

# Зарождение и развитие частичных дислокаций несоответствия и дефектов упаковки в тонкопленочных гетероструктурах

© М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,  
199178 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 9 июня 2000 г.)

Рассмотрены особенности зарождения и развития частичных дислокаций несоответствия в вершинах  $V$ -образных конфигураций полос дефекта упаковки, которые оканчиваются в объеме растущей пленки на  $90^\circ$  частичных дислокациях Шокли. Рассчитаны критические толщины  $h_c$  эпитаксиальной пленки, при которых зарождение таких дефектных образований становится энергетически выгодным. Показано, что при малых несоответствиях сначала зарождаются полные дислокации несоответствия, а при больших — частичные, расположенные в вершинах  $V$ -образных конфигураций полос дефекта упаковки, выходящих на поверхность пленки. Исследованы возможности дальнейшего развития последних с увеличением толщины пленки.

Работа выполнена при поддержке Научного совета по МНТП России "Физика твердотельных наноструктур" (грант № 97-3006), Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 98-02-16075), Отдела морских исследований США (the Office of US Naval Research грант N 00014-99-1-0569) и программы ИНТАС (грант N 99-1216).

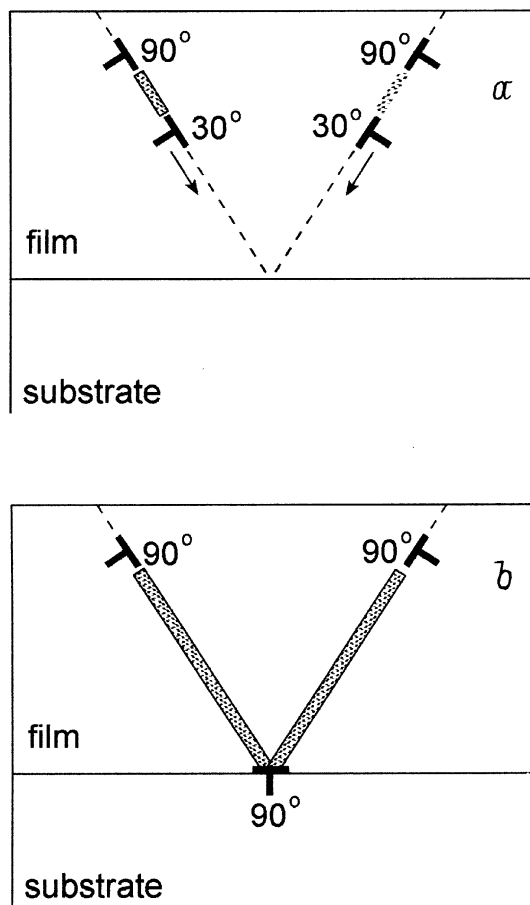
Зарождение и развитие разнообразных дефектных структур в процессе выращивания тонкопленочных гетероэпитаксиальных систем в течение многих лет являются предметом многочисленных экспериментальных и теоретических исследований (например, [1–16]). В частности, интенсивно развиваются представления о дислокациях несоответствия (ДН), появление которых на гетерогранице между подложкой и растущей эпитаксиальной пленкой служит эффективным каналом релаксации напряжений несоответствия, обусловленных различиями в кристаллической структуре и свойствах материалов подложки и пленки [1–6]. В качестве ДН могут выступать как полные решеточные дислокации ("полные дислокации несоответствия" — ПДН), так и частичные дислокации ("частичные дислокации несоответствия" — ЧДН), связанные с дефектами упаковки. Однако абсолютное большинство теоретических моделей было предложено для описания образования и поведения ПДН, хотя сравнительное рассмотрение ПДН и ЧДН показывает, что существуют такие параметры гетеросистемы, при которых образование ЧДН оказывается энергетически более предпочтительным [7,8]. В частности, согласно результатам теоретического анализа работы [8], если несоответствие параметров кристаллических решеток пленки и подложки оказывается достаточно большим ( $> 1\%$ ), то критическая толщина образования ЧДН, связанных с  $V$ -образными дефектами упаковки, становится меньше критической толщины появления ПДН, т.е. такие ЧДН появляются в гетеросистеме раньше, чем ПДН. Данное положение представляет значительный интерес, поскольку в настоящее время интенсивно развиваются технологии, использующие гетероструктуры с большим несоответствием.

Однако в работе [8] рассматривался лишь достаточно простой случай конфигураций ЧДН, а именно ЧДН, находящиеся на гетерогранице в вершинах  $V$ -образных

дефектов упаковки. Основная цель настоящей работы — теоретический анализ условий зарождения экспериментально наблюдавшихся [13] конфигураций ЧДН сложного типа, а именно конфигураций, состоящих из трех ЧДН, находящихся на гетерогранице и в объеме пленки и связанных с  $V$ -образными дефектами упаковки.

## 1. Механизмы зарождения частичных дислокаций несоответствия

Рассмотрим возможные механизмы образования ЧДН на гетерогранице эпитаксиальной пленки и подложки. Наиболее изученным экспериментально представляется один из основных механизмов генерации ДН — зарождение на свободной поверхности растущей эпитаксиальной пленки и скольжение к гетерогранице полупетель расщепленных дислокаций [9–13]. Так, расщепление скользящих полных  $60^\circ$  дислокаций на частичные  $30^\circ$  и  $90^\circ$  дислокации Шокли (рис. 1, *a*) и скольжение уже такой расщепленной конфигурации к гетерогранице приводит к образованию ЧДН, связанной дефектом упаковки со второй частичной дислокацией, которая остается в объеме пленки [9,10]. Реакции между двумя такими ЧДН вблизи гетерограницы приводят к образованию сидячих ЧДН, залегающих в вершинах  $V$ -образных дефектов упаковки [12], на концах которых располагаются частичные дислокации Шокли (рис. 1, *b*). Такие дефектные конфигурации аналогичны барьерам Ломера–Коттрелла в ГЦК-металлах [17], с той только разницей, что в качестве вершинной сидячей дислокации выступает ЧДН. Если образование ЧДН происходит уже при малых толщинах пленки (в системах с большим несоответствием), то зарождение вторых частичных дислокаций Шокли несколько задерживается, и полосы дефектов упаковки простираются от ЧДН до свободной поверхности пленки. По



**Рис. 1.** Зарождение частичных дислокаций несоответствия. *a* — скольжение  $60^\circ$  дислокаций, расщепленных на  $30^\circ$  и  $90^\circ$  частичные дислокации Шокли. *b* — образование  $90^\circ$  сидячей ЧДН, связанной полосами дефекта упаковки с  $90^\circ$  частичными дислокациями Шокли в объеме пленки.

мере дальнейшего роста пленки на поверхности должно происходить зарождение этих частичных дислокаций и их скольжение к вершинной ЧДН, при достижении которой произойдет превращение (схлопывание) такой V-образной дефектной конфигурации в сидячую ПДН Ломера.

В работе [8] был детально рассмотрен первый случай, когда полосы дефектов упаковки все время доходили до поверхности пленки по мере ее роста. Применительно к гетеросистеме GaAs/Si(001), в которой наблюдались такие ЧДН в вершинах V-образных дефектов упаковки [12] это означало, что каждая сидячая  $90^\circ$  ЧДН формировалась путем скольжения двух частичных  $30^\circ$  дислокаций навстречу друг другу и их объединения на гетерогранице, тогда как частичные  $90^\circ$  дислокации, которые должны были замыкать полосы дефектов упаковки, зародиться не успевали.

В настоящей работе рассматривается второй, более общий случай, когда частичные  $90^\circ$  дислокации также скользят с поверхности пленки вслед за частичными  $30^\circ$  дислокациями, и, оказавшись на некотором расстоянии

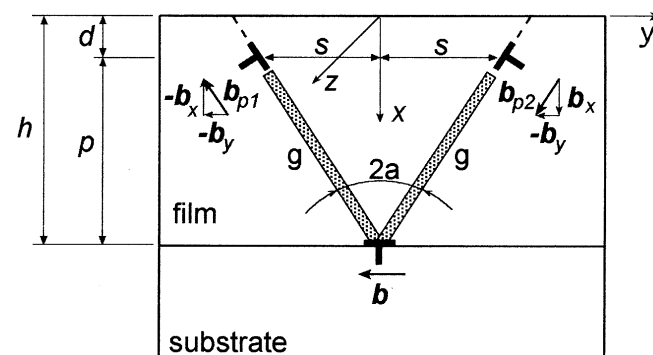
от поверхности, останавливаются (рис. 1, *b*). Таким образом, V-образный дефект упаковки ограничен теперь снизу  $90^\circ$  ЧДН, расположенной в его вершине, а сверху — двумя частичными  $90^\circ$  дислокациями, залегающими в объеме пленки. Отметим, что такие дефектные конфигурации наблюдались экспериментально [13], но теоретически пока не рассматривались.

В следующих разделах мы проведем расчет критических условий зарождения ЧДН, связанных V-образными дефектами упаковками с частичными дислокациями в объеме растущей пленки, и анализ дальнейшего развития таких дефектных конфигураций в процессе эпитаксиального роста. В качестве примера рассматриваются гетероэпитаксиальные структуры GaAs/Si.

## 2. Критические параметры тонкопленочных гетероструктур с частичными дислокациями несоответствия

Одной из важных величин, характеризующих гетероэпитаксиальную систему, является критическая толщина пленки  $h_c$ , при достижении которой образование ДН становится энергетически выгодным [1–6]. Появление уже первых ДН определяет величину  $h_c$ , поэтому достаточно исследовать систему, состоящую из одной ЧДН, связанной V-образным дефектом упаковки с двумя частичными  $90^\circ$  дислокациями в объеме пленки (рис. 1, *b*).

Рассмотрим модельную гетероэпитаксиальную систему в виде тонкой упругоизотропной пленки толщиной  $h$ , получаемую эпитаксиальным ростом на полубесконечной упругоизотропной подложке (рис. 2). Упругие константы, модуль сдвига  $G$  и коэффициент Пуассона  $\nu$  будем считать одинаковыми для материалов пленки и подложки. Исходное когерентное состояние системы характеризуется величиной упругой деформации пленки  $\varepsilon = -f$ , где  $f = (a_2 - a_1)/a_1 > 0$  — исходное двумерное несоответствие параметров решетки подложки  $a_1$  и пленки  $a_2$ . На границе раздела в точке  $(h, 0)$  поместим



**Рис. 2.** Модель V-образной конфигурации полос дефекта упаковки с  $90^\circ$  ЧДН при вершине и двумя  $90^\circ$  частичными дислокациями Шокли на границах полос.

ЧДН с вектором Бюргера  $\mathbf{b}$ , а в объеме пленки, в точках  $(d, \pm s)$ , — частичные  $90^\circ$  дислокации с векторами Бюргера  $\mathbf{b}_{p1} = -\mathbf{b}_x - \mathbf{b}_y$  и  $\mathbf{b}_{p2} = \mathbf{b}_x - \mathbf{b}_y$ . ЧДН соединяется с этими дислокациями полосами дефекта упаковки, составляющими V-образную конфигурацию с углом раствора  $2\alpha$ . Для удобства расчетов представим каждую из этих частичных  $90^\circ$  дислокаций в виде суперпозиции двух краевых дислокаций с векторами Бюргера  $\pm \mathbf{b}_x$  и  $\mathbf{b}_y$  (рис. 2).

Полная энергия системы на единицу длины дислокаций  $W^t$  представляется в виде

$$W^t = W^f + W^n + W^{fd} + W^\gamma + W^d, \quad (1)$$

где  $W^f$  — упругая энергия исходного несоответствия;  $W^n = G(b^2 + 2b_p^2)/[4\pi(1-\nu)]$  — суммарная энергия ядер дислокаций,  $b_p^2 = b_{p1}^2 = b_{p2}^2$ ;  $W^{fd} = -2Gf(bh + 2b_y d)(1+\nu)/(1-\nu)$  — суммарная энергия взаимодействия дислокаций с упругим полем исходного несоответствия;  $W^\gamma = 2\gamma(h-d)/\cos\alpha$  — энергия полос дефектов упаковки,  $\gamma$  — энергия дефекта упаковки;  $W^d$  — упругая энергия дислокационной подсистемы с учетом взаимодействия дислокаций со свободной поверхностью пленки и между собой. Последнее слагаемое рассчитывается с помощью выражений для полей напряжений краевой дислокации, находящейся вблизи свободной поверхности [18], что дает (в единицах  $G/[4\pi(1-\nu)]$ )

$$\begin{aligned} W^d = & -b^2 \left( \ln \frac{b}{2h-b} + \frac{2h(h-b)}{(2h-b)^2} \right) - \frac{4b_x b_y s d^3}{(d^2 + s^2)^2} \\ & - 2bb_y \left( \ln \frac{(h-d)^2 + s^2}{(h+d)^2 + s^2} - \frac{2s^2}{(h-d)^2 + s^2} \right. \\ & + \left. \frac{2(s^2 + 2dh)}{(h+d)^2 + s^2} - \frac{8dhs^2}{[(h+d)^2 + s^2]^2} \right) \\ & + 2bb_x s \left( \frac{2(h-d)}{(h-d)^2 + s^2} - \frac{2(h-d)}{(h+d)^2 + s^2} - \frac{8dh(h+d)}{[(h+d)^2 + s^2]^2} \right) \\ & + b_y^2 \left( \ln \frac{b_y^2 s^2}{(d^2 + s^2)(2d - b_y)^2} + \frac{4d(d - b_y)}{(2d - b_y)^2} - \frac{d^2(d^2 + 3s^2)}{(d^2 + s^2)^2} \right) \\ & - b_x^2 \left( \ln \frac{b_x^2(d^2 + s^2)}{s^2(2d - b_x)^2} + \frac{4d(d - b_x)}{(2d - b_x)^2} - \frac{d^2(3d^2 + s^2)}{(d^2 + s^2)^2} \right). \quad (2) \end{aligned}$$

Для нахождения критической толщины пленки  $h_c$ , при которой зарождение уже первой ЧДН станет энергетически выгодным, приравняем изменение энергии, обусловленное образованием ЧДН, связанной V-образным дефектом упаковки с двумя частичными  $90^\circ$  дислокациями, к нулю

$$\Delta W = W^t - W^f = 0, \quad (3)$$

что дает следующее трансцендентное уравнение относительно  $h_c$ ;

$$\begin{aligned} 2b_p^2 - 8\pi f(1+\nu)(bh + 2b_y d) + \frac{8\pi\gamma(1-\nu)(h-d)}{G \cos \alpha} \\ + b^2 \left( 1 - \ln \frac{b}{2h-b} - \frac{2h(h-b)}{(2h-b)^2} \right) \\ - 2bb_y \left( \ln \frac{(h-d)^2 + s^2}{(h+d)^2 + s^2} - \frac{2s^2}{(h-d)^2 + s^2} \right. \\ + \left. \frac{2(s^2 + 2dh)}{(h+d)^2 + s^2} - \frac{8dhs^2}{[(h+d)^2 + s^2]^2} \right) \\ + 2bb_x s \left( \frac{2(h-d)}{(h-d)^2 + s^2} - \frac{2(h-d)}{(h+d)^2 + s^2} \right. \\ - \left. \frac{8dh(h+d)}{[(h+d)^2 + s^2]^2} \right) - \frac{4b_x b_y s d^3}{(d^2 + s^2)^2} \\ - b_y^2 \left( \ln \frac{b_y^2 s^2}{(d^2 + s^2)(2d - b_y)^2} + \frac{4d(d - b_y)}{(2d - b_y)^2} \right. \\ - \left. \frac{d^2(d^2 + 3s^2)}{(d^2 + s^2)^2} \right) - b_x^2 \left( \ln \frac{b_x^2(d^2 + s^2)}{s^2(2d - b_x)^2} \right. \\ + \left. \frac{4d(d - b_x)}{(2d - b_x)^2} - \frac{d^2(3d^2 + s^2)}{(d^2 + s^2)^2} \right) = 0. \quad (4) \end{aligned}$$

Пользуясь уравнением (4), рассмотрим зависимость  $h_c$  от исходного несоответствия  $f$  при некоторой глубине

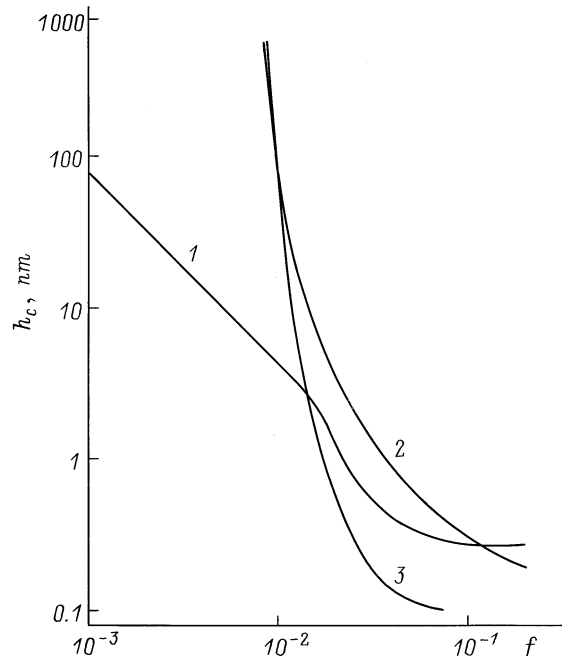
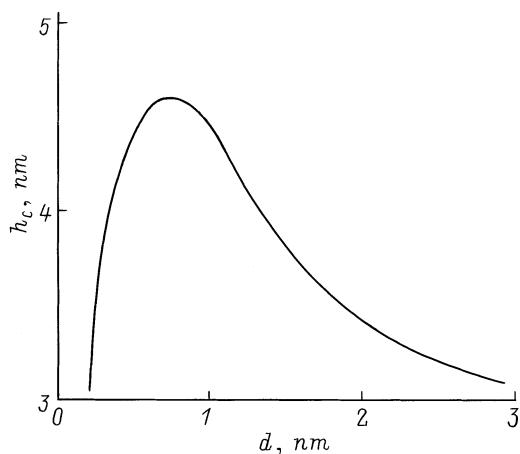


Рис. 3. Диаграмма  $f-h$  для ПДН (1), для ЧДН с полосами дефекта упаковки и  $90^\circ$  частичными дислокациями Шокли на границах полос (2) и для ЧДН с полосами дефекта упаковки, выходящими на поверхность растущей пленки (3).



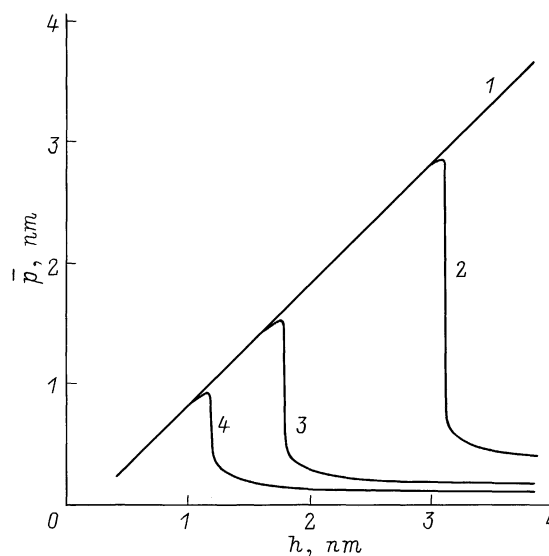
**Рис. 4.** Зависимость критической толщины  $h_c$  от глубины залегания  $90^\circ$  частичных дислокаций Шокли  $d$  при несоответствии  $f = 0.02$ .

залегания частичных дислокаций  $d$ . Как и раньше [8], в расчетах используются, параметры, характерные для гетеросистемы GaAs/Si(001) [7,19]:  $G = 32.5$  GPa,  $\nu = 0.31$ ,  $b = 0.133$  nm,  $b_p = 0.231$  nm,  $b_x = 0.19$  nm,  $b_y = 0.133$  nm,  $2\alpha \approx 70^\circ$ ,  $\gamma = 0.06$  J m $^{-2}$ .

На рис. 3 приведены зависимости  $h_c(f)$  для ПДН (кривая 1,  $b = 0.398$  nm,  $\gamma = 0$ ), для ЧДН в вершине  $V$ -образной конфигурации полос дефекта упаковки, которые замыкаются двумя  $90^\circ$  частичными дислокациями в объеме пленки на минимальной глубине  $d = b_x = 0.19$  nm (кривая 2), и для ЧДН в вершине такой же конфигурации, когда полосы дефекта упаковки выходят на свободную поверхность (кривая 3,  $d = 0$ ,  $b = 0.133$  nm). Из полученной диаграммы видно, что ПДН могут зарождаться при любых несоответствиях  $f$  (при достаточной толщине пленки), тогда как для ЧДН в обоих случаях существует некоторое предельное минимальное несоответствие  $f_l$ , ниже которого их зарождение энергетически невыгодно. Значения  $f_l$  в последних двух случаях примерно одинаковы и равны  $f_l \approx 0.009$ . При этом оказалось, что образование ЧДН с  $d = 0$  всегда вероятнее образования ЧДН с  $d = b_x$  (кривая 3 проходит ниже кривой 2). Рассмотрим, что происходит с увеличением  $d$ . На рис. 4 представлена зависимость  $h_c$  от  $d$  при фиксированном несоответствии  $f = 0.02$ . Как видно из рисунка, при малых  $d$  критическая толщина пленки  $h_c$  с ростом  $d$  увеличивается и при  $d \approx 4b_x \approx 0.76$  nm достигает максимума, а затем уменьшается, оставаясь, однако, существенно больше критических толщин для ПДН ( $\approx 0.14$  nm) и для ЧДН с  $d = 0$  ( $\approx 0.12$ ). Таким образом, можно сделать вывод, что при малых несоответствиях ( $f < 0.01$ ) сначала зарождаются ПДН, а при больших ( $f > 0.01$ ) — ЧДН, причем полосы дефекта упаковки выходят на поверхность растущей пленки.

### 3. Эволюция конфигураций частичных дислокаций несоответствия при росте пленки

Рассмотрим, как будет развиваться ситуация по мере дальнейшего роста пленки при больших несоответствиях ( $f > 0.01$ ). Используем выражения (1) и (2) для расчета равновесного положения  $90^\circ$  частичных дислокаций, замыкающих полосы дефекта упаковки в объеме пленки (рис. 2). По мере увеличения толщины пленки  $h$  можно определить изменение равновесного (соответствующего максимальному выигрышу в энергии  $\Delta W$ ) расстояния  $\bar{p}$  при некотором фиксированном несоответствии  $f$ . Результаты расчета даны на рис. 5, где построены зависимости  $\bar{p}(h)$  для  $f = 0.02, 0.04, 0.07$  и  $0.10$  (сверху вниз). Видно, что пока толщина  $h$  мала ( $h < 1$  nm), при любом из этих несоответствий  $h(\bar{p}) = h - b_x$ , т.е. полосы дефекта упаковки растут вместе с пленкой, доходя (с точностью до величины  $b_x$ ) до свободной поверхности. Когда  $h$  достигает некоторого критического значения  $h'_c$ , происходит резкое падение  $\bar{p}$ , которое можно трактовать как быстрое перемещение  $90^\circ$  частичных дислокаций к границе раздела между пленкой и подложкой, что сопровождается укорочением полос дефекта упаковки вплоть до их исчезновения и "схлопывания" всей  $V$ -образной конфигурации с превращением ЧДН в ПДН. Так, несоответствиям  $f = 0.02, 0.04, 0.07$  и  $0.10$  соответствуют "новые" критические толщины превращения ЧДН в ПДН  $h'_c \approx 5.7, 3.1, 1.9$  и  $1.3$  nm. Полученный таким образом эффект "схлопывания"  $V$ -образных конфигураций полос дефекта упаковки с ЧДН при вершине с превращением в ПДН подтверждает сделанный в работе [8] вывод о неизбежности



**Рис. 5.** Изменение равновесного состояния  $\bar{p}$  между  $90^\circ$  частичными дислокациями Шокли и гетерограницей с ростом толщины пленки для значений несоответствия  $f$ : 1 — 0.02, 2 — 0.04, 3 — 0.07, 4 — 0.10.

снижения плотности ЧДН и роста плотности ПДН в процессе роста пленки и указывает естественный механизм превращения ЧДН в ПДН. Снижение плотности ЧДН и рост плотности ПДН при увеличении толщины растущей пленки наблюдались в экспериментах [13].

Таким образом, проведенное в настоящей работе теоретическое рассмотрение ЧДН в вершинах  $V$ -образных конфигураций полос дефекта упаковки, которые оканчиваются в объеме растущей пленки на  $90^\circ$  частичных дислокациях Шокли, приводит к следующим выводам. При малых несоответствиях сначала зарождаются ПДН, а при больших — ЧДН в вершинах  $V$ -образных конфигураций полос дефекта упаковки, выходящих на поверхность пленки. Во втором случае, по мере увеличения толщины пленки, полосы дефекта упаковки сначала удлиняются, доходя по-прежнему до поверхности пленки, а при некоторой критической толщине  $h'_c$ , которая уменьшается с ростом несоответствия, резко сокращаются за счет зарождения и скольжения к гетерогранице  $90^\circ$  частичных дислокаций Шокли. Результатом их подхода непосредственно к границе становится "схлопывание"  $V$ -образной конфигурации и превращение ЧДН в ПДН. Такой механизм превращения ЧДН в ПДН хорошо объясняет известное из эксперимента (например, [13]) снижение плотности ЧДН и увеличение плотности ПДН в процессе роста нанослойных гетеросистем.

## Список литературы

- [1] Ю.А. Тхорик, Л.С. Хазан. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Наук. думка, Киев (1983). 304 с.
- [2] М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. Металлургия, М. (1985). 160 с.
- [3] E.A. Fitzgerald. Mater. Sci. Rep. **7**, *1*, 87 (1991).
- [4] L.B. Freund. MRS Bulletin **17**, *1*, 52 (1992).
- [5] R. Beanland, D.I. Dunstan, P.I. Goodhew. Adv. Phys. **45**, *1*, 87 (1996).
- [6] S.C. Jain, A.H. Harker, R.A. Cowley, Philos. Mag. **A75**, *6*, 1461 (1997).
- [7] А.К. Гутаковский, О.П. Пчеляков, С.И. Стенин. Кристаллография **25**, *4*, 806 (1980).
- [8] М.Ю. Гуткин, К.Н. Микаелян, И.А. Овидько. ФТТ **40**, *1*, 2059 (1998).
- [9] B.C. De Cooman, C.B. Carter. Acta metall. **37**, *10*, 2765 (1989).
- [10] B.C. De Cooman, C.B. Carter, Kam Toi Chan, J.R. Shealy. Acta metall. **37**, *10*, 2779 (1989).
- [11] J. Zou, D.J.H. Cockayne. Appl. Phys. Lett. **69**, *8*, 1083 (1996).
- [12] M. Loubradou, R. Bonnet, A. Vila, P. Ruterana. Mater. Sci. Forum. **207–209**, *1*, 285 (1996).
- [13] M. Tamura. Appl. Phys. **A63**, *2*, 359 (1996).
- [14] A.F. Schwartzman, R. Sinclair. J. Electron. Mater. **20**, *10*, 805 (1991).
- [15] I.A. Ovid'ko. J. Phys: Condensed Matter. **11**, *34*, 6521 (1999).
- [16] I.A. Ovid'ko. In: Nanostructured Films and Coatings, NATO ARW Ser. / Ed. by G.-M. Chow, I.A. Ovid'ko, T. Tsakalagos. Kluwer, Dordrecht (2000). P. 231.

- [17] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [18] T. Mura. In: Advances in Materials Research / Ed. by H. Herman. Interscience Publishers, N. Y. **3**, *1* (1968).
- [19] J. Zou, B.F. Usher, D.J.H. Cockayne, R. Glaisher. J. Electron. Mater. **20**, *10*, 855 (1991).