytch, E. Snoeck, R. Kitaas. Ultramicroscopy, 74, 131 (1998).
- [12] M. Takeda, J. Suzuki. J. Opt. Soc. Am. A, 13, 1495 (1996).

Редактор Л.В. Шаронова

The crystal structure of silicon-on-sapphire nanoisland

N.O. Krivulin, D.A. Pavlov, A.V. Pirogov, A.I. Bobrov

N.I. Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The paper presents the results of study of the crystal structure of nanoscale silicon islands on sapphire. It is shown that the main defects in silicon-on-sapphire nanoislands are twinning defects. As a result of such defects in the silicon islands on sapphire different crystallographic orientations are formed. At the initial stages of molecular-beam epitaxy of silicon on sapphire, there are two main orientations — (001) parallel to the surface and (001) at an angle of 70° to the surface.