

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° 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° дислокаций на частичные 30° и 90° 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

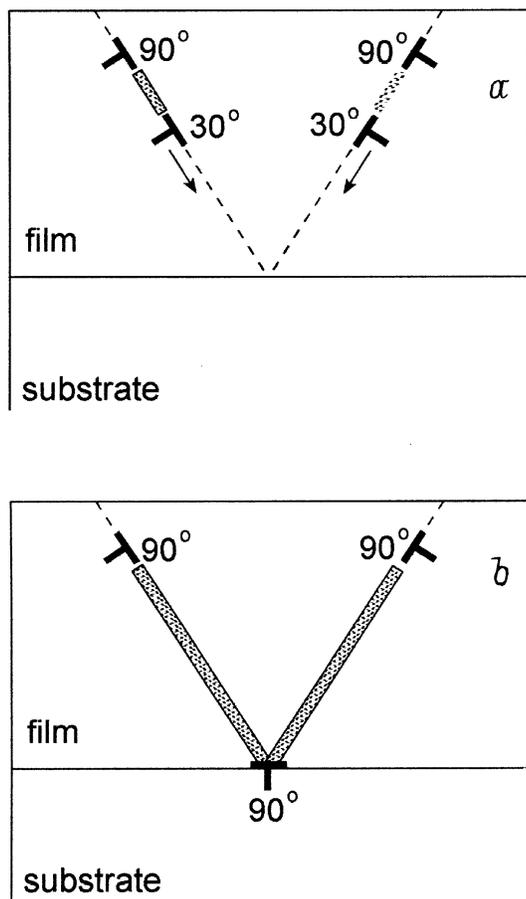


Рис. 1. Зарождение частичных дислокаций несоответствия. *a* — скольжение 60° дислокаций, расщепленных на 30° и 90° частичные дислокации Шокли. *b* — образование 90° сидячей ЧДН, связанной полосами дефекта упаковки с 90° частичными дислокациями Шокли в объеме пленки.

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° ЧДН формировалась путем скольжения двух частичных 30° дислокаций навстречу друг другу и их объединения на гетерогранице, тогда как частичные 90° дислокации, которые должны были замыкать полосы дефектов упаковки, зародиться не успевали.

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

от поверхности, останавливаются (рис. 1, *b*). Таким образом, V-образный дефект упаковки ограничен теперь снизу 90° ЧДН, расположенной в его вершине, а сверху — двумя частичными 90° 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° 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 ν 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

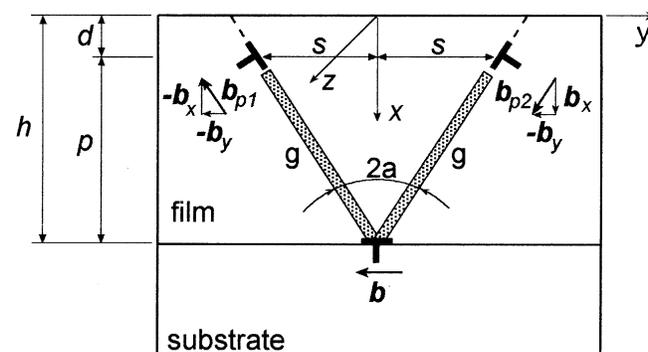


Рис. 2. Модель V-образной конфигурации полос дефекта упаковки с 90° ЧДН при вершине и двумя 90° частичными дислокациями Шокли на границах полос.

ЧДН с вектором Бюргера \mathbf{b} , а в объеме пленки, в точках $(d, \pm s)$, — частичные 90° 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 2α . Для удобства расчетов представим каждую из этих частичных 90° 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, γ — 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 $G/[4\pi(1 - \nu)]$)

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

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° дислокациями, к нулю

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

что дает следующее трансцендентное уравнение относительно h_c ;

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

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

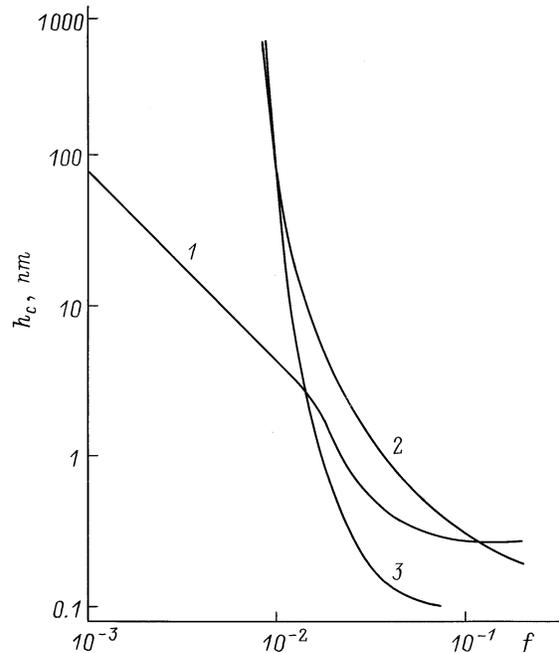


Рис. 3. Диаграмма $f-h$ для ПДН (1), для ЧДН с полосами дефекта упаковки и 90° частичными дислокациями Шокли на границах полос (2) и для ЧДН с полосами дефекта упаковки, выходящими на поверхность растущей пленки (3).

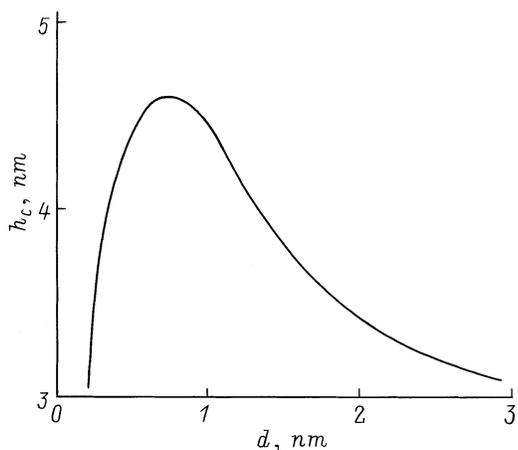


Рис. 4. Зависимость критической толщины h_c от глубины залегания 90° частичных дислокаций Шокли d при несоответствии $f = 0.02$.

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° 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 (≈ 0.14 nm) и для ЧДН с $d = 0$ (≈ 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° 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 ΔW) 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° 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

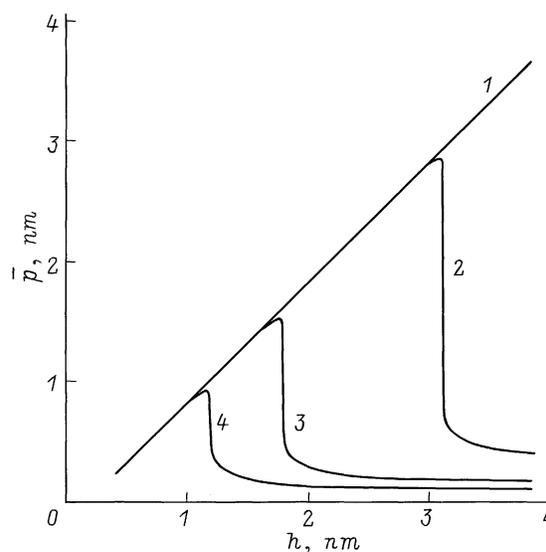


Рис. 5. Изменение равновесного состояния \bar{p} между 90° частичными дислокациями Шокли и гетерограницей с ростом толщины пленки для значений несоответствия f : 1 — 0.02, 2 — 0.04, 3 — 0.07, 4 — 0.10.

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° 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° 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).