

Дефектообразование в эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}(111)$

© Т.Г. Югова, М.Г. Мильвидский*, В.И. Вдовин*

Государственный научно-исследовательский институт редкометаллической промышленности „Гиредмет“,
109017 Москва, Россия

* Институт химических проблем микроэлектроники,
109017 Москва, Россия

E-mail: icpm@mail.girnet.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 12 января 2004 г.)

С помощью методов селективного химического травления и просвечивающей электронной микроскопии исследованы особенности дефектообразования в эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}(111)$ в диапазоне составов твердого раствора (ТР) $0.01 < x < 0.35$. Обнаружено немонотонное изменение плотности дислокаций в эпитаксиальном слое, на гетерогранице и в приграничной области подложки по мере увеличения содержания Si в ТР. Различный характер распределения дислокаций по толщине гетероструктур, имеющих специфические особенности в образцах, относящихся к различным областям состава ТР, обусловлен влиянием состава ТР на кинетику релаксации напряжений несоответствия, в частности на интенсивность зарождения и размножения дислокаций несоответствия. Установлено, что в гетероструктурах, выращиваемых методом гидридной эпитаксии при температуре 600°C , размножение дислокаций несоответствия по модифицированному механизму Франка–Рида проявляется только в области составов $0.03 < x < 0.20$. Полученные результаты объясняются с позиции влияния обогащенных атомами кремния микровыделений, образующихся в результате спинодального распада ТР, на зарождение и распространение дислокаций в эпитаксиальном слое. Предложен механизм генерации дислокаций несоответствия на гетерогенных источниках в эпитаксиальном слое, основанный на зарождении вблизи микровыделений дислокационных петель внедренного типа.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 02-02-16692).

1. Введение

Изучение процессов релаксации напряжений несоответствия в эпитаксиальных гетероструктурах по-прежнему остается актуальной задачей современного материаловедения полупроводников. Детальное знание механизмов зарождения и размножения дислокаций несоответствия (ДН) необходимо для разработки новых способов получения сильно релаксированных тонких буферных слоев с низкой плотностью наклонных дислокаций [1–4].

Исследованию общих закономерностей релаксации напряжений несоответствия в гетероструктурах SiGe/Si посвящено значительное число работ (см., например, обзоры [5,6]). Однако точки зрения разных авторов на природу наблюдаемых явлений далеко не всегда совпадают. В работе [7] предложена теоретическая модель пластической релаксации напряжений несоответствия, которая, по мнению автора, хорошо объясняет экспериментальные данные, полученные на одно- и многослойных гетероструктурах SiGe/Si с разным содержанием Ge в твердом растворе (ТР). Согласно результатам данной работы, энергии активации зарождения (Q_n) и скольжения (Q_v) дислокаций не зависят от состава ТР, величины эффективного сдвигового напряжения (τ_{eff}), а также от геометрии напряженного эпитаксиального слоя. В результате скорость релаксации напряжений

несоответствия в гетероструктурах должна определяться единственным зависящим от состава ТР параметром — $\tau_{\text{eff}}^{4.5}$. Однако имеется достаточно много работ, результаты которых указывают на то, что релаксация напряжений в гетероструктурах зависит от состава ТР более сложным образом. В работе [8] было показано, что кинетика релаксации напряжений в гетероструктурах $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y/\text{Si}$ с содержанием Ge в слоях ~ 0.15 и ~ 0.25 резко различается. Результат был объяснен увеличением эффективности торможения скользящих ДН на пересечениях с дислокациями из ортогональных рядов по мере увеличения содержания Ge в ТР. В работе [9] при исследовании гетероструктур SiGe/Si(100) и GeSi/Ge(100) с примерно одинаковыми напряжениями несоответствия установлено, что скорость скольжения дислокаций оказывается намного больше в слоях, выращиваемых на подложках Ge. Результат был объяснен уменьшением величины Q_v с ростом содержания Ge в ТР. Приведенные факты свидетельствуют о том, что состав ТР SiGe оказывает существенное влияние на поведение ДН в процессе релаксации напряжений несоответствия. Однако природа этого явления остается пока не до конца ясной.

В последнее время все большее внимание при изучении процессов релаксации напряжений уделяется вопросам междислокационного взаимодействия, взаимодействия дислокаций с точечными дефектами, а также влиянию микронеоднородности состава ТР на дефек-

Параметры исследованных эпитаксиальных гетероструктур $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}(111)$ (x — содержание Si в ТР; h — толщина слоя; T — температура роста; E_e — удельная энергия упругонапряженной гетерограницы; h_{CR} — критическая толщина слоя для введения ДН на гетерограницу; h_{FR} — критическая толщина слоя для размножения ДН по механизму Франка–Рида; FR — экспериментальное подтверждение проявления механизма Франка–Рида)

Параметр	Номер образца											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
x , at. share	0.016	0.025	0.030	0.035	0.042	0.064	0.082	0.115	0.135	0.207	0.29	0.315
h , μm	3.5	2.1	1.0	2.5	0.85	0.25	3.5	3.5	2.3	> 1.5	2.5	> 0.5
T , $^\circ\text{C}$	600									660	705	
E_e , J/m^2	0.2	0.3	0.2	0.8	0.4	0.3	6.2	12.1	11.0	55.2		
h_{CR} , μm	0.29	0.16	0.13	0.11	0.092	0.054	0.040	0.026	0.022	0.008		
h_{FR} , μm	2.9	1.6	1.3	1.1	0.92	0.54	0.40	0.26	0.22	0.08		
FR				+			+	+	+			

тообразование [6,10–13]. Перечисленные явления действительно оказывают влияние на зарождение и распространение ДН в слоях. В работе [6] был предложен механизм зарождения ДН на гетерогенных источниках в гетероструктурах SiGe/Si, основанный на зарождении дислокационных петель вакансионного типа около обогащенных атомами Ge микровыделений. К сожалению, авторами не были проанализированы источники достаточно высокой концентрации вакансий в слоях SiGe. Взаимодействие ДН с одинаковыми векторами Бюргерса в точках пересечений в исходно сформировавшейся на гетерогранице сетке ДН приводит к образованию источников размножения ДН по механизму Франка–Рида. Различные варианты так называемого модифицированного механизма Франка–Рида были предложены в работах [14,15], в которых были экспериментально изучены геометрические особенности возникающих дислокационных образований. Также было выполнено теоретическое исследование этого механизма путем численного моделирования [16]. Как было установлено нами ранее на примере гетероструктур $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y/\text{Si}(100)$, выращенных методами традиционной молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) [11] и МПЭ с газовым источником Ge [12], размножение ДН по механизму Франка–Рида происходит в относительно узком диапазоне составов ТР ($0.20 < y < 0.20$). В пределах этого диапазона в гетероструктурах наблюдалось немонотонное изменение плотности дислокаций в слое и приграничной области подложки. Эта особенность действия механизма Франка–Рида не объясняется в рамках известных моделей и требует дальнейшего изучения.

Таким образом, вопрос о механизмах зарождения, движения и размножения дислокаций, лежащих в основе процессов пластической релаксации напряжений несоответствия в гетероструктурах, остается открытым и требует проведения дальнейших исследований. С этой точки зрения гетероструктуры GeSi/Ge представляются особенно привлекательными, поскольку характеризуются рядом отличий от гетероструктур SiGe/Si, а именно: заменой основного компонента в ТР, деформацией другого знака в составляющих их материалах, а также большей пластичностью подложки. Вместе с тем эти гетероструктуры изучены гораздо меньше. Фактически только в работе [9] были выполнены исследования зависимости скорости скольжения дислокаций в эпитаксиальных слоях от состава ТР в гетероструктурах GeSi/Ge. В настоящей работе поставлена задача изучить особенности формирования дислокационной структуры в гетероструктурах GeSi/Ge в широком диапазоне составов ТР. Основное внимание уделено влиянию состава ТР на процессы зарождения, распространения и размножения ДН.

ся рядом отличий от гетероструктур SiGe/Si, а именно: заменой основного компонента в ТР, деформацией другого знака в составляющих их материалах, а также большей пластичностью подложки. Вместе с тем эти гетероструктуры изучены гораздо меньше. Фактически только в работе [9] были выполнены исследования зависимости скорости скольжения дислокаций в эпитаксиальных слоях от состава ТР в гетероструктурах GeSi/Ge. В настоящей работе поставлена задача изучить особенности формирования дислокационной структуры в гетероструктурах GeSi/Ge в широком диапазоне составов ТР. Основное внимание уделено влиянию состава ТР на процессы зарождения, распространения и размножения ДН.

2. Методика эксперимента

Эпитаксиальные слои ТР $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ были выращены на подложках Ge(111) методом гидридной эпитаксии. Методика выращивания описана ранее в работе [17]. Плотность дислокаций в подложках не превышала 10^3 cm^{-2} . Основные параметры выращенных гетероструктур представлены в таблице. Достаточно высокая температура роста и сравнительно большая толщина слоя ТР обеспечивали релаксацию напряжений несоответствия в процессе эпитаксиального роста.

Для корректного решения поставленной задачи в исследуемых образцах должно выдерживаться определенное соотношение между толщиной эпитаксиального слоя и величиной несоответствия параметров решеток элементов гетеропары. Критерием для выбора этого соотношения может служить величина энергии единицы площади упругонапряженной гетерограницы [18–20], вычисляемая по формуле [21]

$$E_e = [2G(1 + \gamma)/(1 - \gamma)]\varepsilon^2 h, \quad (1)$$

где G и γ — соответственно модуль сдвига и коэффициент Пуассона в изотропном твердом теле, ε — упругая

деформация эпитаксиального слоя, возникающая из-за несоответствия параметров решетки слоя и подложки (f), h — толщина слоя. Запасенная энергия упругонапряженного слоя определяет величину τ_{eff} , являющуюся движущей силой зарождения и распространения дислокаций [7], и результирующую степень релаксации напряжений несоответствия в гетероструктуре. С этой точки зрения для изучения влияния состава ТР на формирование дислокационной структуры желательно сохранение постоянного значения E_ϵ в исследуемых гетероструктурах. Для случая гетероструктур с частичной релаксацией напряжений несоответствия в процессе эпитаксиального роста энергия гетерограницы складывается из „упругонапряженной“ и „пластически релаксированной“ составляющих. Такое состояние гетероструктуры описывается соотношением

$$\epsilon = f - \delta, \quad (2)$$

где δ — доля деформации, снятой при введении ДН на гетерограницу. Однако для общей оценки пригодности набора образцов для данных исследований достаточно использовать величину E_ϵ , рассчитанную для случая упругонапряженного слоя. В таблице приведены рассчитанные по формуле (1) значения E_ϵ для исследованных образцов. Расчеты были выполнены с использованием значений коэффициентов $G = 5.64 \cdot 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$ и $\gamma = 0.2$, взятых для Ge [22]. Как видно из приведенных данных, в образцах № 1–6 значения E_ϵ сопоставимы. Это позволяет нам корректно провести сравнение дислокационной структуры в этих образцах. Для образцов № 7–9 также правомерно сравнение структурных характеристик. В образцах с большим содержанием Si в ТР (образцы № 10–12) дефектообразование, как показано далее, протекает по другим механизмам, поэтому значительное отличие их по величине E_ϵ не имеет принципиального значения для сравнения их структурных характеристик с характеристиками остальных образцов.

Структурные исследования проводились методами химического травления косых шлифов гетероструктур в сочетании с интерференционной оптической микроскопией и просвечивающей электронной микроскопией (ПЭМ). Изучались закономерности изменения линейной плотности ДН (misfit dislocations) на гетерогранице (N_{MD}), плотности наклонных дислокаций (threading dislocations) в слоях (N_{TD}) и дислокаций в приграничной области подложек (substrate dislocations) (N_{SD}) в зависимости от состава ТР. Плотность дислокаций в слоях и подложках определялась по дислокационным ямкам травления, выявляемым в травителе на основе $\text{K}_3\text{Fe}(\text{CN})_6$ и KOH . Линейная плотность ДН измерялась по электронно-микроскопическим изображениям продольных срезов гетероструктур, изготовленных в области гетерограницы.

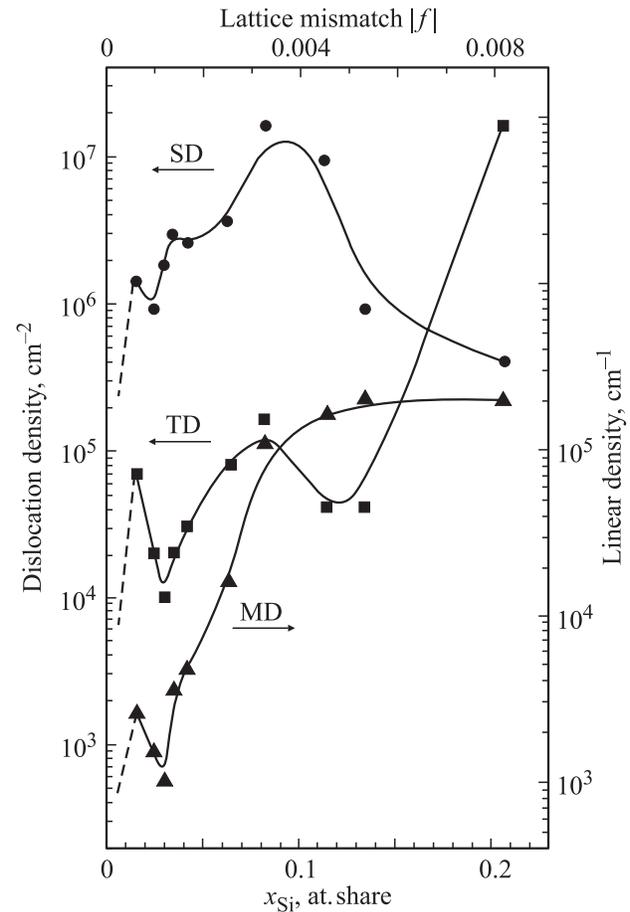


Рис. 1. Зависимости линейной плотности ДН (MD) на гетерогранице, плотности наклонных дислокаций в слое (TD) и подложке (SD) от состава ТР в гетероструктурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$.

3. Экспериментальные результаты

На рис. 1 представлены обобщенные данные, характеризующие изменение дислокационной структуры в гетероструктурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ в зависимости от содержания Si в ТР. Для систематизации и упрощения изложения экспериментальных данных весь диапазон составов ТР условно разделен на три области: $x \leq 0.03$; $0.03 < x < 0.20$ и $x > 0.20$. Принципиальное различие этих областей составов заключается в характерных особенностях распределения дислокаций по толщине гетероструктур. Третья область составов ТР графически не представлена на рис. 1, поскольку в ее пределах наблюдается однотипная дислокационная структура, характеризующаяся практически постоянной величиной $N_{\text{TD}} \geq 10^9 \text{ cm}^{-2}$. Следует отметить, что эти граничные значения составов достаточно условны и могут смещаться в ту или иную сторону в зависимости от конкретных условий эпитаксиального роста (толщина слоя, температура роста, ориентация подложки, метод наращивания слоя и т.д.).

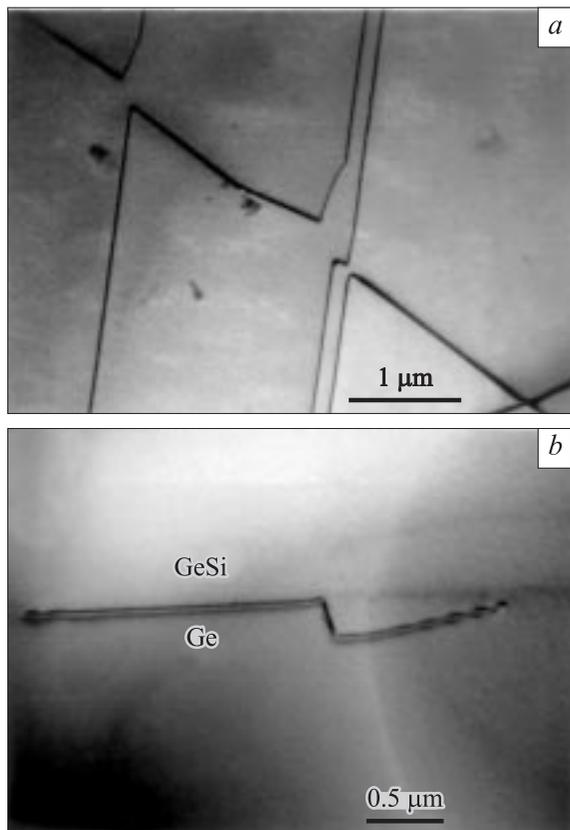


Рис. 2. ПЭМ-изображения дислокационной структуры в продольном (а) и поперечном (b) срезах гетероструктуры $Ge_{0.984}Si_{0.016}/Ge$ (область составов ТР $x \leq 0.03$).

3.1. Область составов $x \leq 0.03$. В гетероструктурах данной области составов главной характерной особенностью дислокационной структуры является наличие плоской регулярной сетки ДН (рис. 2, а), расположенной строго в плоскости гетерограницы (рис. 2, б). Тригональная сетка ДН состоит из прямолинейных 60° дислокаций, вытянутых вдоль направлений $\langle 110 \rangle$. Интересно отметить, что в таких сетках наблюдается асимметрия линейной плотности ДН в дислокационных рядах всех трех направлений. Вместе с тем в них присутствуют группы параллельных ДН с одинаковым вектором Бюргерса (рис. 2, а), образующиеся, вероятно, в результате размножения дислокаций на гетерогранице по механизму, подобному механизму Хагена–Штрунка [23], ранее предложенному для описания дефектообразования в гетероструктурах с кристаллографической ориентацией поверхности роста (100) . Регулярное расположение ДН на гетерогранице и отсутствие дислокационных полупетель в приграничной области подложки свидетельствуют об отсутствии в этих образцах размножения ДН по механизму Франка–Рида. Поскольку величина N_{TD} в слоях превышает значения исходной плотности дислокаций в подложках, в генерации ДН участвуют не только прорастающие из подложки дислокации, но и другие источники. Высокая плотность

дислокаций $(1-2) \cdot 10^6 \text{ cm}^{-2}$ в приграничной области подложки обусловлена искривлением дислокационных линий вблизи точек пересечения ДН [24] и отклонением коротких дислокационных отрезков от гетерограницы в подложку на глубину $\approx 0.1 \mu\text{m}$ (рис. 2, б). Именно эти наклонные дислокационные отрезки выявляются химическим травлением в подложке.

Как следует из рис. 1, в этой области составов плотности дислокаций во всех областях гетероструктуры (N_{MD} , N_{TD} и N_{SD}) уменьшаются по мере увеличения содержания Si в ТР и достигают минимальных значений вблизи $x \approx 0.03$. Следует отметить, что ход этих концентрационных кривых является более сложным, поскольку вблизи $x \approx 0$ величины плотности дислокаций N_{TD} и N_{SD} должны спадать до уровня исходной плотности дислокаций в подложке, а величина N_{MD} — до нуля (эти участки условно показаны штриховыми линиями). Поэтому следует ожидать наличия на кривых точки перегиба с максимумом.

3.2. Область составов $0.03 < x < 0.20$. В гетероструктурах этой области составов ТР главной отличительной особенностью дислокационной структуры является наличие трехмерной сетки ДН, располагающейся в области гетерограницы. Типичные ПЭМ-изображения сетки ДН показаны на рис. 3. Как видно на изображении продольного среза, в плотной сетке ДН преобладает

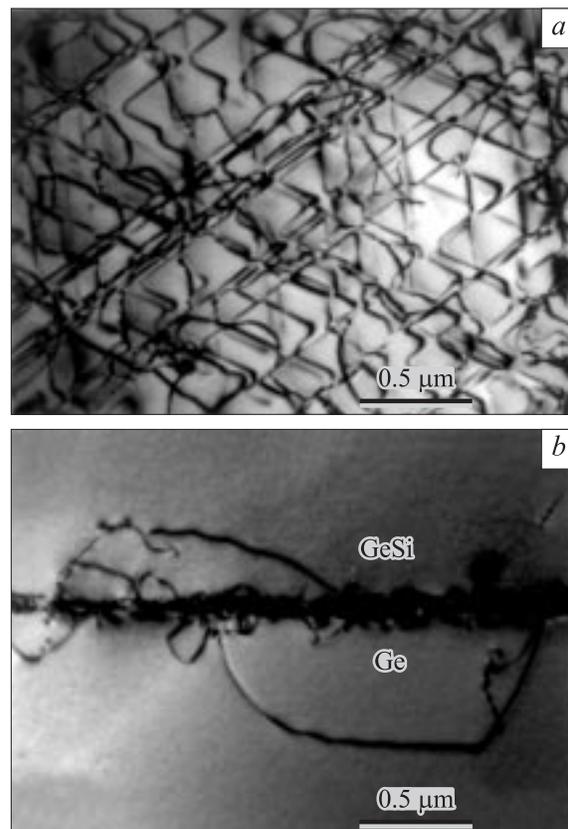


Рис. 3. ПЭМ-изображения дислокационной структуры в продольном (а) и поперечном (b) срезах гетероструктуры $Ge_{0.918}Si_{0.082}/Ge$ (область составов ТР $0.03 < x < 0.20$).

регулярное расположение дислокационных линий вдоль направлений $\langle 110 \rangle$, а на их фоне наблюдается много криволинейных отрезков (рис. 3, *a*). Эти криволинейные отрезки соответствуют дислокационным полупетлям, выходящим из сетки ДН как в подложку, так и в эпитаксиальный слой (рис. 3, *b*). На гетерогранице имеет место многоярусное расположение ДН в пределах области толщиной около $0.1 \mu\text{m}$. В этих гетероструктурах плотность дислокаций в подложке примерно на два порядка величины больше плотности наклонных дислокаций в слое. Приведенные данные свидетельствуют о том, что в гетероструктурах этого диапазона составов происходит размножение ДН по механизму Франка–Рида. Интересно отметить, что в гетероструктурах с наибольшей степенью пластической деформации подложки глубина распространения дислокационных полупетель в подложку Ge не превышает $2 \mu\text{m}$. Это значение меньше соответствующего значения (до $3 \mu\text{m}$) для аналогичных гетероструктур SiGe/Si [11].

Как было установлено нами ранее, в гетероструктурах SiGe/Si [12] трехмерная дислокационная сетка развивается постепенно по мере увеличения толщины слоя вследствие размножения дислокаций в исходно образовавшейся на гетерогранице плоской регулярной сетке ДН. Предполагается, что размножение ДН начинается при достижении некоторой „второй критической“ толщины слоя (h_{FR}) [25]. Эта толщина по количественным оценкам примерно на порядок величины выше критической толщины (h_{CR}), при которой начинается введение ДН на гетерограницу. В таблице представлены рассчитанные нами по предложенной в работе [7] формуле значения h_{CR} , а также величины h_{FR} ($h_{\text{FR}} = 10h_{\text{CR}}$) для исследованных образцов. Те величины h_{FR} , которые оказываются меньше реальной толщины слоя, выделены жирным шрифтом. В соответствующих образцах должно происходить размножение дислокаций по модифицированному механизму Франка–Рида. В нижней строке (FR) таблицы отмечены образцы, в которых экспериментально наблюдались дислокационные структуры, характерные для такого размножения. Как видно из таблицы, для рассматриваемого диапазона составов ТР наблюдается хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных. В образцах № 5 и 6 с относительно малой толщиной эпитаксиальных слоев образовались плоские регулярные сетки ДН. В гетероструктурах с $h > h_{\text{FR}}$ (образцы № 4, 7–9) сформировались хорошо развитые трехмерные дислокационные сетки. Эти результаты иллюстрируют последовательную эволюцию сетки ДН в гетероструктурах GeSi/Ge от плоской сетки к трехмерной в процессе роста слоя.

Как видно из рис. 1, в пределах этой области составов ТР ход концентрационных кривых плотностей дислокаций оказывается сложным. Плотность ДН на гетерогранице резко возрастает в начале диапазона и выходит на насыщение на уровне $N_{\text{MD}} \approx 2 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-1}$ при $x > 0.10$. В большей части этого диапазона ход концентрационных кривых N_{SD} и N_{TD} совпадает, обе

они имеют куполообразную форму. Такая форма кривых обусловлена немонотонным изменением интенсивности размножения ДН с увеличением x . В пределах $0.03 < x \leq 0.08$ интенсивность размножения ДН возрастает, достигая наибольшей величины при $x \approx 0.08$, а затем быстро снижается. При дальнейшем увеличении содержания Si в ТР ($0.13 < x < 0.20$) ход концентрационных кривых N_{SD} и N_{TD} различается. Величина N_{SD} понижается до наименьших значений из-за практически полного прекращения размножения ДН, что подтверждается отсутствием дислокационных полупетель в подложке, тогда как величина N_{TD} резко возрастает. В этих гетероструктурах наблюдается плотная сетка ДН, локализованная в области гетерограницы, в которой преобладает нерегулярное расположение ДН, что указывает, скорее всего, на переход от слоевого к островковому механизму роста эпитаксиального слоя.

3.3. Область составов $x > 0.20$. В этой области составов ТР вследствие высоких напряжений несоответствия эпитаксиальный рост происходит в островковом режиме. Причем островки растут разориентированными относительно подложки и друг друга, о чем свидетельствует наблюдение контраста муара с непараллельным расположением полос контраста на соседних локальных участках размером около $0.1 \mu\text{m}$. В результате в таких гетероструктурах образуется плотная нерегу-

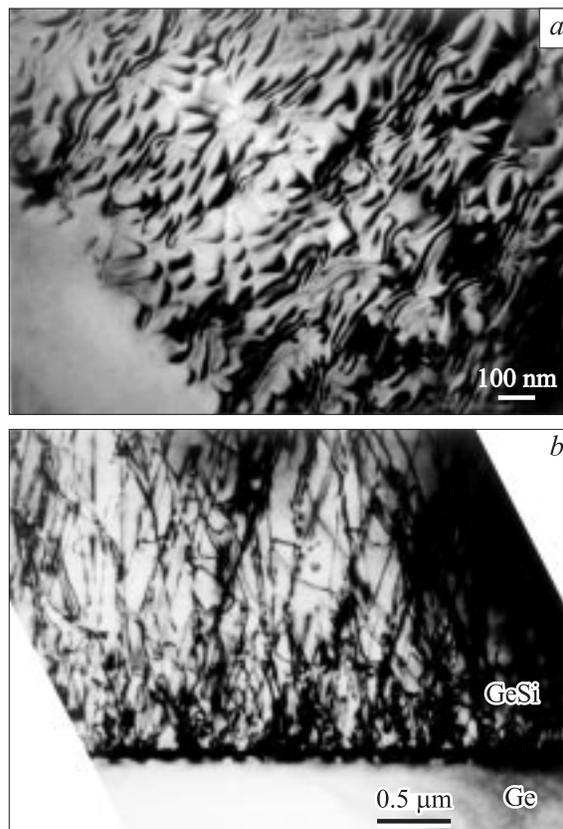


Рис. 4. ПЭМ-изображения дислокационной структуры в продольном (*a*) и поперечном (*b*) срезах гетероструктуры $\text{Ge}_{0.71}\text{Si}_{0.29}/\text{Ge}$ (область составов ТР $x > 0.20$).

лярная сетка ДН на гетерогранице (рис. 4, *a*), а в эпитаксиальном слое — лес наклонных дислокаций ($N_{TD} \geq 10^9 \text{ cm}^{-2}$). Пластическая деформация подложки отсутствует (рис. 4, *b*). Такая дислокационная структура характерна для всего этого диапазона составов ТР вплоть до $x = 1$.

4. Обсуждение результатов

Как следует из экспериментальных данных, в гетероструктурах $Ge_{1-x}Si_x/Ge$ плотности наклонных дислокаций в подложке и слое, а также плотность ДН на гетерогранице изменяются немонотонно по мере увеличения f . Различный характер распределения дислокаций по толщине гетероструктур связан со специфическими особенностями зарождения и размножения ДН в каждой из выделенных областей состава ТР. Одним из важных факторов, зависящих от состава ТР $Ge_{1-x}Si_x$ и влияющих на процессы дефектообразования, является наличие в эпитаксиальных слоях специфических микронеоднородностей, обусловленных процессом спинодального распада ТР. Спинодальный распад происходит на поверхности растущего слоя и сопровождается формированием и последующим заравниванием в матрицу слоя микровыделений, обогащенных кремнием. Интенсивность спинодального распада зависит от содержания Si в ТР: размеры и концентрация микровыделений увеличиваются с ростом x . В настоящей работе мы определяем „микровыделения“ как когерентные с матрицей слоя микронеоднородности с повышенным содержанием Si в ТР. Как показано в работе [6] на примере обогащенных атомами Ge микровыделений в ТР $Si_{1-y}Ge_y$, такого рода микровыделения имеют пластинчатую форму.

Известно, что наличие упругих напряжений в кристаллической решетке приводит к уменьшению энthalпии образования тех или иных собственных точечных дефектов (вакансий при напряжениях сжатия и междоузельных атомов при напряжениях растяжения) и как следствие к увеличению их равновесной концентрации [26]. В гетероструктурах $Ge_{1-x}Si_x/Ge$ эпитаксиальный слой испытывает напряжения растяжения ($f < 0$) из-за наличия подложки, имеющей больший период кристаллической решетки. Вследствие этого эпитаксиальные слои должны быть обогащены междоузельными атомами германия (Ge_i). При этом концентрация Ge_i в ТР должна быть тем больше, чем больше содержание в нем Si. Обогащенные атомами кремния микровыделения, имеющие меньший период кристаллической решетки по сравнению с матрицей ТР, потенциально могут играть роль концентраторов напряжений и влиять на перераспределение в их ближайшем окружении концентрации Ge_i . Однако в относительно толстых эпитаксиальных слоях гидростатическая (дилатационная) компонента поля напряжений должна быть растягивающей внутри выделения и равной нулю в окружающей его матрице. Ситуация принципиально изменяется в том случае, если микровыделение расположено в непосредственной близости от свободной поверхности эпитаксиального слоя

(когда глубина залегания микровыделения меньше или порядка его размеров). Тогда из-за сильной экранировки свободной поверхностью нормальной компоненты поля напряжений микровыделения гидростатическая компонента может стать отрицательной в области между ним и свободной поверхностью и положительной у „боковых“ граней пластинчатого микровыделения. В эти „боковые“ зоны возможна миграция междоузельных атомов, сопровождающаяся образованием дислокационных петель внедренного типа [27]. Именно такая ситуация реализуется в рассматриваемом материале, поскольку образование микровыделений, как отмечалось выше, происходит на поверхности упругонапряженного растущего слоя, а соответствующая миграция междоузельных атомов Ge_i происходит при последующем заравнивании микровыделений в матрицу слоя.

Достаточно крупные микровыделения являются центрами гетерогенного зарождения ДН, когда вблизи них образуются дислокационные петли критических размеров. При образовании такой петли, лежащей в параллельной гетерогранице плоскости, сегмент петли выходит в наклонную плоскость скольжения $\{111\}$ и быстро скользит к поверхности эпитаксиального слоя под действием напряжений несоответствия. В результате разрыва дислокационной линии на поверхности слоя образуется 60° полупетля со скользящими наклонными сегментами. Скольжение этих наклонных сегментов в слое приводит к образованию ДН на гетерогранице. Подобный механизм зарождения ДН (но основанный на образовании вакансионных дислокационных петель вблизи обогащенных атомами Ge микровыделений) был рассмотрен ранее для гетероструктур SiGe/Si [6].

На основе этих представлений полученные экспериментальные результаты могут быть объяснены следующим образом. При достижении растущим слоем критической толщины начинается образование ДН по механизму загиба в плоскость гетерограницы прорастающих из подложки дислокаций. Этот механизм первым проявляется во всех гетероструктурах независимо от состава ТР (величины f). Дополнительная генерация ДН происходит по механизму гетерогенного зарождения дислокаций на микровыделениях. В эпитаксиальных слоях, относящихся к первой области составов ТР ($x \leq 0.03$), образуются наиболее дисперсные микровыделения с большим разбросом по размерам. По этой причине относительно малая доля наиболее крупных микровыделений проявляет себя в качестве центров гетерогенного зарождения ДН. С учетом относительно невысоких по величине напряжений несоответствия в этих гетероструктурах ($|f| < 1.2 \cdot 10^{-3}$) можно предположить, что концентрация центров гетерогенного зарождения ДН в соответствующих слоях практически постоянна. В этих условиях спад на всех концентрационных кривых плотности дислокаций может быть обусловлен только снижением скорости распространения дислокаций в слоях по мере увеличения x . Такое заключение экспериментально подтверждается результатами измерений подвижности

дислокаций в этих образцах [28]. Одной из наиболее вероятных причин уменьшения скорости распространения дислокаций может быть стопорящее действие присутствующих дисперсных микровыделений. Возможно, этим же обусловлено отсутствие размножения ДН по механизму Франка–Рида в образцах данного диапазона составов в тех случаях, когда толщина слоев превышает соответствующие критические толщины h_{FR} для размножения дислокаций (образцы № 1 и 2).

Во второй области составов ТР ($0.03 < x < 0.20$) характер дефектообразования изменяется за счет резкого увеличения скорости зарождения дислокаций. Это связано, с одной стороны, с увеличением размеров и концентрации микровыделений при росте содержания Si в эпитаксиальном слое, а с другой — с соответствующим увеличением напряжений несоответствия в гетероструктурах. С увеличением f уменьшается величина критического размера дислокационной петли [6]. В результате величина N_{MD} в исходно формирующихся на гетерогранице регулярных сетках ДН с увеличением f возрастает (образцы № 5 и 6). Наблюдаемая в исходных сетках плотность ДН обеспечивает релаксацию незначительной доли напряжений несоответствия: около 3% для слоев с $x = 0.042$ и $h = 0.85 \mu\text{m}$ и 7% для слоев с $x = 0.064$ и $h = 0.25 \mu\text{m}$ (степень релаксации оценивалась по отношению экспериментального значения N_{MD} к теоретически рассчитанному в предположении полной релаксации напряжений несоответствия за счет регулярного расположения 60° ДН в плоскости гетерограницы, $b_{eff} = 1.15 \text{ \AA}$). Поскольку в таких гетероструктурах сохраняются большие остаточные напряжения, а в регулярных сетках образуются источники размножения в виде загнутых в подложку дислокационных углов, в них по мере увеличения толщины слоя активизируется размножение ДН по механизму Франка–Рида.

В пределах этой же области составов ТР при $x > 0.08$ дальнейшее увеличение концентрации центров зарождения дислокаций обеспечивает получение предельно достигаемой плотности ДН в исходной сетке (концентрационная кривая N_{MD} выходит на насыщение). При таких плотностях ДН резко снижается интенсивность их размножения и механизм Франка–Рида не реализуется. Аналогичное прекращение действия механизма Франка–Рида наблюдалось также в гетероструктурах SiGe/Si (100) при плотности ДН в сетке $N_{MD} \approx 8 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-2}$ [15].

Другим фактором, косвенно зависящим от состава ТР и влияющим на дефектообразование, является механизм эпитаксиального роста слоя. В области составов ТР $x < 0.15$ реализуется механизм слоевого роста, который является оптимальным для формирования регулярной дислокационной структуры. В пределах области составов ТР $0.15 < x < 0.20$ ($6 \cdot 10^{-3} < |f| < 1 \cdot 10^{-2}$) происходит постепенный переход от слоевого к островковому механизму эпитаксиального роста. В соответствующих гетероструктурах на гетерогранице образуются нерегулярно расположенные ДН, а в слое — плотный

лес наклонных дислокаций. При наращивании слоев в пределах третьей области ТР $x > 0.20$ ($|f| > 1 \cdot 10^{-2}$) реализуется явно выраженный островковый рост, при котором островки с размерами около $0.1 \mu\text{m}$ вырастают разориентированными относительно друг друга. Именно этот фактор определяет образование леса наклонных дислокаций в таких слоях с практически постоянной плотностью $N_{TD} \geq 10^9 \text{ cm}^{-2}$. В таких гетероструктурах значительный вклад в зарождение ДН вносит, скорее всего, механизм зарождения дислокационных полупетель на поверхности растущего слоя [29].

5. Заключение

Изучено влияние состава твердого раствора на дефектообразование в эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}(111)$, полученных методом гидридной эпитаксии. С помощью методов ПЭМ и селективного химического травления получены данные о распределении дислокаций по толщине гетероструктур. Показано, что характер распределения дислокаций различен в образцах, относящихся к разным областям составов ТР ($x \leq 0.03$; $0.03 < x < 0.20$ и $x > 0.20$). Плотности наклонных дислокаций в эпитаксиальном слое и подложке, а также ДН на гетерогранице изменяются немонотонно по мере увеличения содержания Si в ТР. Формирование дислокационной структуры с характерными особенностями для указанных диапазонов состава ТР определяется в основном скоростью зарождения и интенсивностью размножения ДН.

Предложен механизм зарождения ДН из дислокационных петель внедренного типа, образующихся при агломерации междоузельных атомов Ge_i в окрестностях когерентных с кристаллической матрицей микровыделений пластинчатой формы, обогащенных атомами Si по сравнению с исходным ТР.

Показано, что в исследованных гетероструктурах размножение ДН по модифицированному механизму Франка–Рида наблюдается только в области составов $0.03 < x < 0.20$ при толщинах эпитаксиальных слоев, примерно на порядок превышающих критическую толщину. В таких гетероструктурах на начальных стадиях релаксации напряжений несоответствия формируется плоская регулярная сетка ДН, которая в процессе размножения ДН трансформируется в трехмерную. В пределах указанной области составов интенсивность размножения ДН изменяется немонотонно по мере увеличения содержания Si в ТР, достигая наибольших значений при $x \approx 0.08$ и спадая практически до нуля при $x \approx 0.20$.

Установлено, что в гетероструктурах SiGe/Ge размножение ДН по механизму Франка–Рида происходит также, как в гетероструктурах SiGe/Si, независимо от знака напряжений несоответствия. Характерным признаком действия этого механизма является распространение дислокационных полупетель от гетерограницы в подложку.

Авторы выражают благодарность Л.К. Орлову и О.А. Кузнецову за предоставление исследованных в работе эпитаксиальных структур.

Список литературы

- [1] T. Hackbarth, H.-J. Herzog, M. Zeuner, G. Höck, E.A. Fitzgerald, M. Bulsara, C. Rosenblad, H. von Känel. *Thin Solid Films* **369**, 148 (2000).
- [2] M. Bauer, K. Lyutovich, M. Oehme, E. Kasper, H.-J. Herzog, F. Ernst. *Thin Solid Films* **369**, 152 (2000).
- [3] C.S. Peng, Z.Y. Zhao, H. Chen, J.H. Li, Y.K. Li, L.W. Guo, D.Y. Dai, Q. Huang, J.M. Zhou, Y.H. Zhang, T.T. Sheng, C.H. Tung. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 3160 (1998).
- [4] F.K. LeGoues. *MRS Bull.* April, 38 (1996).
- [5] Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, С.И. Чикичев. *УФН* **171**, 689 (2001).
- [6] D.D. Perovic, D.C. Houghton. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **146**, 117 (1995).
- [7] D.C. Houghton. *J. Appl. Phys.* **70**, 2136 (1991).
- [8] R. Hull, J.C. Bean. *Appl. Phys. Lett.* **54**, 925 (1989).
- [9] R. Hull, J.C. Bean, L.J. Peticolas, B.E. Weir, K. Prabhakaran, T. Ogino. *Appl. Phys. Lett.* **65**, 327 (1994).
- [10] R. Hull, E.A. Stach, R. Tromb, F. Ross, M. Reuter. *Phys. Stat. Sol. (a)* **171**, 133 (1999).
- [11] V.I. Vdovin, M.G. Milvidskii, T.G. Yugova, K.L. Lyutovich, S.M. Saidov. *J. Cryst. Growth* **141**, 109 (1994).
- [12] T.G. Yugova, V.I. Vdovin, M.G. Milvidskii, L.K. Orlov, V.A. Tolomasov, A.V. Potapov, N.V. Abrosimov. *Thin Solid Films* **336**, 112 (1998).
- [13] V.I. Vdovin. *Phys. Stat. Sol. (a)* **171**, 239 (1999).
- [14] A. Lefebvre, C. Herbeaux, C. Bouillet, J. Di Persio. *Phil. Mag. Lett.* **63**, 23 (1991).
- [15] F.K. LeGoues, B.S. Meyerson, J.F. Morar, P.D. Kirchner. *J. Appl. Phys.* **71**, 4230 (1992).
- [16] K.W. Schwarz. *J. Appl. Phys.* **85**, 120 (1999).
- [17] В.И. Вдовин, О.А. Кузнецов, М.Г. Мильвидский, Л.К. Орлов, Т.Г. Югова. *Кристаллография* **38**, 4, 269 (1993).
- [18] X.W. Liu, A.A. Hopgood, B.F. Usher, H. Wang, N.S. Braithwaite. *J. Appl. Phys.* **88**, 5975 (2000).
- [19] A.R. Powell, S.S. Iyer, F.K. LeGoues. *Appl. Phys. Lett.* **64**, 1856 (1994).
- [20] A. Rockett, C.J. Kiely. *Phys. Rev. B* **44**, 1154 (1991).
- [21] J.W. Matthews. *J. Vac. Sci. Technol.* **12**, 126 (1975).
- [22] Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. Атомиздат, М. (1972). 600 с.
- [23] W. Hagen, H. Strunk. *Appl. Phys.* **47**, 85 (1978).
- [24] V.I. Vdovin, L.A. Matveeva, G.N. Semenova, M.Ya. Skorohod, Yu.A. Tkhorik, L.S. Khazan. *Phys. Stat. Sol. (a)* **92**, 379 (1985).
- [25] R. Beanland. *J. Appl. Phys.* **72**, 4031 (1992).
- [26] М.Г. Мильвидский, Н.С. Рыгова, Е.В. Соловьева. В сб.: *Проблемы кристаллографии*. Наука, М. (1987).
- [27] M.Yu. Gutkin, I.A. Odiv'ko, A.G. Sheinerman. *J. Phys.: Cond. Matter* **15**, 3539 (2003).
- [28] M.V. Mezhenyi, M.G. Mil'vidskii, T.G. Yuogova. *J. Phys.: Cond. Matter* **14**, 12997 (2002).
- [29] E.P. Kvam. *Phil. Mag. Lett.* **62**, 167 (1990).