

УДК 548.4

© 1991

КРИТЕРИЙ ОЧИСТКИ НАПРЯЖЕННОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ ОТ РОСТОВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ

М. Ю. Гуткин, А. Е. Романов

Рассмотрена «очистка» напряженной сверхрешетки от проросших в нее из подложки ростовых дислокаций (РД). Для малой $\sim 10^3$ – 10^5 см⁻² исходной плотности РД, когда основным механизмом очистки является «вывод» скользящих в слоях с несоответствием сегментов РД на боковую поверхность системы, предложен энергетический критерий, определяющий необходимые для этого значения основных параметров сверхрешетки. Численно получена диаграмма, которая позволяет определить критические параметры системы, отвечающие переходу сверхрешетки в «очищенное» от РД состояние.

Получение тонкопленочных гетероэпитаксиальных систем (ТПГС) обычно сопровождается формированием в них характерной дислокационной структуры, основными элементами которой являются дислокации, несоответствия (ДН) и ростовые дислокации (РД). В отличие от ДН, локализованных вблизи гетерограниц, РД прорастают через весь объем эпитаксиальных слоев и гораздо сильнее, чем ДН, способствуют деградации различных электронных и оптических характеристик полупроводниковых приборов и устройств [1–5]. Плотность РД определяется параметрами ТПГС и исходной дефектностью подложки и составляет от $\sim 10^3$ [6] до $\sim 10^{10}$ см⁻² [7]. В настоящее время наличие РД превратилось в актуальную проблему для создателей ТПГС.

За последние несколько лет был разработан ряд способов снижения плотности РД, таких как термический отжиг, использование буферных и градиентных слоев, создание напряженных сверхрешеток (НСР), а также комбинации этих способов [5]. Наибольшего успеха позволяет добиться использование двух последних методик, включающих обязательное введение в ТПГС НСР. НСР представляют собой многослойные композиции из чередующихся пленок разного состава [8]. Впервые предложенные в работе [9] в качестве элемента с новыми электронными и оптическими свойствами, НСР затем исследовались авторами работ [10–12] с целью изучения механизмов образования в них ДН и определения соответствующих критических параметров НСР. Была продемонстрирована возможность получения НСР с бездислокационными границами раздела и с малой плотностью ($\leq 10^4$ см⁻²) РД, отмечалась возможность резкого снижения плотности РД за счет их изгиба и скольжения в слоях НСР под действием напряжений несоответствия с последующим взаимодействием между скользящими сегментами РД, приводящим к дислокационным реакциям или к аннигиляции этих сегментов, или выходом скользящих сегментов на боковую поверхность НСР [12]. Поскольку эти процессы происходят при росте НСР, при достаточном количестве слоев можно добиться значительного снижения плотности РД. Работы [10–12] стали стартовыми для появления большого количества исследований, в которых НСР использовались именно для снижения плотности РД [13–21]. Все отмеченные в работе [12] механизмы снижения плотности РД получили недавно прямое экспериментальное подтверждение [17, 18]. Однако, несмотря на бурный рост интереса к НСР, наблюдается почти полное отсутствие теоретических работ, из которых можно было бы получить

необходимые оценки для определения условий «очистки» НСР от РД. Расчеты, выполненные для НСР, по-видимому, исчерпываются работами по определению критических параметров для образования ДН [10, 22-25] и оценке вероятности аннигиляции РД при их плотности в подложке $\sim 10^7 \div 10^9 \text{ см}^{-2}$ [26].

Цель настоящей работы состоит в получении количественной оценки значений параметров НСР, необходимых для очистки ТПГС от РД при условии малой $\sim 10^3 \div 10^5 \text{ см}^{-2}$ исходной плотности последних. При такой плотности РД их взаимодействием между собой можно пренебречь и единственным эффективным способом очистки НСР становится «вывод» РД

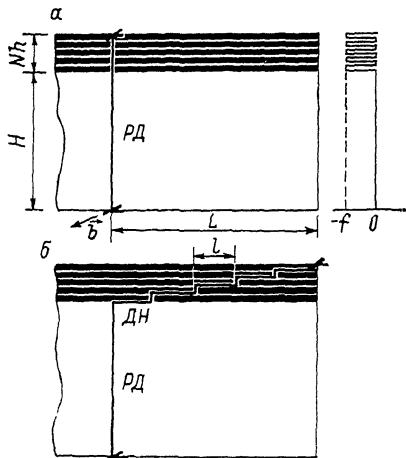


Рис. 1. Тонкопленочная гетероэпитаксиальная система с неизогнутой, проросшей сквозь напряженную сверхрешетку ростовой дислокацией (а), и с изогнутой и выведенной на боковую поверхность ростовой дислокацией (б).

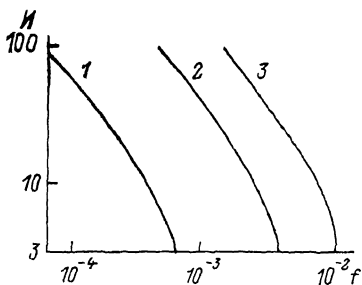


Рис. 2. Диаграммы состояния дислокационной структуры в тонкопленочной гетероэпитаксиальной системе с напряженной сверхрешеткой.

Левее приведенных кривых дислокационная структура представляет собой совокупность прямолинейных, нормальных к границам раздела ростовых дислокаций, правее — совокупность изогнутых ростовых дислокаций, «выходящих» в N -слое сверхрешетки на ее боковую поверхность. В последнем случае N -слой оказывается свободным от ростовых дислокаций. Толщины слоев составляют $200b$ (1), $20b$ (2), $5b$ (3).

на боковую поверхность ТПГС [10, 17, 18]. Этот процесс осуществляется ступенчато по мере наращивания НСР, каждый слой которой, обладающий несоответствием по отношению к подложке, заставляет проросший в него отрезок РД скользить на некоторое расстояние l , определяемое в приближении линейного натяжения равенством силы несоответствия силе линейного натяжения в образовавшемся при таком скольжении отрезке ДН.

Рассмотрим модель, состоящую из подложки толщиной H и нанесенной на нее НСР с теми же упругими модулями, составленной из N чередующихся слоев одинаковой толщины h , причем параметры решетки в нечетных слоях отличаются от параметров решеток подложки и четных слоев, тогда как параметры решетки в четных слоях совпадают с параметрами решетки в подложке, так что закон изменения двумерного дилатационного несоответствия f вдоль толщины ТПГС имеет вид, представленный на рис. 1, а. Толщину слоев h выберем такой, которая для заданного f обеспечивает при наращивании очередного слоя аккомодацию f за счет изгиба РД и образования отрезков ДН длиной l без активации других возможных механизмов зарождения ДН [10]. Предположим также, что $Nh \ll H$. Оценим, какое число слоев N надо нарастить, чтобы вывести проросшую РД за пределы НСР. Пусть линия РД нормальна, а вектор Бюргерса b параллелен внешним и внутренним поверхностям ТПГС,

причем линия РД пересекает границу НСР с подложкой в точке, расположенной на расстоянии L от края системы (рис. 1, а). Величина L в среднем составляет половину размера ТПГС. Заметим, что хотя при выбранной геометрии системы отрезок РД не способен скользить в нечетных слоях (здесь \mathbf{b} нормален действующим сдвиговым напряжениям), однако для предложенной ниже энергетической оценки сам процесс движения не играет никакой роли.

Сравним два энергетических состояния системы, соответствующие неизогнутой РД (рис. 1, а) и изогнутой РД, отрезок которой в последнем нечетном N -слое «вышел» на боковую поверхность НСР (рис. 1, б). Энергия системы в i -состоянии, приходящаяся на одну РД, имеет вид

$$W_i^t = W^f + W_i^{de} + W_i^{dn} + W_i^{df}, \quad (1)$$

где W^f — упругая энергия исходного несоответствия, одинаковая для обоих состояний; W_i^{de} — собственная упругая энергия РД; W_i^{dn} — энергия ядра РД; W_i^{df} — энергия взаимодействия РД с упругим полем несоответствия. В первом состоянии (рис. 1, а)

$$W_1^{de} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} (H + Nh) \ln \frac{R}{b}, \quad (2)$$

$$W_1^{dn} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} (H + Nh), \quad (3)$$

$$W_1^{df} = 2G \frac{1+\nu}{1-\nu} fbhL \frac{N+1}{2}. \quad (4)$$

Выражения (2), (3) получены умножением известных формул для плотностей упругой энергии и энергии ядра на единицу длины краевой дислокации в бесконечной изотропной среде [27] на общую длину РД. Выражение (4) — это работа (в данном случае положительная) по введению РД в упругое поле несоответствия, которое при условии $Nh \ll H$ имеет вид

$$\sigma^f = -2G \frac{1+\nu}{1-\nu} f$$

и действует только в нечетных слоях НСР.

Во втором состоянии (рис. 1, б)

$$W_2^{de} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} H \ln \frac{R}{b} + \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} L \left(\ln \frac{(N-1)h}{b} - \frac{1}{2} \right), \quad (5)$$

$$W_2^{dn} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} (H + Nh + L), \quad (6)$$

$$W_2^{df} = 2G \frac{1+\nu}{1-\nu} fbhL \left(1 + 2 + \dots + \frac{N-1}{2} \right) = 2G \frac{1+\nu}{1-\nu} fbhL \frac{N-1}{4}. \quad (7)$$

Первое слагаемое в формуле (5) получено аналогично (2), а второе представляет собой упругую энергию краевой дислокации длиной L (в реальных НСР $L \gg H \gg Nh$), расположенной на среднем расстоянии $(N-1)h/2$ от свободной поверхности НСР. Выражение (6) записано аналогично (3).

Поскольку, как видно из выражений (4) и (7), энергия W_2^{df} в $2(N+1)/$ $(N-1)$ раза меньше энергии W_1^{df} ; именно этот выигрыш и обеспечивает стремление РД «выйти» из системы. Однако этому препятствуют члены, соответствующие собственной энергии образовавшихся отрезков ДН. Необходимые условия для «выхода» обеспечиваются при выполнении неравенства $\Delta W^t = W_2^t - W_1^t < 0$. Тогда критические параметры для реализации перехода из первого состояния во второе можно определить из равенства

$$\Delta W^t = 0, \quad (8)$$

откуда, учитывая реальные соотношения величин Nh , H , L и R (в качестве R должна быть взята величина, не превышающая L), получаем уравнение

$$\frac{1}{2} + \ln \frac{(N-1)h}{b} - 2\pi(1+\nu)(N+3)f \frac{h}{b} = 0. \quad (9)$$

Отсюда можно аналитически найти критическое несоответствие

$$f_{\text{кр}} = \frac{\frac{1}{2} + \ln \frac{(N-1)h}{b}}{2\pi(1+\nu)(N+3) \frac{h}{b}}, \quad (10)$$

превысив которое при заданных h и N можно «заставить» РД «выйти» из НСР. Например, при типичных параметрах НСР $h=20b$ и $N=21$ $f_{\text{кр}} \approx 1.66 \cdot 10^{-3}$. Результаты численного анализа уравнения (9) представлены на рис. 2, где для заданных толщин слоев НСР в координатах $f-N$ построены диаграммы, определяющие области реализации «очищенной» от РД ТПГС (правее соответствующих кривых).

Более тщательный анализ выражения (1) для обоих состояний потребовал бы строгого учета взаимодействия РД со всеми свободными поверхностями ТПГС и взаимодействия между всеми отрезками изогнутой РД, однако последующий переход к разности ΔW^i и реальные соотношения между геометрическими размерами в ТПГС позволяют пренебречь этими факторами.

Результаты расчета остаются неизменными при обращении знака исходного несоответствия, т. е. для НСР с растянутыми нечетными слоями. В этом случае РД будет изгибаться в сторону, противоположную изображенной на рис. 1, б, и «выйдет» на противоположный край системы. Тем не менее знак напряжения несоответствия важен при решении технологической задачи оптимального легирования слоев НСР, поскольку во многом определяет характер диффузии примесей. Данное обстоятельство может оказаться существенным при рассмотрении микромеханизмов изгибания и скольжения отрезков РД в реальной конкретной системе.

Полученные оценочные соотношения (9) или (10) представляют собой энергетический критерий очистки ТПГС от РД, позволяющий при малой плотности РД целенаправленно подбирать параметры [использующихся для этой цели НСР.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Тхорик Ю. А., Хазан Л. С. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев, 1983. 304 с.
- [2] Мильвидский М. Г., Освенский В. Б. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. М., 1985. 160 с.
- [3] Yamaguchi M., Yamamoto A., Itoh Y. // J. Appl. Phys. 1986. V. 59. N 5. P. 1751—1753.
- [4] Itoh Y., Nishioka T., Yamamoto A., Yamaguchi M. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 19. P. 1617—1618.
- [5] Жиляев Ю. В., Кечек А. Г., Куликов А. Ю., Мартисов М. Ю. // Препринт ЛФТИ. 1988. № 1290. 38 с.
- [6] Stringfellow G. B., Greene P. E. // J. Appl. Phys. 1969. V. 40. N 2. P. 502—507.
- [7] Sheldon P., Jones K. M., Al-Jassim M. M., Yacobi B. G. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 11. P. 5609—5611.
- [8] Osbourn G. C., Gourley P. L., Fritz I. J. et al. Semiconductors and semimetals / Ed. R. K. Willardson, A. C. Beer. N. Y., 1987. V. 24. P. 459—503.
- [9] Esaki L., Tsu R. // IBM J. Res. Developm. 1970. V. 14. N 1. P. 61—65.
- [10] Matthews J. W., Blakeslee A. E. // J. Cryst. Growth. 1974. V. 27. N 1. P. 118—125.
- [11] Matthews J. W., Blakeslee A. E. // J. Cryst. Growth. 1975. V. 29. N 2. P. 273—280.
- [12] Matthews J. W., Blakeslee A. E. // J. Cryst. Growth. 1976. V. 32. N 2. P. 265—273.
- [13] Gourley P. L., Biefeld R. M., Dawson L. R. // Appl. Phys. Lett. 1985. V. 47. N 5. P. 482—484.
- [14] Shinohara M., Ito T., Imamura Y. // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. N 9. P. 3449—3455.
- [15] Bedair S. M., Humphreys T. P., El-Masry N. A. et al. // Appl. Phys. Lett. 1986. V. 49. N 15. P. 942—944.

- [16] Gourley P. L., Drummond T. J., Doyle B. L. // Appl. Phys. Lett. 1986. V. 49. P. 1101—1103.
- [17] Hayafuji N., Ochi S., Miyashita M. et al. // J. Cryst. Growth. 1988. V. 93. P. 494—498.
- [18] El-Masry N. A., Tarn J. C., Karam N. H. // J. Appl. Phys. 1988. V. 64. N 7. P. 3672—3677.
- [19] Radzinski Z. J., Jiang B. L., Rozgonyi G. A. et al. // Appl. Phys. Lett. 1988. V. 52. N 20. P. 1692—1694.
- [20] Cao D. S., Chen C. H., Fry K. L. // J. Appl. Phys. 1989. V. 65. N 6. P. 2451—2456.
- [21] Villaflor A. B., Kimata M. // Jpn. J. Appl. Phys. 1989. V. 28. N 3. P. L496—L499.
- [22] Hirth J. P., Evans A. G. // J. Appl. Phys. 1986. V. 60. N 7. P. 2372—2376.
- [23] Fritz I. J. // Appl. Phys. Lett. 1987. V. 51. N 14. P. 1080—1082.
- [24] Van der Merwe J. H., Jesser W. A. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 5. P. 1509—1517.
- [25] Jesser W. A., Van der Merwe J. H. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 6. P. 1928—1935.
- [26] Мартисов М. Ю., Романов А. Е. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 6. С. 1885—1887.
- [27] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций: Пер. с англ. М., 1972. 598 с.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
5 июня 1990 г.
В окончательной редакции
18 декабря 1990 г.