

07,03

Образование дислокационных пар в гетероструктуре Ge/GeSi/Si(001)

© Ю.Б. Болховитянов, А.К. Гутаковский, А.И. Дерябин, Л.В. Соколов[¶]

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова РАН,
Новосибирск, Россия

[¶] E-mail: sokolov@isp.nsc.ru

(Поступила в Редакцию 21 мая 2018 г.

В окончательный редакции 20 августа 2018 г.)

В гетероструктурах (ГС) Ge/LTGe/GeSi/Si(001) буферный слой GeSi в определенном диапазоне параметров ГС и режимов их роста остается псевдоморфным, в то время как пленка Ge полностью релаксирована за счет сетки краевых дислокаций, расположенной на границе раздела Ge/GeSi. В работе экспериментально показано, что наряду с краевыми дислокациями образуются дислокации с векторами Бюргерса типа $a_0(100)$. Их формирование обусловлено реакцией 60° -х дислокаций, имеющих однонаправленную винтовую компоненту. При этом, если в процессе релаксации буферного слоя краевые дислокации расщеплялись с образованием дислокационного комплекса краевого типа, в котором 60° -е дислокации оставались связанными, то дислокации с векторами Бюргерса $a_0(001)$ расщеплялись на две независимые 60° -е дислокации.

Электронно-микроскопические исследования проводились на оборудовании ЦКП „Наноструктуры“ при поддержке Российского научного фонда (грант № 14-22-00143).

DOI: 10.21883/FTT.2019.02.47127.139

1. Введение

Краевые дислокации Ломера являются одним из основных структурных дефектов в кристаллах и пленках Ge, Si и $A^{III}B^V$ [1,2]. В гетероструктурах Ge/Si(001) они являются основным типом дислокаций несоответствия (ДН), компенсирующих разность параметров кристаллической решетки пленки и подложки. Дислокации Ломера образуются вследствие объединения двух комплементарных 60° -х ДН либо при их случайной встрече, либо в процессе наведенного зарождения [3]. Объединение двух комплементарных 60° -х ДН в одну краевую ДН — энергетически выгодный процесс, так как при этом взаимно компенсируются противоположно направленные винтовые компоненты вектора Бюргерса 60° -х ДН, не участвующие в процессе пластической релаксации напряженной пленки. Критерий b^2 и расчеты удельной энергии дислокации на атомном уровне показывают значительный энергетический выигрыш при образовании краевой дислокации [4].

Дислокации Ломера, обычно обнаруживаемые в области границ раздела, могут иметь разнообразную структуру ядра: от компактной, подобной предложенной Hornsta [5], до рыхлой, занимающей в поперечнике несколько nm [6]. Как ранее было показано [7], параметры гетероструктур (ГС) Ge/LTGe/GeSi/Si(001) и режимы их роста могут быть выбраны так, что буферный слой GeSi остается псевдоморфным и пленка Ge зарождается на искусственной подложке GeSi/Si(001), латеральный параметр решетки которой повторяет латеральный параметр Si. В ГС такого типа после пластической релаксации слоя Ge, выращенного при 500°C , практически все дислокации несоответствия имеют краевой тип и расположены в границе раздела Ge/GeSi, а буферный

слой GeSi остается псевдоморфным (рис. 1, *a*). При отжиге ГС часть ДН краевого типа, ранее считавшиеся неподвижными, мигрируют с верхней границы Ge/GeSi на нижнюю GeSi/Si (рис. 1, *b*). Такое перераспределение краевых дислокаций между верхней и нижней границами осуществляется путем движения дислокационных комплексов ломеровского типа, имеющих более рыхлую, чем компактная по Hornstra [5] краевая дислокация, атомную структуру, то есть, миграция краевых дислокаций происходит в расщепленном виде. Предполагаемый механизм их передвижения был предложен в [8]. В [9] было установлено, что расщепление затрагивает не

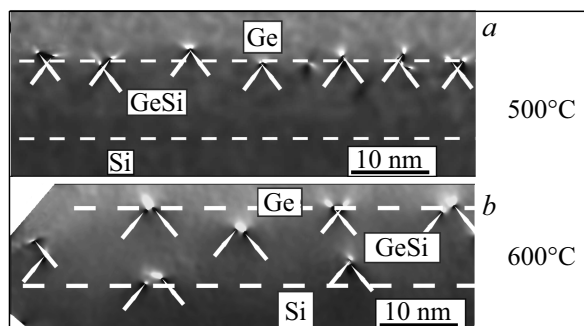


Рис. 1. Результаты цифровой обработки ВРЭМ изображений свежес выращенного при 500°C (*a*) и отожженного при 600°C (*b*) образцов гетероструктуры Ge/Ge_{0.5}Si_{0.5}(10 nm)/Si(001). Представлены карты распределения межплоскостных расстояний для (111) и (11 $\bar{1}$) плоскостей в тоновой моде (использован GPA анализ для отображения общей картины распределения дислокаций). Белые стрелки отмечают окончания экстра плоскостей {111}. Штриховые линии — границы раздела.

только дислокации Ломера с исходно рыхлой структурой ядра, но и совершенные (компактные) дислокации Ломера.

Несмотря на преобладание дислокаций Ломера и ломеровских комплексов в границах раздела релаксированных гетероструктур, в литературе обсуждается возможность образования дислокаций с векторами Бюргера типа $a_0\langle 001 \rangle$ [10]. Такие дислокации гипотетически могут сформироваться в результате реакции двух 60° -х дислокаций, имеющих однонаправленную винтовую компоненту. Oktyabrsky и J. Narayan [11], рассчитав взаимодействие дислокационных пар в разной парной комбинации, показали, что в обеих парах 60° -х дислокаций (с параллельными и антипараллельными винтовыми компонентами) наблюдается взаимное притяжение, однако, притяжение в паре с параллельными винтовыми компонентами в 10 раз слабее. Тем не менее, достоверных наблюдений таких дислокаций в литературе не встречается. Учитывая высокую плотность дислокаций, хорошую упорядоченность дислокационной сетки и возможность управления их перемещением, можно ожидать наблюдения дислокаций типа $a_0\langle 001 \rangle$ в гетероструктуре Ge/LTGe/GeSi/Si(001).

2. Эксперимент

Структуры Ge/LTGe/GeSi/Si(001) были выращены методом молекулярной эпитаксии. На поверхности Si подложки при $T = 450^\circ\text{C}$ вначале выращивался 10 nm буферный слой GeSi с содержанием Ge, равным 0.5; затем, при $T = 200^\circ\text{C}$, наносился затравочный слой Ge (LTGe) толщиной 7 nm. После этого, одновременно с подъемом температуры до $T = 500^\circ\text{C}$, выращивался основной слой Ge до толщины $0.5\ \mu\text{m}$. По окончании роста образцы отжигались в атмосфере водорода при температуре 600°C в течение 10 min.

Дислокационная структура выращенных образцов изучалась на поперечных срезах на электронном микроскопе JEOL-4000EX с ускоряющим напряжением 400 kV. Использовалась высокоразрешающая электронная микроскопия (ВРЭМ), сканирующая просвечивающая электронная микроскопия (СПЭМ), а также цифровая обработка ВРЭМ и СПЭМ изображений [12].

В настоящей работе использовалась методика анализа геометрической фазы (GPA — geometric phase analysis), впервые предложенная в [13], для изучения локального распределения межплоскостных расстояний d_{111} и $d_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}$ в окрестности дислокаций несоответствия. Детали методики можно найти в [14]. Цифровая обработка экспериментальных ВРЭМ и СПЭМ изображений осуществлялась с использованием коммерческой программы „Digital Micrograph“ (GATAN).

3. Результаты

Как ранее было показано [7,8,15,16], при отжиге дислокационные дефекты ломеровского типа перерас-

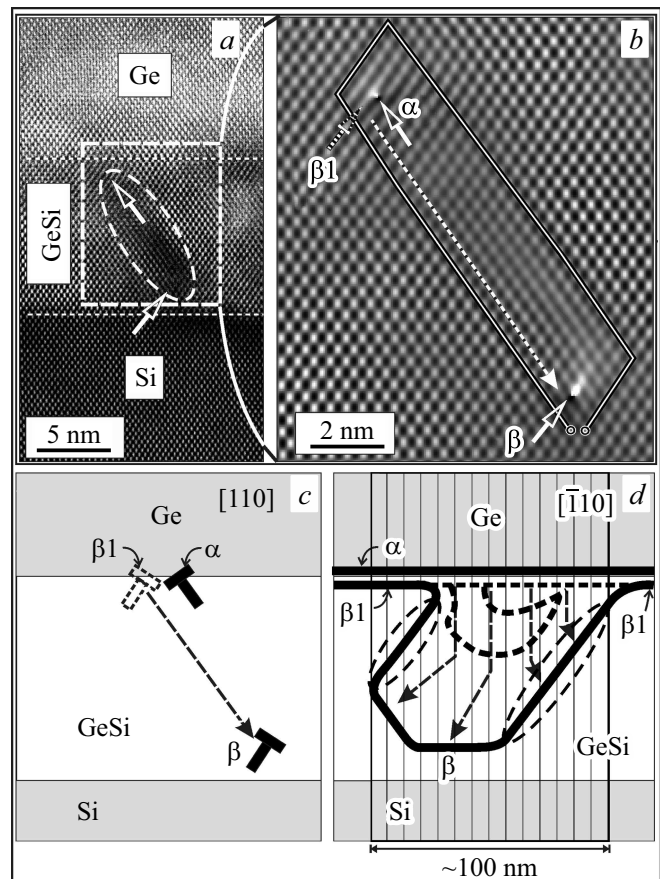


Рис. 2. (a) — экспериментальное СПЭМ-изображение поперечного среза неотожженного образца Ge/Ge_{0.5}Si_{0.5}(10 nm)/Si(001). Белым стриховым овалом отмечен деформационный контраст от дислокации, лежащей внутри фольги в наклонной плоскости (111); (b) — фильтрованное в рефлексках (11 $\bar{1}$) и (111) композитное изображение области, выделенной белым прямоугольником на рис. 2,а. Белой пунктирной стрелкой отмечено направление возможного скольжения дислокации β из вероятного положения $\beta 1$ в наблюдаемое положение β . c, d — схемы расщепления пары 60° -х дислокаций в предположении их слабой связи. (c) — тот же вид, что и на рис. 2,а, (d) — вид сбоку, в направлении $[\bar{1}10]$.

пределяются на двух гетерограницах таким образом, что происходит компенсация несоответствия буферного слоя. При этом, в процессе перемещения части дефектов с границы Ge/GeSi в границу GeSi/Si происходит уменьшение доли дислокаций с компактным ядром в пользу „рыхлых“ дислокаций, обладающих ядром в 2–6 nm [8,15,16]. Несмотря на увеличение расстояния между 60° -ми дислокациями, образующими краевую дислокацию, в целом, большинство 60° -х дислокаций не теряют связи, а образуют рыхлый дефект, перемещающийся как единое целое, по механизму, описанному в [16].

Тем не менее встречаются и не связанные друг с другом, на первый взгляд, 60° -е дислокации. Один из таких примеров представлен на рис. 2.

Внимательное рассмотрение позволяет обнаружить деформационный контраст между парой 60° -х дислокаций (выделено белым штриховым овалом на рис. 2, а). В литературе встречаются предположения о возможности существования на границе раздела пленка/подложка парных 60° -х дислокаций с параллельными винтовыми компонентами, например, в системе Ge/Si [6,17], в противоположность комплементарным дислокациям, у которых винтовые компоненты антипараллельны. Такие пары не имеют энергетических предпочтений перед отдельными 60° -ми дислокациями однако они также выполняют основную функцию дислокаций несоответствия в ГС — релаксацию напряжений в пленке. Не будучи сильно связанной, такая дислокационная пара может легко распастись на две независимые 60° -е дислокации. Предположительная конфигурация 60° -х дислокаций, наблюдающихся на рис. 2, а, 2b представлена на рис. 2, с. Здесь изображена пара 60° -х дислокаций (α и β), находящихся на наклонных зеркально отклоненных плоскостях $\{111\}$. Одна из них (α) находится вблизи границы Ge/GeSi, тогда как участок дислокации β проскользил вдоль плоскости (111) почти до границы GeSi/Si. Деформационный контраст, наблюдаемый на рис. 2, а (осевая линия деформационного следа совпадает со следом наклонной плоскости (111)), создается наклонным участком дислокации β (выделен белым штриховым овалом на рис. 2, d). Если дислокацию β вернуть вдоль плоскости скольжения (111) в положение β_1 , получится пара близко расположенных 60° -х дислокаций. Схема расщепления (предполагаемый вид в направлении, лежащем в плоскости фольги) представлена на рис. 2, d. На первоначально прямой линии дислокационной пары 60° -х дислокаций (α и β_1) образуется полупетля (дислокация β), пересекающая буферный слой GeSi. Штриховыми овалами на рис. 2, d выделены наклонные участки 60° -й дислокации, ответственные за появление деформационного контраста, видимого на рис. 2, а. Конечная дислокационная полупетля на рис. 2, d по форме скопирована с наблюдавшейся ранее экспериментально в работе [18]. В отличие от наблюдающихся в массовом порядке рыхлых ломеровских комплексов краевого типа, мы обнаружили только одну пару связанных деформационным контрастом 60° -х дислокаций. Дополнительным свидетельством в пользу слабой связи этих дислокаций является их высокая подвижность при температуре роста. Если Ломеровские комплексы обнаруживают движение к границе Ge/GeSi только после отжига, то в рассматриваемой паре 60° -х дислокаций одна из них уже проскользила к границе GeSi/Si во время роста. Необходимо отметить, что в случае параллельных винтовых компонент у пары 60° -х дислокаций, контур Бюргера на рис. 2, b не является плоским четырехугольником, так что вектор Бюргера, замыкающий этот контур, имеет компоненту, направленную перпендикулярно плоскости рисунка.

4. Обсуждение результатов

В 1951 г. Ломер [1] предположил, что упрочнение кубических и гексагональных кристаллов при деформации

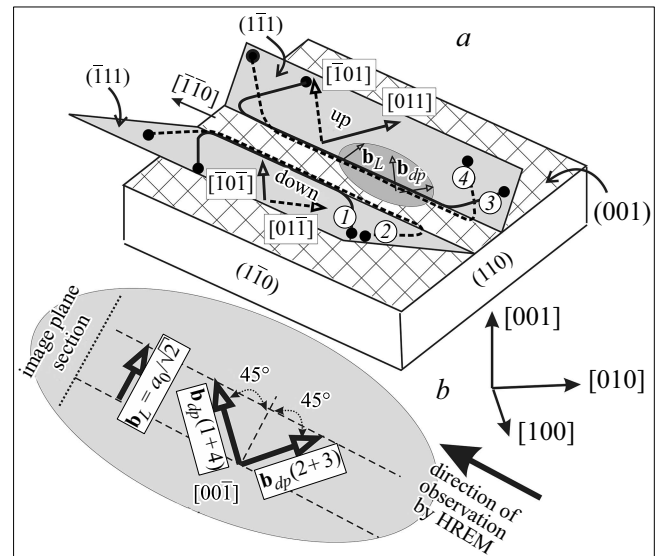


Рис. 3. Схемы движения краевых дислокаций Ломера, а также 60° -х дислокационных пар в гетероструктурах Ge/GeSi/Si(001) (а) — четыре семейства 60° -х дислокаций типа $a/2\langle 110 \rangle \{111\}$, участвующих в пластической релаксации напряженной пленки GeSi на Si и распространяющихся в одном из направлений $\langle 110 \rangle$. Граница раздела пленка/подложка заштрихована. Направления векторов Бюргера взяты из работы [19]. (б) — вид сверху (направление $[00\bar{1}]$) области, ограниченной на (а) овалом. \mathbf{b}_{dp} — суммарные векторы Бюргера дислокационных пар ①+④ и ②+③.

может быть объяснено появлением краевых сидячих дислокаций. В гетеросистеме Ge на Si (001) эти дислокации (названные дислокациями Ломера) образуются из двух 60° -х дислокаций, скользящих вдоль двух зеркально наклонных плоскостей $\{111\}$, пересекающихся в границе раздела пленка/подложка. В результате их взаимодействия образуется краевая дислокация. Применительно к системе GeSi/Si(001) в каждом из двух ортогональных направлений $\langle 110 \rangle$ распространяются четыре семейства 60° -х дислокаций — по две на каждой зеркально наклонной плоскости скольжения $\{111\}$. На рис. 3, а эти пары обозначены как ①, ② (плоскость $(\bar{1}11)$) и ③, ④ (плоскость $(1\bar{1}1)$). Краевая дислокация Ломера образуется при взаимодействиях ①+③ и ②+④ дислокаций по следующим выражениям:

$$\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3 = a_0/2[\bar{1}0\bar{1}] + a_0/2[011] = a_0/2[\bar{1}10], \quad (1)$$

$$\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_4 = a_0/2[01\bar{1}] + a_0/2[\bar{1}01] = a_0/2[\bar{1}10], \quad (2)$$

где a_0 — параметр решетки.

В обоих случаях вектор Бюргера \mathbf{b}_L такой дислокации лежит в плоскости (001) и перпендикулярен линии дислокации (рис. 3, б). В соответствии с правилом Франка [20] эта реакция энергетически выгодна: $b_1^2 + b_3^2 > b_L^2$, также как и $b_2^2 + b_4^2 > b_L^2$. Действительно, при таком взаимодействии происходит компенсация антипараллельных винтовых компонент 60° -х дислокаций,

участвующих в реакции. Соответственно такие пары 60° -х дислокаций, называемые комплементарными [3], испытывают притяжение друг к другу и при возможности сближения объединяются в компактные краевые дислокации Ломера. Рассчитанная в [4] энергия взаимодействия комплементарных дислокаций, образующих ломеровскую составляет ~ 27 eV/nm.

Комбинации 60° -х дислокаций, находящихся на зеркально отклоненных плоскостях $\{111\}$, но с параллельными винтовыми компонентами (на рис. 3 это ①+④ и ②+③), приведены ниже

$$\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_4 = a_0/2[\bar{1}0\bar{1}] + a_0/2[\bar{1}0\bar{1}] = a_0[\bar{1}00], \quad (3)$$

$$\mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_3 = a_0/2[01\bar{1}] + a_0/2[001] = a_0[010]. \quad (4)$$

Результирующий вектор Бюргерса такой реакции также лежит в плоскости (001), но направлен под углом 45° к линии дислокации (рис. 3, *b*). Таким образом, необходимый признак краевой дислокации — перпендикулярность вектора Бюргерса к ее линии — не выполняется, и результат такого взаимодействия не является краевой дислокацией. Однако существование и присутствие таких дислокационных пар в буферном слое GeSi и его границах не может быть выявлено на ВРЭМ снимках поперечных сечений образцов, параллельных плоскости (110). Как видно на рис. 3, *b*, проекции векторов Бюргерса \mathbf{b}_{dp} на плоскость ВРЭМ или СПЭМ изображений, совпадают по величине с вектором Бюргерса ломеровской краевой дислокации \mathbf{b}_L . Поэтому невозможно выявить некомплементарные пары 60° -х дислокаций на фоне многочисленных ломеровских комплексов с помощью обхода контуром Бюргерса. Тем не менее, по правилу Франка ($b_1^2 + b_4^2 = b_{dp}^2$ или $b_2^2 + b_3^2 = b_{dp}^2$) такое взаимодействие предполагается возможным. Так, в работе [6] авторы считают, что дислокационные пары, не сформировавшие компактную дислокацию Ломера после отжига образца, и есть пары 60° -х дислокаций с параллельными винтовыми компонентами, то есть, результаты выражений (дислокационных реакций) (3 и 4). В то же время в наших образцах большинство дислокационных пар имеют рыхлую структуру, в то время как вследствие механизма наведенного зарождения [21] можно ожидать, что комплементарные 60° -е дислокации зарождаются парами. Можно предположить, что отличие комплементарной пары 60° -х дислокаций от некомплементарной может быть обнаружено только по разнице взаимодействия дислокаций между собой. В случае некомплементарной пары это либо не образование компактной дислокации Ломера даже после отжига, либо как это показано на (рис. 3), расщепление дислокационного комплекса на две 60° -е дислокации даже при низкой температуре.

5. Заключение

Приведенные экспериментальные данные и обработка более 300 дислокационных пар свидетельствуют о

преобладающей роли краевых дислокаций и дислокационных комплексов краевого типа в релаксации гетероструктуры Ge/Ge_{0.5}Si_{0.5}/Si(001). Тем не менее, в малом количестве встречаются дислокационные конфигурации, состоящие из двух некомплементарных 60° -х дислокаций, имеющих однонаправленную винтовую компоненту. Суммарный вектор Бюргерса такого дефекта имеет значение типа $a_0\langle 100 \rangle$.

Список литературы

- [1] W.M. Lomer. Phil. Mag. **42**, 1327 (1951).
- [2] S. Mader, A.E. Blakeslee, J. Angilello. J. Appl. Phys. **45**, 4730 (1974).
- [3] E.P. Kvam, D.M. Maher, C.J. Humphreys. J. Mater. Res. **5**, 1900 (1990).
- [4] M. Ishimura, J. Narayan. Phil. Mag. A **72**, 281 (1995).
- [5] J. Hornstra. J. Phys. Chem. Solid **5**, 129 (1958).
- [6] J. Narayan, S. Oktyabrsky. J. Appl. Phys. **92**, 7122 (2002).
- [7] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. Acta Mater. **61**, 617 (2013).
- [8] Ю.Б. Болховитянов, А.К. Гутаковский, А.С. Дерябин, Л.В. Соколов. ЖЭТФ **150**, 5 (11), 955 (2016).
- [9] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. J. Crystal Growth **483**, 265 (2018).
- [10] Yi Wang, P. Ruterana, S. Kret, J. Chen, S. El Kazzi, L. Desplanque, X. Wallart. Appl. Phys. Lett. **100**, 262110 (2012).
- [11] S. Oktyabrsky, J. Narayan. MRS Proc. **399**, 443 (1996).
- [12] M.J. Hÿtch, E. Snoeck, R. Kilaas. Ultramicroscopy **74**, 131 (1998).
- [13] S. Kret, P. Ruterana, A. Rosenauer, D. Gerthsen. Phys. Status Solidi B **227**, 247 (2001).
- [14] А.К. Гутаковский, А.Л. Чувилин, С.А. Сонг. Доклады РАН. Физика **71**, 1426 (2007). [Available at <https://www.researchgate.net/publication/225617264>]
- [15] Y.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. Acta Mater. **61**, 5400 (2013).
- [16] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. Thin Solid Films **616**, 348 (2016).
- [17] A. Vila, A. Cornet, J.R. Morante. Appl Phys Lett. **68**, 1244 (1996).
- [18] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. J. Crystal Growth **293**, 247 (2006).
- [19] R.S. Goldman, K.L. Kavanagh, H.H. Wieder, S.N. Ehrlich, R.M. Feenstra. J. Appl. Phys. **83**, 5137 (1998).
- [20] F.C. Frank. Physika **15**, 131 (1949).
- [21] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. ФТТ **52**, 1, 32 (2010).

Редактор Ю.Э. Кутаев