Закономерности образования дислокационных сеток на границе сращённых пластин Si(001)

© В.И. Вдовин[¶], Е.В. Убыйвовк, О.Ф. Вывенко

Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 17 июля 2012 г. Принята к печати 17 июля 2012 г.)

Методом просвечивающей электронной микроскопии выполнено исследование дислокационных сеток в структурах с гидрофильным соединением пластин Si(001). Наблюдались сетки с различной геометрией и типом доминирующих дислокаций. Один тип сеток, типичный для сращённых структур, формируется на основе квадратной сетки винтовых дислокаций и содержит систему однонаправленных 60-градусных дислокаций зигзагообразной формы. Установлено, что такие дислокационные сетки являются плоскими в структурах с азимутальной разориентацией пластин более 2°, а при меньших углах разориентации — трехмерными. Уникальная сетка другого типа образована только 60-градусными дислокациями, преобладающая доля которых вытянута вдоль одного направления, не совпадающего с направлениями (110) в плоскости соединения, и имеет ряд специфических особенностей, объяснение которых невозможно в рамках общепринятых представлений.

1. Введение

Метод прямого соединения пластин полупроводниковых материалов дает богатые возможности для создания планарных структурно-совершенных композиций из материалов с различными кристаллическими решетками, а также различающихся кристаллографической ориентацией или типом проводимости. Полученные таким методом тонкие слои (~ 100 нм) характеризуются отсутствием в них пронизывающих дислокаций, что обусловлено спецификой формирования дислокационной сетки на границе сращённых пластин, и представляют интерес для различных приборных реализаций [1]. В частности, прямое соединение пластин Si используется для получения тонких упругонапряженных слоев Si, применяемых в производстве быстродействующих транзисторов благодаря высокой подвижности носителей заряда в таких слоях. Планарность дислокационной сетки является критическим фактором, определяющим эффективность таких приборов.

Вместе с тем дислокационные сетки в структурах с прямым соединением пластин кремния представляют значительный интерес для изучения природы дислокационной люминесценции [2,3] в силу специфики их морфологии (плоские сетки) и преобладания винтовых дислокаций. Для решения этой задачи требуется детальное представление о характере расположения дислокаций в сетке, их типе и взаимодействии между собой. К настоящему времени достаточно хорошо изучены общие закономерности формирования дислокационных сеток в структурах Si(001)/Si(001) с азимутальной разориентацией в плоскости сращивания [4-7], основным компонентом которых является квадратная сетка винтовых дислокаций. Однако в последнее время в сращённых структурах наблюдались дислокационные сетки, образованные преимущественно 60-градусными дислокациями [8,9], описание которых весьма затруднено с

помощью известных моделей. Кроме того, практически неизученными остаются механизмы генерации дислокаций. Так же требуется детальное изучение пространственного расположения дислокаций относительно границы сращивания, поскольку можно ожидать отклонения дислокаций от границы в результате дислокационных реакций в точках пересечения дислокаций [10].

В настоящей работе основное внимание уделяется характеризации особенностей дислокационных сеток разного типа (с доминирующими винтовыми или 60-градусными дислокациями), анализу взаимодействия дислокаций в сетках и выявлению признаков, указывающих на возможные механизмы генерации дислокаций.

2. Методика эксперимента

Исследовались структуры гидрофильно соединенных пластин Si(001) с углами разориентации в плоскости сращивания до 3°. Структуры состоят из тонкого слоя, толщиной до 200 нм, и толстой несущей пластины (подложки). Пластины диаметром 200 мм сращивались в процессе термического отжига при температуре 1200°С в течение 3 ч. Перед соединением пластины разворачивались относительно друг друга в различных вариантах. В первом случае использовались пластины из одного набора, т.е. с одинаковыми параметрами отклонения от сингулярной грани (001). Одна из пары пластин разворачивалась на 180° вокруг базового среза, и затем пластины соединялись лицевой поверхностью. При этом отклонение пластин компенсируется в перпендикулярном направлении к базовому срезу, тогда как в направлении (110) базового среза величина отклонения удваивается. В таких структурах направление отклонения пластин практически совпадает с направлением (110) в плоскости соединения. Во втором случае использовались пластины из разных наборов, разворот одной из пар пластин на 90° осуществлялся в плоскости соединения

[¶] E-mail: vivdov@gmail.com

лицевых поверхностей. При таком соединении получается произвольное направление отклонения пластин и возможна как частичная компенсация отклонения пластин, так и, напротив, суммирование соответствующих углов. По данным рентгеновской дифракции отклонение пластин в структурах, соединяемых по первому варианту, равнялось $\sim 0.5^{\circ}$. Дислокационные сетки исследовались на продольных и поперечных срезах структур методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

3. Экспериментальные результаты

При изложении экспериментальных результатов и их обсуждении мы будем разделять дислокационные сетки на два вида — классические и необычные сетки. К классическим относятся такие сетки, в которых доминируют винтовые дислокации, образующие квадратную сетку. Необычными сетками мы будем называть сетки, состоящие преимущественно или полностью из смешанных (60-градусных) дислокаций.

3.1. Классические дислокационные сетки

Дислокационные сетки классического вида мы наблюдали в структурах, полученных совмещением пластин по первому варианту. На рис. 1 приведено типичное ПЭМизображение дислокационной сетки, в которой смешанные дислокации располагаются параллельно винтовым дислокациям (1). Взаимодействие смешанных дислокаций с перпендикулярными винтовыми дислокациями в точках пересечения сопровождается преобразованием первых в зигзагообразные дислокации, состоящие из ломаных отрезков смешанных дислокаций с различными векторами Бюргерса. Характерным элементом таких дислокационных сеток является сдвиг линий винтовых дислокаций на полпериода на пересечении со смешанными дислокациями. Смешанные зигзагообразные дислокации (2) приобретают равновесную конфигурацию, для которой характерно образование углов 120° между



Рис. 1. ПЭМ-изображение классической дислокационной сетки в условиях многолучевой дифракции: *1* — винтовые дислокации, *2* — 60-градусные зигзагообразные дислокации.



Рис. 2. ПЭМ-изображения поперечных срезов структур с классической дислокационной сеткой: *a* — темнопольное изображение, угол разориентации 0.95°; *b* — светлопольное изображение, угол разориентации 2.5°.

дислокационными отрезками в тройных узлах (выделено сплошными линиями). Образование такой конфигурации является следствием одновременно протекающих процессов в каждой точке пересечения смешанной дислокации с перпендикулярными винтовыми дислокациями: от распада четверного дислокационного узла на два тройных, соединенных 60-градусной дислокационной перемычкой, до согласованного смещения в полях упругих напряжений этой перемычки и сегментов винтовых дислокаций в новые равновесные положения [9]. Можно ожидать, что такая трансформация дислокационной сетки может приводить к смещению дислокаций от границы сращивания пластин. Исследование поперечных срезов структур с различными углами азимутальной разориентации пластин показало, что отклонение дислокационных сегментов от плоскости сетки (рис. 2, a) наблюдается в структурах с углами разориентации до 2°. В структурах с углами > 2° наблюдается практически плоская сетка дислокаций (рис. 2, b).

3.2. Необычные дислокационные сетки

Дислокационную сетку, состоящую исключительно из смешанных дислокаций, мы наблюдали в структуре с номинальным углом разориентации пластин 1°, полученной совмещением пластин по второму варианту. На рис. 3 показано изображение сетки, полученное в режиме просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ). Как видно из рис. 3, дислокационная сетка состоит из гексагональных ячеек, сильно вытянутых в одном направлении, которое не совпадает ни с одним из кристаллографических направлений в плоскости границы. Преобладающими дислокациями в сетке являются вытянутые в этом направлении дислокации, имеющие периодическое распределение (период 60 нм) в плоскости границы. В условиях двухлучевой дифракции эти дислокации имеют двойной контраст в одном из



Рис. 3. ПРЭМ-изображение необычной дислокационной сетки.



Рис. 4. Темнопольное изображение необычной дислокационной сетки в отражении $g\langle 400 \rangle$.

отражений g(220) (аналогичный контраст наблюдается на рис. 3) и погасают только в отражении g(400) (вектор дифракции совпадает с направлением (100), показанным на рис. 3). Среди этих дислокаций присутствуют смешанные дислокации с другими векторами Бюргерса, контраст на которых сильно ослабляется в перпендикулярном отражении g(400). На рис. 3 эти дислокации имеют одиночный контраст (некоторые из них отмечены белыми треугольниками), распространяются они в сетке непрерывными линиями по границам гексагональных ячеек (фрагмент такой дислокации очерчен сплошной черной линией). Для различения двух видов смешанных дислокаций будем в дальнейшем условно называть последние "контурными" дислокациями. Вместе с тем в сетке присутствуют зигзагообразные дислокации (фрагмент такой дислокации очерчен сплошной белой линией), вдоль которых располагаются тройные дислокационные узлы и наблюдается сдвиг пересекаемых ими параллельных дислокаций на полпериода. В тройных

узлах с достаточно симметричной формой острый угол в вершине гексагональной ячейки равен $\sim 60^{\circ}$. Следует отметить, что вдоль зигзагообразной дислокации форма этих углов сильно меняется. Более того, в областях пересечения зигзагообразных дислокаций с контурными дислокациями всегда присутствуют "лишние" ячейки (такая ячейка выделена на линии контурной дислокации) в форме ромбов минимальных размеров.

На рис. 4 представлено ПЭМ изображение этой дислокационной сетки в условиях погасания контраста на доминирующих дислокациях, отличающихся наличием двойного контраста. Контурные дислокации распространяются в одном направлении на огромные расстояния, сложным образом очерчивая гексагональные ячейки и нигде не обрываясь. Однако очень редко наблюдаются замкнутые конфигурации контурных дислокаций, охватывающих одну-две гексагональные ячейки (см. рис. 4).

Поведение контраста на дислокациях в необычной сетке оказывается намного сложнее, чем в случае классических сеток с преобладанием винтовых дислокаций. Анализ дислокационного контраста был выполнен с использованием всех отражений типа (220) и (400) в зоне [001], а также отражений типа (111) в четырех зонах (112). Обобщенно можно отметить, что все дислокации в сетке являются 60-градусными. Дислокационные сегменты, образующие зигзагообразные дислокации, имеют различные вектора Бюргерса. Одна серия таких сегментов погасает одновременно с периодически расположенными дислокациями в отражении $g\langle 400 \rangle$, тогда как другая серия сегментов остается видимой (рис. 4). Следует отметить, что в данной сетке из всех дислокаций только погасающие в отражении $g\langle 400 \rangle$ дислокационные сегменты оказываются параллельными кристаллографическому направлению (110) в плоскости соединения. Вместе с тем поведение контраста на сегментах зигзагообразных дислокаций, включенных в линии контурных дислокаций, отличается и они имеют в этом отражении такой же интенсивный контраст, как протяженные отрезки контурных дислокаций. Полного погасания контраста на контурных дислокациях не наблюдалось ни в одном из всех использованных отражений.

Что касается пространственного расположения дислокаций в необычной сетке, то наблюдение сетки в темнопольном режиме при отклонениях разного знака от точного брэгговского отражения показало, что дислокационные отрезки вблизи тройных узлов сильно отклоняются от плоскости сетки, причем вдоль линий зигзагообразных дислокаций острые дислокационные углы в гексагональных ячейках поочередно отклоняются в противоположные стороны.

4. Обсуждение результатов

Результаты исследования классических дислокационных сеток показывают, что упругое взаимодействие как пересекающихся, так и параллельных смешанных и винтовых дислокаций является ответственным за специфическую геометрию дислокационных сеток, за исключением периода винтовых дислокаций, величина которого определяется углом азимутальной разориентации пластин. Упругое взаимодействие дислокаций также ответственно за отклонение дислокационных сегментов от плоскости залегания сетки, приводящее к увеличению толщины сетки примерно до 100 нм. Такое поведение дислокаций наблюдается в структурах с относительно большими величинами периода винтовых дислокаций (23 нм в структуре, показанной на рис. 2, *a*). Вероятно, при более плотном расположении винтовых дислокаций с периодом < 10 нм (8 нм в структуре, показанной на рис. 2, *b*) силы коллективного упругого взаимодействия этих дислокаций препятствуют смещению дислокационных сегментов из сетки.

Модель дислокационных реакций [9], предложенная нами на основе результатов исследования классических сеток, позволяет разобраться со структурой более сложных дислокационных сеток. Например, в работе [8] была представлена необычная сетка дислокаций, состоящая из сильно вытянутых в направлении (110) длинных смешанных дислокаций и коротких сегментов винтовых дислокаций, регулярно расположенных в перпендикулярном направлении (110). Условием образования такой сетки явилось то, что ось отклонения пластин совпадала с направлением (110) в плоскости границы, а величина его была такая, что плотность смешанных дислокаций в 2 раза превышала плотность винтовых дислокаций. Результатом взаимодействия каждой второй смешанной дислокации с параллельной винтовой дислокацией явилось образование системы параллельных 60-градусных дислокаций с чередующимися различными векторами Бюргерса. В точках пересечения смешанных дислокаций с перпендикулярными винтовыми дислокациями возникали дислокационные перемычки с различной геометрией. Дальнейшая трансформация дислокационной сетки, связанная со скольжением сегментов дислокаций в поле упругих напряжений [9], приводит к образованию сильно вытянутых гексагональных ячеек, образованных смешанными дислокациями. От винтовых дислокаций в сетке остаются только очень короткие регулярно расположенные сегменты. В данном случае образование необычной сетки, состоящей преимущественно из смешанных дислокаций, произошло в результате трансформации исходной ортогональной сетки винтовых дислокаций.

Иная ситуация наблюдается в обнаруженной нами необычной сетке. Далее приводятся специфические особенности дислокационной структуры, которые не объясняются в рамках общепринятых представлений [4–7].

Положение протяженных отрезков 60-градусных дислокаций в сетке не совпадает с кристаллографическими направлениями (110) в плоскости границы. Нам не удалось найти аналогии в дислокационных структурах, получаемых различными способами.

Винтовые дислокации полностью отсутствуют в сетке. Этот факт не позволяет при анализе сетки однозначно исходить из того, что сетка винтовых дислокаций исходно образовывалась в структуре. В частности, если предположить вариант идеального совпадения смешанных дислокаций, компенсирующих отклонение пластин, с винтовыми дислокациями по направлению и величине периода, можно допустить образование системы однонаправленных смешанных дислокаций с одинаковым вектором Бюргерса. Однако отсутствие системы перпендикулярных винтовых дислокаций объяснить не удается.

Смещение однонаправленных смешанных дислокаций на полпериода указывает на взаимодействие их с пересекающими дислокациями. Если предположить, что зигзагообразные дислокации возникают для компенсации отклонения пластин, то образование вдоль этих дислокаций "лишних" ячеек невозможно объяснить с помощью модели дислокационных реакций.

Контурные дислокации, точно очерчивающие гексагональные ячейки, не имеют аналогии в классических дислокационных сетках. Предположение, что контурные дислокации связаны с отклонением пластин, исключает такую причину зарождения для зигзагообразных дислокаций и не объясняет сдвиг на полпериода доминирующих смешанных дислокаций.

"Лишние" ячейки в сетке образуются вдоль зигзагообразных дислокаций в областях пересечения с контурными дислокациями, что указывает на взаимосвязанное образование тех и других.

Принципиальным отличием данного образца от остальных исследованных в работе является отсутствие муара на изображениях, полученных в условиях двухлучевой дифракции, наличие которого является значительной помехой при регистрации изображений классических сеток [4]. Картина дифракции прошедших электронов для этого образца соответствует монокристаллическому кремнию и не отличается от картин дифракции на образцах с классическими сетками дислокаций, т.е. соответствует номинальному углу разориентации пластин. По-видимому, образование такого типа дислокационной сетки на основе 60-градусных дислокаций приводит к полному совпадению кристаллических решеток пластин.

Из результатов сопоставления структуры классических и необычной сетки можно сделать предположение, что формирование их проходит по разным механизмам. Однако даже в случае классических сеток отсутствуют конкретные модели генерации дислокаций и мы можем только высказать предположения исходя из опубликованных данных. В работе [11] было показано, что квадратная сетка винтовых дислокаций может быть получена непосредственно при соединении атомарно чистых поверхностей Si(001) при комнатной температуре в условиях сверхвысокого вакуума. Это означает, что стадия зарождения дислокаций просто отсутствует. Выполненный нами ранее схематический анализ последовательного введения смешанных дислокаций на границу, содержащую сетку винтовых дислокаций, также показал, что вся дислокационная сетка должна формироваться одновременно [9]. Однако не исключается вариант постепенного распространения сетки вдоль плоскости соединения пластин, поскольку реальное соединение кристаллических решеток происходит в одном локальном месте и затем в течение нескольких секунд распространяется по всей площади [11]. В работе [12] было показано, что в структурах Si(100)/Si(100) с предельно малыми углами отклонения (< 0.001°) и разориентации ($\leq 0.001^{\circ}$) пластин, отожженных при температуре 1000°C в течение 4 ч, образуются отдельные дислокационные петли произвольной формы. Этот факт указывает на петельный механизм зарождения дислокаций. Можно предположить, что в структурах с гидрофильным соединением пластин возможно образование дислокаций по петельному механизму за счет межузельных атомов, генерация которых вблизи границы связана с растворением окисного слоя в процессе отжига. Если принять модель зарождения большого количества дислокационных петель, которые сильно вытягиваются в одном направлении и взаимодействуют между собой, можно представить "лишние" ячейки в сетке как пустоты между контактирующими петлями. Однако в случае образования одинаковых дислокационных петель в точках контакта должна происходить аннигиляция дислокаций, а в случае образования дислокационных петель с различными векторами Бюргерса возможные дислокационные реакции должны приводить к образованию только краевых дислокаций, что не соответствует экспериментальным данным. По-видимому, форма дислокационных конфигураций в

тройных узлах может быть указателем на специфику формирования дислокационной сетки, хотя механизмы остаются неопределенными.

5. Заключение

Выполнено исследование структур с гидрофильно соединенными пластинами Si(001), отличающихся схемой соединения пластин. Методом ПЭМ наблюдались классические и необычные сетки дислокаций. Показано, что в структурах с периодом винтовых дислокаций < 10 нм дислокационные сетки являются плоскими, а с увеличением периода толщина сетки может увеличиться до 100 нм за счет отклонения дислокационных сегментов от плоскости залегания сетки. Полученные результаты показали новые возможности управления дислокационной структурой на границе сращённых пластин. Вместе с тем мы обнаружили, что не все наблюдаемые дислокационные сетки могут быть объяснены в рамках известных модельных представлений и требуются дальнейшие исследования закономерностей формирования дислокационных сеток в структурах Si(001)/Si(001). Прогресс в данном вопросе может быть достигнут при изучении начальных стадий релаксации напряжений в структурах в течение короткого отжига.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 10-02-01010).

Авторы выражают благодарность О. Конончуку за предоставленные для исследования образцы.

Список литературы

- [1] M. Reiche. Mater. Sci. Forum, 590, 57 (2008).
- [2] T. Sekiguchi, S. Ito, A. Kanai. Mater. Sci. Eng. B, 91–92, 244 (2002).
- [3] A. Bondarenko, O. Vyvenko, I. Isakov. J. Phys. Conf. Ser., 281, 012 008 (2011).
- [4] H. Föll, D. Ast. Phil. Mag. A, 40, 589 (1979).
- [5] T. Akatsu, R. Scholz, U. Gösele. J. Mater. Sci., 39, 3031 (2004).
- [6] K. Rousseau, J. Eymery, F. Fournel, J.-P. Morniroli, J.-L. Rouvi'ere. Phil. Mag., 85, 2415 (2005).
- [7] M. Benamara, A. Rocher, A. Laporte, G. Sarrabayrouse, L. Lescouzères, A. PeyreLavigne, M. Fnaiech, A. Claverie. Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 378, 863 (1995).
- [8] J. Coelho, G. Patriarche, F. Glas, I. Sagnes, G. Saint-Girons. Phys. Status Solidi C, 2, 1933 (2005).
- [9] V. Vdovin, O. Vyvenko, E. Ubyivovk, O. Kononchuk. Sol. St. Phenomena, 178–179, 253 (2011).
- [10] V.I. Vdovin, L.A. Matveeva, G.N. Semenova, M.Ya. Skorohod, Yu.A. Tkhorik, L.S. Khazan. Phys. Status. Solidi A, 92, 379 (1985).
- [11] U. Gösele, Y. Bluhm, G. Kästner, P. Kopperschmidt, G. Kräuter, R. Scholz, A. Schumacher, St. Senz, Q.-Y. Tong. J. Vac. Sci. Technol. A, 17, 1145 (1999).
- [12] T. Wilhelm, T. Mchedlidze, X. Yu, T. Arguirov, M. Kittler, M. Reiche. Sol. St. Phenomena, **131–133**, 571 (2008).

Редактор Л.В. Шаронова

Regularities of dislocation network formation at the boundary in Si(001) bonded wafers

V.I. Vdovin, E.V. Ubyivovk, O.F. Vyvenko

St. Petersburg State University, 198504 St. Petersburg, Russia

Abstract Structures of Si(001) hydrofillic bonded wafers have been studied by transmission electron microscopy. Dislocation networks with different geometry and type of dominant dislocations were observed. One kind of networks, typical for bonded wafers, is based on the square network of screw dislocations and includes a system of unidirectional 60-degree dislocations of zigzag-like form. For structures with twist angle more than 2° , such dislocation networks were found to be flat, whereas they are three-dimensional for smaller angles. Unique network of other kind consisting of 60-degree dislocations was found. The main part of dislocations is elongated in one direction which does not coincide with any $\langle 110 \rangle$ crystallographic directions at the boundary. Moreover, there are a number of specific features of the network, which cannot be explained with the use of generally accepted ideas.