

УДК 539.261

РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ИСКАЖЕНИЙ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКИ НА ОТКЛОНЕННЫХ ПОДЛОЖКАХ (001)

© 2011 г. А. В. Колесников, А. С. Ильин, Е. М. Труханов, А. П. Василенко,
И. Д. Лошкарев, А. С. Дерябин

Учреждение Российской академии наук Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск
E-mail: trukh@isp.nsc.ru

Развита методика определения структурных параметров эпитаксиальных слоев по данным рентгеновской дифрактометрии, позволяющая анализировать триклинные искажения, которые возникают в гетеросистемах с несингулярными ориентациями. Зарегистрированы углы взаимного разворота кристаллических решеток дислокационной пленки $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ и подложки Si.

ВВЕДЕНИЕ

Свойства кристалла в значительной мере определяются его деформационным состоянием и наличием структурных дефектов, в частности дислокаций. В гетеросистемах, содержащих эпитаксиальную пленку и подложку, как правило, возникают напряжения несоответствия, которые снимаются при введении в границу раздела дислокаций несоответствия. Накопление последних обуславливает протекание релаксационного процесса. Как было установлено еще Франком и Ван дер Мерве [1], энергия гетеросистемы ниже, если на начальной стадии эпитаксиального роста пленка находится в псевдоморфном состоянии, т.е. когда она полностью упруго деформирована и дислокации несоответствия отсутствуют.

В экспериментальной и технологической практике для определения структурного состояния полупроводниковой эпитаксиальной гетеросистемы используют модель тетрагональных искажений кристаллической решетки. В ней принимается, что под влиянием напряжений несоответствия кубическая решетка пленки трансформируется в тетрагональную. Вводят два параметра: ε_{\perp} и ε_{\parallel} — так называемые рентгеновские деформации в перпендикулярном и параллельном границе раздела (ГР) направлениях соответственно. Они определяются на основе кривых дифракционного отражения (КДО) и характеризуют относительную разницу межплоскостных расстояний пленки d_L и подложки d_S , т.е. $(d_L - d_S)/d_S$, определенных в указанных направлениях. Модель надежно работает в случае сингулярной ГР (001), при этом ε_{\perp} и ε_{\parallel} характеризуют изменения соответствующих сторон элементарной ячейки пленки [2]. Однако для гетеросистем с вицинальными ориентациями ГР (001) модель неприменима из-за дополнительных искажений кристаллической решетки пленки: ее разворота и сдвиговой деформации. Впервые явление разворота между решетками пленки и подложки наблюдал Нагаи (Nagai) [3] на примере гетеро-

системы InGaAs/GaAs с вицинальными ориентациями ГР (001), которые получены поворотом вокруг кристаллографического направления $\langle 110 \rangle$, принадлежащего ГР. Нагаи предложил модель, в которой явление разворота есть следствие двух факторов: величины угла α между вицинальной и сингулярной ориентациями, а также значения f — несоответствия между ячейками кристаллических решеток пленки и подложки в ненапряженном состоянии. Для определения угла разворота решеток пленки и подложки β Нагаи предложил формулу

$$\text{tg}(2\beta) = \text{tg}(\alpha) \cdot f. \quad (1)$$

Последующие исследования [4] показали, что модель Нагаи справедлива только для псевдоморфных пленок, когда дислокации несоответствия полностью отсутствуют.

1. РАЗВИТИЕ МЕТОДА ИССЛЕДОВАНИЯ

Для обработки КДО от образцов с несингулярной ориентацией границы раздела и ненулевой пластической релаксацией нами выполнено развитие идей тетрагональной модели и модели Нагаи. В дополнение к используемым в тетрагональной модели рентгеновским деформациям решетки пленки ε_{\perp} , ε_{\parallel} вводятся еще два угла сдвига δ_{xz} и δ_{zx} [5], показанные на рис. 1. Ось $0z$ перпендикулярна ГР, а ось $0x$ принадлежит ГР. Плоскость $x0z$ — это плоскость дифракции. Прямоугольнику кристаллической решетки подложки со сторонами a_x и a_z (изображен пунктирными линиями на рисунке), соответствует развернутый на угол ψ параллелограмм решетки пленки, стороны которого увеличены в $(1 + \varepsilon_{\parallel})$ и $(1 + \varepsilon_{\perp})$ раз, а угол между этими сторонами равен $(\pi/2 \pm \pm 2\varepsilon_{xz})$, где ε_{xz} — используемая в теории упругости сдвиговая компонента тензора деформаций. Можно показать, что

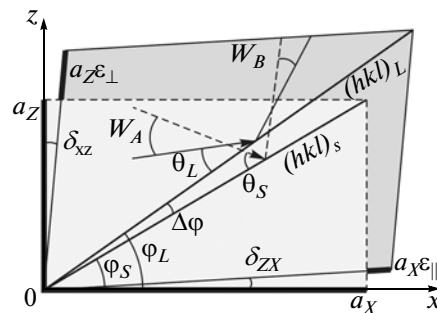
$$\varepsilon_{xz} = 1/2(\delta_{xz} + \delta_{zx}) \quad \text{и} \quad \psi = 1/2(\delta_{xz} - \delta_{zx}). \quad (2)$$

Диагоналями прямоугольника и параллелограмма (рис. 1) являются плоскости подложки $(hkl)_S$ и пленки $(hkl)_L$, которые имеют одноименные индексы Миллера и наклонены к ГР под углами φ_S и φ_L соответственно.

Для определения четырех неизвестных параметров ε_{\parallel} , ε_{\perp} , δ_{xz} и δ_{zx} в рамках предлагаемой модели проводится регистрация КДО от двух наборов отражающих плоскостей. На рисунке изображены плоскости (hkl) одного из наборов. Направления падающих рентгеновских лучей указаны стрелками. Угол между падающими лучами обозначен W_A , а между отраженными – W_B . Эти углы определяются по КДО. Согласно [2], $\Delta\varphi = \varphi_L - \varphi_S = 1/2(W_A - W_B)$ и $\Delta\theta = \theta_L - \theta_S = -1/2(W_A + W_B)$, где θ – значение кинематического угла Брэгга для подложки (θ_S) и пленки (θ_L). Анализируя рисунок, можно получить следующие соотношения:

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{\sin \theta_S \sin \varphi_S}{\sin \theta_L \sin(\varphi_L - \delta_{zx})} - 1 \quad (3)$$

и $\varepsilon_{\perp} = \frac{\sin \theta_S \cos \varphi_S}{\sin \theta_L \cos(\varphi_L + \delta_{xz})} - 1.$



Деформации кристаллической решетки пленки относительно подложки в плоскости дифракции. Ход лучей при отражении от плоскостей (hkl) .

Полученные выражения в случае $\delta_{xz} = \delta_{zx} = 0$ тождественно преобразуются в уравнения для тетрагональных искажений кристаллической решетки пленки в случае сингулярной ГР (001) [2]. Если записать уравнения (3) для двух различных наборов отражающих плоскостей, то получим систему из четырех уравнений, которая позволит определить δ_{xz} и δ_{zx} :

$$\delta_{xz} = \arctg \left(\frac{\sin \theta_S^{(1)} \cos \varphi_S^{(1)} \sin \theta_L^{(2)} \cos \varphi_L^{(2)} - \sin \theta_L^{(1)} \cos \varphi_L^{(1)} \sin \theta_S^{(2)} \cos \varphi_S^{(2)}}{\sin \theta_S^{(1)} \cos \varphi_S^{(1)} \sin \theta_L^{(2)} \sin \varphi_L^{(2)} - \sin \theta_L^{(1)} \sin \varphi_L^{(1)} \sin \theta_S^{(2)} \cos \varphi_S^{(2)}} \right), \quad (4a)$$

$$\delta_{zx} = \arctg \left(\frac{\sin \theta_L^{(1)} \sin \varphi_L^{(1)} \sin \theta_S^{(2)} \sin \varphi_S^{(2)} - \sin \theta_S^{(1)} \sin \varphi_S^{(1)} \sin \theta_L^{(2)} \sin \varphi_L^{(2)}}{\sin \theta_L^{(1)} \cos \varphi_L^{(1)} \sin \theta_S^{(2)} \sin \varphi_S^{(2)} - \sin \theta_S^{(1)} \sin \varphi_S^{(1)} \sin \theta_L^{(2)} \cos \varphi_L^{(2)}} \right), \quad (4б)$$

где индексы ⁽¹⁾ и ⁽²⁾ соответствуют первому и второму наборам отражающих плоскостей. Для корректного решения уравнений (4) необходимо, чтобы линии пересечения обеих отражающих плоскостей с ГР были параллельны. Предлагаемая модель позволяет анализировать наиболее общий случай триклинных искажений кристаллической решетки эпитаксиальной пленки.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для экспериментальной проверки развитой модели были использованы гетеросистемы $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ с вицинальными (001) ориентациями. Были исследованы более десяти образцов с разными составами и ориентациями границы раздела. В таблицах представлены данные для двух типичных образцов, полученные как по развиваемой модели, так и в рамках классической тетрагональной модели. ГР первого образца (табл. 1) была получена поворотом на 4° вокруг направления типа $[1\ 0\ 0]$, а второго (табл. 2) – поворотом на 6.2° вокруг направления типа $[-1\ 1\ 0]$. Для проверки корректности модели использовалось число наборов отражающих плоскостей, превышающее 2.

В случае первого образца было использовано четыре набора, а в случае второго – восемь наборов.

В первой колонке таблиц указаны векторы дифракции, а во второй – значения азимутальных углов, при которых регистрировались КДО. За нулевое значение азимута принято положение образца, когда брэгговская ось совпадает с линией отклонения вицинальной ориентации ГР от сингулярной. Скомбинированные попарно наборы отражающих плоскостей представлены в четных и нечетных строках таблиц.

Для пересчета значений ε_{\perp} , ε_{\parallel} в параметры эпитаксиальной пленки, использована их взаимосвязь [6] с параметром несоответствия гетеросистемы $f = [(1 - \nu)\varepsilon_{\perp} + 2\nu\varepsilon_{\parallel}]$. Это позволило определить как степень пластической релаксации пленки $\rho = (\varepsilon_{\parallel}/f)$ 100%, так и, используя закон Вегарда, атомную долю германия x в пленке GeSi. Таблицы содержат значения x и ρ , полученные как по нашей, так и по классической тетрагональной моделям. Видно, что значения x и ρ , определенные в рамках обеих моделей, по порядку величины согласуются. Однако разброс значений, определенных по развиваемой модели, существенно ниже. Кроме того, в некоторых случаях расчет в рамках тетрагональной модели дает

Таблица 1. Экспериментальные и расчетные данные по образцу № 1 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ [0 1 14], разворот от [001] на 4° вокруг [1 0 0]

Рефлекс	Азимут	W_A угл. с	W_B угл. с	Тетрагональная модель		Предлагаемая модель			
				x	$\rho, \%$	x	$\rho, \%$	Ψ угл. с	ϵ_{xz} угл. с
0–44	0	4670	3620	0.303	77	0.310	59.6	427	56
044	180	5790	3030	0.304	40				
404	90	5245	3465	0.315	63	0.314	63.8	27	12
–404	270	5150	3480	0.312	65				
–2–24	315	3580	2496	0.310	76.4	0.306	61.2	335	4
224	135	4373	2063	0.293	43.1				
2–24	45	3695	2508	0.296	46.4	0.309	61.9	270	32
–224	225	4315	2125	0.316	74.6				

Таблица 2. Экспериментальные и расчетные данные по образцу № 2 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ [1 1 13], разворот от [001] на 6.2° вокруг [–1 1 0]

Рефлекс	Азимут	W_A угл. с	W_B угл. с	Тетрагональная модель		Предлагаемая модель			
				x	$\rho, \%$	x	$\rho, \%$	Ψ угл. с	ϵ_{xz} угл. с
115	0	3486	1601	0.009	–4205	0.199	47.6	660	22
–1–15	180	2254	2498	0.290	116.9				
224	0	3262	593	0.162	–26.4	0.202	48.3	618	67
–2–24	180	1905	1569	0.200	87.1				
115	0	3486	1601	0.009	–4205	0.201	48.6	607	78
–2–24	180	1905	1569	0.200	87.1				
224	0	3262	593	0.162	–26.4	0.199	48.2	651	25
–1–15	180	2254	2498	0.290	116.9				
–115	110	2726	2195	0.188	43.9	0.227	73.9	7	7
1–15	250	2709	2230	0.196	51.5				
–224	100	2529	886	0.162	22	0.187	40.2	12	6
2–24	260	2497	896	0.161	23.8				
–115	110	2726	2195	0.188	43.9	0.198	51.3	74	88
2–24	260	2497	896	0.161	23.8				
–224	100	2529	886	0.162	22	0.200	51.9	98	88
1–15	250	2709	2230	0.196	51.5				

нефизичные значения. Так, например, для образца № 2 (табл. 2) в случае рефлекса [1 1 5] значение ρ получается -4205% . Это демонстрирует ограниченную применимость классической тетрагональной модели в случае вицинальных ГР (001).

Значения $x = 0.227$ и $\rho = 73.9\%$, полученные по развитой модели для рефлексов [–1 1 5] и [1 –1 5]

(табл. 2), плохо согласуются с величинами, рассчитанными по другим рефлексам. Это объясняется тем фактом, что не выполняется условие параллельности линий пересечения отражающих плоскостей с ГР. В данном случае угол между линиями составляет 40° .

В последних двух колонках таблиц приведены значения сдвиговой деформации ϵ_{xz} и угла разворота

ψ решеток пленки относительно подложки вокруг направлений, определяемых углом азимута. Анализ значений ψ позволяет сделать вывод, что решетка пленки подвержена развороту $\psi = 427''$ (образец 1) и $\psi = 634''$ (средняя величина верхних четырех табличных значений ψ для образца 2), причем ось разворота совпадает с линией отклонения вицинальной ориентации от сингулярной. Сдвиговые деформации при этом незначительные и не превышают 100 угл. с. Этот эффект можно объяснить накоплением в гетерогранице дислокаций несоответствия с одинаковыми векторами Бюргерса [7, 8], создающих аналог малоугловой границы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развитая модель позволяет получать надежные значения степени пластической релаксации пленки ρ и ее атомного состава x . Для псевдоморфных и дислокационных пленок возможно определение сдвиговой деформации ϵ_{xz} и угла разворота кристаллической решетки пленки ψ . В исследованных образцах кристаллическая решетка пленки в большей

степени подвержена развороту, чем сдвиговой деформации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 10-02-00902-а, и Интеграционного междисциплинарного проекта СО РАН № 1.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frank F.C., Van der Merwe J.H. // Proc. Roy. Soc. Ser. A. 1949. V. 98. № 1053. P. 216.
2. van der Sluis P. // J. Phys. D: Appl. Phys. 1993. V. 26. P. A188.
3. Nagai H. // J. Appl. Phys. 1974. V. 45. P. 3789.
4. Auvray P., Poudoulec A., Baudet M. // Appl. Surf. Sci. 1991. V. 50. P. 109.
5. Хирт Дж., Лоте И. // Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. 599 с.
6. Bennet B.R., Del Alamo J.A. // Electron Matter. 1991. V. 20. P. 1075.
7. Trukhanov E.M., Kolesnikov A.V. // Appl. Surf. Sci. 1998. V. 123/124. P. 669.
8. Труханов Е.М. // Поверхность: 2010. V. 1. P. 43.