

06

Структурное состояние эпитаксиальных пленок GaP разных полярностей на отклоненных подложках Si(001)

© И.Д. Лошкарев, А.П. Василенко, Е.М. Труханов,
А.В. Колесников, М.А. Путято, М.Ю. Есин,
М.О. Петрушков

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
Новосибирск
E-mail: idl@isp.nsc.ru

Поступило в Редакцию 26 сентября 2016 г.

С использованием метода рентгеновской дифрактометрии исследована структура пленок GaP, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии на вицинальных подложках Si(1113). Установлено, что кристаллическая решетка псевдоморфной пленки поворачивается вокруг (110) в сторону увеличения отклонения от сингулярной ориентации. В процессе релаксации происходит поворот в противоположную сторону. Это справедливо для пленок обеих полярностей: (001) и (00 $\bar{1}$). Установлены отличия морфологии поверхности релаксированной и псевдоморфной пленок GaP.

DOI: 10.21883/PJTF.2017.04.44299.16494

Наиболее востребованными полупроводниковыми материалами современного приборостроения являются Si и соединения A^{III}B^V. Все большее значение приобретают низкодефектные слои арсенида галлия на кремнии. Распространенным вариантом перехода от неполярного полупроводника Si к полярному GaAs является применение промежуточных эпитаксиальных слоев GaP: параметр его кристаллической решетки близок к параметру решетки кремния (несоответствие f составляет около 0.4%). Слои GaP можно получать как в рамках осаждения металлорганических соединений из газовой фазы [1,2], так и с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии [3,4].

При зарождении слоя GaP полярность пленки зависит от того, какие атомы первыми осаждаются на поверхность — Si-атомы галлия или атомы фосфора. В первом случае возникает полярность пленки (001), а во втором — (00 $\bar{1}$) [5]. Для последующего приборного применения необходимо получить гладкую пленку GaAs, которая выращивается на слое GaP и наследует его полярность. Полярность влияет на морфологию поверхности GaAs [5], ее структурное качество и разворот кристаллической решетки относительно решетки Si [6]. Разворот является результатом проявления упругих деформаций и пластической релаксации напряжений в пленке. Задача данной работы — исследование структурного состояния пленок GaP обеих полярностей. Необходимо изучить морфологию поверхности и разворот решетки псевдоморфных и релаксированных пленок.

Представленные в настоящей работе исследования выполнены на полученных с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии слоях GaP разной полярности на подложках Si(1113), отклоненных на 6.2° от сингулярной ориентации (001). Использовались рентгеновская дифрактометрия и атомно-силовая микроскопия. Для измерения деформации пленки и разворота ее кристаллической решетки использовалась модель триклинных искажений [7], в которой кроме рентгеновских перпендикулярных и латеральных деформаций ε_{\perp} и ε_{\parallel} дополнительно применяются два сдвиговых угла δ_{zx} и δ_{xz} . Если в недеформированной ячейке пленки стороны грани параллельны осям Oz и Ox , то в искаженной ячейке они отклонятся от осей на соответствующие углы δ_{zx} и δ_{xz} . Полуусумма этих углов равна сдвиговой деформации ε_{xz} , а полуразность — углу поворота ψ решетки пленки относительно подложки вокруг оси Oy (направление ступеней $\langle 110 \rangle$ гетерограницы). Исследования проводились на двухкристальном рентгеновском дифрактометре с использованием монохроматора Ge(004), в излучении $\text{CuK}\alpha_1$. Результаты измерений и анализа представлены в таблице. Степень пластической релаксации определялась при комнатной температуре по формуле $\rho = (\varepsilon_{\parallel}/f) \cdot 100\%$.

На рис. 1 приведены карты рентгеновского рассеяния в обратном пространстве для практически псевдоморфной (образец № 1, см. таблицу) и релаксированной (образец № 5) пленок. На картах черными кружками указаны расчетные координаты узлов для псевдоморфной (coherent) и релаксированной (relax) пленок, вычисленные в рамках упругой изотропной модели, соответственно для $\rho = 0$ и $\rho = 100\%$.

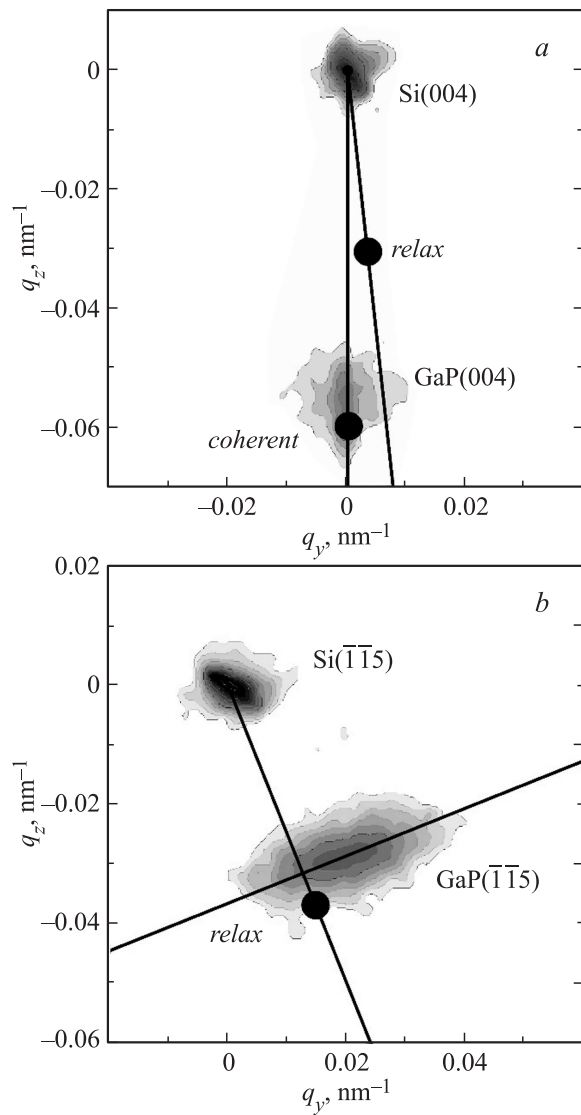


Рис. 1. Рентгеновские карты обратного пространства узлов гетеросистем GaP/Si: *a* — вокруг узла (004) псевдоморфной пленки, *b* — вокруг узла ($\bar{1}\bar{1}5$) релаксированной пленки.

Результаты измерений деформационного состояния пленок GaP разных полярностей

№ образца	Полярность GaP	ε_{xz} , arcsec	ψ , arcsec	ρ , %
1	(001)	-131	124	4
2	(001)	-66	87	11
3	(00 $\bar{1}$)	-59	71	14
4	(00 $\bar{1}$)	-67	106	18
5	(001)	-8	-83	113
6	(00 $\bar{1}$)	-6	-78	109

На рис. 1, *a* видно несовпадение расчетного (coherent) и фактического положения узла, так как пленка имеет релаксацию около 4%. Наклонными линиями, проходящими через точки „relax“ на картах, показано направление вектора рассеяния, соединяющего узлы Si и нулевой узел обратной решетки. Смещение узла GaP(004) влево от этой линии свидетельствует о повороте кристаллической решетки пленки в положительную сторону, когда увеличивается угол отклонения от сингулярной ориентации (001). На рис. 1, *b* через пик пленки проведена наклонная линия ориентационных искажений, уширение пика GaP($\bar{1}\bar{1}5$) вдоль которой свидетельствует о наличии разброса по ориентациям в пленке из-за присутствия дислокаций несоответствия. Этот разброс означает неоднородный поворот кристаллической решетки пленки в области взаимодействия рентгеновского пучка с кристаллом. Расчетная (relax) и экспериментальная координаты узлов не совпадают, так как пленка упруго растянута в латеральном направлении ($\rho = 113\%$) и повернута.

Причина избыточной релаксации ($\rho > 100\%$) объясняется различием температурных коэффициентов расширения пленки и подложки. Температурные коэффициенты расширения для Si и GaP равны $2.6 \cdot 10^{-6}$ и $4.65 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ соответственно, и после охлаждения от температуры роста (или отжига) до комнатной в пленке возникают заметные упругие деформации.

Морфология поверхности исследовалась в полуконтактном режиме на атомно-силовом микроскопе Solver P47. По представленным снимкам (рис. 2) видно, что отсутствуют антифазные домены в пленке.

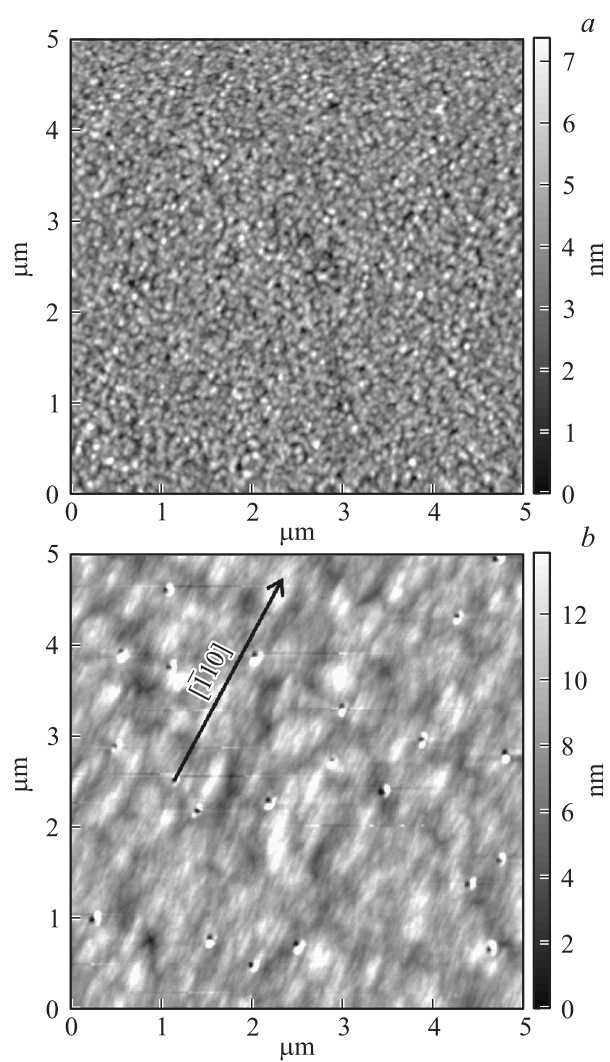


Рис. 2. Изображения атомно-силовой микроскопии поверхности пленок: *a* — псевдоморфной, *b* — релаксированной.

Псевдоморфная пленка толщиной 75 nm имеет изотропный характер рельефа поверхности (рис. 2, *a*) со среднеквадратичной шероховатостью (S), равной 0.85 nm. Данный показатель является относительно низким и свидетельствует о гладкой поверхности. На релаксированной пленке толщиной 650 nm наблюдается анизотропный характер рельефа (рис. 2, *b*) с выделенным направлением $[\bar{1}10]$ параллельно ступеням вицинальной подложки. Это может быть связано с анизотропным характером диффузии адатомов галлия по поверхности [8]. Величина $S = 0.82$ nm сравнима с шероховатостью слоев GaAs толщиной более 1 μ m, на поверхности которых также наблюдаются дефекты в виде ямок [5].

Псевдоморфные пленки имеют разворот кристаллической решетки относительно решетки подложки, сопоставимый с углом, рассчитанным по формуле Нагаи (Nagai) [9]: $\text{tg}(\psi) = \text{tg}(\alpha)\varepsilon_{\perp}$, где α — угол отклонения границы раздела от сингулярной ориентации. Для системы GaP/Si при $\rho = 0\%$ получаем угол разворота $\psi = 178$ arcsec, который больше экспериментальных значений, приведенных в таблице для образцов № 1–4. Следовательно, в процессе релаксации угол поворота решетки пленки GaP уменьшается вне зависимости от полярности. В образцах № 1–3 присутствует сдвиговая деформация ε_{xz} решетки, сравнимая по порядку величины с разворотом, что типично для псевдоморфных пленок на вицинальных подложках (001). В образце № 4 при релаксации 18% сдвиговая деформация уже в полтора раза меньше угла поворота. По мере введения дислокаций в границу раздела, т.е. увеличения степени релаксации, поворот пленки продолжается, и угол становится противоположным по знаку, что имеет место у релаксированных образцов № 5 и 6. Сдвиговая деформация у этих образцов на порядок величины меньше, чем угол поворота. При полной пластической релаксации расчетное значение $\varepsilon_{xz} = 0$.

Релаксация напряжений происходит путем введения дислокаций несоответствия. В границу раздела (001) возможно введение восьми семейств 60° -дислокаций несоответствия по четырем плоскостям скольжения типа $\{111\}$. Наиболее выгодно введение дислокаций в границу раздела (1113) по плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$, у которой наименьший угол залегания и соответственно минимальная критическая толщина. Проведены расчеты формируемой дислокационной структуры. Решалась система уравнений с учетом полных тензоров напряжений от каждого семейства дислокаций [10], а также с учетом направлений

дислокационных линий, угла поворота кристаллической решетки и степени релаксации. В результате установлены плотности дислокаций каждого семейства. При полной релаксации напряжений несоответствия в границе раздела линейная плотность дислокаций несоответствия вдоль ступеней равна $10.1 \mu\text{m}^{-1}$, из них 57% — это дислокации с минимальной критической толщиной.

В представленной работе установлено, что поворот решетки псевдоморфной пленки GaP происходит в сторону увеличения отклонения от сингулярной ориентации. При протекании релаксации пленка поворачивается в противоположную сторону вне зависимости от ее полярности. Поворот обусловлен преимущественным вкладом в значение ψ дислокаций, скользящих в $(\bar{1}\bar{1}1)$. Определена дислокационная структура релаксированных пленок GaP, формирующая экспериментально измеренный поворот. На пленках наблюдается анизотропный характер рельефа с выделенным направлением параллельно ступеням границы раздела. Укажем, что наиболее качественные пленки GaAs выращивают с использованием прослойки GaP. В случае релаксированных пленок GaAs поворот кристаллической решетки зависит от ее полярности: поворот в сторону увеличения отклонения от сингулярной ориентации соответствует полярности (001) , а полярности $(00\bar{1})$ — поворот в противоположном направлении. Следовательно, повороты кристаллических решеток GaP и GaAs обусловлены различными физическими закономерностями.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 16-32-60087 мол_а_дк, 16-32-00172 мол_а).

Список литературы

- [1] Warren E.L., Kibbler A.E., France R.M. et al. // Appl. Phys. Lett. 2015. V. 107. P. 082109.
- [2] Takagi Y., Furukawa Y., Wakahara A. et al. // J. Appl. Phys. 2010. V. 107. P. 063506-1.
- [3] Болховитянов Ю.Б., Пчеляков О.П. // УФН. 2008. Т. 178. С. 459–480.
- [4] Lin A.C., Fejer M.M., Harris J.S. // J. Cryst. Growth. 2013. V. 363. P. 258–263.
- [5] Емельянов Е.А., Коханенко А.П., Пчеляков О.П. и др. // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 1. С. 49–54.
- [6] Лошкарев И.Д., Василенко А.П., Труханов Е.М. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2013. Т. 77. № 3. С. 264–267.

- [7] Колесников А.В., Ильин А.С., Труханов Е.М. и др. // Изв. РАН. Сер. физ. 2011. Т. 75. № 5. С. 652–655.
- [8] Емельянов Е.А., Феклин Д.Ф., Пулято М.А. и др. // Автометрия. 2014. Т. 50. № 3. С. 13–24.
- [9] Nagai H. // J. Appl. Phys. 1974. V. 45. P. 3789.
- [10] Труханов Е.М., Колесников А.В., Лошкарев И.Д. // Поверхность. Рентген-, синхротр. и нейтрон. исслед. 2014. № 5. С. 100–107.