

Влияние типа винтовой составляющей дислокаций несоответствия на образование пронизывающих дислокаций в полупроводниковых гетероструктурах

© Е.М. Труханов[¶], А.В. Колесников, А.П. Василенко, А.К. Гутаковский

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

(Получена 25 июня 2001 г. Принята к печати 12 июля 2001 г.)

Показано, что в гетероструктурах с границей раздела (001) и кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита полное снятие напряжений несоответствия за счет введения двух взаимно перпендикулярных семейств 60-градусных дислокаций несоответствия возможно лишь в случае одинаковых типов их винтовых составляющих. В противном случае требуется введение дополнительных семейств дислокаций несоответствия, что увеличивает вероятность образования пронизывающих дислокаций в эпитаксиальной пленке. При неоптимальном протекании процесса, когда вводятся два взаимно перпендикулярных семейства с противоположными типами винтовых составляющих, происходит накопление избыточной энергии действующих сдвиговых напряжений. Примерами неоптимального введения дислокаций несоответствия является работа модифицированных дислокационных источников Франка–Рида и источников Хейгена–Шранка. Выполнено моделирование процесса релаксации и проведены экспериментальные исследования.

1. Введение

В полупроводниковых эпитаксиальных структурах несоответствие параметров решеток сопрягаемых слоев вызывает возникновение поля механических напряжений. Управление процессом релаксации напряженного состояния представляет серьезную экспериментальную и теоретическую задачу современной эпитаксиальной технологии. Наиболее традиционным вариантом релаксации является введение дислокаций несоответствия (ДН) в границу раздела пленка–подложка, что возможно при толщине пленки h , превышающей критическую величину h_c , когда становится энергетически выгодным переход пленки из псевдоморфного состояния в дислокационное [1–3]. Предпочтительным механизмом образования ДН является скольжение, поскольку оно происходит при более низких температурах по сравнению с переползанием дислокаций. Это облегчает формирование резких границ раздела и уменьшает дефектность гетероструктуры в целом. В процессе введения дислокации несоответствия один из ее концов (или оба) отогнут от границы раздела и выходит на свободную поверхность пленки. В результате возникает дислокационный участок, который пронизывает всю толщину эпитаксиальной пленки и в процессе своего скольжения вдоль границы раздела производит удлинение ДН. В идеализированном случае после завершения релаксационного процесса все подвижные пронизывающие дислокационные участки выведены на боковые грани гетероструктуры и средняя длина ДН сравнима с диаметром границы раздела. В такой гетеросистеме после полного снятия напряжений несоответствия пленка и подложка имеют одинаковую плотность структурных дефектов кристаллической решетки.

Реализация идеализированного случая позволила бы на основе объемного Si решить проблему получения бездефектного подложечного материала для широкого класса полупроводников, поскольку Si является наиболее совершенным из искусственно изготавливаемых объемных кристаллов. Достаточно толстые совершенные эпитаксиальные слои, в которых сняты напряжения несоответствия, можно в дальнейшем использовать как подложки–затравки для получения новых полупроводниковых соединений.

При протекании релаксационного процесса в реальных структурах всегда существует вероятность остановки скользящего дислокационного участка вдали от края пленки, в результате чего возникают неподвижные пронизывающие дислокации (ПД). Если параметр несоответствия сопрягаемых кристаллических решеток пленки и подложки f порядка 1% или более, то образование неподвижных ПД практически неизбежно. Для современной эпитаксиальной технологии получение высокосовершенных структур с большим несоответствием возможно только в случае псевдоморфных слоев, когда введение ДН либо энергетически невыгодно ($h < h_c$), либо не происходит вследствие кинетических ограничений при $h > h_c$ [4,5].

Хотя возникновение неподвижных ПД в определенных ситуациях способствует генерации новых ДН [6–9] и протеканию процесса снятия напряжений несоответствия, однако в целом данное явление следует охарактеризовать как нежелательное. Это связано с существенным ухудшением структурных свойств гетеросистемы, содержащей данные дефекты. В таких структурах в ряде случаев не достигаются значения электрофизических параметров, регистрируемые на объемных высокосовершенных кристаллах, а также не выявляются теоретически предсказанные электронные и оптические свойства. После завершения процесса снятия напряжений несоответствия,

[¶] E-mail: trukh@isp.nsc.ru
Fax: (3832)333502

по мере увеличения толщины пленки плотность неподвижных ПД монотонно снижается вследствие взаимной аннигиляции дислокаций, имеющих противоположно направленные вектора Бюргерса \mathbf{b} [10]. Чем меньше число семейств ДН, введенных в границу раздела, тем более благоприятны условия для аннигиляции неподвижных ПД. Для гетеросистем с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита и границами раздела (001) возможен вариант релаксации, когда формируются всего два взаимно перпендикулярных семейства 60°-градусных ДН (60°-ДН) с общим вектором \mathbf{b} . Образование такой сетки ДН максимально облегчает условия для аннигиляции ПД и в мировой литературе на протяжении десятилетий сохраняется повышенный интерес к изучению механизмов ее формирования [11–15]. Однако влияние типа винтовой дислокационной составляющей на протекание релаксационного процесса и на образование пронизывающих дислокаций до настоящего времени не изучено.

В предлагаемой статье это наиболее детально рассмотрено для процесса введения взаимно перпендикулярных семейств с общим \mathbf{b} , хотя обсуждаются и другие механизмы формирования ДН. Исследование выполнено для полупроводниковых гетеросистем с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита и границей раздела (001), что наиболее широко используется в экспериментальной и технологической практике. В работе также показано, что возникновению неподвижных пронизывающих дислокаций при введении ДН в данную границу раздела способствует высокая симметрия кубической кристаллической решетки.

2. Образование неподвижных пронизывающих дислокаций как результат взаимодействия неподвижных дислокационных участков

Подвижные пронизывающие дислокационные участки, которые в процессе своего скольжения удлиняют дислокации несоответствия, могут взаимодействовать, формируя неподвижные ПД. Поскольку направление [001] является осью симметрии 4-го порядка, то при $h > h_c$ в границу раздела (001) могут равновероятно вводиться восемь семейств 60°-ДН. Они приведены в таблице. Четыре семейства 1–4 параллельны направлению [110] и четыре семейства 5–8 параллельны [110].

Для анализа влияния взаимодействий между скользящими пронизывающими дислокационными участками на возникновение неподвижных ПД примем, что происходит удлинение ДН семейства номер 1 в направлении [110]. Согласно таблице, такая ДН имеет вектор Бюргерса $\mathbf{b}_1 = (a/2)[101]$. Движущийся пронизывающий участок данной дислокации несоответствия может встретить аналогичный участок, который скользит в противоположном направлении [110] и удлиняет еще одну ДН. Если расстояние между встретившимися ПД

Параметры 60°-ДН, залегающих в границе раздела (001) гетероструктур с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита. Типы винтовых дислокационных составляющих соответствуют случаю, когда параметр решетки пленки превышает параметр подложки ($a_d > a_s$). В противном случае, когда $a_d < a_s$, типы винтовых дислокационных составляющих необходимо изменить на противоположные

Номер семейства	Плоскость скольжения	Направление вектора Бюргерса, \mathbf{b}	Направление дислокационной линии, ξ	Тип винтовой дислокационной составляющей
1	($\bar{1}\bar{1}1$)	[101]	[$\bar{1}10$]	Левая
2	($\bar{1}\bar{1}1$)	[011]	[$\bar{1}10$]	Правая
3	(111)	[$\bar{1}01$]	[$\bar{1}\bar{1}0$]	Левая
4	(111)	[0 $\bar{1}1$]	[$\bar{1}\bar{1}0$]	Правая
5	($\bar{1}\bar{1}1$)	[011]	[$\bar{1}\bar{1}0$]	Левая
6	($\bar{1}\bar{1}1$)	[$\bar{1}01$]	[$\bar{1}\bar{1}0$]	Правая
7	($\bar{1}\bar{1}1$)	[0 $\bar{1}1$]	[110]	Левая
8	($\bar{1}\bar{1}1$)	[101]	[110]	Правая

меньше или порядка величины b/f , то между ними возможны четыре варианта взаимодействия I–IV. В случае I дислокация несоответствия, удлиняющаяся во встречном направлении [110], также принадлежит семейству 1. Поэтому возможна полная аннигиляция встретившихся дислокационных участков, и вероятность возникновения неподвижной пронизывающей дислокации минимальна. Если подвижный исходный участок семейства 1 встречает скользящий дислокационный участок семейства 2 (случай II) или участок семейства 3 (случай III), то эти участки останавливаются в положениях устойчивого дислокационного равновесия, и возникают две неподвижные ПД. Их взаимное уничтожение с помощью дислокационных реакций невозможно.

В случае IV, когда удлиняющаяся во встречном направлении дислокация несоответствия принадлежит семейству 4, т.е. $\mathbf{b}_4 = (a/2)[0\bar{1}1]$, между удлиняющимися одна навстречу другой дислокациями несоответствия возможна реакция с образованием чисто краевой ломеровской ДН. Поскольку в таблице направления дислокационных линий для семейств 1 и 4 приняты противоположными ($\xi_1 = -\xi_4$), вектор Бюргерса ломеровской ДН вычисляется как $\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_4 = (a/2)[110]$. В случае возникновения ломеровской ДН снятие несоответствия между кристаллическими слоями гетероструктуры происходит наиболее эффективно, но это не распространенная ситуация. Обычно доля чисто краевых ДН невелика, и она возрастает с увеличением температуры и параметра несоответствия. Лишь в исключительных случаях удается получить 100% ломеровских ДН, но при этом их необходимо вводить по механизму переползания [16]. Если реакция с возникновением ломеровской ДН имеет место, то после встречи подвижных дислокационных участков один из них или оба продолжают скольжение в своих исходных направлениях, превращая по мере движения две ранее введенные 60°-ДН в одну 90°-ДН. Если в

реакции участвуют обе подвижные ПД и реакция проходит полностью, то возникшая 90° -ДН будет иметь длину, равную сумме длин исходных 60° -ДН. Тогда каждый из концов возникшей ломеровской дислокации будет соединяться с поверхностью пленки парой дислокационных участков, а не одной ПД. Такая структура объясняется специфической особенностью возникновения 90° -ДН, поскольку мы рассматриваем их образование не в результате переползания, а по механизму скольжения дислокаций в двух различных плоскостях $\{111\}$.

Для того чтобы в случае I началась аннигиляция оставшихся ПД, а в случае IV — реакция с возникновением 90° -ДН, обычно требуется поперечное скольжение данных ПД или их переползание, поскольку две удлиняющиеся во встречных направлениях ДН, как правило, не располагаются вдоль одного и того же атомного ряда в границе раздела. Если в случае I, аннигиляция не происходит, и формируются две неподвижные ПД, то вероятность их аннигиляции увеличивается с ростом толщины пленки [17].

В ситуациях I–IV движение пронизывающих дислокационных участков происходит в параллельных направлениях. Для дислокаций, перемещающихся в перпендикулярных направлениях вдоль границы раздела, также возможны положения устойчивого дислокационного равновесия, что может приводить к образованию неподвижных ПД. Это справедливо, если скользящий участок дислокации семейства 1 встречает участок любого из семейств 5–7. Наиболее интересным вариантом встречи подвижных ПД, скользящих в перпендикулярных направлениях, является встреча пронизывающих участков семейств 1 и 8, поскольку возможна их аннигиляция. В результате в границе раздела формируется так называемая Г-образная дислокация. Из рассмотренного взаимодействия между пронизывающими дислокациями следует, что для уменьшения плотности неподвижных ПД в границу раздела (001) полупроводниковой гетеросистемы должно вводиться всего одно семейство 60° -ДН в направлении $[\bar{1}10]$ и одно семейство в направлении $[110]$. Оптимальными представляются такие комбинации перпендикулярных семейств, которые имеют одинаковые \mathbf{b} и формируют Г-образные дислокации. Согласно таблице, это семейства 1 и 8, 2 и 5, 3 и 6, 4 и 7.

В литературе известны различные механизмы образования Г-образных ДН. Обсудим некоторые из них. На начальной стадии процесса релаксации первые 60° -ДН создаются в результате изгиба и последующего движения дислокационных участков, прорастающих в пленку из подложки [1,18]. Если в процессе рассматриваемого явления подвижная ПД закрепится на дефекте кристаллической решетки пленки, то какой-то ее участок может начать движение во вторичной плоскости скольжения $\{111\}$. Это возможно как для верхнего [6,7], так и для нижнего [8] участка ПД, закрепившегося на дефекте. Возможна также ситуация, когда одна часть ПД скользит во вторичной плоскости, а другая — в первичной плоскости [9]. Если эффект закрепления

многократно повторяется, то возникает ломаная линия, которая содержит прямолинейные взаимно перпендикулярные дислокационные отрезки. При пересечении двух таких отрезков возникает четверной дислокационный узел, который может разделиться на 2 двойных узла, поскольку векторы Бюргера \mathbf{b} у пересекающихся дислокаций одинаковы. В результате образуются две Г-образные дислокации несоответствия [2,19,20]. Каждая из них содержит два взаимно перпендикулярных дислокационных луча, плоскостями скольжения которых являются пересекающиеся плоскости типа $\{111\}$. Лучи имеют общую точку, в дальнейшем именуемую изломом Г-образной дислокации. Вдали от излома дислокационный луч представляет собой расположенный в границе раздела отрезок ДН, а вблизи — это изогнутый в плоскости скольжения дислокационный участок. Один из изломов двух Г-образных ДН, возникших при распаде четверного дислокационного узла, в результате призматического скольжения смещается от границы раздела в пленку, а второй — в подложку. Поскольку вектор Бюргера \mathbf{b} наклонен к границе раздела, то при отгибании участков Г-образных дислокаций от границы раздела длины данных участков уменьшаются, что и обуславливает энергетический выигрыш реакции распада четверного дислокационного узла. Такая дислокационная реакция была теоретически предсказана Ридом [21] и впервые экспериментально наблюдалась в работах [19,20]. Движение излома Г-образной ДН внутрь пленки может привести к возникновению дислокационного источника Хейгена–Шранка [11,18] или его модифицированного варианта [12], а движение такого излома внутрь подложки — привести к возникновению модифицированного источника Франка–Рида [13–15, 18]. При работе данных источников образуются дополнительные Г-образные ДН с тем же самым вектором Бюргера, что обеспечивает благоприятные условия для аннигиляции неподвижных ПД в процессе дальнейшей релаксации гетероструктуры [10]. Таким образом, на основе известных в мировой литературе данных формирование сетки 60° -ДН с одинаковыми \mathbf{b} можно рассматривать как перспективный вариант управления процессом снятия напряжений несоответствия с целью уменьшения плотности неподвижных ПД. Однако данный вывод получен без учета влияния типа винтовой составляющей ДН на протекание процесса релаксации напряжений несоответствия. Учет такого влияния выполнен в следующем разделе.

3. Влияние винтовой составляющей дислокации несоответствия на процесс пластической релаксации напряжений несоответствия

Нами рассчитано протекание процесса релаксации на примере гетеросистемы $\text{Ge}_{0.25}\text{Si}_{0.75}/\text{Si}$ с границей раздела (001). Принималось, что вводятся два взаимно

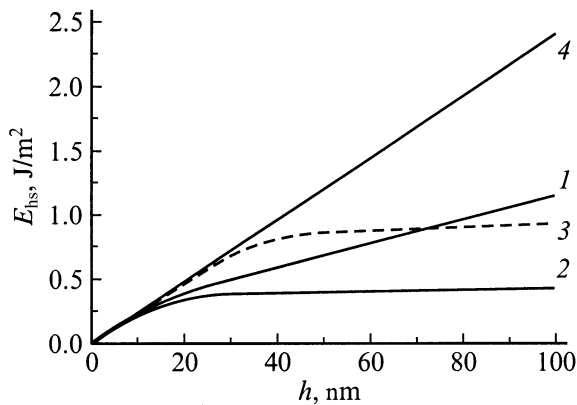


Рис. 1. Изменение энергии гетероструктуры при увеличении толщины пленки, определенное в рамках различных моделей. 1 и 2 — предлагаемая модель, примененная для случая введения двух взаимно перпендикулярных семейств 60° -ДН, имеющих различные типы винтовых составляющих (1) и одинаковые типы (2); 3 — расчет в рамках модели Мэтьюза [1]; 4 — случай перенапряженной псевдоморфной пленки.

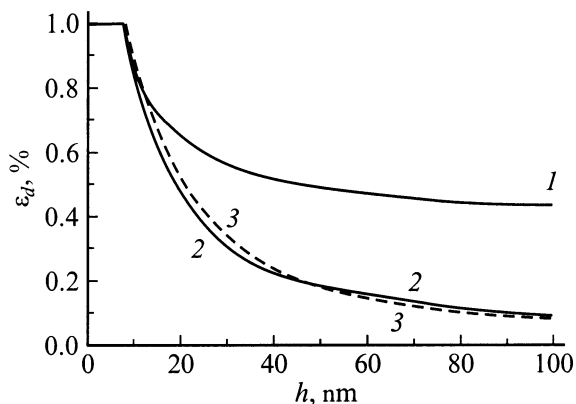


Рис. 2. Влияние типа винтовой составляющей дислокаций несоответствия на протекание процесса релаксации. Обозначение кривых такое же, как на рис. 1.

перпендикулярных семейства 60° -ДН, причем величина линейной плотности $1/D$ у них совпадает. Здесь D — расстояние между соседними дислокациями семейства. Для заданной толщины пленки h вычислялась зависимость энергии гетероструктуры от величины D . Значение минимума этой функции принималось за величину энергии гетероструктуры E_{hs} , которая соответствует заданному значению h в условиях квазиравновесного протекания процесса.

Модель расчета подобна использованной нами в работе [22] с той модификацией, что вместо семейств чисто краевых ДН рассматривались 60° -ДН. Тип винтовой составляющей дислокации учитывался выбором соответствующего знака компонент напряжений. Зависимость $E_{hs}(h)$ представлена на рис. 1. Кривая 1 соответствует случаю введения взаимно перпендикулярных

ДН с различными типами винтовых составляющих, а кривая 2 — случаю, когда винтовые составляющие совпадают. Для сравнения на рисунке кривой 3 показано изменение энергии гетеросистемы, полученное в рамках модели Мэтьюза [1]. Видно, что при $h < h_c$, которое близко к 10 нм, все три зависимости совпадают. При h , близком к 30 нм, зависимость 2 выходит на насыщение, а зависимость 1 становится практически линейно возрастающей функцией.

Упругие остаточные деформации в пленке определялись как $\epsilon_d = f/(1 - D/D_0)$. Величина $h_c = 8.3$ нм, рассчитанная в рамках нашей модели, близка к значению 9.8 нм, вычисленному по модели [1]. Результаты расчетов $\epsilon_d(h)$ представлены на рис. 2. Обозначения кривых на рис. 1 и 2 совпадают. Из таблицы видно, что семейства 1 и 8, которые могут создавать Γ -образные ДН, имеют разные типы винтовых составляющих. Поэтому их введение описывается кривой 1. Из данных рис. 2 видно, что если при введении Γ -образных ДН величина упругих остаточных деформаций становится ниже некоторого уровня ($\epsilon_d < 0.8\%$ для гетероструктуры $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$), то протекание процесса релаксации оказывается неоптимальным. Поэтому между возникшими дислокациями становится энергетически выгодным вводить дислокации других семейств. Например, если генерируются Γ -образные дислокации, содержащие левовинтовые составляющие семейства 1 и правовинтовые составляющие семейства 8, то возможно дополнительное введение как правовинтовых ДН семейств 2 или 4, которые параллельны семейству 1, так и введение левовинтовых ДН семейств 5 или 7, параллельных семейству 8. При введении дополнительных дислокационных семейств релаксационный процесс приближается к оптимальному варианту (кривая 2), однако при этом возрастает вероятность возникновения неподвижных ПД, как было рассмотрено в разд. 2.

Уменьшение энергии гетероструктуры при введении дополнительных дислокационных семейств является значительным. Если предположить, что при любом h вводятся только два взаимно перпендикулярных семейства 1 и 8, то при $h > 30$ нм энергия гетероструктуры будет составлять существенную долю (25–40%) энергии структуры, содержащей перенапряженную псевдоморфную пленку, что значительно превышает энергию оптимально релаксирующей структуры. Для сравнения на рис. 1 приведена кривая 4, показывающая энергию гетеросистемы, у которой пленка находится в псевдоморфном состоянии не зависимо от величины h . Приближающееся к линейному увеличению энергии гетероструктуры (кривая 1) связано с накоплением избыточной упругой энергии дальнедействующих сдвиговых напряжений [23–25]. В гетеросистеме с полностью снятыми напряжениями несоответствия, когда расстояние между соседними 60° -ДН равно $D_0 = 0.5b/f$, эти дальнедействующие напряжения равны

$$\sigma_{xy} = Gb/D_0 = 2Gf, \quad (1)$$

что составляет значительную долю напряжений исходной псевдоморфной пленки

$$\sigma_{yy} = \sigma_{xx} = 2Gf \frac{(1 + \nu)}{(1 - \nu)}.$$

Образованием данных напряжений и объясняется асимптотическое приближение зависимости $E_{hs}(h)$ к линейной при увеличении h (кривая 1 на рис. 1). При определении компонент тензора напряжений σ_{xy} ось Oz была направлена перпендикулярно границе раздела (001), а оси Ox и Oy — параллельно направлениям $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$. Если направления Ox и Oy повернуть в плоскости границы раздела на 45° , т.е. сделать их параллельными направлениям $[100]$ и $[010]$, то дальнедействующее поле опишется в рамках сжимающе–растягивающих напряжений

$$\sigma_{yy} = -\sigma_{xx} = 2Gf. \quad (2)$$

Упомянутое выше дополнительное введение правовинтовых семейств ДН 2 и 4, которые параллельны семейству 1, а также введение левовинтовых семейств ДН 5 и 7, которые параллельны семейству 8, является одним из способов релаксации поля дальнедействующих напряжений. Если релаксация происходит недостаточно эффективно, то в пленке возможно возникновение фрагментарной структуры или трещин [23–26].

Поле напряжений, записанное как (1) или (2), является суперпозицией двух полей, каждое из которых создано одиночным семейством 60° -ДН. В частности, семейство левовинтовых дислокаций несоответствия 1, распределенных с линейной плотностью $1/D_0$, создает дальнедействующее поле напряжений, которое равно половине величины, определяемой выражением (1) или (2). Это поле можно полностью компенсировать дальнедействующими напряжениями семейства правовинтовых дислокаций 2 или 4, которые параллельны семейству 1 и распределены с той же линейной плотностью. Если же мы хотим для компенсации дальнедействующего поля напряжений, созданного семейством левовинтовых дислокаций несоответствия 1, использовать семейство ДН, которое залегает в перпендикулярном направлении, то эти дислокации должны быть левовинтовыми. Это могут быть дислокации семейства 5 или семейства 7, распределенные с той же линейной плотностью $1/D_0$.

Представленный анализ позволяет определить требования к семействам 60° -ДН для обеспечения минимальной плотности неподвижных ПД на различных стадиях релаксационного процесса в гетероструктуре с границей раздела (001). Если требуется вырастить эпитаксиальную пленку, в которой напряжения несоответствия сняты лишь частично ($\varepsilon_d > 0.8f$), то целесообразно вводить два взаимно перпендикулярных семейства ДН с общим вектором Бюргерса. В полупроводниковой технологии более распространенной задачей является получение малодефектной пленки, в которой напряжения несоответствия сняты полностью. Одним из возможных вариантов ее оптимального решения является введение

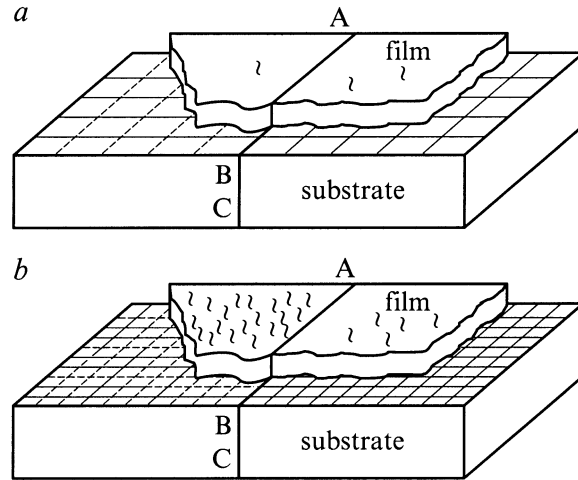


Рис. 3. Схема, качественно поясняющая влияние типа винтовой составляющей дислокации несоответствия (ДН) на образование неподвижных пронизывающих дислокаций. Правее сечения АВС вводятся два семейства ДН с одинаковыми типами винтовых составляющих в течение всего процесса релаксации (а и б). Левее сечения АВС на начальной стадии процесса вводятся два семейства ДН с общим **b** и противоположными типами винтовых составляющих (а), а на последующих стадиях — несколько семейств. Короткими извилистыми линиями на рисунке обозначены пронизывающие дислокации. Сплошными и штриховыми линиями обозначены дислокации несоответствия, имеющие винтовые составляющие разного типа.

двух взаимно перпендикулярных семейств ДН с одинаковыми типами винтовых составляющих. Необходимо ввести либо два семейства левовинтовых ДН, либо два семейства правовинтовых ДН.

Отметим, что в рамках модели Мэтьюза и ее различных модификаций [1–3] тип винтовой составляющей не учитывается. Протекание процесса релаксации, вычисленное в рамках этой модели, обозначено штриховой кривой 3 на рис. 2, которая расположена довольно близко от кривой 2, построенной для случая одинаковых типов винтовых составляющих. Как следует из наших данных на рис. 1, величина упругой энергии гетероструктуры, накопленной к концу процесса релаксации, в случае кривой 3 приблизительно в 2 раза больше, чем в случае кривой 2. В результате для области толщин, использованных при получении рис. 1 ($h \lesssim 100$ нм), кривая 3 расположена ближе к кривой 1, чем к кривой 2.

Влияние типа винтовой составляющей на образование неподвижных ПД проиллюстрировано на схемах рис. 3. Дислокации несоответствия с различными типами винтовых составляющих изображены сплошными и штриховыми линиями. На начальной стадии процесса релаксации (рис. 3, а) в область границы раздела, расположенную левее сечения АВС, вводятся два взаимно перпендикулярных семейства ДН с общим вектором Бюргерса (например, дислокации семейств 1 и 8), а в область правее данного сечения — два взаимно перпендикулярных семейства ДН, имеющие винтовые составляющие одного

типа. Это могут быть два семейства ДН с левовинтовой составляющей или два семейства с правовинтовой составляющей. В правой области структуры перпендикулярные семейства ДН имеют различные векторы Бюргерса, поэтому здесь аннигиляция пронизывающих дислокаций протекает менее эффективно, чем в левой области, и плотность неподвижных пронизывающих дислокаций на начальной стадии выше (рис. 3, *a*). Для дальнейшего протекания релаксационного процесса в левой области структуры требуется введение дополнительных дислокационных семейств, что способствует увеличению плотности неподвижных ПД (рис. 3, *b*). Как показано в [25], при этом возможно даже перераспределение ранее введенных ДН. Однако в правой области структуры сохраняется введение тех же семейств, что и на рис. 3, *a*, на протяжении всего релаксационного процесса. В результате на завершающей стадии можно достичь существенно более низкой плотности ПД. Отметим, что если бы на начальной стадии процесса левее сечения АВС вводились два взаимно перпендикулярных семейства ДН с различными векторами Бюргерса и различными винтовыми составляющими (например, дислокации семейств *l* и *b*), то на рис. 3, *a* следовало бы изобразить одинаковые плотности пронизывающих дислокаций левее и правее сечения АВС.

С помощью рис. 3 мы иллюстрируем два условия, которые обеспечивают пониженную плотность неподвижных пронизывающих дислокаций на различных стадиях процесса снятия напряжений несоответствия. Для начальной стадии таким благоприятным условием является общий вектор Бюргерса у двух взаимно перпендикулярных семейств ДН. А на остальных стадиях процесса — одинаковые типы винтовых составляющих данных семейств.

4. Особенности возникновения пронизывающих дислокаций при образовании дислокаций несоответствия различными механизмами

Как было показано в разд. 2, возникновению неподвижных пронизывающих дислокаций при введении ДН в границу раздела (001) полупроводниковой гетероструктуры способствует высокая симметрия кубической кристаллической решетки. Представленные на рис. 2 данные в первом приближении описывают квазиравновесное протекание релаксационного процесса в случае введения ДН в границы раздела вицинальных ориентаций (001). Отметим, что при переходе от сингулярной ориентации границы раздела (001) к любой вицинальной число семейств ДН, которым соответствует общее значение h_c , становится меньше 8. Поэтому в условиях квазиравновесного протекания процесса происходит уменьшение вероятности образования ПД. Очевидно, что при описании релаксационного процесса необходимо рассматривать те семейства ДН, которым соответствуют

минимальные значения h_c . Согласно [26], если отклоненная ориентация получена поворотом вокруг направления типа $\langle 100 \rangle$, то при минимальной критической толщине вводятся ДН двух взаимно перпендикулярных семейств, которые имеют противоположные типы винтовых составляющих. Поэтому процесс описывается кривой 1 на рис. 2, что вызывает накопление избыточной упругой энергии, и, как следствие, требует введения дополнительных семейств ДН. Если же отклоненная ориентация получена поворотом вокруг направления типа $\langle 110 \rangle$, то будут вводиться 2 пары взаимно перпендикулярных семейств. В каждой паре одно семейство является дислокациями с левовинтовой составляющей, а второе — с правовинтовой. В результате процесс будет описываться кривой 2 (рис. 2), но вероятность образования ПД будет увеличена из-за большого количества вводимых семейств. Можно показать, что если вицинальные ориентации (001) получены поворотами вокруг каких-либо других осей, то вероятности образования неподвижных ПД ниже, чем в случае ориентаций, полученных поворотами вокруг направлений $\langle 110 \rangle$, и выше, чем в случае ориентаций, полученных поворотами вокруг направлений $\langle 100 \rangle$. Таким образом, если рассматривать все множество вицинальных ориентаций (001), то для ориентаций, полученных поворотами вокруг направлений $\langle 110 \rangle$, вероятность образования неподвижных ПД в условиях квазиравновесного протекания релаксационного процесса максимальна. Отметим, что именно эти отклоненные ориентации наиболее распространены в технологической практике.

Из известных в мировой литературе механизмов введения ДН к наиболее обсуждаемым следует отнести гомогенное возникновение дислокационных полупетель в случайных местах гетеросистемы и безактивационное введение ДН из дислокаций, ранее существовавших в подложке. В случае первого механизма при равновероятном введении различных дислокационных семейств на любой стадии процесса не выполняются условия, рассмотренные при обсуждении рис. 3, которые обеспечивают пониженную плотность неподвижных ПД. В случае второго механизма плотность неподвижных ПД зависит от природы дислокаций подложки. Если все дислокации имеют один и тот же вектор Бюргерса, то на начальной стадии релаксации вводится всего 2 семейства взаимно перпендикулярных ДН с общим \mathbf{b} и на этой стадии процесса вероятность образования неподвижных ПД понижена (рис. 3, *a*, левая область). На последующих стадиях процесса из-за введения дополнительных семейств данная вероятность повышается. Если же в исходной подложке равновероятно обнаружить дислокацию с любым вектором Бюргерса, то отсутствуют условия, понижающие плотность неподвижных ПД.

Поиск факторов, обеспечивающих введение двух взаимно перпендикулярных семейств ДН с одинаковыми типами винтовых составляющих, представляется также важным для стадии формирования равновесной сетки ДН [18]. Если вводятся такие семейства, то можно рассчитывать на образование сравнительно плоской сетки

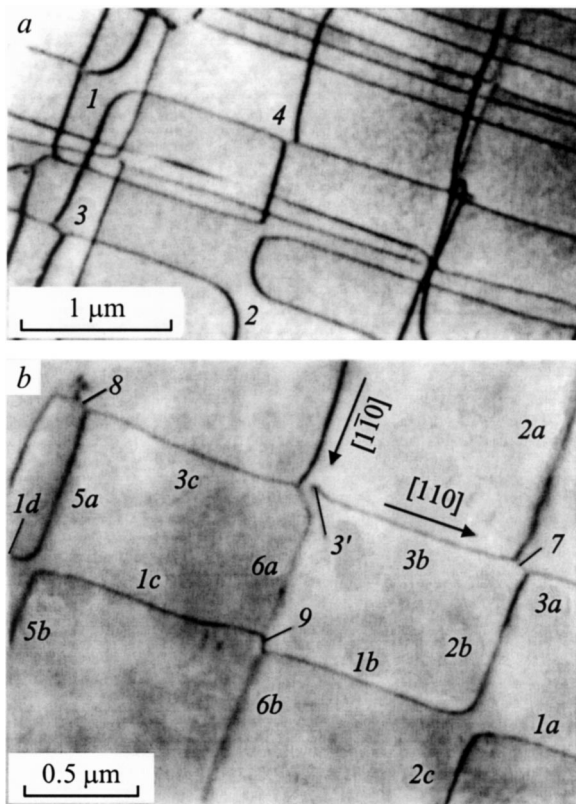


Рис. 4. Электронно-микроскопические снимки трехмерной сетки дислокаций вблизи границы раздела гетероструктуры $\text{InGaAs}/(001)\text{GaAs}$. На рис. 4, *a* цифрами 1 и 2 обозначены пары Г-образных дислокаций несоответствия (ДН), а цифрами 3 и 4 — короткие переемычки дислокационной сетки, соединившие два тройных узла ДН. На рис. 4, *b* цифрой 3' обозначена неподвижная пронизывающая дислокация, возникшая на стадии формирования сетки. Для дислокаций 1–8 рис. 4, *b* векторами Бюргера являются $\mathbf{b}_{1,2,4,5} = (a/2)[101]$, $\mathbf{b}_3 = (a/2)[01\bar{1}]$, $\mathbf{b}_{6,7,8} = (a/2)[110]$.

дислокаций. По-видимому, чем больше дислокационных семейств участвует в процессе релаксации, тем более объемной окажется равновесная сетка дислокаций, сформированная на заключительной стадии релаксации, и тем выше энергия такой сетки. Кроме того, как показано ниже с привлечением экспериментальных данных, увеличение числа семейств, участвующих в процессе релаксации, способствует дополнительному формированию неподвижных ПД на заключительной стадии процесса релаксации.

Примеры трехмерных сеток дислокаций, которые возникают в условиях, когда во взаимно перпендикулярных направлениях вводится несколько дислокационных семейств, представлены на электронно-микроскопических снимках (рис. 4). На рис. 4, *a* цифрами 1 и 2 обозначены изломы Г-образных ДН, а цифрами 3 и 4 — короткие переемычки дислокационной сетки, соединившие два тройных узла ДН. Изломы 1 и 2, так же как и переемычки 3 и 4, по-разному ориентированы в пространстве. Это означает, что для создания приведенной на рис. 4, *a*

дислокационной структуры необходимо взаимодействие по крайней мере четырех семейств ДН, представленных в таблице.

Картина трехмерной сетки дислокаций, приведенная на рис. 4, *b*, получена при использовании дифракционного вектора $\mathbf{g} = [220]$. Одинаковыми цифрами обозначены элементы сетки, которые имеют одинаковые векторы Бюргера. Различные буквенные добавления к одинаковым цифрам обозначают элементы сетки, которые, по-видимому, ранее составляли протяженную единую дислокацию несоответствия. Вектора Бюргера различных дислокационных элементов сетки указаны в подписи к рисунку. Для их определения были использованы следующие две особенности поведения дислокационного контраста. Первая из них заключается в том, что изображение дислокации исчезает, если одновременно выполняются условия $\mathbf{g}\mathbf{b} = 0$ и $\mathbf{g}(\mathbf{b} \times \xi) = 0$, где ξ — единичный вектор, параллельный линии дислокации. Согласно второй особенности, изображение дислокации становится двойным, если $\mathbf{g}\mathbf{b} = 2$, и съемка производится в условиях, когда сфера Эвальда строго проходит через узел обратной решетки, соответствующий вектору \mathbf{g} . Для исследования дислокационной структуры были получены также электронно-микроскопические снимки этого же участка гетеросистемы (рис. 4, *b*) с использованием векторов $\mathbf{g} = [\bar{2}20]$, $[400]$ и $[040]$. Это позволило установить, что возникновение данной сетки дислокаций связано с протеканием дислокационных реакций. Элементы сетки 1–5 являются 60° -ДН. Элементы 6а и 6б — это ломеровские 90° -ДН. Их контраст исчезает для $\mathbf{g} = [\bar{2}20]$. Наблюдаются две пары Г-образных дислокаций, одна из которых представлена дислокациями 1а, 2с и 1б, 2б, а вторая — дислокациями 1с, 5б и 1д, 5а. Короткие дислокационные переемычки, связывающие тройные узлы сетки, обозначены 7–9.

По-видимому, на ранней стадии формирования данной дислокационной структуры дислокация 4 была более протяженной в направлении $[1\bar{1}0]$, занимая положения элементов 6а и 6б. В результате реакций между непрерывной дислокацией 3, которая включала участки 3а, 3б и 3с, и дислокациями 2, 4 и 5 возникли дислокационные отрезки 7 и 8, а также неподвижная пронизывающая дислокация 3'. Анализ показывает, что при ее образовании возникла также подвижная ПД, которая проскользила в направлении $[1\bar{1}0]$, превращая 60° -дислокацию 4 в ломеровскую дислокацию 6. Для создания упомянутых пронизывающих дислокаций участок дислокации 3, вблизи ее пересечения с дислокацией 4, скольжением вышел на свободную поверхность пленки. Это привело к увеличению уровня энергии системы, однако последующее формирование ломеровской ДН компенсировало данные затраты и дополнительно уменьшило энергию. Уменьшение энергии в результате дислокационной реакции превращения 60° -ДН в ломеровскую связано также с тем фактом, что проекция краевой составляющей вектора Бюргера на направление $[110]$ для дислокации 6 имеет вдвое большую величину, чем для дислокации 4.

Укажем, что в результате данной реакции уменьшился уровень сдвиговых напряжений гетеросистемы, что благоприятствовало ее протеканию. Согласно данным рис. 4, *b* и таблицы, три соседние параллельные дислокации 2, 4 и 5 имеют одинаковый вектор Бюргерса и одинаковый тип винтовой составляющей. Поэтому замена 60°-дислокации 4 на краевую дислокацию 6 уменьшила средний уровень сдвиговых напряжений в их окрестности. Важным результатом вышеизложенного анализа является вывод, что при создании трехмерной дислокационной сетки вблизи границы раздела возможно появление неподвижных ПД.

5. Заключение

Исследовано влияние типа дислокационной винтовой составляющей на протекание релаксационного процесса снятия напряжений несоответствия и образование пронизывающих дислокаций в эпитаксиальной пленке. Это позволило определить требования к семействам 60°-ДН для обеспечения минимальной плотности неподвижных пронизывающих дислокаций. Если технологической задачей является получение перенапряженной эпитаксиальной пленки, когда допустимо частичное протекание пластической релаксации, то целесообразно вводить два взаимно перпендикулярных семейства ДН с общим вектором Бюргерса. Если же задачей является получение малодефектной пленки, в которой напряжения несоответствия сняты полностью, то возможным вариантом ее оптимального решения является введение двух взаимно перпендикулярных семейств ДН с одинаковыми типами винтовых составляющих.

Список литературы

- [1] J.W. Matthews. *J. Vac. Sci. Technol.*, **12**, 126 (1975).
- [2] E.A. Fitzgerald. *Mater. Sci. Reports*, **7** (3), 87 (1991).
- [3] Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, С.И. Чикичев. УФН (в печати).
- [4] Yu.B. Bolkhovityanov, A.L. Alperovich, A.S. Jaroshevich, N.V. Nomerotsky, A.G. Paulish, A.S. Terekhov, E.M. Trukhanov. *J. Cryst. Growth*, **146**, 310 (1995).
- [5] J.C. Bean, L.C. Feldman, A.T. Fiory, S. Nakahava. *J. Sci. Vac. Technol.*, **A2**, 436 (1984).
- [6] M. Hohnisch, H.-J. Herzog, F. Schäffler. *J. Cryst. Growth*, **157**, 126 (1995).
- [7] B. Beanland. *J. Appl. Phys.*, **77**, 6217 (1995).
- [8] J. Washburn, E.P. Kvam. *Appl. Phys. Lett.*, **57**, 1637 (1990).
- [9] C.G. Tuppen, C.J. Gibbings, M. Hockly, S.G. Roberts. *Appl. Phys. Lett.*, **56**, 54 (1990).
- [10] R.E. Romanov, W. Pompe, S. Mathis, G.E. Beltz, J.S. Speck. *J. Appl. Phys.*, **85**, 182 (1999).
- [11] H. Strunk, W. Hagen, E. Bauser. *Appl. Phys.*, **18**, 67 (1979).
- [12] R. Beanland. *J. Appl. Phys.*, **72**, 4031 (1992).
- [13] A. Lefebvre, C. Herbeaux, C. Bouillet, J. Dr Persino. *Phil. Mag. Lett.*, **63**, 23 (1991).
- [14] F.K. LeGoues, B.S. Meyerson, J.F. Morar, P.D. Kirchner. *J. Appl. Phys.*, **71**, 4230 (1992).

- [15] K.W. Shwarz. *J. Appl. Phys.*, **85**, 108 (1999).
- [16] A. Trampert, K.H. Ploog. *Appl. Phys. Lett.*, **66** (17), 2265 (1995).
- [17] J.S. Speck, M.A. Brewer, G. Beltz, A.E. Romanov, W. Pompe. *J. Appl. Phys.*, **80**, 3808 (1996).
- [18] V.I. Vdovin. *Phys. St. Sol.*, **171**, 239 (1998).
- [19] E.M. Trukhanov, E.B. Gorokhov, S.I. Stenin. *Phys. St. Sol. (a)*, **33**, 435 (1976).
- [20] С.И. Стенин, О.П. Пчеляков, Е.М. Труханов. В кн.: *Свойства структур металл-диэлектрик-полупроводник* (М., Наука, 1976) с. 222.
- [21] В.Т. Рид. *Дислокации в кристаллах* (М., Наука, 1957).
- [22] E.M. Trukhanov, K.B. Fritzler, A.V. Kolesnikov. *Appl. Surf. Sci.*, **123/124**, 664 (1998).
- [23] А. Тхорик, Л.С. Хазан. *Пластические деформации и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах* (Киев, 1983).
- [24] Е.М. Труханов. *Поверхность*, **2**, 13 (1995).
- [25] Е.М. Труханов. *Поверхность*, **2**, 22 (1995).
- [26] E.M. Trukhanov, A.V. Kolesnikov. *Appl. Surf. Sci.*, **123/124**, 669 (1998).

Редактор Т.А. Полянская

Influence of the misfit dislocation screw component of the threading dislocation formation in semiconductor heterostructures

E.M. Trukhanov, A.V. Kolesnikov, A.P. Vasilenko, A.K. Gutakovskiy

Institute of Semiconductor Physics,
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,
630090 Novosibirsk, Russia

Abstract In (001) heterostructures with diamond or sphalerite lattice crystal structure, the process of misfit stress release by introduction of two mutually perpendicular arrays of misfit dislocations (MD) is possible only in the case of the same types of their screw dislocation components. In the opposite case, the releasing process requires introduction of additional MD arrays, that results in increasing the density of threading dislocations. If introduction of two mutually perpendicular MD arrays of different screw types takes place, an additional energy of long-range shear stresses is accumulated. Such energetically unfavorable processes occur if the Frank-Read or Hagen-Strunk MD sources are at work.