

## ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

**Кремний-германиевые эпитаксиальные пленки:  
физические основы получения напряженных  
и полностью релаксированных гетероструктур**

Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, С.И. Чикичев

*Гетероструктуры  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  на основе двух элементарных полупроводников становятся важным элементом современной микроэлектроники. Успешное эпитаксиальное выращивание таких гетероструктур предполагает детальное знание механизмов упругой и пластической деформации сплошных и островковых пленок как на начальных стадиях эпитаксии, так и при последующей термообработке. В настоящем обзоре систематизирован и обобщен большой материал, отражающий достигнутый на сегодняшний день уровень понимания фундаментальных физических механизмов формирования упруго деформированных и пластически релаксированных гетерокомпозиций в системе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ , в частности, обсуждается использование "податливых" и "мягких" подложек, а также синтез островков нанометровых размеров (так называемых квантовых точек).*

PACS numbers: 61.72.Lk, 62.25.+g, 73.40.Kp, 81.15.+z

**Содержание**

1. Введение (689).
  2. Пластическая релаксация (690).
    - 2.1. Прорастающие дислокации и дислокации несоответствия.
    - 2.2. Критическая толщина введения дислокаций несоответствия.
    - 2.3. Движение прорастающих дислокаций в напряженных пленках. Теория и эксперимент.
    - 2.4. Зарождение дислокаций несоответствия в напряженных пленках. Теория и эксперимент.
    - 2.5. Пластическая релаксация пленок.
    - 2.6. Взаимодействие дислокаций, мультипликация. Вторичные источники дислокаций несоответствия.
    - 2.7. Захороненные слои и многослойные гетероструктуры. Особенности пластической релаксации.
  3. Упругая релаксация (703).
    - 3.1. "Податливые" и "мягкие" подложки.
    - 3.2. Упругая релаксация пленок через образование островков.
  4. Морфология поверхности релаксированных пленок (709).
  5. Практическая реализация механизмов релаксации (710).
    - 5.1. Основные физические предпосылки использования гетероструктур  $\text{GeSi}/\text{Si}$  в приборах.
    - 5.2. Искусственные подложки.
    - 5.3. Кремний-германиевые наноструктуры с квантовыми точками.
  6. Заключение (713).
- Список литературы (714).

Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, С.И. Чикичев. Институт физики полупроводников СО РАН,  
630090 Новосибирск, просп. Лаврентьева 13, Российская Федерация  
Тел./Факс (3832) 33-35-02  
E-mail: pch@isp.nsc.ru

Статья поступила 17 октября 2000 г.

**1. Введение**

Получение методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) гетероструктур с относительно высокой разностью параметров решеток пленки и подложки, обладающих низкой плотностью прорастающих дислокаций (ПД), является важнейшей задачей полупроводникового материаловедения. Работы в этой области ведутся более двух десятков лет. Основные прикладные задачи можно разделить на три направления.

1. Получение псевдоморфных пленок и многослойных гетероструктур (ГС) без дислокаций несоответствия (ДН). Напряжения в таких ГС модифицируют зонную структуру полупроводника, что приводит к появлению новых полезных электрических и оптических свойств.

2. Противоположная задача — получение полностью релаксированных пленок, так называемых искусственных подложек, что необходимо для создания различных приборных ГС на материалах с параметром решетки, отличным от параметра имеющихся коммерческих подложек. Здесь основной целью является достижение максимально возможного структурного совершенства такой искусственной композиции, приближение по этому параметру к стандартным монокристаллическим подложкам.

3. К крайнему проявлению релаксации напряженных пленок относится образование островков нанометровых размеров, получившее в последнее время большой научный и практический резонанс в связи с открывшейся возможностью выращивания ансамблей наноструктур с плотностью более  $10^{10} \text{ см}^{-2}$  — так называемых квантовых точек. Особенности гетероэпитаксиального роста, приводящие к реализации каждой из этих трех задач,

основаны на общих физических законах релаксации напряженных пленок, успехи в понимании которых за последние годы обобщены в нижеследующих разделах.

## 2. Пластическая релаксация

### 2.1. Прорастающие дислокации и дислокации несоответствия

Подложка и пленка рассогласованы, когда их кристаллические ячейки не совпадают по размеру. Так как для формирования дислокаций несоответствия требуется дополнительная энергия, первоначально слой растет в напряженном, псевдоморфном состоянии, при котором размеры ячейки пленки и подложки совпадают в плоскости границы раздела. Если пластическая релаксация прошла полностью, ячейка пленки возвращается в свое первоначальное состояние, а на границе раздела создается сетка ДН. В идеальном случае это ортогональная сетка дислокаций, лежащих только на границе раздела или вблизи нее. Однако, как будет ясно из последующего изложения, эта сетка ДН может быть создана только путем скольжения дислокаций по наклонным плоскостям, пересекающим пленку. Эти пересекающие пленку ветви дислокаций остаются в ней, создавая большую плотность прорастающих дислокаций. Во всех наблюдаемых гетероструктурах GeSi/Si ДН лежат в направлениях  $\langle 110 \rangle$ . Различаются два основных типа ДН по углу между линией дислокации и направлением вектора Бюргера, который равен  $60^\circ$  и  $90^\circ$ . Соответственно, дислокации первого типа называются  $60^\circ$ -ными, а второго —  $90^\circ$ -ными. Для  $60^\circ$ -ного типа линия дислокации и вектор Бюргера лежат в плоскости  $\{111\}$ , которая для материалов Ge и Si является плоскостью скольжения. Этим и объясняется преимущественное появление этого типа дислокаций в релаксирующей напряженной пленке. Другой тип дислокаций —  $90^\circ$ -ные (или ломеровские, L-дислокации) являются "сидячими". Энергетически ломеровские дислокации, будучи чисто краевыми, выгодней для релаксации пленок по сравнению с  $60^\circ$ -ными, так как доля введенной пластической деформации для них в два раза больше. Однако по причине невозможности их введения путем скольжения, количество  $90^\circ$ -ных ДН в большинстве случаев невелико.

В пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  при малых рассогласованиях ( $< 1,5\%$ ) наблюдается ортогональная сетка ДН, в основном,  $60^\circ$ -ного типа. При больших рассогласованиях ( $> 2,3\%$ ) [1] наблюдается, в основном, ортогональная сетка коротких краевых L-дислокаций. Природа дислокационной микроструктуры в границе раздела пластически релаксируемой пленки оказывает большое влияние на совершенство кристаллической структуры основного объема пленки: короткие дислокации связаны с поверхностью пленки ветвями ПД, плотность которых достигает величин  $10^{10} - 10^{11} \text{ см}^{-2}$ . Задача получения совершенных, полностью релаксированных пленок GeSi/Si распадается на две подзадачи: а) обеспечить приемлемый темп релаксации пленки введением ДН; б) свести до минимума количество прорастающих дислокаций. В определенной степени эти две подзадачи противоречивы, так как введение ДН происходит через прохождение ПД через объем пленки.

### 2.2. Критическая толщина введения дислокаций несоответствия

Еще в 1949 г. Франк и Ван дер Мерве [2] указали на возможность выращивания тонкого кристаллического слоя на подложке с иным параметром решетки без дефектов на границе раздела. В такой гетеропаре рассогласование параметров решеток пленки и подложки компенсируется изменением размеров ячейки слоя, в результате чего последний оказывается биаксиально напряженным псевдоморфным слоем с когерентно сопряженной с подложкой границей раздела. Энергия деформаций, накапливающаяся в пленке, пропорциональна ее толщине. После того, как толщина слоя начинает превосходить некоторую величину, называемую критической толщиной, энергия становится настолько большой, что на границе раздела возникают дислокации несоответствия, частично или полностью снимающие напряжения в объеме пленки.

**2.2.1. Модель энергетического баланса.** Рассмотрим модель энергетического баланса, основанную на сравнении энергий напряженной и пластически релаксированной пленок, предложенную Мэтьюзом в [3] (energybalance model). Энергия напряжений единицы площади псевдоморфной пленки толщиной  $h$  есть

$$E_\varepsilon = \frac{2G(1+\nu)}{1-\nu} \varepsilon^2 h, \quad (1)$$

где  $G$  и  $\nu$  — соответственно модуль сдвига и коэффициент Пуассона в изотропном твердом теле,  $\varepsilon$  — двумерная (плоская) упругая деформация в пленке, возникающая из-за разницы параметров решетки пленки и подложки:

$$f = \frac{a_f - a_s}{a_s}. \quad (2)$$

Энергия единицы площади сетки дислокаций несоответствия, пластически релаксирующих пленку, равна

$$E_d = \frac{2}{\rho} \frac{Gb^2(1-\nu \cos^2 \alpha)}{4\pi(1-\nu)} \left( \ln \frac{\beta h}{b} + 1 \right). \quad (3)$$

Здесь множитель 2 отвечает двум системам дислокаций несоответствия в каждом направлении  $\langle 110 \rangle$  вдоль границы раздела,  $\rho$  — количество дислокаций на единицу длины в плоскости границы раздела,  $b$  — величина вектора Бюргера дислокации,  $\alpha$  — угол между вектором Бюргера и линией дислокации. Число  $\beta$  называется параметром ядра дислокации и для системы GeSi по современным данным принимается равным 0,76 (для  $60^\circ$ -ных дислокаций) [4]. Количество дислокаций  $\rho$ , пластически релаксирующих пленку, равно

$$\rho = \frac{b_{\text{eff}}}{f - \varepsilon}, \quad (4)$$

где  $b_{\text{eff}}$  — эффективный вектор Бюргера (т.е. компонента вектора Бюргера, лежащая в плоскости границы раздела в направлении, перпендикулярном ДН — величина абсолютной пластической релаксации, являющаяся следствием появления одной ДН). Тогда

$$E_d = \frac{G(b/b_{\text{eff}})b(1-\nu \cos^2 \alpha)}{2\pi(1-\nu)} (f - \varepsilon) \left( \ln \frac{\beta h}{b} + 1 \right). \quad (5)$$

Полная энергия пленки равна  $E_c + E_d$ . Величина упругих деформаций пленки,  $\varepsilon^*$ , при которых эта сумма минимальна, может быть определена из выражения  $d(E_c + E_d)/d\varepsilon = 0$ , и она равна

$$\varepsilon^* = \frac{(b/b_{\text{эф}}) b(1 - \nu \cos^2 \alpha)}{8\pi h(1 + \nu)} \left( \ln \frac{\beta h}{b} + 1 \right). \quad (6)$$

Наибольшая возможная величина для  $\varepsilon^*$  равна  $f$ . Таким образом, толщина псевдоморфной пленки, при которой становится возможным появление первых ДН — критическая толщина — равна

$$h_c = \frac{(b/b_{\text{эф}}) b(1 - \nu \cos^2 \alpha)}{8\pi f(1 + \nu)} \left( \ln \frac{\beta h_c}{b} + 1 \right). \quad (7)$$

Для сетки краевых дислокаций  $\alpha = 90^\circ$  и  $b/b_{\text{эф}} = 1$ . Для  $60^\circ$ -ных дислокаций  $\alpha = 60^\circ$  и  $b/b_{\text{эф}} = 2$ . С учетом того, что для системы GeSi  $\nu = 0,28$ ,  $f = 0,041x$  ( $x$  — доля Ge в твердом растворе),  $\beta = 0,76$ , для случая с  $60^\circ$ -ными дислокациями получаем упрощенное выражение для критической толщины:

$$h_c = 1,62 \frac{b}{x} \left( \ln \frac{0,76h_c}{b} + 1 \right). \quad (8)$$

**2.2.2. Модель силового баланса.** В 1974 г. Мэтьюз и Блэйкли [5] предложили модель, основанную на балансе сил, действующих на дислокацию, так называемую force balance model. На рисунке 1 схематически представлена начальная стадия пластической релаксации псевдоморфной пленки. Типичный путь — это возникновение каким-либо образом  $60^\circ$ -ной дислокации, которая имеет возможность скольжения в наклонной к границе раздела плоскости (111). Дислокация состоит из ветви, лежащей в границе раздела — ДН, а также ветви, выходящей на поверхность пленки — ПД. Пластическая релаксация пленки происходит путем увеличения длины каждой такой ДН за счет движения прорастающей части в плоскости скольжения. Каждый такой проход дислокационной петли через часть пленки уменьшает упругие деформации в этой ее части и поэтому, при некоторых условиях, может быть энергетически выгодным. Рассмотрим эти условия.

На прорастающую часть дислокации (ветвь АВ) действует сила  $F_c$ , способствующая расширению дисло-

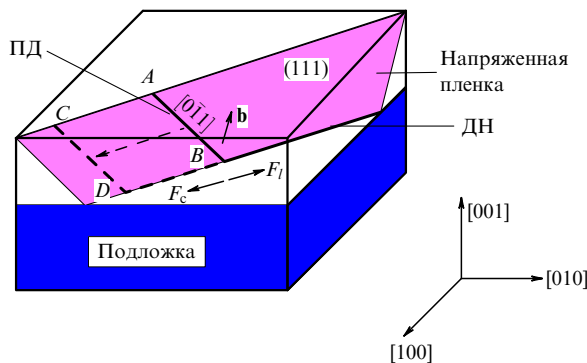


Рис. 1. Схематическое представление пластической релаксации напряженной пленки через образование дислокаций несоответствия и связанных с ними прорастающих дислокаций.

кационной петли. Сила эта обусловлена имеющимися в пленке напряжениями несоответствия и записывается следующим образом [6]:

$$F_c = \frac{2G(1 + \nu)}{1 - \nu} \varepsilon b h \cos \lambda, \quad (9)$$

где  $\lambda$  — угол между вектором Бюргерса и лежащим в плоскости границы раздела перпендикуляром к пересечению плоскости скольжения дислокации и поверхности подложки. Видно, что сила, заставляющая дислокацию двигаться, пропорциональна имеющимся напряжениям в пленке и ее толщине.

На движущуюся ветвь CD в точке D действует тормозящая сила  $F_l$ , связанная с дополнительной работой, требующейся на образование нового участка дислокации несоответствия — DB. Эта сила равна

$$F_l = \frac{Gb^2(1 - \nu \cos^2 \alpha)}{4\pi(1 - \nu)} \left( \ln \frac{\beta h}{b} + 1 \right). \quad (10)$$

Критическая толщина определяется балансом этих двух сил,  $F_c = F_l$ . Отсюда

$$h_c = \frac{b(1 - \nu \cos^2 \alpha)}{8\pi \varepsilon(1 + \nu) \cos \lambda} \left( \ln \frac{\beta h_c}{b} + 1 \right). \quad (11)$$

С учетом того, что  $\cos \lambda = 0,5$  [6], а наибольшая возможная величина для  $\varepsilon$  есть  $f$ , для системы GeSi на Si(001) это выражение становится идентичным формуле (8).

В более поздних работах, посвященных введению ДН и их распространению в напряженных пленках, исследователи стали широко использовать понятия так называемого скальвающего напряжения (resolved shear stress)  $\tau$  и эффективного скальвающего напряжения (effective or excess shear stress)  $\tau_{\text{эф}}$ . В выражении (1) величина  $[2G(1 + \nu)/(1 - \nu)]\varepsilon$  представляет собой "плоское" напряжение в пленке,  $\sigma$ . Поворот его действия в направлении скольжения ПД в плоскости скольжения (111) и называется скальвающим напряжением:

$$\tau = \cos \lambda \cos \phi \frac{2G(1 + \nu)}{(1 - \nu)} \varepsilon, \quad (12)$$

где  $\phi$  — угол между плоскостью скольжения и нормалью к границе раздела. Величина  $\cos \lambda \cos \phi$  называется фактором Шмидта (Schmidt factor, далее  $S$ ). Сдвиговая компонента напряжения, препятствующая продвижению ПД, равна [7]

$$\tau_s = \frac{Gb(1 - \nu \cos^2 \alpha) \cos \phi}{4\pi h(1 - \nu)} \left( \ln \frac{\beta h}{b} + 1 \right). \quad (13)$$

Разность  $\tau - \tau_s$  называется эффективным скальвающим напряжением,  $\tau_{\text{эф}}$ , и является движущей силой распространения ПД в напряженных пленках толщины  $h$ :

$$\tau_{\text{эф}} = S \frac{2G(1 + \nu)}{(1 - \nu)} \varepsilon - \frac{Gb(1 - \nu \cos^2 \alpha) \cos \phi}{4\pi h(1 - \nu)} \left( \ln \frac{\beta h}{b} + 1 \right). \quad (14)$$

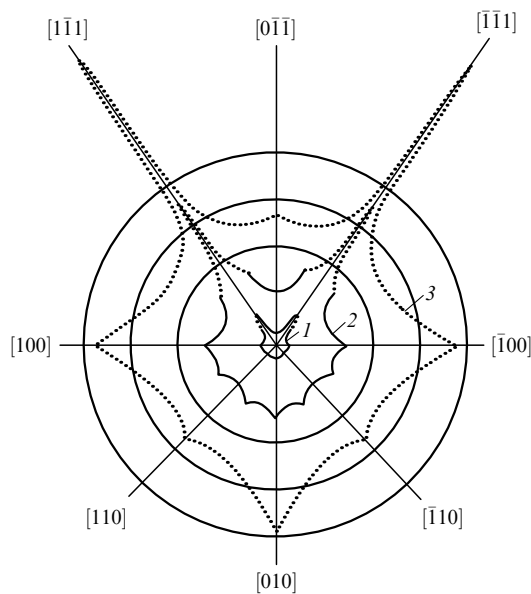
Из равенства нулю  $\tau_{\text{эф}}$  на начальной стадии пластической релаксации пленок, когда  $\varepsilon = f$ , определяется критическая толщина:

$$h_c = \frac{b(1 - \nu \cos^2 \alpha)}{8\pi f(1 + \nu) \cos \lambda} \left( \ln \frac{\beta h_c}{b} + 1 \right), \quad (15)$$

что совпадает с выражением (11).

**2.2.3. О возможностях управления доминирующим типом ДН при гетероэпитаксии.** В работе Гутаковского, Пчелякова и Стенина [8] (1980 г.) было получено общее уравнение для определения критической толщины псевдоморфного слоя при любом законе изменения упругой деформации по толщине пленки. Была также впервые построена полярная диаграмма зависимости критической толщины от ориентации поверхности подложки. Показано, что выбором соответствующей ориентации подложки или созданием переходных слоев с градиентом состава можно исключить из процесса релаксации гетероэпитаксиальных напряжений частичные дислокации несоответствия. Расчеты были проделаны для случая сплошной изотропной пленки, имеющей одинаковую с подложкой структуру типа сфалерита (или алмаза) и одинаковые упругие константы, неизменные от точки к точке. Рассмотрен наиболее часто реализующийся механизм релаксации напряжений, осуществляемый скольжением дислокаций.

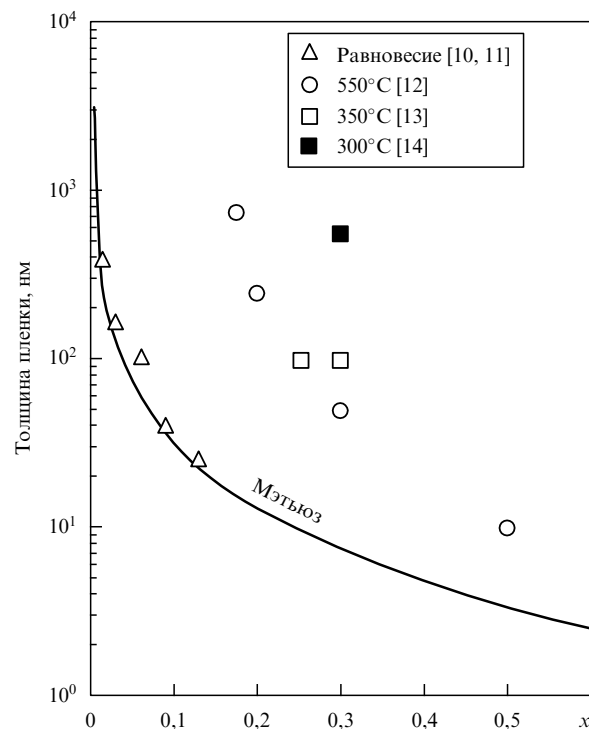
Совокупность проведенных в [8] расчетов иллюстрируется полярной диаграммой зависимости минимальной критической толщины введения ДН от ориентации подложки на рис. 2. Направление радиус-вектора диаграммы определяет направление нормали к поверхности подложки, а его величина — минимальную  $h_c$  для данного  $\varepsilon_0$ . На этом рисунке совмещены две полярные диаграммы: верхняя половина — для оси разориентации [011], нижняя половина — для оси [001]. Из полярной диаграммы следует, что при достаточно больших значениях  $f = \varepsilon_0$  ( $\sim 4 \times 10^{-2}$ ) релаксация напряжений полными дислокациями будет предпочтительна лишь в очень узком диапазоне ориентации подложки (отклонение от (111) к (100) на  $2-7^\circ$ ). При всех других ориентациях первоначально будут вводиться частичные ДН. При малых значениях  $f = \varepsilon_0$  ( $\sim 7 \times 10^{-3}$ ) для любой ориента-



**Рис. 2.** Полярная диаграмма для минимальной критической толщины по Гутаковскому, Пчелякову, Стенину [8]. Сплошные участки соответствуют образованию частичных ДН, пунктирные — полных ДН;  $\varepsilon_0$  равно  $4 \times 10^{-2}$  (1),  $1,5 \times 10^{-2}$  (2),  $7 \times 10^{-3}$  (3). Верхняя половина диаграммы рассчитана для оси разориентации [011], нижняя — для [001]. Для кривых 1 и 2 расстояние между концентрическими кольцами соответствует 3 нм, для 3 — 4,5 нм.

ции подложки энергетически выгодным является образование полных ДН. В случае промежуточных величин  $f$  ( $\sim 1,5 \times 10^{-2}$ ) существуют достаточно широкие интервалы ориентации с преобладанием либо полных, либо частичных ДН, причем доля последних растет с уменьшением энергии дефекта упаковки. Из полярной диаграммы также видно, что пластическая деформация наиболее затруднена при точной ориентации подложки по {111} ( $h_c$  максимальна), особенно при малых  $\varepsilon_0$ . Поэтому здесь следует ожидать повышенного уровня остаточных напряжений, особенно в тонких пленках.

**2.2.4. Основные экспериментальные результаты.** На рисунке 3 приведена расчетная зависимость критической толщины (сплошная линия) для пленок  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  от состава по выражению (8). Во второй половине 1980-х и начале 1990-х годов был опубликован ряд работ, посвященных экспериментальному определению критической толщины в пленках  $\text{GeSi}/\text{Si}$  и сравнению этих результатов с расчетами Мэтьюза. Экспериментальные данные некоторых работ также приведены на рис. 3. При выращивании пленок при высоких температурах ( $900^\circ\text{C}$ ) [9] либо при их последующем отжиге [10, 11] определяемая экспериментально критическая толщина хорошо совпадает с расчетной зависимостью (треугольники на рис. 3). Экспериментально определенная  $h_c$  в пленках, выращенных при более низких температурах, стабильно превышала расчетную, причем, чем ниже была температура роста, тем такое превышение было более существенным [12–14]. Наблюдалось увеличение  $h_c$  в 10 и более раз, что хорошо видно на рис. 3. После того, как факт существенного превышения критической толщины введения дислокаций несоответствия, рассчитанной по



**Рис. 3.** Критическая толщина пленок  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  в зависимости от состава  $x$ . Кривая — расчет по формуле (8). Точки — экспериментальные данные различных авторов для пленок, выращенных при различных температурах.

моделям Мэтьюза, стал общепринятым, появились толкования этого явления, основанные на предположении кинетической заторможенности зарождения и движения дислокаций сквозь пленку. Обсуждение этого вопроса будет продолжено в следующих разделах.

**2.3. Движение прорастающих дислокаций в напряженных пленках. Теория и эксперимент**

Основные положения теории распространения дислокаций в кристаллах подробно изложены в монографиях (см., например, [15]). Изучением движения дислокаций в пленках GeSi/Si занимались в последние 15 лет несколько групп исследователей: Халл и Бин с соавторами [16–19], Хоутон с соавторами [20, 21] и др. Они в первую очередь опирались на исследования, проведенные на объемных кристаллах германия и кремния [22–26]. Основной особенностью рассматриваемой проблемы является то, что дислокации находятся в двухосно сжатой пленке, напряжения в которой могут достигать больших величин (> 1 ГПа).

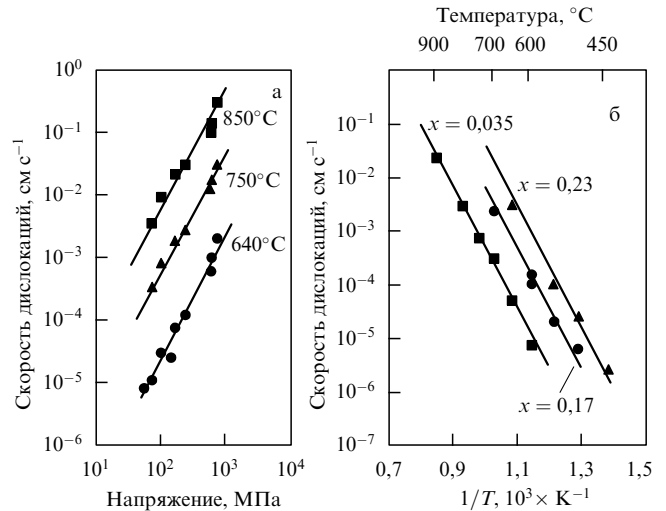
Согласно классическим представлениям [22], скорость движения дислокации может быть представлена в виде:

$$V_d = V_0 \tau_{\text{eff}}^m \exp\left(-\frac{E_v}{kT}\right), \tag{16}$$

где  $V_0$  — константа,  $E_v$  — энергия активации движения дислокации путем скольжения,  $\tau_{\text{eff}}$  — эффективное напряжение, действующее на дислокацию (14). Величина эффективного напряжения пропорциональна  $\varepsilon$  (а на начальной стадии релаксации, когда  $\varepsilon \sim f$ , она пропорциональна разнице параметров решеток Ge и Si) и возрастает с увеличением толщины пленки  $h$ . Таким образом, с помощью этих двух параметров —  $\varepsilon$  и  $h$  можно регулировать величину эффективного напряжения, определяющую скорость движения дислокации при конкретной температуре.

Хоутон [20] исследовал движение и зарождение дислокаций в напряженных пленках GeSi/Si(001) следующим образом. Выращивались пленки  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  при температурах роста 350–500 °С до толщин, превышающих  $h_c$ . Затем, после кратковременного изохронного отжига пленок при более высоких температурах, с помощью селективного травления в разбавленном травителе Шиммеля (4 части 48 %-ной кислоты HF на 5 частей 0,3М  $\text{CrO}_3$  в течение 30–60 с при 300 К [27, 28]) на их поверхности выявлялись следы ДН, которые и наблюдались в микроскопе с приставкой Номарского. Количество наблюдаемых следов принималось равным количеству возникших ДН, а их длина вдоль поверхности, деленная на время отжига, соответствовала удвоенной скорости разбега прорастающих ветвей.

В ранних исследованиях этой проблемы было показано, что скорости движения дислокаций в объемных кристаллах германия и кремния суперлинейны с ростом эффективного напряжения, а степень  $m$  в (16) меняется в пределах 1–1,5 [22]. На рисунке 4а из работы Хоутона [20] демонстрируется зависимость скорости скольжения ПД от величины эффективного напряжения. На основании этих данных величина  $m$  была оценена как  $2 \pm 0,1$ . Меняя температуру отжига, Хоутон смог оценить скорость разбега ПД в большом интервале температур, что позволило определить энергию активации движения дислокаций. На рисунке 4б представлены некоторые



**Рис. 4.** Скорость движения 60°-ных дислокаций в напряженных пленках Ge–Si в зависимости от величины напряжений (а) и обратной температуры (б) по данным Хоутона [20].

полученные им зависимости скорости от обратной температуры. Энергия активации  $E_v$ , найденная из наклона  $\ln V - 1/T$ , не зависела от доли Ge (в пределах до концентрации  $x = 0,23$ ) и величины эффективного напряжения  $\tau_{\text{eff}}$  и была оценена как  $E_v = (2,25 \pm 0,05)$  эВ.

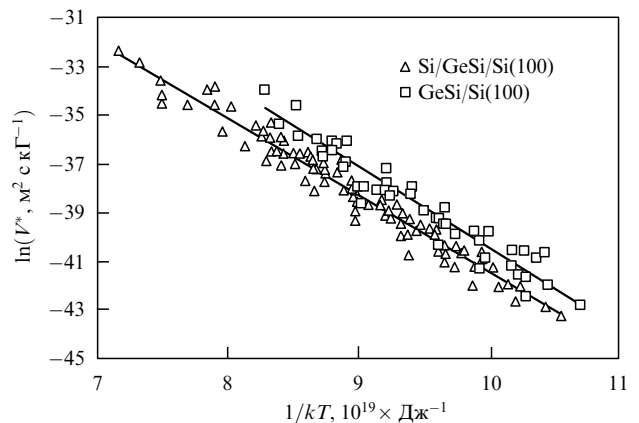
Другая группа исследователей (Халл и др. [17]) изначально предположила, что энергия активации движения дислокаций твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(100)$  должна зависеть от  $x$  и находиться в пределах между 2,2 и 1,6 эВ — энергиями активации для кремния и германия, соответственно, определенными ранее на объемных образцах. Тогда

$$E_v(x) = (2,2 - 0,6x) \text{ эВ} \tag{17}$$

и

$$V_d = V_0 \tau_{\text{eff}}^m \exp\left(-\frac{E_v - 0,6x}{kT}\right). \tag{18}$$

Измерения скорости движения дислокаций проводились непосредственно в просвечивающем электронном микроскопе (*in situ*, с записью на видеокамеру) и подробно описаны в [29]. На рисунке 5 приведены совокупные результаты измерений скорости движения ПД этими



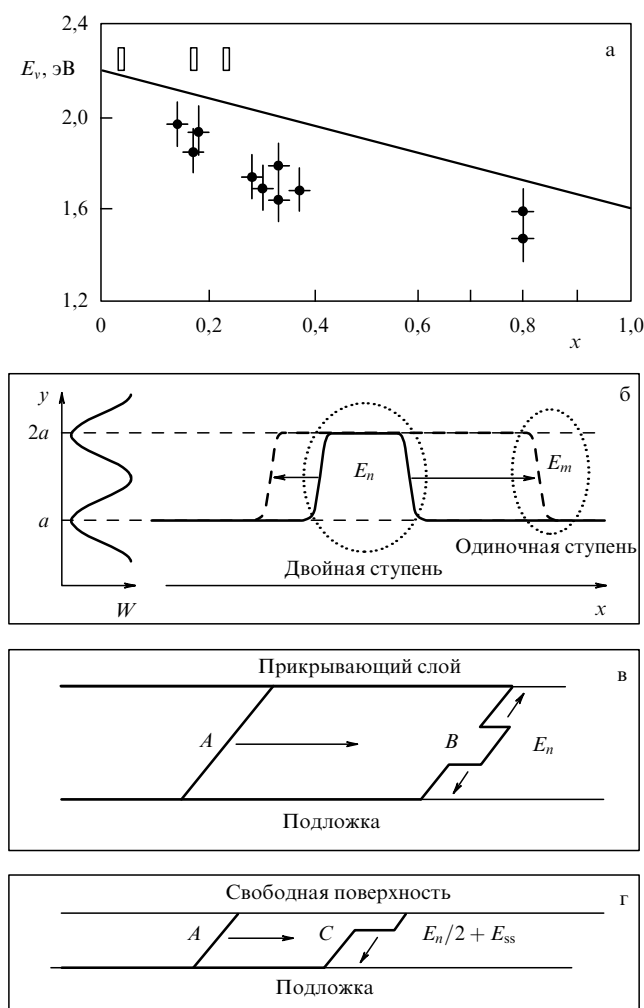
**Рис. 5.** Нормированные скорости скольжения дислокаций в ГС Ge–Si, измеренные в процессе отжига пленок непосредственно в электронном микроскопе по данным Халла и др. [19].

исследователями [19]. Для совмещения данных введена скорость  $V^*$ , нормированная по  $\tau_{\text{eff}}$  и  $x$ :

$$V^* = \frac{V_d}{\tau_{\text{eff}}} \exp\left(-\frac{0,6x}{kT}\right). \quad (19)$$

(Заметим в скобках, что авторы этих исследований хотя и признают отличие степени  $m$  в выражении (18) для скорости роста от единицы, но, тем не менее, нормируют скорость движения ПД по  $\tau_{\text{eff}}$  в первой степени, что может внести систематическую ошибку при определении энергий активации в пленках с большими значениями  $\tau_{\text{eff}}$ .)

Рисунок 6а суммирует измерения энергии активации ПД, выполненные Халлом с соавторами [17]. Там же представлены данные Хоутона, способ получения которых был описан выше. Видно, что наблюдается заметная



**Рис. 6.** Энергия активации движения дислокаций в ГС Ge–Si по данным Халла [17] (крестики) и Хоутона [20] (прямоугольники) (а). Схема, поясняющая движение дислокаций: (б) слева — потенциальный рельеф, показывающий две близлежащие энергетические долины для возможного местоположения дислокаций. Сплошная линия — дислокация. Пунктирными овалами отмечены образовавшаяся двойная ступень (энергия активации  $E_n$ ) и одна из движущихся по направлению стрелок одиночных ступеней (энергия активации  $E_m$ ); (в) перемещение дислокации путем образования двойной ступени; (г) перемещение дислокации путем зарождения одиночной ступени у поверхности тонкой пленки (энергия активации  $E_n/2 + E_{ss}$ ).

разница между данными этих двух групп исследователей. Тем не менее для дальнейших рассуждений можно считать, что энергия активации движения ПД в напряженных пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  на кремнии с  $x$  до 0,3 близка к 2 эВ.

Как известно, общепризнанной моделью движения дислокаций является модель, основанная на формировании двойных [15] и одинарных дислокационных ступеней (double kink and single kink model). По причине термических флуктуаций или действия напряжений двойная ступень (ДС) может зародиться на дислокационной линии (рис. 6б). После достижения критического размера ДС диссоциирует на две одинарные ступени (ОС), которые разбегаются в противоположных направлениях (рис. 6б), что в конечном счете приводит к переходу дислокационной линии в соседнюю долину энергетического рельефа. Предполагается, что такой механизм зарождения ДС с энергией активации  $E_n$ , а затем разбегающихся ОС с энергией активации  $E_m$  имеет место в массивных образцах и в захороненных пленках [30] (рис. 6в). Таким образом, ранее обсуждавшаяся энергия активации движения дислокации состоит из двух частей:  $E_v = E_n + E_m$ . Если пленка тонкая, возможно образование одиночной ступени на линии дислокации у поверхности, как показано на рис. 6г. В этом случае энергия активации образования ОС состоит из  $E_n/2$  и энергии ступени, возникающей на поверхности,  $E_{ss}$ . Так как последняя мала, то  $E_n/2 + E_{ss} < E_n$ . Именно большей вероятностью образования ОС в пленках с открытой поверхностью Халл и др. объясняют большую скорость движения ПД в пленках GeSi/Si по сравнению с Si/GeSi/Si (при прочих равных условиях), что наглядно демонстрирует рис. 5.

Все приведенные данные относятся к передвижению дислокаций скольжением, т.е. к наиболее распространенным в этой системе  $60^\circ$ -ным дислокациям, принимающим основное участие в пластической релаксации напряженных пленок GeSi на Si. Анализируя эти данные можно заметить, что скорости движения ПД в напряженных пленках при температурах выше  $450^\circ\text{C}$  (см., например, рис. 4) находятся в пределах  $10 - 100 \text{ nm s}^{-1}$ . Эти значения достаточно велики, чтобы движение дислокаций не могло быть лимитирующим фактором, тормозящим начало пластической релаксации в псевдоморфных пленках с толщинами того же порядка, находящихся в метастабильном состоянии. Остается предположить, что таким лимитирующим фактором является зарождение дислокаций несоответствия.

#### 2.4. Зарождение дислокаций несоответствия в напряженных пленках. Теория и эксперимент

Зарождение дислокационной петли в напряженной пленке аналогично зарождению новой фазы (например, появлению зародыша твердой фазы в переохлажденной жидкости) и требует затраты какого-то количества энергии. Энергия дислокационной петли радиуса  $R$  согласно Мэттьюзу [31] равна

$$W_l = Gb^2R \frac{2-v}{4(1-v)} \left( \ln \frac{\beta R}{b} + 1 \right). \quad (20)$$

Выигрыш за счет уменьшения напряжений при образовании такой петли внутри напряженной пленки равен

$$W_s = 2\pi R^2 S \frac{G(1+v)}{1-v} bf. \quad (21)$$

Видно, что дополнительная энергия появившейся дислокационной петли пропорциональна радиусу, а уменьшение энергии напряжений при этом — квадрату радиуса дислокационной петли. Соответственно, алгебраическая сумма этих энергий в зависимости от  $R$  должна иметь максимум, как показано на рис. 7а. Этот максимум является тем энергетическим барьером, преодоление которого возможно при флуктуационном достижении дислокационной петлей критического радиуса  $R_c$  (рис. 7а).

На рисунке 7а изображены зависимости  $W_s$  и  $W_l$ , а также их суммы  $W_s + W_l$  от радиуса дислокационной петли для доли Ge в пленке, равной 0,3. Видно, что расчетный энергетический барьер образования такой петли  $W_c$  составляет около 250 эВ и существенно превышает величину  $\sim 2$  эВ [32], необходимую для зарождения ДН с наблюдаемой плотностью (порядка нескольких единиц на 1 мкм длины). Более точные расчеты с учетом типа дислокации, энергии ступени, образующейся на поверхности пленки при прохождении дислокационной полупетли через ее объем, учет различных значений параметра ядра дислокации  $\beta$  [33, 34] дают несколько меньшие значения  $W_c$ , которые, тем не менее, близки или

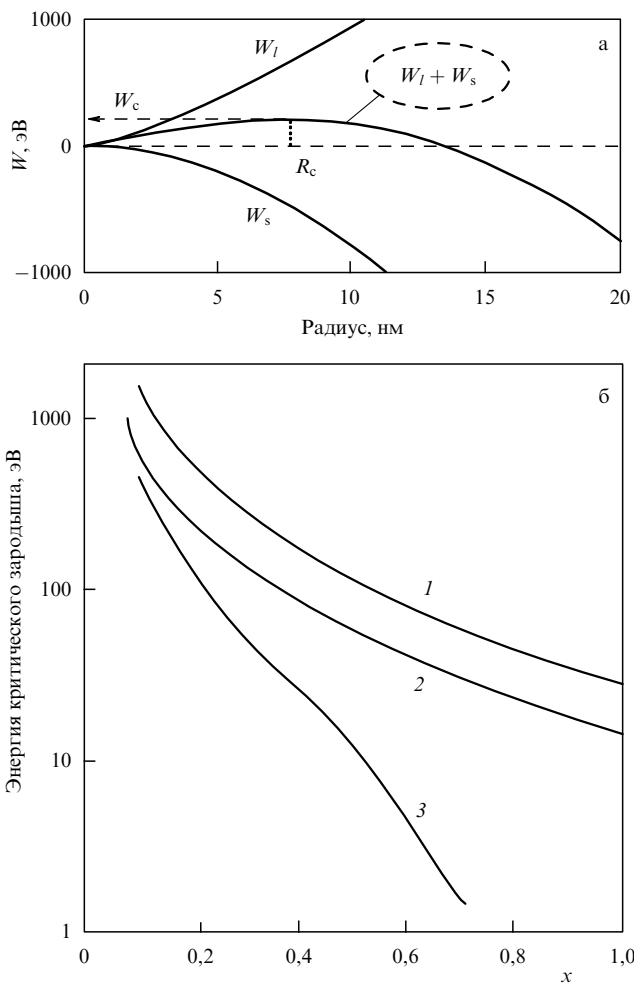


Рис. 7. (а) Пример расчета для определения критического радиуса дислокационной петли и энергии ее образования для  $\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}/\text{Si}(001)$ . (б) Величина барьера для появления дислокационной петли критического радиуса по расчетам Халла и Бина [34] (1, 3), а также Иглшема и др. [33] (2) для 60°-ных (1, 2) и 90°-ных (3) дислокаций.

превышают 100 эВ для концентрации Ge  $x \leq 0,3$  в твердом растворе GeSi, что хорошо видно на рис. 7б. На основе таких расчетов был сделан вывод о невозможности гомогенного зарождения ДН в псевдоморфных пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  с  $x$  до 0,5 [33]. Тем не менее ДН в таких гетероструктурах возникают, и далее мы подробно обсудим имеющиеся на сегодняшний день модели и экспериментальные наблюдения начальных стадий релаксации напряженных пленок, а также возможные источники ДН.

Авторы работ [33, 34], из которых взяты зависимости рис. 7б, называют энергетический барьер, необходимый для образования дислокационной петли критического радиуса, энергией активации или активационным барьером. Этот барьер, как видно из рис. 7б, зависит от  $x$ , т.е. от величины напряжений  $\varepsilon$ . Муни с соавторами [35], рассчитав величину этой энергии по схеме, приведенной в начале этого раздела, дают следующее выражение:  $W_c = K/\varepsilon$  (здесь  $K$  — константа), что качественно соответствует ходу зависимостей на рис. 7б. По этому выражению энергия активации зарождения дислокационной петли обратно пропорциональна величине напряжений в пленке. Между тем, общепринятое физическое понимание энергии активации какого-либо процесса сводится к введению некоей минимальной энергии, характеризующей активационный характер процесса и определяемой обычно из наклона температурной зависимости некоторого надежно измеряемого параметра, построенной в аррениусовских координатах.

Хоутон в той же обобщающей работе [20] подошел к зарождению ДН с иных позиций. В предыдущем разделе был кратко указан использованный им метод оценки скорости зарождения. После построения измеренных значений скорости зарождения ДН в координатах  $\ln(dN/dt) - 1/T$  были получены зависимости, изображенные на рис. 8. Видно, что наклон зависимостей практически одинаков и извлекаемая из этого наклона

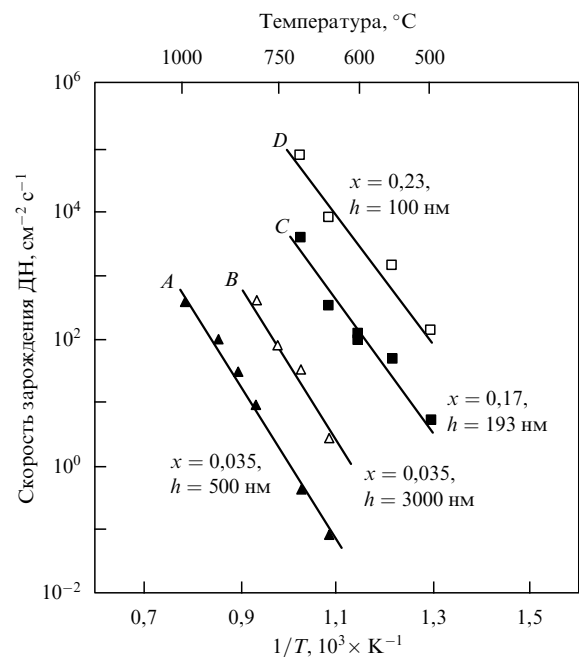


Рис. 8. Скорость зарождения ДН в зависимости от обратной температуры по данным Хоутона [20].

энергия активации зарождения  $W_n$  равна  $2,5 \pm 0,5$  эВ и не зависит от  $x$  и величины  $\tau_{\text{eff}}$ . На основе полученных результатов автором было предложено полуэмпирическое выражение для скорости зарождения ДН:

$$\frac{dN(t)}{dt} = N_0 \tau_{\text{eff}}^n \exp\left(-\frac{W_n}{kT}\right), \quad (22)$$

формально аналогичное выражению (16) для скорости движения дислокаций в напряженных пленках. Здесь  $\tau_{\text{eff}}$  — то же эффективное напряжение, что и в (16),  $N_0$  — подгоночный параметр, по мнению автора характеризующий начальную плотность точек наиболее вероятного зарождения ДН, разную для разных подложек Si. Определенный на основе экспериментальных данных показатель степени  $n$  равен 2,5.

Таким образом, по одной модели энергетический барьер для зарождения ДН зависит от рассогласования параметров решеток пленки и подложки как  $1/\varepsilon$ , где  $\varepsilon \sim f$ , а по другой — энергия активации зарождения ДН является величиной, не зависящей от  $x$  и близкой к 2,5 эВ. Это противоречие можно преодолеть, предположив существование некоторой структурной конструкции из минимально возможного количества атомов, представляющей дислокационный зародыш, определенный для каждого типа дислокации в конкретном материале. Для создания такого зародыша в первоначально структурно совершенной кристаллической матрице и необходимо преодолеть тот энергетический барьер, который так подробно экспериментально определил Хоутон [20] для составов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  с  $x$  до  $\sim 0,3$ . Остается пока без ответа вопрос о том, каков физический механизм влияния толщины пленки на скорость зарождения ДН. Как видно из выражения (22), скорость зарождения ДН,  $dN/dT$ , пропорциональна  $\tau_{\text{eff}}$  в степени 2,5, а  $\tau_{\text{eff}} \sim h$  (формула (14)). Возможные варианты: а) центры зарождения ДН расположены в первом приближении однородно по объему пленки, и с ростом ее толщины количество центров растет (см., например, [33]); б) зародившаяся у границы раздела (где, предположительно, сосредоточена основная часть центров) или у поверхности петля или полупетля ДН (тот самый минимально возможный зародыш, для возникновения которого необходимо преодолеть энергетический барьер  $W_n$ ) флуктуационным путем пересекает всю толщину пленки, после чего начинает работать сила  $F_c$ , пропорциональная толщине пленки (9), которая "растаскивает" прорастающие ветви в противоположных направлениях (либо дислокационная петля аннигилирует, если толщина пленки мала).

Многочисленные практические наблюдения за пластической релаксацией напряженных пленок GeSi, тем не менее, не привели к четкому пониманию причин и источников ДН. Бинланд [36] обращает внимание на две волны пластической релаксации напряженного слоя: первая при малых толщинах слоя обусловлена первичными источниками, вторая развивается на основе вторичных источников, связанных с различными вариантами мультипликации дислокаций. Собранные по литературным данным примеры моделей первичных источников зарождения ДН приведены Вдовиным в [37]. Это а) загиб дислокаций, прорастающих из подложки, б) зарождение дислокационных полупетель с поверхности слоя, в) различные внутренние несовершенства,

являющиеся источниками гетерогенного зарождения ДН: когерентные частицы на поверхности подложки типа  $\beta$ -SiC, которые могут стать источником ПД, а затем и ДН [27], и г) обнаруженные в объеме GeSi так называемые ромбические образования [33]. Причем попытки связать эти образования с какими-либо неоднородностями, являющимися первопричиной образования ромбических источников, не были успешными. Перович и Хоутон [21] предлагают в качестве внутреннего источника наличие микронеоднородностей состава твердого раствора GeSi, неких кластеров, генерирующих дислокационную петлю. Халл и др. [34] указывают на возможную способность твердого раствора GeSi модифицировать локальную структуру в области дислокационного ядра при смещении атомов Ge и Si, что может привести к существенному понижению напряжений в этом месте и уменьшить энергию деформированного ядра. Последнее, в свою очередь, понизит энергию образования дислокационной петли.

В случае роста на подложках кремния источником первого типа (изгиб прорастающих из подложки дислокаций) можно пренебречь вследствие высокого совершенства таких подложек:  $N_d < 10^2 \text{ см}^{-2}$ . Зарождение дислокационных полупетель с поверхности напряженного слоя является наиболее популярным механизмом, к которому обращаются исследователи в последние 20 лет (см., например, обзоры Фицджеральда [6] или Джейн и др. [38]). Однако уже в конце 80-х годов в ряде работ было показано, что зарождение таких полупетель маловероятно на гладкой поверхности растущей пленки вследствие большой величины энергетического барьера, составляющего десятки эВ [1, 33], о чем говорилось выше.

Поверхность напряженного слоя может становиться шероховатой в процессе роста в соответствии с действием механизма упругой релаксации, разработанного, в основном, в связи с новым направлением в гетероэпитаксии сильно напряженных структур — наноостровков Ge на Si и InAs на GaAs [39, 40]. На такой поверхности вследствие геометрического усиления напряжений на неоднородностях, барьер для образования ДН снижается. Показано, что такой механизм действительно может быть ответственным за введение ДН с поверхности, однако его работоспособность экспериментально подтверждается в системах со средними величинами рассогласования параметров решеток  $\sim 1\%$  и более [41, 42]. Область деформаций, при которых растущая поверхность теряет морфологическую устойчивость еще до начала пластической релаксации, уменьшается при повышении температуры, благодаря увеличению поверхностной диффузии адатомов. Соответственно, различные приемы, способствующие двумерному росту, такие как низкие температуры и малые скорости осаждения совместно с контролем *in situ* за планарностью поверхности, позволяют отодвинуть границу потери ее морфологической устойчивости в область более напряженных составов твердых растворов GeSi и исключить влияние поверхности на пластическую релаксацию пленок. Тем не менее дислокации несоответствия столь же неотвратимо появляются при росте и отжиге многослойных ГС и так называемых захороненных пленок GeSi — напряженных пленок, покрытых прикрывающим слоем Si. В этом случае модель возникновения шероховатости поверхности напряженного слоя не может работать, так как



прикрывающий слой не напряжен. В многослойных напряженных гетеросистемах, подвергнутых отжигу для наблюдения релаксационных процессов, ДН наблюдаются в первую очередь на границе с подложкой. Таким образом, можно прийти к заключению, что роль поверхности в зарождении ДН в пленках со средними и малыми рассогласованиями параметров решеток (~ 1 % и менее) в последние годы преувеличивалась. Тем не менее нельзя признать твердо установленным, что описанные выше внутренние источники зарождения ДН играют основную роль на начальных этапах пластической релаксации твердых растворов GeSi.

**2.5. Пластическая релаксация пленок**

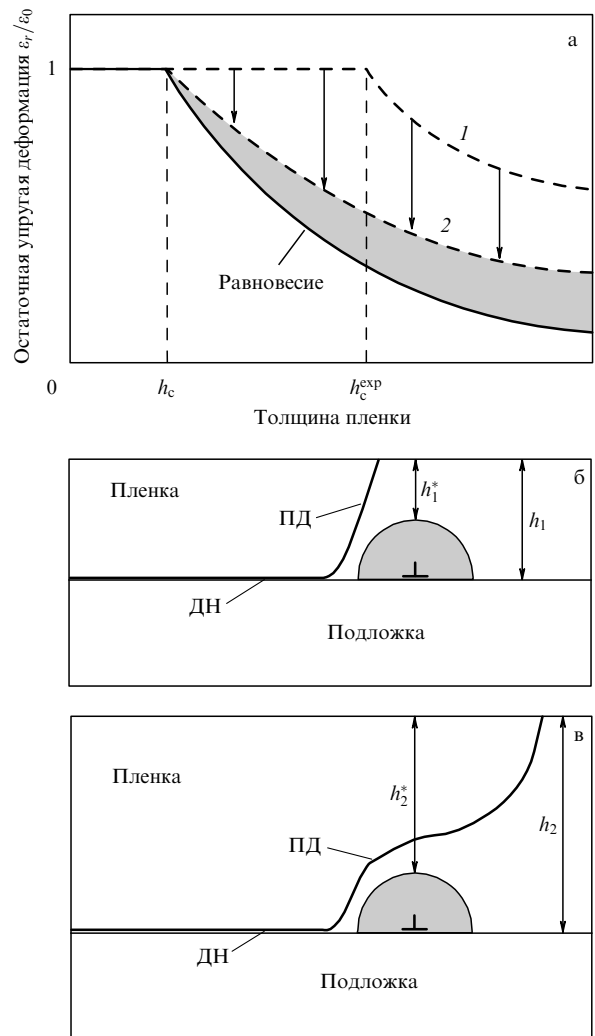
**2.5.1. Классический подход и экспериментальные отклонения.** В квазиравновесных условиях и при отсутствии барьеров, как только псевдоморфная пленка превысит  $h_c$ , должно начаться образование ДН. Напряжения в пленке уменьшаются, и критическая толщина возрастает. Эта новая критическая толщина вновь должна быть превышена, чтобы образовалась следующая порция ДН. Таким образом, пленка плавно пластически релаксирует, по мере того как ее толщина возрастает. Остаточные упругие деформации можно выразить как

$$\varepsilon(t) = f - b_{\text{eff}}\rho(t), \tag{23}$$

где  $b_{\text{eff}}$  — проекция вектора Бюргерса на нормаль в плоскости границы раздела, перпендикулярную линии пересечения плоскости скольжения и плоскости границы раздела,  $\rho(t)$  — линейная плотность дислокаций и, согласно [43],

$$\varepsilon(t) = f \frac{h_c}{h(t)} \text{ при } h \geq h_c. \tag{24}$$

На рисунке 9а такая зависимость изображена сплошной кривой. Как отмечалось выше, расчетная критическая толщина во многих случаях превышает (см. рис. 3). Можно ввести две критические толщины:  $h_c$  — теоретическая, или равновесная, и  $h_c^{\text{exp}}$  — экспериментальная. Их систематическое различие не свидетельствует о том, что расчеты Мэтьюза неверны — просто в выращивании полупроводниковых пленок барьеры различного рода играют существенную роль, тормозя введение ДН. Специальные исследования, предпринятые Хоутоном с соавторами [10] для твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  с  $x = 1 - 15\%$ , показали "блестящее", как они пишут, совпадение экспериментальных результатов с расчетами по Мэтьюзу. Это также видно на рис. 3 для пленок, выращенных или отожженных при высоких температурах. Равновесные модели Мэтьюза для определения критической толщины введения ДН определяют некоторый фундаментальный параметр  $h_c$ , который зависит только от конкретной пары материалов, образующих ГС, и величины рассогласования, а также от типа кристаллографической плоскости границы раздела. Этот параметр используется исследователями как некая граница по толщинам, ниже которой псевдоморфная пленка является стабильной, не подверженной введению ДН, а выше — находится в метастабильном состоянии. Тенденция псевдоморфных пленок, находящихся в этой области, к появлению ДН и их распространению, т.е. начало и темп пластической релаксации зависят от двух



**Рис. 9.** Схематические зависимости пластической релаксации напряженных пленок с ростом их толщины (а) и схемы стопорения движущейся ПД, встречающей на своем пути ортогонально расположенную ДН (б), (в).

новых параметров: температуры и времени нахождения ГС при этой температуре (рис. 9а, зависимость 1). Соответственно,  $h_c^{\text{exp}}$  для конкретной ГС является плавающей величиной, зависящей от этих новых параметров. Чтобы убрать кинетическую заторможенность пластической релаксации псевдоморфных пленок, необходимо либо растить пленки с малыми скоростями (что не всегда дает положительный результат), либо после роста отжигать их при повышенных температурах. Тем не менее, как свидетельствуют многочисленные литературные данные, равновесная экспериментальная зависимость пластической релаксации ГС, приближаясь к теоретической, не совпадает с ней (рис. 9а, зависимость 2).

**2.5.2. Модели кинетической заторможенности пластической релаксации.** Мэтьюз с соавторами [44] были первыми, кто предложил ввести скоростную зависимость силы трения, действующей на движущуюся дислокацию, в модель силового баланса. Додсон и Цао [45] расширили идеи Мэтьюза, введя скоростную зависимость мультипликации дислокаций. Более детально идея дополни-

тельных сил, действующих на дислокацию в напряженной пленке, была разработана Фоксом и Джессером [46, 47].

Вернемся к разделу 1.3 и выражению (14), из которого следует, что скорость движения дислокации пропорциональна  $\tau_{\text{eff}}$  в степени  $m$  — так называемому эффективному напряжению. Равенство  $\tau_{\text{eff}}$  нулю соответствует условиям, имеющимся в пленке, достигшей критической величины. Для пленки, находящейся в метастабильной области ( $h > h_c$ ),  $\tau_{\text{eff}} > 0$  и, в предположении (для простоты)  $m = 1$ , комбинируя выражения (14) и (16) и умножая их на  $bh$ , получаем:

$$S \frac{2G(1+\nu)}{1-\nu} \varepsilon(bh) = \frac{Gb(1-\nu \cos^2 \alpha) \cos \phi}{4\pi h(1-\nu)} \times \\ \times \left( \ln \frac{\beta h}{b} + 1 \right) bh + \frac{V_d}{V_0} \exp\left(\frac{E_v}{kT}\right) bh, \quad (25)$$

или  $F_c = F_l + F_v$ , где  $F_v$  — сила трения (по Фоксу и Джессеру [46]  $F_v = BhV_d \exp(Q_i/kT)$ , где  $B$  — константа), связанная с энергией диссипативных процессов, сопровождающих движение дислокации.

Скорости движения дислокаций, о которых шла речь в разделе 1.3, определялись на начальных стадиях релаксации пленок, и взаимодействием дислокаций справедливо пренебрегали. Соответственно, энергия активации движения дислокаций, вычисленная Хоутоном [20] и Халлом и др. [17], находилась в пределах 1,5–2,2 эВ. Определенные экспериментально скорости движения дислокаций были настолько велики, что позволяли сделать предположение об отсутствии лимитирования начальной стадии пластической релаксации движением дислокаций в псевдоморфных пленках GeSi/Si при обычно используемых температурах роста 400–600 °С, и, тем более, при более высоких температурах отжига. Однако в процессе более глубокой релаксации пленок (вторая волна по Бинланду [36]) замедление движения ПД и их стопорение могут происходить из-за их взаимодействия. С ростом доли пластической релаксации пленки фиксированной толщины уменьшается движущая сила релаксации  $\tau_{\text{eff}}$ , и скорость движения ПД снижается. Последняя снижается также и из-за того, что активационный барьер движения дислокаций повышается и его можно назвать эффективным (в работах Фокса и Джессера —  $Q_i$ ); по-видимому, этот барьер может существенно превышать  $E_v$  — величину, определенную экспериментально.

Халл и Бин [48] конкретизируют механизм торможения ПД в пленках, для которых в границе раздела с подложкой сетка ДН уже образовалась. На рисунке 9б, в приведена схема, поясняющая взаимодействие двух дислокаций: ветви ПД, распространяющейся вправо, и лежащей на ее пути, ортогональной к ней ДН. Последняя создает поле деформаций (затемненный полукруг), препятствующее движению ПД. По Халлу и Бину [48] аналог выражения (25) выглядит как  $F_c = F_l + F_{\text{др}}$ , где  $F_{\text{др}}$  — это тормозящая сила, обусловленная взаимодействием движущейся ветви ПД с ортогональной сеткой ДН.

**2.5.3. Модели силового баланса с участием дополнительных тормозящих сил.** Несколько иную интерпретацию торможения ПД на ортогональной сетке ДН дают Гиллард, Никс и Фройнд (ГНФ) [49]. На рисунке 9б показано, что эффективная толщина  $h_1^*$  пленки над

лежащей в границе раздела ДН меньше, чем полная толщина пленки. Величина  $h_1^*$  может оказаться меньше критической, и тогда произойдет стопорение ПД. Как только пленка становится толще (рис. 9в), эффективная толщина возрастает ( $h_2^*$ ) и ПД, изгибаясь, продолжает движение. Таким образом, равновесная плотность ДН, при которой эффективное напряжение, заставляющее двигаться ПД, становится равным нулю (см. формулу (15)), меньше для пленки с толщиной  $h$  из-за того, что  $h^* < h$ . Влияние этого эффекта должно быть более сильным для пленок с большим отличием параметра решетки от подложки (и, следовательно, более тонких в момент создания сетки ДН), что и наблюдается на практике (см., например, [48]).

Один из авторов модели ГНФ (Фройнд) показал [50], что для ПД, скользящих вдоль наклонных плоскостей и взаимодействующих с прямой 60°-ной ДН, из восьми комбинаций векторов Бюргера независимыми являются четыре. Соответственно, рассчитаны 4 варианта зависимостей остаточной упругой деформации от толщины пленки. Авторы ГНФ вводят так называемый блокирующий потенциал ортогональной сетки ДН, поле напряжений которого рассчитывается с учетом краевой и винтовой компонент 60°-ных ДН. На рисунке 10 представлена зависимость величины остаточной упругой релаксации в пленке Ge<sub>0,3</sub>Si<sub>0,7</sub>/Si(001) от ее толщины, рассчитанная по равновесной модели Ху [43] (см. формулу (23)). Там же приведены теоретические зависимости модели ГНФ для  $x = 0,35$  (заштрихованная область представляет область расположения зависимостей для четырех комбинаций векторов Бюргера). Экспериментальные точки взяты также из работы Гилларда и др. [49] и из [14]. Видно, что в целом расчетные зависимости модели ГНФ близки к экспериментальным данным, однако, последние находятся систематически выше. Исследователи отмечают, что существуют дополнительные неучтенные факторы, приводящие к стопоре-

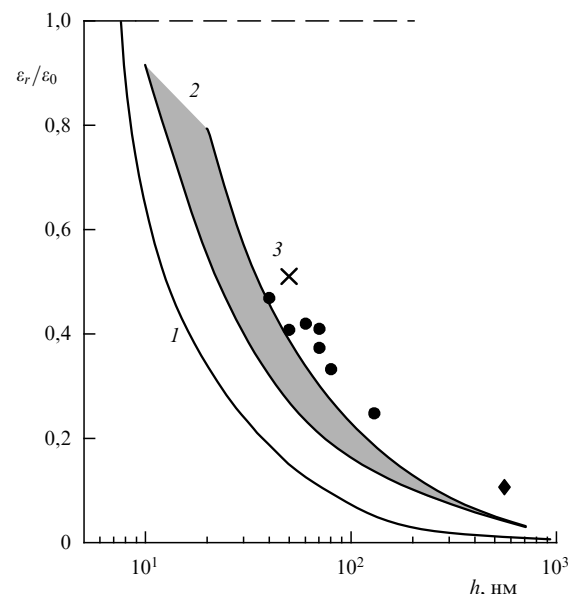


Рис. 10. Остаточная упругая деформация в пленках Ge–Si в зависимости от их толщины. Расчет: классический вариант для  $x = 0,3$  по Ху [43] (1); Гиллард и др. [49] для  $x = 0,35$  (2); Фишер и др. для  $x = 0,3$  [52] (3). Экспериментальные точки из [49] (кружки) и [14] (ромбик).

нию прорастающих ветвей ДН и тем самым дополнительно ограничивающие степень пластической релаксации в напряженных пленках (например, стопорение на поверхностных несовершенствах [51]).

Фишер [7, 52] подошел к той же проблеме со следующих позиций. Скальвающее напряжение, действующее на 60°-ную ПД в процессе пластической релаксации пленки, выражается как

$$\tau(f - \delta) = S \frac{2G(1 + \nu)}{(1 - \nu)} \left( f - \frac{b}{2p} \right), \quad (26)$$

где  $b/2p = \delta$  — фактор, уменьшающий величину начальной упругой деформации из-за пластической релаксации,  $p$  — среднее расстояние между дислокациями. (Из выражения  $f = b/2p$  определяется то минимальное расстояние между ДН, которое соответствует полной пластической релаксации пленки; например,  $p = 16$  нм для  $x = 0,3$ . См. также (4) и (23).) В качестве дополнительного противодействующего фактора Фишер вводит в рассмотрение внутреннее напряжение, образованное ДН, лежащими в границе раздела. Скальвающее внутреннее напряжение, пересчитанное на плоскость скольжения для 60°-ных ПД со средним расстоянием  $p$  между ними, записывается следующим образом:

$$\tau_{MD} = \frac{Gb(1 - \nu/4)}{2\pi p(1 - \nu)} \ln \frac{p}{2b}. \quad (27)$$

С учетом этой противодействующей добавки к выражению (26) суммарное скальвающее напряжение  $\tau^* = \tau(f - \delta) - \tau_{MD}$  равно

$$\tau^* = S \frac{2G(1 + \nu)}{1 - \nu} \left[ f - \frac{b}{2p} (1 - A) \right], \quad (28)$$

где

$$A = \frac{1 - \nu/4}{2\pi \cos \lambda(1 + \nu)} \ln \frac{p}{2b} \quad (29)$$

— фактор, дополнительно уменьшающий скальвающее напряжение в зависимости от текущей плотности ДН. В результате такого упрочнения слой GeSi/Si после проведения термического процесса пластической релаксации имеет остаточные упругие деформации, и это состояние является стабильным. На рисунке 10 крестиком обозначена расчетная точка такого стабильного состояния пленки  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  толщиной 50 нм с  $x = 0,3$  [52].

## 2.6. Взаимодействие дислокаций, мультипликация.

### Вторичные источники дислокаций несоответствия

Дислокации несоответствия, однажды возникнув, могут размножаться путем взаимодействия. Вдовин [37] рассмотрел основные вторичные источники, обусловленные взаимодействием имеющихся дислокаций в напряженной пленке. Наиболее популярными считаются два из них: источник на основе механизма, предложенного Хагеном и Штрунком [53], и источник Франка–Рида [15]. Механизм Хагена–Штрунка может работать в тонких пленках, так как в этой схеме предполагается выход ветвей расщепившейся ДН на поверхность. Конфигурация дислокаций, соответствующая этому механизму, наблюдалась на практике в пленках GeSi/Si(001) [37, 54]. Однако Иглшем и др. [33] подвергают сомнению действенность механизма Хагена–Штрунка, полагая, что подобная конфигурация дислокаций может соответ-

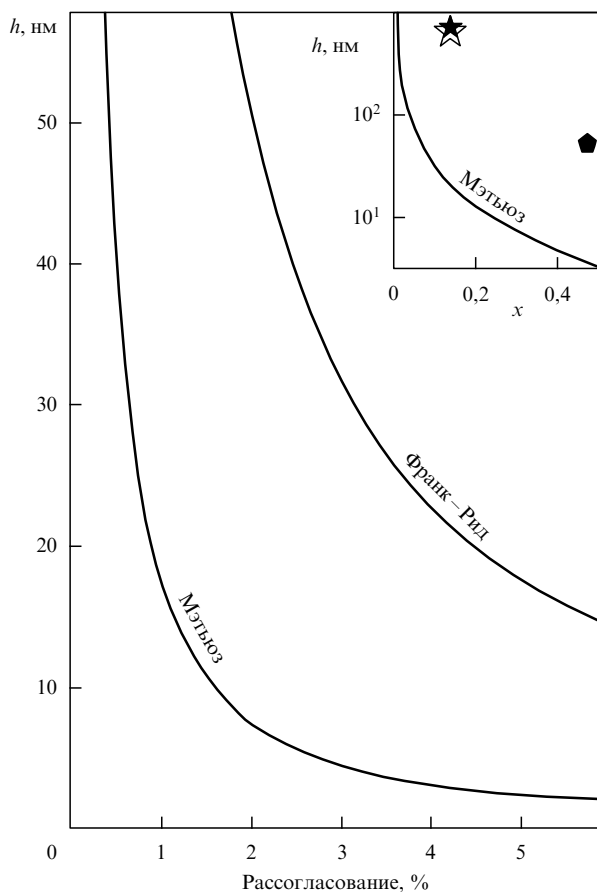
ствовать и другим механизмам размножения дислокаций. Вдовин [55] считает, что механизм Хагена–Штрунка наблюдается, в основном, в тонких напряженных пленках с небольшой разницей параметров решеток пленки и подложки.

Напротив, для того, чтобы работал источник Франка–Рида, необходима толщина пленки, существенно превышающая критическую [56]. Формирование новой дислокационной петли связано с возникновением закрепления ПД внутри напряженной пленки. Легоус и др. посвятили ряд работ [35, 57, 58] изучению источника в напряженных пленках GeSi/Si(001), работающего на пересекающихся плоскостях скольжения (111), который они назвали модифицированным источником Франка–Рида (MFR). Характерной особенностью такого механизма считается глубокое проникновение дислокаций в подложку.

Капано [59] вслед за Иглшемом [33] подвергает сомнению действенность механизма Хагена–Штрунка и предлагает свой вариант размножения ДН, приводящий к тому же видимому результату — наблюдаемым пучкам 60°-ных ДН с одним и тем же вектором Бюргерса. Предлагаемый механизм постулирует возникновение последовательных источников типа Франка–Рида при движении прорастающей дислокации. Автор [59] подтверждает этот механизм примерами на основе экспериментальных данных. Квазипериодическое стопорение движущейся ПД нельзя объяснить наличием каких-либо несовершенств на ее пути, и автор объясняет его "пульсациями" ПД, а именно, квазирегулярными сжатиями диссоциированной движущейся ПД.

Как отмечает Бинланд [56], для работы вторичных источников ДН необходима большая толщина пленок. Он вводит новую критическую толщину, по достижении которой в напряженной пленке становится возможным запуск вторичных источников. Для примера на рис. 11 показана рассчитанная Бинландом зависимость критической толщины, необходимой для начала работы источника Франка–Рида, от величины рассогласования параметров решеток. Видно, что эта новая критическая толщина существенно превышает  $h_c$ , рассчитанную по Мэтьюзу для начала введения ДН. На вставке рис. 11 приведены экспериментальные данные Капано [59] и Таппена с соавторами [60], оценивающие толщины, по достижении которых становится наблюдаемой мультипликация дислокаций в пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  с  $x = 0,13$ . Видно, что эти толщины на порядок превышают  $h_c$ . Таким образом, пластическая релаксация напряженных пленок происходит в два этапа: сначала реализуются имеющиеся первичные источники ДН. Можно предположить, что чем чище и совершеннее псевдоморфная пленка, тем этих источников меньше. Длительный отжиг таких тонких пленок, находящихся в метастабильном состоянии, но не превышающих по толщине порог запуска вторичных источников, не приносит желаемых результатов, имеющих целью глубокую пластическую релаксацию. И только по достижении определенной толщины растущей пленки появляется возможность размножения ДН и дальнейшей пластической релаксации.

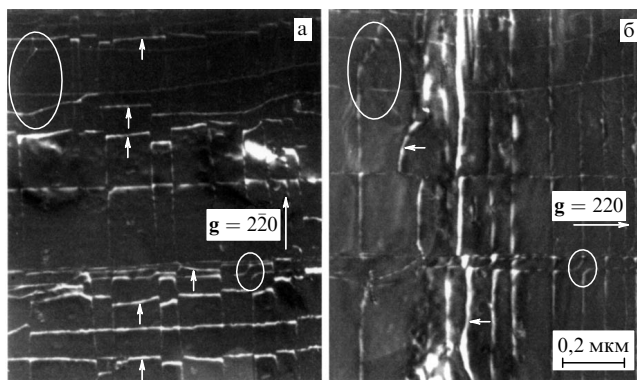
Еще одна особенность пластической релаксации пленок GeSi/Si связана с двумя типами ДН, наиболее распространенными в этом материале: 60°-ными и 90°-ными дислокациями. Как ранее отмечалось, 90°-ные



**Рис. 11.** Расчетная критическая толщина начала действия источника Франка – Рида по Бинланду [56] в сравнении с расчетной критической толщиной введения ДН по Мэтьюзу в зависимости от величины рассогласования параметров решеток пленки и подложки. На вставке: критическая толщина как функция  $x$  для твердых растворов  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ; пятиугольник — расчетная точка, снятая с основной зависимости толщины ГС, при которой начинает работать источник Франка – Рида, звездочки — экспериментальные точки из работ Капано [59] и Таппена [60], соответствующие, по данным авторов, началу мультипликации ДН в твердом растворе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  с  $x = 0,18$ .

ДН энергетически более выгодны по сравнению с  $60^\circ$ -ными, однако они являются "сидячими". Поэтому их вхождение в напряженную пленку существенно затруднено. При увеличении  $x$  и при длительном отжиге пленок доля  $90^\circ$ -ных ДН в них возрастает [61]. Выявление типа ДН обычно осуществляется в просвечивающем электронном микроскопе (ТЕМ) путем двойной съемки одного и того же участка. Если вектор дифракции  $\mathbf{g}$  оказывается направленным параллельно линии краевой дислокации, т.е. перпендикулярно ее вектору Бюргерса, то такая дислокация не видна на ТЕМ-изображении.

На рисунке 12 приведен пример дислокационной структуры пленки  $\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}/\text{Si}(001)$ , отожженной при  $800^\circ\text{C}$ . Два темнопольных изображения одного и того же участка (рис. 12а и рис. 12б, соответственно), полученные в условиях двухволновой дифракции от взаимно перпендикулярных семейств плоскостей  $\{220\}$ , иллюстрируют полное погасание чисто краевых ДН Ломера при выполнении условия  $\mathbf{g} \times \mathbf{b} = 0$ . На комплементарных частях рис. 12 такие дислокации указаны короткими стрелками.



**Рис. 12.** Пример идентификации  $90^\circ$ -ных дислокаций несоответствия. Овалы — выделенные места для определения идентичности мест съемки. Фотографии предоставлены А. К. Гутаковским.

Существует несколько моделей, объясняющих появление  $90^\circ$ -ных ДН в релаксированных пленках. При больших рассогласованиях, вплоть до  $x = 1$ , напряженная пленка на начальной стадии роста трансформируется в островковую, и большая доля  $90^\circ$ -ных ДН, доходящая до 100 %, объясняется их введением в края островков. Однако этот случай не является репрезентативным при выращивании напряженных пленок твердых растворов  $\text{GeSi}/\text{Si}$ , так как в технологии наращивания методом МЛЭ давно прослеживается тенденция к планаризации растущей поверхности (низкие температуры и скорости роста, использование поверхностно-активного вещества (ПАВ), например, сурьмы [62]). Тем не менее  $90^\circ$ -ные ДН наблюдаются во всем спектре составов пленок  $\text{GeSi}/\text{Si}$ . Согласно работе Иглшема [33] и более подробной работе Вдовина [63], образование L-дислокаций может происходить путем взаимодействия близлежащих параллельных  $60^\circ$ -ных ДН с соответствующими векторами Бюргерса в соответствии с реакцией

$$a/2[101] + a/2[01\bar{1}] = a/2[110]. \quad (30)$$

При этом близлежащие  $60^\circ$ -ные ДН или их отдельные ветви должны либо подняться в пленку, либо опуститься в подложку по наклонным плоскостям скольжения до их слияния. Такие конфигурации наблюдались экспериментально [63]. Гослинг [64] теоретически показывает, что акт зарождения петли с  $60^\circ$ -ной дислокацией на границе раздела в области уже существующей  $60^\circ$ -ной ДН (с последующим превращением в ломеровскую ДН) имеет существенно меньший энергетический барьер, чем при зарождении одиночной петли. Наконец, Квам и др. [1] предлагают как вариант зарождение комплементарной  $60^\circ$ -ной дислокации на поверхности тонкого слоя под воздействием поля напряжений уже существующей в границе раздела  $60^\circ$ -ной ДН.

## 2.7. Захороненные слои и многослойные гетероструктуры.

### Особенности пластической релаксации

Наряду с однослойными напряженными ГС все более широкое распространение получают так называемые напряженные сверхрешетки, состоящие из нескольких (нескольких десятков) слоев напряженного твердого раствора  $\text{GeSi}$ , разделенных барьерными слоями  $\text{Si}$ .

Барьерный слой играет двойную роль. В процессе роста он выглаживает поверхность ГС после осаждения каждого напряженного слоя [65]. Основная же его структурная роль — это уменьшение средней деформации ГС. Появление дополнительных параметров многослойной ГС, таких как толщина барьерного слоя  $h_b$ , величина деформаций в нем  $\varepsilon_b$ , количество пар слоев  $N$ , а также толщина  $h_{cap}$  верхнего прикрывающего слоя (ПС) привело к увеличению степеней свободы, способствующих большему разнообразию свойств и характера релаксации гетероструктур. С другой стороны, это усложнило исследование и описание возможных путей пластической релаксации таких ГС.

Особым случаем напряженных многослойных гетероструктур являются так называемые компенсированные сверхрешетки, в которых барьерный слой также напряжен, но знак напряжений противоположен. В этом случае при тщательном подборе толщин барьерных слоев и величины напряжений в них средняя деформация такой ГС может быть близка к нулю, что позволяет выращивать подобные многослойные ГС с большим количеством пар слоев.

Средняя по ГС деформация (net strain) в общем случае записывается следующим образом:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{N(\varepsilon_f h_f + \varepsilon_b h_b)}{N(h_f + h_b) + h_{cap}}, \quad (31)$$

где  $N(h_f + h_b) + h_{cap} = H$  — суммарная толщина ГС. В большинстве случаев каждый напряженный слой гетероструктуры имеет толщину, меньшую критической для введения ДН. С ростом количества пар слоев общая толщина ГС  $H$  увеличивается, а средняя величина деформации остается практически постоянной (31). Такую ГС можно представить как квазиоднородную пленку толщины  $H$  с величиной деформации  $\bar{\varepsilon}$ , подчиняющуюся ранее описанным закономерностям пластической релаксации. С ростом общей толщины ГС пластическая релаксация начинается с введения ДН на границе раздела между ГС и подложкой, а ПД пронизывают всю толщину ГС, выходя на поверхность, как показано на рис. 13а. На прорастающую ветвь дислокации действует эффективное скалывающее напряжение

$$\tau_{eff}^{SM} = S \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)} |\bar{\varepsilon}| - \frac{Gb(1-\nu \cos^2 \alpha) \cos \phi}{4\pi H(1-\nu)} \times \left( \ln \frac{\beta H}{b} + 1 \right), \quad (32)$$

а критическая толщина введения дислокаций несоответствия равна

$$H_c = \frac{b(1-\nu \cos^2 \alpha)}{8\pi |\bar{\varepsilon}| (1+\nu) \cos \lambda} \left( \ln \frac{\beta H_c}{b} + 1 \right). \quad (33)$$

Так как сила, действующая на дислокацию, всегда положительна, в выражениях (32) и (33) стоит модуль средней деформации.

Вводя деформацию противоположного знака в барьерный слой, можно полностью компенсировать деформацию в основном слое. На рисунке 14 представлены зависимости критической толщины, выраженной в количестве пар основного и барьерного слоев для абстрактной ГС со следующими параметрами: основ-

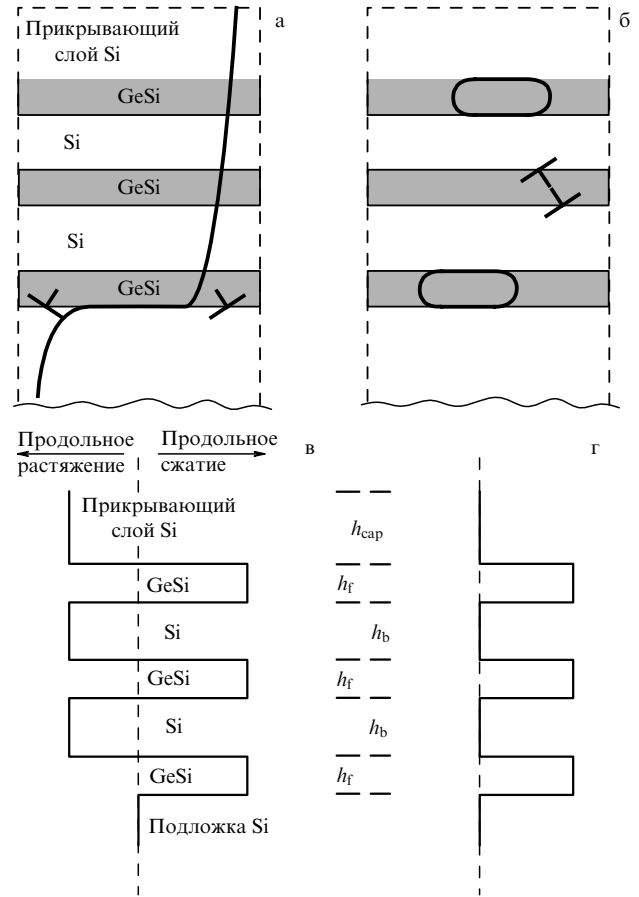


Рис. 13. Два способа введения ДН в ГС по Хоутону [61]: в границу раздела с подложкой (а) и внутрь отдельной пленки (б). Распределение напряжений в таких пластически релаксирующих ГС схематически показано на рис. (в) и (г), соответственно.

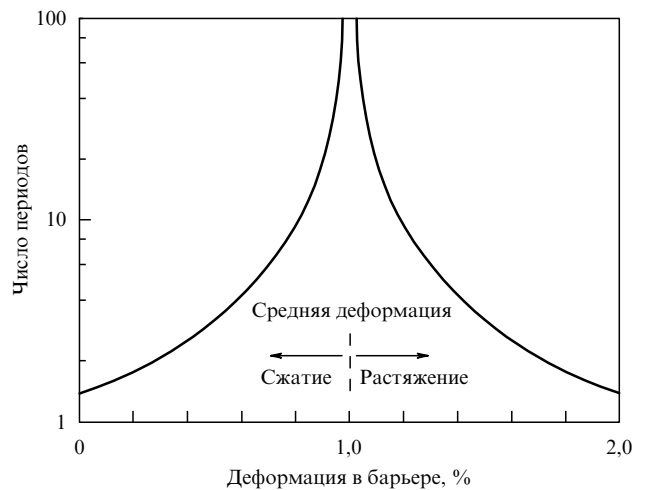


Рис. 14. Структурная стабильность многослойной ГС в зависимости от величины деформации в барьере. Расчет.

ной слой упруго сжат до  $\varepsilon = 1\%$ ;  $h_f = h_b = 8$  нм (толщина основного слоя чуть меньше критической толщины для одиночного слоя с  $\varepsilon = 1\%$ , см. рис. 3). Видно, что зависимость имеет резонансный характер: допустимое количество пар слоев возрастает при приближении к положению полной компенсации и вновь убывает при перекомпенсации ( $\varepsilon_b > 1\%$ ).

Механизм релаксации многослойных напряженных ГС, при котором ДН вводятся на границе раздела между подложкой и ГС, действительно наблюдается на практике [61]. Назовем его механизмом А. Изменение распределения напряжений в такой релаксирующей ГС показано на рис. 13в. Видно, что величина напряжений в основной части ГС перераспределяется между слоями твердого раствора и барьерными слоями, а прикрывающий слой Si становится растянутым.

Другой возможный вариант релаксации напряженной ГС представлен на рис. 13б [61]. Рассогласование параметров решеток компенсируется дислокациями несоответствия, образующимися на верхней и нижней границах каждого слоя, так называемыми парными дислокациями несоответствия или дислокационными диполями, отличительной особенностью которых является то, что верхняя и нижняя  $60^\circ$ -ные дислокации расположены в одной плоскости скольжения, но имеют противоположно направленные векторы Бюргерса [66]. Этот механизм релаксации, назовем его В, реализуется в случае, когда каждый псевдоморфный слой в отдельности начинает превосходить критическую толщину введения ДН. В этом случае каждый слой релаксирует независимо (рис. 13г).

Особое место в изучении механизмов релаксации напряженных пленок занимают так называемые "захороненные" слои или ГС, состоящие из напряженного слоя толщиной  $h_f$  (например, твердого раствора GeSi) и прикрывающего слоя толщиной  $h_{cap}$ , согласованного с подложкой (например, Si). ПС, осажденный на псевдоморфной пленке и имеющий параметр решетки подложки, увеличивает равновесную критическую толщину  $h_c$  введения ДН. Для полубесконечного ПС эта величина возрастает в два раза. Это следует из простого логического рассуждения: если взять две одинаковых псевдоморфных пленки, толщина каждой из которых равна критической  $h_c$ , и сложить их вместе поверхностями, мы получаем захороненную пленку толщиной  $2h_c$ , находящуюся по-прежнему в структурно стабильном состоянии.

Введение ДН в виде диполя в напряженный захороненный слой менее выгодно по сравнению с введением одиночных дислокаций, так как при продвижении прорастающей части такой петли вдоль слоя толщиной  $h_f$  противодействующая часть эффективного скалывающего напряжения (правая часть (14)) удваивается. Однако при релаксации захороненного слоя по механизму А, т.е. при посредстве одиночных дислокаций, прорастающая часть движущейся дислокации выходит на поверхность ПС и ее продвижение через слои  $h_f$  и  $h_{cap}$  также тормозится вследствие ее вынужденного движения в ненапряженной части ГС — в прикрывающем слое. Таким образом, должна наблюдаться конкуренция механизмов введения ДН в зависимости от толщины прикрывающего слоя.

Эту проблему подробно рассмотрел Хоутон в [20, 67]. Вводя энергию взаимодействия дислокационной пары как работу, необходимую для введения второй дислокации с поверхности на глубину  $h_{cap}$ ,

$$E_i = \frac{Gb^2(1-\nu \cos^2 \alpha)}{2\pi(1-\nu)} \ln \frac{h_f}{h_f + h_{cap}}, \quad (34)$$

Хоутон получает выражение для эффективного скалывающего напряжения (пренебрегая единицей под логарифмом)

для движения дислокационной пары:

$$\tau_{eff}^{DP} = S \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)} \left[ \varepsilon - \frac{b(1-\nu \cos^2 \alpha)}{4\pi h_f(1+\nu)} \times \left( 2 \ln \frac{\beta h_f}{b} + \ln \frac{h_{cap}}{h_f + h_{cap}} \right) \right]. \quad (35)$$

Видно, что при  $h_{cap} \rightarrow \infty$

$$\tau_{eff}^{DP} = S \frac{2G(1+\nu)}{(1-\nu)} \varepsilon - \frac{Gb(1-\nu \cos^2 \alpha) \cos \phi}{2\pi h_f(1-\nu)} \ln \frac{\beta h_f}{b}, \quad (36)$$

где вклад в торможение движения дислокации (правый член) в два раза больше, чем в выражении (14), и, соответственно, критическая толщина захороненного слоя будет в два раза больше, чем в выражении (15), что подтверждает выше приведенное логическое рассуждение.

Рассмотрим ГС, состоящую из захороненного напряженного слоя с толщиной, существенно превосходящей критическую. Такая ГС реально может быть выращена при низких температурах. Закрытая прикрывающим слоем, она находится в метастабильном состоянии. Если эту ГС затем отжигать при температурах более высоких, чем температура роста, то будет происходить ее пластическая релаксация. При релаксации по механизму А увеличение толщины ПС ведет к уменьшению средней величины упругой деформации  $\bar{\varepsilon}$ , что, казалось бы, должно снижать движущую силу пластической релаксации такой ГС. С другой стороны, как отмечалось ранее, ГС, находящаяся в метастабильном состоянии, должна релаксировать независимо от величины ПС. На рисунке 15 приведены зависимости эффективного скалывающего напряжения  $\tau_{eff}$  от толщины ПС для гетероструктуры Ge<sub>0,3</sub>Si<sub>0,7</sub>/Si(001) толщиной 100 и 10 нм, рассчитанные по выражениям (32) и (35). Толщина пленки 100 нм превышает критическую толщину более чем в 10 раз. Нанесение прикрывающего слоя на такую пленку не должно существенно изменить ее метастабильное состояние. Тем не менее видно, что движущая

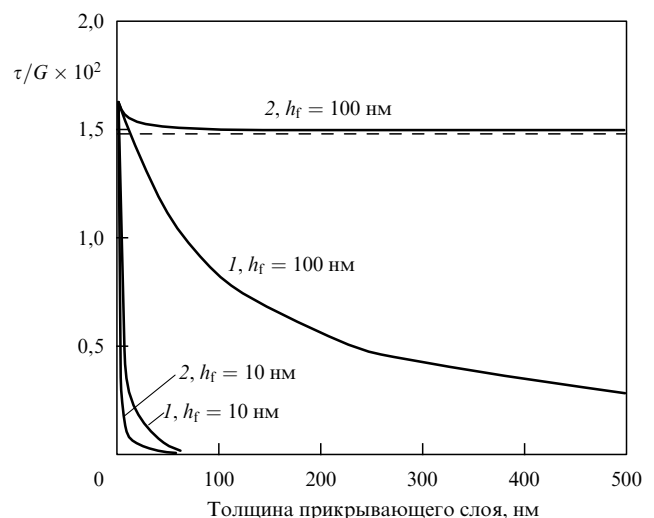


Рис. 15. Безразмерное эффективное скалывающее напряжение, действующее на одиночную ДН (1) и дислокационную пару (2) в зависимости от толщины прикрывающего слоя для пленки Ge<sub>0,3</sub>Si<sub>0,7</sub>/Si(001) толщиной 100 и 10 нм. Расчет.

сила релаксации, рассчитанная по механизму А (одиночная ДН на границе раздела с подложкой), непрерывно уменьшается, что входит в противоречие с разумным предположением о предопределенности релаксации такой ГС. Как видно из рис. 15, возможность введения ДН по механизму В в виде диполей остается существенной и практически не зависит от толщины ПС (кривая (2) для пленки толщиной 100 нм). Видно также, что начиная с некоторой относительно небольшой толщины прикрывающего слоя, релаксация диполями становится более выгодной. Толщина пленки 10 нм превышает критическую толщину незначительно ( $h_c \sim 8$  нм, см. рис. 3). В этом случае, как видно из рис. 15, расчет дает резкое уменьшение движущей силы введения ДН с ростом  $h_{\text{ср}}$  для обоих механизмов и эффективные скальвающие напряжения  $\tau_{\text{eff}}^{\text{SM}}$  и  $\tau_{\text{eff}}^{\text{DP}}$  становятся равными нулю в одном и том же интервале толщин прикрывающего слоя.

### 3. Упругая релаксация

#### 3.1. "Податливые" и "мягкие" подложки

Физический механизм, лежащий в основе эпитаксиального перехода от одного материала к другому с отличающимся параметром решетки, использующийся в традиционных методах — это релаксация упругих деформаций в тонком слое нового материала путем введения ДН. Однако введение ДН неизбежно влечет за собой появление ПД, пронизывающих эпитаксиально выращенный материал, так как ПД является частью общей с ДН петли. Традиционные методы с использованием буферных слоев с переменным параметром решетки, мезаобластей на подложке или буферных слоев, состоящих из напряженных сверхрешеток, основаны на различных способах борьбы с ПД, способствующих их скольжению к краям подложки (слоя) или мезы. В последние несколько лет появился ряд новых методов получения искусственных подложек, рассмотрению и анализу которых посвящен данный раздел. Это так называемые "податливые" и "мягкие" подложки.

При использовании податливых и мягких подложек предполагается, что работает совсем иной физический механизм — перераспределение напряжений между псевдоморфным слоем и тонкой (или мягкой) подложкой-мембраной, в результате действия которого псевдоморфный слой упруго релаксирует без образования ДН и, соответственно, без ПД. Мягкие подложки — слой пористого кремния (ПК) или низкотемпературного кремния (НК) на основной кремниевой подложке — отличаются повышенным содержанием точечных дефектов и более низкими величинами констант упругости и, предположительно, могут использоваться и как податливые подложки (кремниевая мембрана поверх ПК), и как области преимущественного образования и размножения ДН.

**3.1.1. Концепция.** Идея применения податливой подложки основана на эффекте, связанном с перераспределением упругих деформаций между псевдоморфным слоем и подложкой, если толщина последней сравнима с толщиной растущего слоя (см., например, монографию Тхорика [68]). На рисунке 16 представлена модель конструкции, в которой этот эффект может быть исполь-



Рис. 16. Схематическая модель гетероструктуры, включающая тонкую мембрану, способную скользить вдоль поддерживающей подложки.

зован. Предполагается, что тонкая мембрана, играющая роль податливой подложки, может свободно перемещаться в латеральном направлении, не отрываясь, однако, от поддерживающей толстой подложки. Деформации в псевдоморфном слое с учетом толщины подложки записываются следующим образом [68]:

$$\varepsilon_f = \frac{d_0}{d_0 + h} \varepsilon_m, \tag{37}$$

где  $d_0$  и  $h$  — толщины соответственно податливой подложки и слоя,  $\varepsilon_m$  — полная упругая деформация, ассоциирующаяся обычно с величиной рассогласования  $f$  параметров решетки слоя и подложки,  $\varepsilon_f$  — упругая деформация в слое. В этом случае энергия упругих деформаций в псевдоморфном слое становится нелинейной функцией толщины растущего слоя:

$$E_f = \frac{2G(1 + \nu)}{1 - \nu} \left( \frac{d_0}{d_0 + h} \right)^2 f^2 h. \tag{38}$$

Подставляя выражение (37) в (14) вместо  $\varepsilon$  и приравнявая  $\tau_{\text{eff}}$  нулю, получаем

$$h_c \frac{d_0}{d_0 + h_c} \frac{8\pi f(1 + \nu) \cos \lambda}{b(1 - \nu \cos^2 \alpha)} = \ln \frac{\beta h_c}{b} + 1. \tag{39}$$

Если  $d_0 \rightarrow \infty$  (толстая подложка), то (39) переходит в (15). На рисунке 17 приведен пример графического решения уравнения (39) для  $\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}/\text{Si}(100)$ . Сплошная линия — правая часть (39) как функция  $h$ . Левая часть (39) представлена пунктирными линиями для разных толщин мембраны  $d_0$ . Эти зависимости пересекают сплошную кривую в точках, соответствующих критической толщине (равенства правой и левой частей (39)). Если мембрана толстая ( $d_0 \rightarrow \infty$ , т.е. эквивалентна толстой подложке), то пересечение зависимостей происходит в точке, абсцисса которой соответствует  $h_c$  по Мэттьюзу (указана стрелкой на рис. 17а). Если же мембрана тонкая, то абсцисса пересечения кривых, как видно из рис. 17а, сдвигается вправо, т.е. критическая толщина растет. Наконец, наступает момент, когда эти кривые не пересекаются (на рис. 17а — это левые части уравнения (39) для  $d_0 = 5$  и 10 нм, которые идут ниже сплошной кривой). В этом случае растущая псевдоморфная пленка успевает передать большую часть упругих деформаций мембране до того, как становится возможным введение ДН. Зависи-

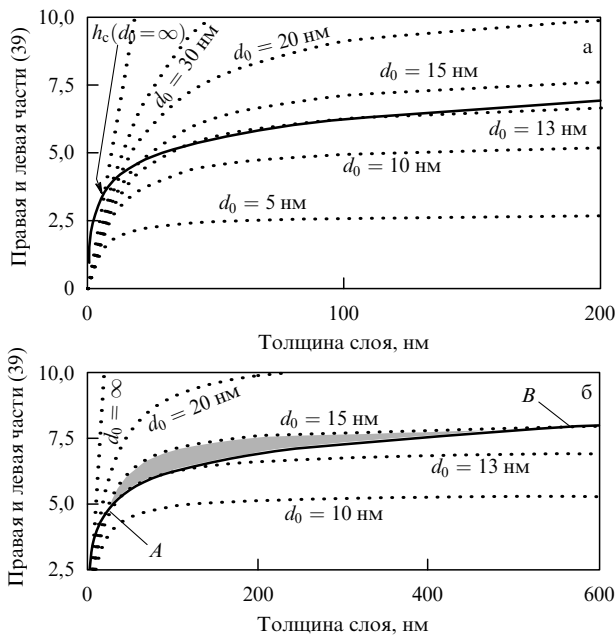


Рис. 17. Пример графического решения уравнения (39) для  $\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}/\text{Si}(100)$ . Сплошной линией и пунктиром показаны соответственно правая и левая части (39). См. пояснения в тексте.

мость  $h_c$  от толщины мембраны более детально изображена на рис. 18. Видно, что критическая толщина при малых величинах  $d_0$  устремляется к бесконечности. Из рисунка 18 также видно, что перераспределение напряжений между псевдоморфным слоем и тонкой подложкой, оказывающее заметное влияние на величину  $h_c$ , начинает проявляться только при малых толщинах мембраны. В данном случае для  $x = 0,3$  этот эффект становится существенным при толщинах мембраны менее 30 нм. На рисунке 19 представлены зависимости критических толщин от рассогласования параметров решетки пленки и подложки, рассчитанные для разных толщин мембран в работах Фройнда и Никса [69] (а) и Жанга и Су [70] (б). Для сравнения этих двух расчетов штриховой линией отмечены сечения, соответствующие

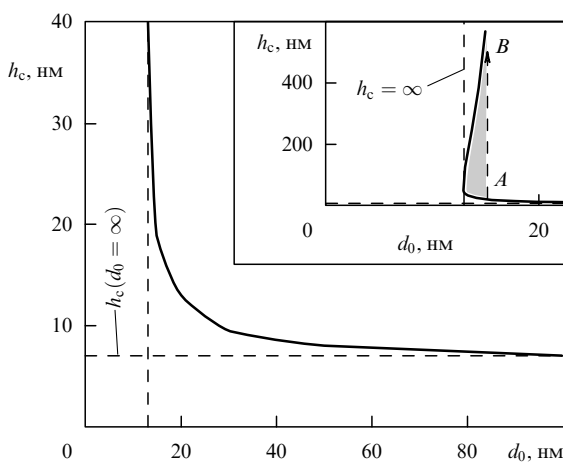


Рис. 18. Увеличение критической толщины пленки  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(100)$  с уменьшением толщины мембраны для  $x = 0,3$ ;  $d_0$  — толщина мембраны. На вставке: то же в другом масштабе. Расчет.

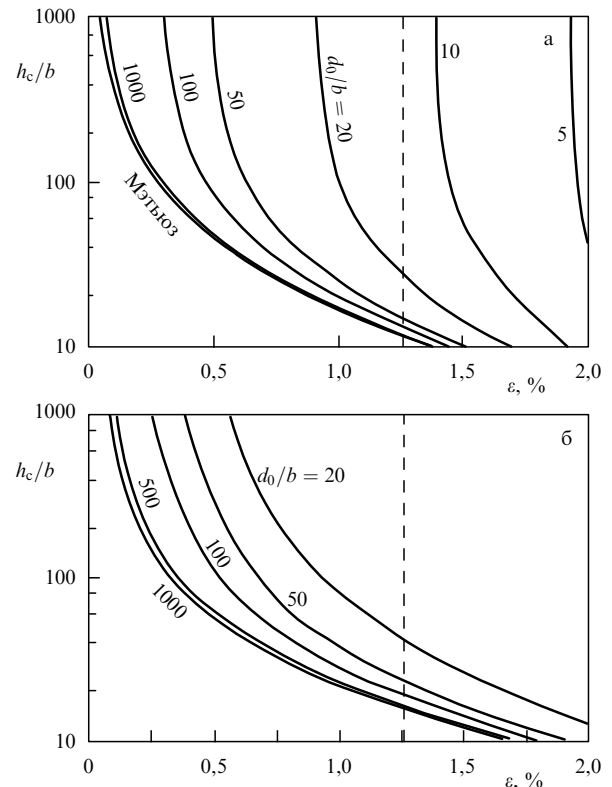


Рис. 19. Нормированная критическая толщина введения ДН в зависимости от деформаций в ГС и толщины мембраны  $d_0$ . Из работ [69] (а) и [70] (б).

величине деформаций в псевдоморфных пленках  $\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}/\text{Si}(001)$ .

Графическое решение, пример которого изображен на рис. 17, позволяет дополнительно провести качественный анализ перехода напряженной пленки от пластической к упругой релаксации и обнаружить особенности, до сих пор не отмеченные в литературе. Как видно из рис. 17а, пересечение левой и правой частей уравнения (39) в области перехода к  $h_c \rightarrow \infty$  происходит под острым углом (см., например, кривую для  $d_0 = 13$  нм). Логарифмическая часть (39) известна неточно: например, Хоутон [20] принимает  $\beta = 4$ , а Гиллард и др. — 0,76 [4]. Соответственно, такой разброс величины  $\beta$  создаст заметную неопределенность в расчетном определении толщины мембраны, при которой  $h_c \rightarrow \infty$ .

Более существенным, на наш взгляд, является не отмеченный ранее в публикациях на эту тему эффект нахождения псевдоморфной пленки в метастабильном состоянии на ограниченном интервале толщин. Это хорошо видно на рис. 17б, на котором зависимости продлены в область больших толщин растущего слоя. Несмотря на то, что зависимость для  $d_0 = 15$  нм пересекает сплошную кривую в точке А, далее, с ростом толщины пленки, она проходит несколько выше логарифмической зависимости, а затем пересекает ее в обратном направлении (точка В на рис. 17б). Таким образом, существует область (заштрихована на рис. 17б), в которой псевдоморфный слой может находиться в метастабильном состоянии только в ограниченном интервале толщин. При этом движущая сила для введения ДН — эффективное скалывающее напряжение  $\tau_{\text{eff}}$  — существенно занижена. Так, например, при толщине мембраны



20 нм движущая сила введения ДН уменьшается в  $\cong 17$  раз для пленки толщиной 100 нм и в  $\cong 34$  раза для  $h = 200$  нм по сравнению со случаем отсутствия мембраны. В силу имеющихся кинетических ограничений для введения ДН такой слой, несмотря на временное попадание его в метастабильную область, будет оставаться в упругом состоянии, что расширяет возможности использования податливых мембран по их толщине и снижает критичность точного знания величины  $d_0$ , для которой  $h_c$  обращается в бесконечность. На вставке рис. 18 заштрихована область, соответствующая затемненной области на рис. 17б. Таким образом, в псевдоморфных пленках, выращенных на тонких мембранах, резко снижается движущая сила пластической релаксации — эффективное скалывающее напряжение  $\tau_{\text{eff}}$ .

**3.1.2. Техника создания податливых подложек.** Первым, кто обратил внимание на возможное использование тонкой подложки в качестве объекта, снимающего напряжения пленки до достижения критической толщины пленки, был Ло. В работе [71] он экспериментально продемонстрировал эту возможность на тонких мембранах, которые создавались с помощью травления отверстий в подложке специально выращенной гетероструктуры. В процессе роста напряженной пленки такие мембраны изгибались, и поэтому данный эксперимент носил чисто демонстрационный характер. К настоящему времени оформились два более перспективных варианта создания податливых подложек.

**GeSi/SOI.** Использование подложек "кремний на изоляторе ( $\text{SiO}_2$ )". Подложка состоит из тонкой пленки кремния толщиной порядка 10–100 нм, которая связана с оксидной прослойкой  $\text{SiO}_2$ . Последняя, в свою очередь, находится на толстой подложке [72, 73]. Как вариант этого метода, используемый для соединений  $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ , гетероструктура GaAs/AlGaAs/GaAs приваривается через промежуточный слой (который далее будет играть роль "мягкой" прослойки) к поддерживающей подложке. Затем подложка гетероструктуры GaAs и слой AlGaAs отравливаются разными травителями (AlGaAs используется как стопорный слой при травлении подложки GaAs по хорошо известной технологии изготовления фотокатодов (см., например, [74, 75])). Оставшаяся пленка GaAs на "мягком" подслое становится податливой подложкой при росте напряженных пленок InGaAs [76].

**Сварка с доворотом.** В этом случае гетероструктура (например, GaAs/AlGaAs/GaAs) приваривается непосредственно к подложке GaAs без промежуточных слоев, причем кристаллографические ориентации свариваемой пары не совпадают по углу: производится доворот вокруг оси, перпендикулярной поверхности. На границе раздела образуется сетка чисто винтовых дислокаций, плотность которых возрастает с углом доворота. Далее подложка GaAs и стопорный слой AlGaAs гетероструктуры отравливаются так же, как и в предыдущем варианте. Предполагается, что при дальнейшем росте напряженного слоя (например, InGaAs на тонком слое GaAs) последний является податливым, так как область, содержащая винтовые дислокации, способствует его скольжению по поддерживающей подложке [77].

По обоим методам имеются теоретические разработки [69, 70, 78, 79].

**3.1.3. Комментарий.** Для обоих методов в литературе сообщаются экспериментальные доказательства, подтверждающие работоспособность концепции, изложенной в разделе 3.1.1. Однако остается неразрешенным противоречие чисто технического плана, а именно то, что промежуточный "мягкий" слой должен быть податливым в плоскости подложки и жестким в направлении роста. Неразрешимым представляется и следующее противоречие: если наращиваемый слой сначала растет как псевдоморфный, а затем релаксирует без дислокаций несоответствия (согласно концепции, приведенной в разделе 3.1.1, его напряжения передаются податливому слою, который, в конце концов, и деформируется), то он должен ползти по подложке на большие межатомные расстояния, что невозможно без его отслоения. Повидимому, по этой причине в публикациях отсутствуют данные или хотя бы комментарии о выращивании совершенных слоев на податливых подложках большой площади.

Представляется также маловероятным, что в случае подложки с сеткой винтовых дислокаций релаксация растущего напряженного слоя может происходить исключительно упруго: прослойка с большой плотностью несовершенств является действенным источником генерации дислокаций несоответствия, проникающих в первоначально псевдоморфный слой.

Возможное воздействие "мягкости" подложки на улучшение структурных свойств псевдоморфного слоя до сих пор оценивается только теоретически. Джессер и др. [47], рассматривая влияние свойств податливой подложки на критическую толщину псевдоморфного слоя, подчеркивают важность уменьшения упругих констант подложки, однако основной упор делается на уменьшение ее толщины.

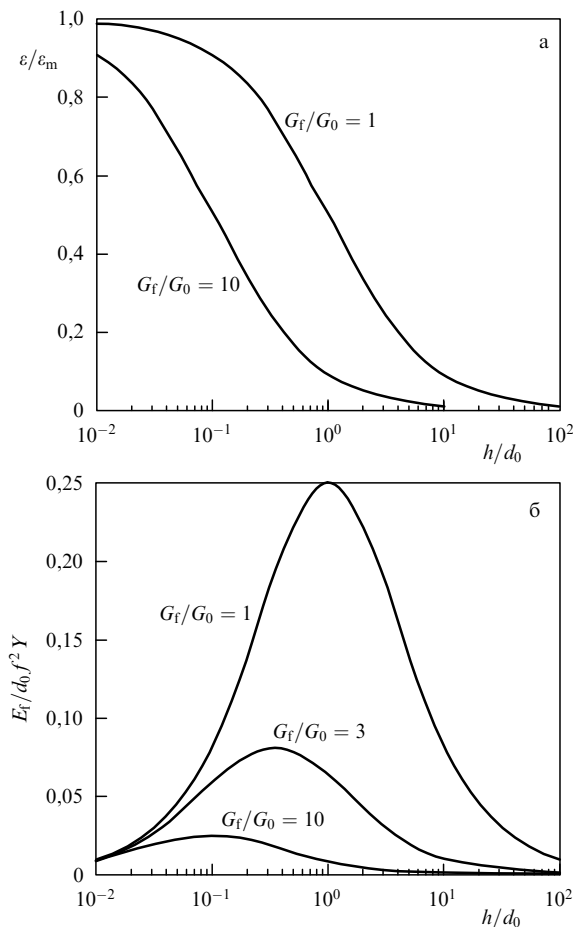
**3.1.4. Пористый кремний как подложка.** Как уже отмечалось, идея податливой подложки основана на создании мембраны — подложки малой толщины, которая принимает на себя деформации растущего слоя. При этом упругие константы пленки и подложки принимаются равными (формула (37)). В общем случае тонкая подложка может к тому же иметь другие величины упругих констант. Тогда механическое равновесие системы пленка – подложка записывается как

$$G_f \frac{1 + \nu_f}{1 - \nu_f} \varepsilon_f h + G_0 \frac{1 + \nu_0}{1 - \nu_0} \varepsilon_0 d_0 = 0, \quad (40)$$

где индекс 0 относится к тонкой подложке. Пренебрегая разницей коэффициентов Пуассона и учитывая, что  $\varepsilon_f - \varepsilon_0 = \varepsilon_m$ , получаем

$$\varepsilon_f = \frac{1}{1 + G_f h / G_0 d_0} \varepsilon_m. \quad (41)$$

Видно, что уменьшение величины модуля сдвига  $G_0$  в тонкой подложке оказывает тот же эффект, что и уменьшение ее толщины. Для наглядности на рис. 20а сравниваются две зависимости, характеризующие уменьшение упругих деформаций в пленке с ростом отношения толщин пленки и мембраны  $h/d_0$ . Уменьшение в 10 раз модуля сдвига, характеризующего мембрану, существенно снижает величину упругих деформаций в напряженной пленке. Соответственно, энергия



**Рис. 20.** Уменьшение упругих деформаций в псевдоморфной пленке (а) и изменение ее энергии (б) в зависимости от величины отношения толщин пленки и мембраны для нескольких отношений модулей сдвига. Расчет.

упругих деформаций в пленке сложным образом зависит от ее толщины:

$$E_f = Y \varepsilon_f^2 h = \frac{Y f^2 h}{(1 + G_f h / G_0 d_0)^2}. \quad (42)$$

Нормированная на модуль Юнга  $Y$  и квадрат величины рассогласования  $f$  энергия псевдоморфной пленки в безразмерном виде

$$\frac{E_f}{Y f^2 d_0} = \frac{h/d_0}{(1 + G_f h / G_0 d_0)^2} \quad (43)$$

представлена на рис. 20б как функция отношения толщин пленки и мембраны  $h/d_0$  для трех отношений  $G_f/G_0$ , равных 1, 3 и 10. Уменьшение модуля сдвига мембраны приводит к заметному падению максимально возможной величины энергии напряжений, запасаемых в пленке, а максимумы зависимостей смещаются влево — в сторону относительно больших толщин мембраны.

В обычно используемых полупроводниковых материалах отношение упругих констант колеблется в пределах 2, тогда как толщину мембраны можно менять в широких пределах. Соответственно, основное внимание при разработке концепции податливой подложки было уделено созданию тонких мембран. Однако в последние

годы появился новый материал — пористый кремний, упругие константы которого могут существенно отличаться от объемных. Так, согласно [80], модуль Юнга уменьшается в несколько десятков раз при пористости, достигающей до 90%. Поэтому необходимо обратить внимание на модуль сдвига  $G_0$  в (41), малая величина которого приводит нас к модели мягкой подложки (т.е. подложки, принимающей на себя, в силу своей мягкости, основную часть деформаций растущего напряженного слоя), а положительные особенности хода зависимостей, изображенных на рис. 20а, б, могут быть каким-либо образом использованы. В недавно вышедшей работе [81] пористый кремний был использован в качестве подложки, обладающей свойствами податливости и мягкости. Было показано, что пленки твердого раствора  $\text{Ge}_{0,3}\text{Si}_{0,7}$  остаются пластически нерелаксированными до толщин вплоть до 0,3 мкм.

### 3.2. Упругая релаксация пленок через образование островков

Как отмечалось в разделе 2.4, поверхность напряженного слоя может становиться шероховатой в процессе роста и отжига в соответствии с действием механизма упругой релаксации. Это явление интенсивно изучалось в последнее десятилетие в связи с его ключевым значением в образовании особого состояния напряженной пленки в виде когерентных островков нанометровых размеров. Основное положение модели заключается в том, что шероховатая поверхность напряженного слоя (и тем более островковая) термодинамически более равновесна вследствие упругой релаксации напряжений в вершинах выступов. Поверхностная энергия слоя является противодействующим фактором, однако она только частично компенсирует стремление системы к состоянию с шероховатой поверхностью. Механизм реализации этого явления — перемещение ростовых единиц вдоль поверхности в места с наименьшей свободной энергией, т.е. в вершины волнистой поверхности. Подробное знание особенностей механизма упругой релаксации необходимо как для борьбы с шероховатостью напряженных пленок, так и для реализации противоположной цели — сознательного получения наноструктур с большой плотностью. Поэтому данная модель быстро была признана в научной среде, и в 1990–1995 гг. появилось много как теоретических, так и экспериментальных работ, направленных на ее обоснование.

**3.2.1. Исторический аспект.** Публикации, из которых можно извлечь основные положения модели, приведены ниже в хронологическом порядке.

**1972 г.** Азаро и Тиллер [82] теоретически рассмотрели задачу для абстрактного физического объекта о влиянии напряжений на морфологическую устойчивость поверхности и показали, что ее неустойчивость, являясь термодинамически необходимой, может развиваться за счет поверхностной диффузии атомов.

**1986 г.** Гринфельд [83] теоретически показал, что поверхность негидростатически напряженного твердого тела в контакте с жидкой фазой оказывается неустойчивой относительно возмущений с любой длиной волны, если частицы вещества могут мигрировать вдоль поверхности. Неустойчивость возникает при сколь угодно малых негидростатических напряжениях. Поверхност-

ное натяжение подавляет эту неустойчивость в коротковолновой части спектра.

1988 г. Бергер и др. [84] впервые определенно утверждают, что минимум свободной энергии для напряженного слоя достигается при некоторой величине шероховатости поверхности. Экспериментально показано, что поверхностный параметр решетки пленки  $\text{In}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}/\text{GaAs}$  увеличивается с ростом ее толщины, остающейся меньше критической, т. е. происходит упругая релаксация поверхностных участков растущего слоя. В 1989 г. Сроловиц в работе [85] впервые развивает теорию неустойчивости плоской поверхности напряженного твердого тела применительно к псевдоморфным полупроводниковым пленкам  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ , ссылаясь на экспериментальные результаты Бергера и др. [84].

1990 г. Иглшем и Церулло [86] экспериментально показывают, что островки Ge на  $\text{Si}(100)$  свободны от ДН до 50-кратного превышения критической толщины. Объяснение этого феномена дается на основе предположения об упругой релаксации островка и прилегающей части подложки. В том же году Гуха и др. [87] впервые представили прямые экспериментальные доказательства упругой релаксации островков  $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}/\text{GaAs}$ , существенно превышающих критическую толщину. Исследования выполнены с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения на поперечном срезе. (Впервые для островков нанометровых размеров.) Вершина бездислокационного островка принимает параметр решетки ненапряженного твердого раствора  $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{As}$ . Именно после этих публикаций начался бурный рост исследований механизмов образования напряженных островков и особенностей их упорядочения, так как появилась возможность создавать массивы бездефектных (без ДН) трехмерных объектов нанометровых размеров, имеющих практическое применение в наноэлектронике. В том же году Мо и др. [88] с помощью STM впервые демонстрируют четко прорисованные трехмерные островки Ge на Si и определяют их грани —  $\{105\}$ , назвав островки hut-кластерами.

1991 г. Снайдер и др. [89] изучили эволюцию морфологии  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}(100)$ , используя методы дифракции быстрых электронов на отражение (RHEED) и сканирующей туннельной микроскопии (STM), и установили связь между морфологией поверхности пленки и релаксацией напряжений в ней. Предложен новый механизм релаксации напряженных пленок: упругая релаксация через когерентные островки.

1992 г. Куллис и др. [90] демонстрируют связь между шероховатостью поверхности твердого раствора GeSi и вариациями деформаций в слое. Эта связь объясняется частичной упругой релаксацией деформаций в выступах. Прикрывающий такую поверхность слой кремния выглаживает ее.

Перечисленные публикации стали тем отправным материалом, который способствовал появлению ряда теоретических работ, посвященных рассмотрению неустойчивости поверхности растущего напряженного слоя для конкретных гетерокомпозиций GeSi/Si и InGaAs/GaAs. Это работы Ратша и Зангвилла (1993 г.) [91], Спенсера и др. (1993 г.) [92], Фройнда и Йонсдоттир (1993 г.) [93], Терсоффа и Легоуса [39], Джонсона и Фройнда (1997 г.) [94], Обаяши и Шинтани (1998 г.) [95], Мюллера и Керна (1998 г.) [96] и др.

**3.2.2. Результаты теоретических расчетов.** На рисунках 21 и 22 изображены результаты теоретических расчетов двух подходов к математической модели упругой релаксации напряженных пленок: интегральный — для всей поверхности пленки в приложении к системе GeSi/Si [95] и расчет для отдельного островка [94]. Отметим, что эти расчеты не являются пионерскими, но приводятся здесь из-за их наглядности. Основой обоих подходов является вычисление равновесных состояний шероховатой поверхности напряженного слоя — минимизация суммы энергии напряжений и поверхностной энергии. Эта сложная задача решается в предположении изотропности как упругих, так и поверхностных свойств системы. Не учитывается также немонотонность поверхностных свойств пленки при появлении vicinalных граней. (Расчеты с учетом поверхностной энергии конкретных граней, а также более тонких эффектов, связанных с влиянием напряжений на величину поверхностной энергии, приводятся в [97, 98].)

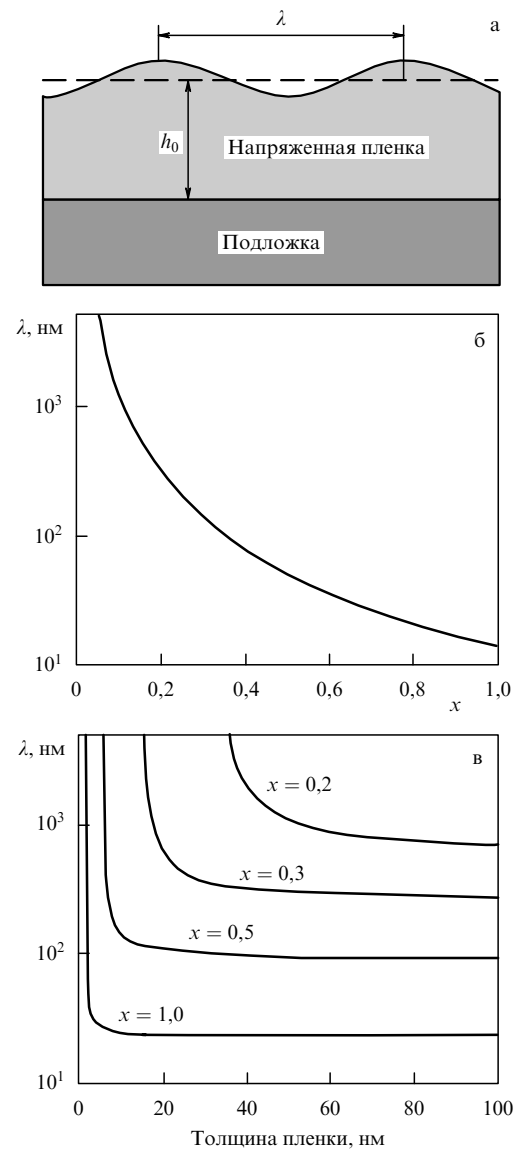


Рис. 21. Модель Обаяши и Шинтани [95]: геометрическая схема модели (а); зависимости критической длины волны  $\lambda$  шероховатости поверхности напряженной ГС  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(100)$  от  $x$  (б) и от толщины пленки (в).

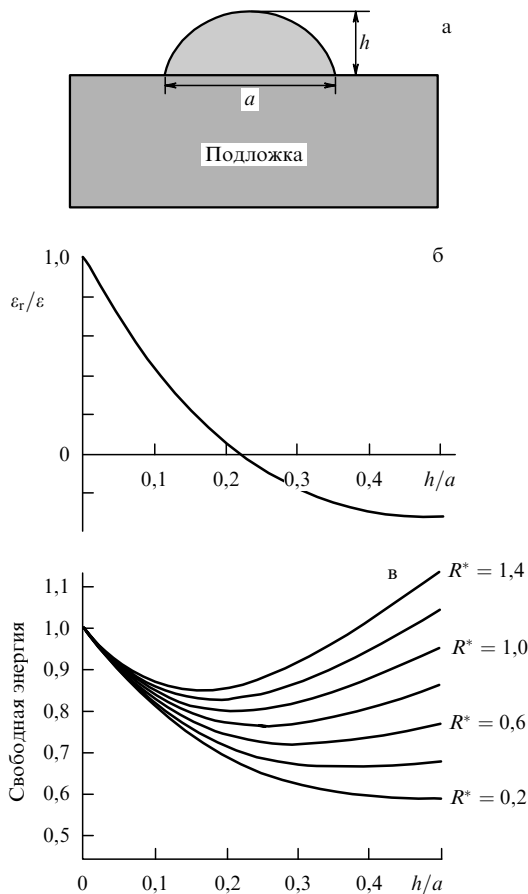


Рис. 22. Модель Джонсона и Фройнда [94]: геометрическая схема модели (а); изменение упругих деформаций в вершине островка (б) и его полной свободной энергии, нормированной на единицу объема (в) в зависимости от геометрического параметра островка  $h/a$ .

На рисунке 21 представлена модель, в которой для напряженной пленки GeSi/Si определенного состава и толщины вводится поверхностная волна, уменьшающая напряжения. При определенной длине волны, называемой критической, в системе устанавливается квазиравновесное состояние. На рисунке 21б видно, что критическая длина волны уменьшается с ростом доли германия в твердом растворе и составляет около 20 нм при  $x = 1$ , что хорошо совпадает с размерами островков, обнаруживаемых в этой системе с помощью ТЕМ и СТМ (см., например, [99]). На рисунке 21в приведено изменение критической длины волны от толщины псевдоморфного слоя для разных составов. Видно, что при определенной толщине слоя, увеличивающейся с уменьшением доли Ge в пленке, критическая длина волны выходит на некоторый постоянный уровень. Дополнительный вывод из этого рисунка — поверхность напряженного слоя нестабильна даже при малой доле Ge в пленке (на рис. 21в  $x = 0,2$ ), что подтверждает теоретический тезис Гринфелда [83], представленный в разделе 3.2.1. Это также подтверждается и современными экспериментальными данными (см. работы Флоро и др. [100] и Озкана и Никса [101]): поверхность слоя неустойчива даже при малых рассогласованиях с подложкой, необходимы только повышенные температуры для ускорения поверхностной диффузии.

На рисунке 22 представлена модель, по которой рассчитывается минимум свободной энергии для когерентного островка полусферической формы. Основным параметром является соотношение высоты к латеральным размерам островка (aspect ratio)  $h/a$ , от которого существенно зависит степень упругой релаксации когерентного островка. На рисунке 22б видно, как величина упругих деформаций на вершине островка зависит от его размеров, уменьшаясь с увеличением отношения  $h/a$ . На рисунке 22в демонстрируется изменение полной свободной энергии островка с ростом  $h/a$ . Ее минимум смещается вправо по оси  $h/a$  при уменьшении параметра  $R^*$ . Этот параметр введен как мера отношения поверхностной энергии  $\gamma$  и энергии упругих деформаций, пропорциональных  $\epsilon^2$ :

$$R^* = \frac{2\gamma}{M\epsilon_m^2 A^{1/2}}, \quad (44)$$

где  $M = 2G(1 + \nu)/(1 - \nu)$ ;  $G$ ,  $\nu$  и  $\gamma$  — модуль сдвига, коэффициент Пуассона и поверхностная энергия, соответственно;  $A$  — площадь границы раздела островка — подложка,  $\epsilon_m$  — то же, что и в (37). Энергия напряжений стоит в знаменателе. Таким образом, чем больше величина упругих деформаций, тем меньше параметр  $R^*$ , тем глубже минимум свободной энергии и тем дальше он отстоит по оси  $h/a$ , соответствуя большим величинам шероховатости. Наглядно видна роль поверхностной энергии, которая стоит в числителе формулы (42) для параметра  $R^*$ .

### 3.2.3. Экспериментальные подтверждения модели.

Появление и развитие морфологической неустойчивости поверхности напряженного слоя активизируется с ростом рассогласования параметров решеток пленки и подложки. Повышение температуры сдвигает начало возникновения шероховатой поверхности в область меньших начальных деформаций. Шероховатость поверхности напряженной пленки нарастает также с толщиной пленки. В литературе имеются многочисленные подтверждения этих закономерностей [100, 102–104].

Если поверхностную энергию новой фазы каким-либо способом уменьшить, потеря морфологической стабильности напряженной пленки возможна и при малых рассогласованиях. Так, в условиях контакта напряженной пленки с жидкой фазой, при котором поверхностная энергия пленки существенно меньше, чем поверхностная энергия границы раздела пленка — вакуум (или пар), наблюдается образование островков в системе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  при очень малых рассогласованиях, соответствующих концентрации Ge  $x \sim 0,05$  ( $\epsilon \sim 0,2\%$ ) [105]. Размеры островков и периода шероховатости имеют порядок микрона и легко наблюдаются. Поверхностные волны шероховатости и островки выстроены в направлениях  $\langle 100 \rangle$ , а ДН не обнаруживаются [105].

В качестве заключения к данному разделу можно сформулировать следующие утверждения: (а) движущая сила морфологической неустойчивости напряженной пленки существует всегда и при всех толщинах и возрастает с толщиной и разностью параметров решеток пленки и подложки; (б) для понижения шероховатости необходимо подавление диффузионных поверхностных процессов, для чего следует понижать температуру

роста, а также применять приемы, способствующие планаризации поверхности напряженной пленки, например, использование ПАВ или прикрывающих слоев.

**3.2.4. Шероховатость поверхности и введение ДН.** Образовавшиеся нерегулярности на поверхности понижают барьер для зарождения дислокационных полупетель, и при некоторой величине шероховатости становится возможной пластическая релаксация пленки путем введения ДН с поверхности. Предположение о таком развитии событий стало удобным объяснением наблюдавшейся экспериментально пластической релаксации пленок с начальными деформациями в интервале менее 1,5 %, при которых возникновение дислокационными полупетель на гладкой поверхности было маловероятным (см. раздел 2.4). Однако все оказалось не так просто. Например, как утверждает в работе [105], в слоях  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  с  $x \sim 0,05$ , распавшихся на отдельные островки, ДН не образуются, несмотря на то, что толщина островков превышает критическую.

Аналогичная структура шероховатости наблюдается и при отжиге в вакууме первоначально планарных пленок  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ , выращенных методом МЛЭ. Озкан и Никс [101] подробно изучали морфологические изменения поверхности таких пленок взаимно дополняющими методами ТЕМ, атомно-силовой микроскопии (AFM), а также рентгеновской дифрактометрии. Как отмечается в [101], поверхностная шероховатость выстраивается в направлениях  $\langle 100 \rangle$  независимо от толщины пленки, что связано с особенностями анизотропии упругих свойств кристаллической поверхности данного материала. (Такая же ориентация поверхностных образований наблюдалась в системе  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}(001)$  [106].) Соответственно, стенки этих образований не совпадают с плоскостями, наиболее благоприятными для образования дислокационных петель. В пленках, толщина которых превышает критическую, образовавшаяся сетка ДН, имеющая направления  $\langle 110 \rangle$ , приводит к реорганизации ориентации морфологических волн поверхности от  $\langle 100 \rangle$  к  $\langle 110 \rangle$  [101]. Такой поворот объясняется влиянием поля напряжений сетки ДН, которое создает на поверхности пленки латеральный градиент химического потенциала, способствующий перестройке морфологической структуры поверхности через поверхностную диффузию. В результате "долины" и "хребты" приобретают направления, "навязанные" полем упругих деформаций ДН.

Подобные исследования были проведены на ГС  $\text{InGaAs}/\text{GaAs}(001)$  [106, 107], и было показано, что в стандартных условиях роста морфологическая неустойчивость поверхности напряженной пленки, т. е. переход от двумерного слоевого роста к трехмерному, наблюдается в образцах с  $\varepsilon > 1,5\%$  (это справедливо и для  $\text{InGaAs}/\text{InP}(001)$  [108]). Предполагается, что "долины" на поверхности напряженной пленки и их пересечения являются удобными местами для зарождения дислокаций, так как в этих местах величина напряжений возрастает. Однако при изучении таких ГС в электронном микроскопе обнаруживаются, в основном, короткие дислокационные сегменты в ГС на основе как  $\text{GeSi}$  [101, 109], так и  $\text{InGaAs}$  [106, 107]. При исследовании поперечных срезов указанных ГС действительно обнаруживаются дефекты, связанные с "долинами", однако такие дефекты имеют сложное строение. Структура этих дефектов обсуждается в цитируемых работах.

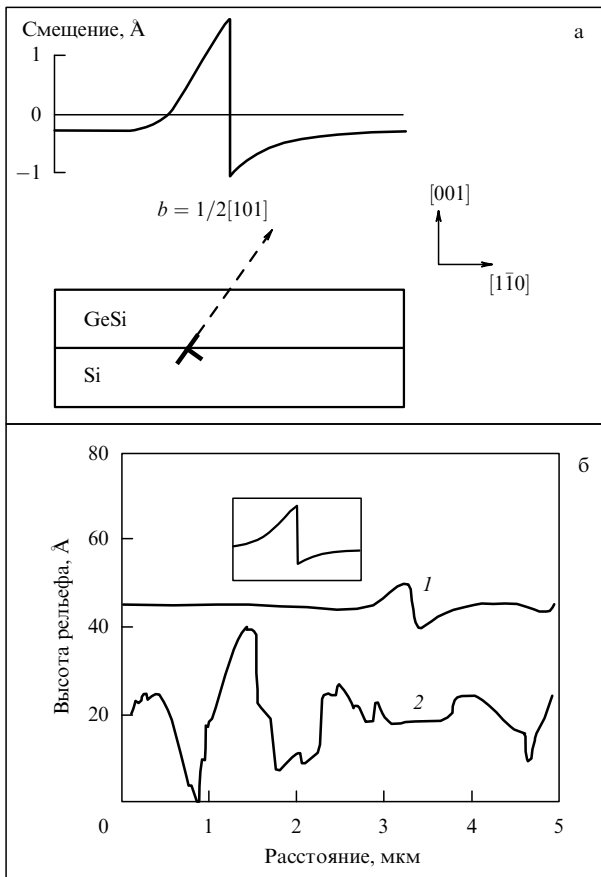
Таким образом, к настоящему времени установлена определенная связь между потерей морфологической устойчивости напряженных пленок и образованием ДН, однако эта связь четко прослеживается только для ГС со средними ( $\varepsilon \sim 1,5\%$ ) и более высокими значениями деформаций. С другой стороны, эти исследования не подтвердили популярного ранее предположения о том, что шероховатость поверхности является основным источником ДН в ГС с малыми рассогласованиями ( $\varepsilon < 1,0\%$ ). Новые возможности наблюдения поверхности с атомным разрешением показали, что ДН в подобных ГС появляются, несмотря на наблюдаемый экспериментально двумерный механизм роста [106].

#### 4. Морфология поверхности релаксированных пленок

Как видно из предыдущего раздела, сетка ДН на границе раздела пленка–подложка создает поле напряжений, достигающее поверхности пленки и воздействующее на механизм роста. Появляется характерная структура поверхности в виде пересекающихся полос (cross-hatches) (см. [110] и ссылки в этой работе). Выступы и впадины поверхностного рельефа тянутся в направлениях  $\langle 100 \rangle$ , соответствующих пересечению наклонных плоскостей скольжения  $60^\circ$ -ных дислокаций с плоскостью подложки (100) или (111). Еще в 1975 г. Ольсен [111] с помощью ТЕМ и оптической микроскопии нашел связь между появлением на поверхности пленки характерных полос, позже названных cross-hatches, и обнаружением ДН в границе раздела пленка–подложка. Лутц и др. [112] показали непосредственную связь между дислокациями и величиной ступени на поверхности. Одиночные ДН дают ступеньку на поверхности пленки  $\text{GeSi}/\text{Si}(001)$ , расчетный вид которой изображен на рис. 23а. Современные способы исследования морфологии поверхности (в данном случае AFM) позволяют обнаружить ступеньки такой величины. На рисунке 23б расчетная форма ступени, созданной пятью ДН из одного источника (на вставке), сравнивается с подходящим AFM-профилем релаксированного образца  $\text{GeSi}/\text{Si}(001)$ . Видно удовлетворительное соответствие расчетной и экспериментально определенной формы ступеньки.

При увеличении толщины пленки и особенно при высоких температурах роста на первое место по влиянию на морфологию растущей поверхности выходит механизм, предложенный Фицджеральдом и др. (см., например, [113]), заключающийся в том, что поле напряжений от дислокационной сетки способствует перестройке поверхности (см. предыдущий раздел). Наложение нескольких механизмов роста шероховатости поверхности пленки усложняет ее характер и увеличивает амплитуду колебаний толщины релаксирующей пленки. В результате создается поверхность с грубым рельефом (например, таким, как показано на рис. 23б, кривая 2).

Таким образом, основными причинами образования cross-hatches на поверхности релаксирующей напряженной пленки являются: потеря морфологической устойчивости пленки из-за упругой релаксации напряженного слоя; ступеньки от вхождения отдельных дислокаций и их пакетов; влияние поля напряжений сетки ДН на скорость роста отдельных участков поверхности. Результирующая картина морфологии поверхности



**Рис. 23.** Ступеньки на поверхности напряженной пленки, обусловленные ДН. Расчет с учетом одиночной ДН (а) и пучка из пяти ДН (вставка на рис. б); (1) и (2) — результаты измерений. Из работы [112].

пленки является суперпозицией этих трех механизмов роста шероховатости. В зависимости от условий роста (температура, величина рассогласования, толщина пленки) каждый из этих трех механизмов может стать определяющим.

## 5. Практическая реализация механизмов релаксации

### 5.1. Основные физические предпосылки использования гетероструктур GeSi/Si в приборах

Ожидается, что мировой рынок бытовой электроники в 2001 г. достигнет в денежном выражении более 200 млрд долларов и хорошо известно, что на 97% этот рынок формирует кремниевая электроника. Наиболее быстро растущим сегментом данного рынка является оборудование для связи и телекоммуникаций. Именно здесь необходимы достаточно высококачественные и в то же время дешевые дискретные компоненты и небольшие интегральные схемы СВЧ-диапазона. Именно здесь и находят все более широкое применение гетероэпитаксиальные структуры  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ , которые несколько поколебали недавнюю монополию полупроводниковых соединений  $A^{III}B^V$ . Заметим сразу, что по своим предельным характеристикам приборы на основе гетероструктур GeSi/Si никогда не превзойдут устройства, изготавливаемые на гетероструктурах AlGaAs/GaAs.

Однако для широкой номенклатуры устройств бытовой электроники достижение предельных параметров не требуется — определяющим фактором является стоимость и совместимость с другими элементами радиоэлектронных схем, а по этим параметрам гетероструктуры GeSi/Si вполне конкурентоспособны.

Для любой гетероструктуры возможность или невозможность ее использования в СВЧ-транзисторе определяется, прежде всего, подвижностью и концентрацией двумерного электронного (или дырочного) газа, который формируется в гетеропереходе методом модуляционного легирования. Для получения высокой подвижности необходима атомная гладкость гетерограницы при отсутствии в ней дислокаций, а также минимальный уровень фоновых (неконтролируемых) примесей. Кроме того, само формирование двумерного электронного или дырочного газа возможно лишь при условии, что в гетеропереходе реализуются разрывы зон нужной величины и знака. В отличие от гетеросистемы AlGaAs/GaAs, в которой рассогласование параметров решетки пренебрежимо мало, в гетероструктурах GeSi/Si упругие деформации играют определяющую роль в формировании электронных свойств гетероперехода и служат одним из основных инструментов зонной инженерии. Ниже кратко рассмотрены эти эффекты.

Кремний и германий являются непрямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны при комнатной температуре 1,124 и 0,665 эВ, соответственно [114]. Кремний имеет 6 долин в зоне проводимости вблизи точки X зоны Бриллюэна, которые характеризуются двумя компонентами тензора эффективной массы — продольным  $m_l/m_0 = 0,916$  и поперечным  $m_t/m_0 = 0,19$ . Эффективная масса проводимости составляет при этом  $m_c/m_0 = 0,259$ . Абсолютный минимум зоны проводимости германия располагается в точке L зоны Бриллюэна, и 4 долины имеют следующие компоненты тензора эффективной массы:  $m_l/m_0 = 1,57$ ,  $m_t/m_0 = 0,087$  (эффективная масса проводимости Ge  $m_c/m_0 = 0,118$ ). В соответствии с такой зонной структурой подвижности электронов в беспримесных кристаллах Si и Ge при 300 К составляют  $1450$  и  $3900 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ . Изознергетические поверхности двух верхних валентных зон в Si и Ge, вырожденных в Г-точке зоны Бриллюэна, анизотропны и не являются параболическими. Во многих случаях этими усложнениями пренебрегают и пользуются значениями эффективных масс легких и тяжелых дырок в сферическом приближении ( $m_{lh}/m_0 = 0,159$ ,  $m_{hh}/m_0 = 0,467$  для Si и  $m_{lh}/m_0 = 0,0424$ ,  $m_{hh}/m_0 = 0,316$  для Ge). Подвижности дырок в беспримесных кристаллах Si и Ge при 300 К составляют  $450$  и  $1900 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ , соответственно.

Перераспределение заряда валентных электронов на гетерогранице приводит к формированию дипольного слоя, а упругие деформации сдвигают и расщепляют соответствующие энергетические уровни. Соответствующие расчеты выполнены в [115] и представлены на рис. 24 для псевдоморфной пленки Ge на подложке Si (100) (рис. 24б) и псевдоморфной пленки Si на подложке Ge (100) (рис. 24в). Из рисунка видно, что расположение зон благоприятствует созданию двумерного дырочного газа в псевдоморфных пленках Ge (или твердого раствора  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ), выращенных на подложке кремния, и двумерного электронного газа в псевдоморфных пленках Si, выращенных на подложке Ge (или  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ). Видно

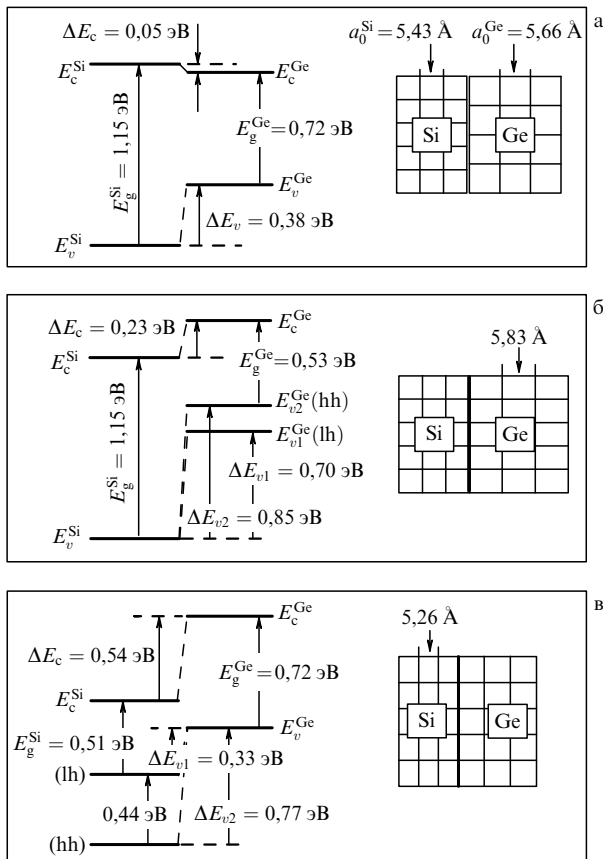


Рис. 24. Зонная диаграмма гетероперехода Ge/Si: без учета упругих деформаций и дипольных эффектов (а); для псевдоморфной пленки Ge на подложке Si(001) (б); для псевдоморфной пленки Si на подложке Ge(001) (в).

также, что гигантские негидростатические деформации приводят и к гигантским изменениям в зонной структуре. Так, ширина запрещенной зоны в псевдоморфной пленке Si на подложке Ge в два раза меньше, чем в объемном недеформированном кристалле. Сказанным, однако, не исчерпывается влияние деформации на электронные свойства гетеропереходов Si/Ge. Одновременно со снятием вырождения валентных зон в точке Г двухосное сжатие псевдоморфной пленки Ge (или  $Ge_xSi_{1-x}$ ) на подложке Si приводит к существенному изменению дисперсионной зависимости  $E(k)$ . В частности, эффективная масса "тяжелых" дырок в валентной зоне  $E_{v2}^{Ge}(hh)$  (рис. 24б) оказывается меньше эффективной массы "легких" дырок в валентной зоне  $E_{v1}^{Ge}(lh)$ . Другими словами, дырки, которые были "тяжелыми" в объемном недеформированном германии, становятся легче "легких" в псевдоморфном слое. Поскольку при комнатной температуре в широком диапазоне концентраций носителей заряда подвижность обратно пропорциональна квадрату эффективной массы, то выигрыш в подвижности при прочих равных условиях достигает одного порядка величины в псевдоморфных пленках  $Si_{0,5}Ge_{0,5}$  [116].

Упругие деформации растяжения в псевдоморфных пленках Si на релаксированных буферных слоях  $Ge_xSi_{1-x}(100)$  способствуют увеличению подвижности электронов за счет расщепления шестикратно вырожденной зоны проводимости на два изонергетических

эллипсоида с большой осью, направленной перпендикулярно току, и 4 эллипсоида, лежащих в плоскости двумерного электронного газа. Такая реконфигурация зонной структуры приводит к существенному уменьшению междолинного рассеяния на f-фононах, вызывающего изменение квазиимпульса электронов на  $90^\circ$ , но не затрагивает значительно более слабое междолинное рассеяние на g-фононах, приводящее к изменению квазиимпульса электронов на  $180^\circ$ . Совокупность перечисленных факторов обеспечила получение подвижности электронов в канале до  $2900 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$  и дырок до  $1800 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$  [117], что, в свою очередь, позволило создать полевые транзисторы, работоспособные до частот 70–80 ГГц.

Преимущества гетеропереходов GeSi/Si по сравнению с традиционным кремнием настолько велики, что ведущие производители интегральных схем уже объявили об использовании псевдоморфных гетероструктур Si/GeSi/Si в своих технологических маршрутах по выпуску чипов для СВЧ-электроники и схем памяти с использованием КМОП-технологии [118].

### 5.2. Искусственные подложки

Для создания различных полупроводниковых приборов, использующих весь спектр полупроводниковых материалов, технология эпитаксиального наращивания которых достаточно хорошо отработана, желательно иметь набор подложек, базирующихся на Si и GaAs и обеспечивающих выращивание гетероструктур с различными параметрами решетки. Такие подложки часто называют искусственными (artificial substrates). Таким образом, под искусственной подложкой принято понимать некую гетероструктуру, выращенную эпитаксиально на коммерческой подложке Si (или GaAs) и имеющую новое потребительское качество: совершенную кристаллическую структуру и гладкость поверхности, мало отличающиеся от базовой подложки, но другой параметр решетки. Это позволяет создавать приборные гетероструктуры на основе пленок твердых растворов (или соединений  $A^{III}B^V$ ) с улучшенными характеристиками.

Простое наращивание пленок GeSi на подложках кремния не привело к успеху, так как количество прорастающих дислокаций в таких пленках резко возрастает с ростом доли германия. Характерная плотность ПД в пленках постоянного состава и ее зависимость от состава  $x$  по литературным данным [1, 16, 37] представлена на рис. 25. Большая плотность ПД обусловлена большой плотностью коротких ДН, каждая из которых связана с поверхностью слоя парой прорастающих дислокаций (arms). По данным Халла и др. [16] даже на начальной стадии пластической релаксации, не превышающей 1 %, плотность ПД в подобном образце находится на уровне  $N_{TD} \sim 10^7 \text{ см}^{-2}$ , а к концу пластической релаксации возрастает до  $10^8 \text{ см}^{-2}$  (соответственно нижний и верхний пятиугольники на рис. 25). Положительные результаты по изготовлению искусственных подложек с относительно малой плотностью прорастающих дислокаций достигнуты, в основном, на гетероструктурах с плавным изменением параметра решетки.

**5.2.1. Буферные слои с изменяющимся параметром решетки.** Метод роста буферного слоя с переменным параметром решетки и со ступенчато либо линейно нарастающим содержанием новой компоненты твер-

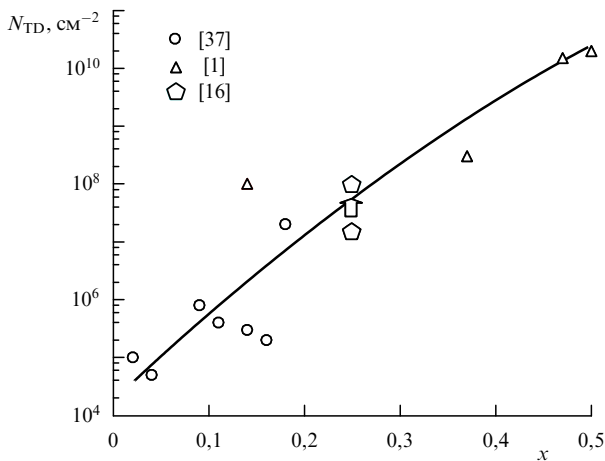


Рис. 25. Плотность прорастающих дислокаций  $N_{TD}$  в пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  постоянного состава в зависимости от концентрации германия  $x$ .

ного раствора известен давно. За последние более чем 20 лет это наиболее удачный способ выращивания совершенных полупроводниковых пленок на подложках с иным параметром решетки. Так, например, он применяется для изготовления светодиодных матриц на гетероструктурах GaAsP/GaAs в промышленных масштабах. Практически все светодиодные индикаторы изготавливаются на этом материале. основополагающие работы по этим гетероструктурам опубликованы еще в конце 1960-х гг. [119, 120]. Разница параметров решеток пленки GaAsP и подложки GaAs в данном случае не превышала  $\sim 1,5\%$ , что определялось прямозонной частью твердого раствора GaAsP, необходимой для создания эффективных светодиодов.

В последние 10–15 лет проводятся аналогичные разработки по созданию буферных слоев GeSi на Si. Совершенные гетероструктуры на основе GeSi/Si позволяют существенно улучшить свойства приборов, традиционно изготавливаемых на кремниевых подложках (подробности можно найти в недавних обзорах Шеффлера [121] и Поля [122]). Еще одной заманчивой особенностью таких ГС является их возможное использование в качестве искусственных подложек для роста GaAs — в перспективе это может привести к совмещению приборов, создаваемых на основе кремниевой технологии, с оптоэлектронными приборами, основным материалом для которых является GaAs. Ключевым элементом такого совмещения являются буферные слои на основе  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ , позволяющие создавать на их поверхности полностью релаксированные совершенные слои твердого раствора германий–кремний  $s$   $x$  вплоть до 1. Изучению особенностей выращивания таких буферных слоев и их структурных характеристик посвящено большое количество работ (см., например, [6, 113, 123–128]).

Преимущества обсуждаемого подхода заключаются в следующем: так как градиент состава выбирается малым ( $< 0,5\%$  деформаций на 1 мкм), только небольшие упругие деформации присутствуют в буферном слое в каждый момент времени. Отсюда следует, что: а) слои не содержат больших остаточных напряжений, если рост осуществляется при не очень низких температурах; б) все дислокации, вводимые в буферный слой, являются  $60^\circ$ -ными дислокациями скольжения. Дислокационные

сегменты, ответственные за компенсацию разности параметров решетки пленки и подложки, расположены в разных плоскостях буферного слоя. Поэтому взаимодействие между ними сведено к минимуму и не препятствует их скольжению; в) прорастающие дислокации могут скользить к краям шайбы, так как эффективное скалывающее напряжение в градиентном слое поддерживается на определенном уровне.

В результате интенсивных исследований эффектов пластической релаксации напряженных пленок применительно к буферным слоям с переменным параметром решетки в гетеросистемах GeSi/Si намечился прорыв в создании различных полупроводниковых приборов на основе буферных слоев  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  с  $x$  до 0,3 (см., например, обзоры [121, 122] и цитируемую в них литературу).

К сожалению, при изменении и ужесточении требований к гетероструктурам преимущества переходных слоев с меняющимся параметром решетки переходят в их недостатки. Поскольку градиент состава  $< 0,5\%$  деформаций на 1 мкм, отсюда следует, что: а) буферные слои должны быть толстыми ( $> 1\text{мкм}$ ), что увеличивает время роста и потребление расходуемых материалов. (Кёниг в работе, посвященной прогнозу широкого применения гетероструктур [129], отмечает, что тонкий буферный слой около 100 нм был бы идеальным с экономической точки зрения); б) возникает поверхностная шероховатость, накапливающаяся с толщиной и достигающая 15–20 нм, — а это серьезная проблема для использования слоев в современных технологиях; в) плотность дислокаций  $10^6 - 10^7 \text{ см}^{-2}$ , обнаруживаемая в твердых растворах  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  с  $x$ , близкими к 1, достаточно велика.

Поверхностная шероховатость — одна из основных причин роста плотности прорастающих дислокаций при больших  $x$ . К такому заключению пришли исследователи, занимавшиеся изучением кристаллических свойств переходных слоев  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  в интервале составов вплоть до  $x = 1$  [125]. Такой же вывод был сделан и для гетероструктур InGaAs/GaAs [130]. Фицджеральд и др. в ряде последних работ (см., например, [113]) связали повышенную плотность ПД в твердых растворах  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ , близких по составу к чистому германию, со стопорением разбегающихся ветвей ДН на крутых участках шероховатой поверхности, обосновав тем самым один из главных на сегодня путей улучшения структурного совершенства буферных слоев с переменным параметром решетки — строгое поддержание двумерного роста буферного слоя. Для этого они использовали изящный, но практически вряд ли широко применимый способ химико-механической полировки твердого раствора промежуточного состава, в результате которой улучшается планарность поверхности [126]. Именно так была доказана положительная роль гладкой поверхности растущего буферного слоя: в твердых растворах  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  с  $x$ , близким к 1, плотность прорастающих дислокаций была понижена на порядок и были созданы фотоприемные устройства на их основе [127]. В [113] обнаружено, что на отклоненных от сингулярной грани (100) подложках Si буферные слои GeSi более гладкие и, соответственно, имеют более высокие структурные свойства. Обнаруженная закономерность сразу же была использована для создания гетероструктуры GaAs/GeSi/Si с высокими электрофизическими параметрами в слое GaAs [131].



**5.2.2. Мезаподложки.** Наиболее близким к описанному методу борьбы с прорастающими дислокациями является метод использования так называемых мезаподложек (patterned substrates). Еще в 1989 г. Фицджеральд и др. [132] убедительно доказали, что уменьшение линейных размеров мезаобласти, приводящее к укорочению длины линий ДН, фиксирующихся на стенках мезы, способствует уменьшению их взаимодействия и мультипликации. Это повышает величину  $h_c$ , что было показано экспериментально. Одновременно следует ожидать уменьшения плотности прорастающих дислокаций по той же причине — из-за уменьшения взаимодействия ДН. Несмотря на то, что со времени публикации статьи [132] прошло более 10 лет, заметного прогресса в этом направлении не наблюдается [133–135], возможно потому, что в конечном итоге, необходимо строгое совмещение планарной технологии с искусственными подложками, изначально имеющими мезаструктуру.

**5.2.3. Дислокационные фильтры.** Фильтрующие свойства отдельных напряженных слоев и напряженных сверхрешеток (СР) по отношению к прорастающим дислокациям известны давно. Они основаны на эффекте изгиба ПД под действием тангенциально направленных сил. В результате ПД скользит к краю эпитаксиального слоя, формируя вдоль границы раздела "напряженный слой–предыдущий слой" линию дислокации несоответствия. Представляется вполне логичным использовать для понижения плотности ПД не один напряженный слой, а их систему — напряженную сверхрешетку, что впервые было предложено Мэтьюзом и др. [31]. В [136] сверхрешетка на основе InGaAs/GaAs была использована как дислокационный фильтр в ГС GaAs/Si и было показано, что при этом плотность ПД уменьшалась на порядок.

Фицджеральд в обзорной работе [6] проанализировал этот способ понижения плотности ПД и пришел к выводу о его слабой эффективности в системах, имеющих большую плотность ПД. Объясняется это тем, что в таких системах (например, Ge/Si) дислокации, скользящие в большом количестве к границам эпитаксиального слоя, взаимодействуют, что приводит к их стопорению и мультипликации, и в результате понижение их плотности не превышает одного порядка. Тем не менее определенная активность в использовании напряженных слоев, СР, а в последние годы — короткопериодных СР как дислокационных фильтров имеет место (см., например, [137, 138]).

Применение одиночных слоев также дает неплохие результаты по понижению плотности ПД. Так, в работе [139] описано выращивание твердого раствора  $Ge_{0,3}Si_{0,7}/Si(001)$  через промежуточные слои с 10, 15, 20 и 25 % Ge. Плотность ПД в верхнем слое составляла  $10^7 \text{ см}^{-2}$ . После того, как в каждый промежуточный слой твердого раствора GeSi был "вставлен" согласованный с ним тройной твердый раствор GeSiC, плотность ПД снизилась до величины менее  $10^5 \text{ см}^{-2}$ . Авторы предполагают, что в процессе промежуточных отжигах такой гетероструктуры ПД, скользящие к периферии слоев, изгибаются вследствие их более медленного движения сквозь слой GeSiC и залегают в основном вдоль границ раздела между согласованными по параметру решетки твердыми растворами GeSi и GeSiC.

### 5.3. Кремний-германиевые наноструктуры с квантовыми точками

Важным примером гетероструктур, содержащих слои, находящиеся в упруго деформированном бездефектном состоянии, являются напряженные сверхрешетки Si/GeSi и наноструктуры с квантовыми точками. Несмотря на большую разницу параметров решеток, они привлекают внимание технологов ввиду больших успехов, достигнутых в создании новых перспективных приборов с использованием квантовых эффектов. Создаются фотоэмиссионные и фотоприемные кремний-германиевые устройства — пример успешной конкуренции кремниевых СР с традиционными оптоэлектронными материалами, такими как соединения  $A^{III}B^V$ . Интерес к нанокластерам Ge в Si связан с рядом обстоятельств, а именно, а) разработана технология получения достаточно однородного по размеру массива нанокластеров Ge; б) размеры нанокластеров удалось уменьшить до значений, обеспечивающих проявление эффектов размерного квантования и электрон-электронного взаимодействия вплоть до комнатной температуры; в) разработанные методы совместимы с существующей кремниевой технологией изготовления дискретных приборов и схем.

Такие разработки, считавшиеся до последнего времени экзотическими, могут привести к настоящей революции в кремниевой интегральной технологии.

До 1992 г. основным способом создания структур, в которых удалось добиться размерного квантования носителей заряда, была фотолитография с присущим этому методу ограничением на минимальные размеры. Обнаружение эффекта упорядочения в массивах нанометровых островков в гетеросистемах Ge/Si и InAs/GaAs позволило получать бездефектные квантовые точки предельно малых размеров (10–100 нм) с плотностью  $10^{10}–10^{11} \text{ см}^{-2}$  и привело к более четкому выявлению атомоподобного характера электронных и оптических спектров этих объектов. После первых публикаций начался бурный рост исследований механизмов образования напряженных островков и особенностей их упорядочения, поскольку это открывает возможность создания массивов бездефектных (без ДН) трехмерных объектов нанометровых размеров, перспективных для практических применений в нанoeлектронике.

Развитию и современному состоянию представлений об упорядочении ансамблей квантовых точек при гетероэпитаксии посвящены обзоры Пчелякова и др. [140]. В этих работах рассмотрены движущие силы и основные механизмы эволюции и упорядочения нанообъектов в гетеросистемах с большим несоответствием параметров решеток при МЛЭ и термообработке. Проводится анализ экспериментальных наблюдений кластерообразования и самоорганизации наноструктур Ge/Si на поверхности кремния, а также обсуждаются возможные пути повышения упорядочения, уменьшения размеров и увеличения плотности германиевых квантовых точек. Приводятся также оригинальные результаты исследований электронных и оптических свойств гетероструктур и многослойных композиций с квантовыми точками Ge.

## 6. Заключение

В настоящем обзоре обобщены основные достижения за последние 10–15 лет в понимании релаксации напряженных пленок как пластической, так и упругой, при-

менительно к твердым растворам GeSi на кремнии. Именно на этом материале, выращенном методом МЛЭ, были изучены основные особенности и закономерности появления и распространения ДН, приводящих к пластической релаксации полупроводниковых напряженных пленок и многослойных гетероструктур. Система GeSi/Si представляется наиболее важной также для изучения образования ансамблей трехмерных упруго релаксированных кластеров нанометровых размеров (см., например, обзоры [140]).

Успехи в понимании особенностей введения, движения и аннигиляции дислокаций в первоначально напряженных пленках GeSi/Si позволили создать как транзисторные структуры с новыми электронными свойствами, так и полностью релаксированные композиции — искусственные подложки, на которых стало возможным выращивать GaAs и, тем самым, совместить кремниевую технологию с основным материалом оптоэлектроники. Однако, несмотря на существенные успехи в феноменологическом описании релаксации напряженных пленок через введение ДН, до полного понимания этого процесса еще далеко. Сложность, многофакторность и многостадийность пластической релаксации псевдоморфных пленок пока затрудняют создание ее последовательной математической модели. Серьезного исследования требует процесс зарождения ДН на атомарном уровне.

За последние пять лет резко возрос интерес исследователей к образованию островковых пленок. Это явление имело большой научный и практический резонанс вследствие того, что оно открывает реальную возможность создавать бездефектные трехмерные центры большой плотности ( $> 10^{10} \text{ см}^{-2}$ ) с размерами, обеспечивающими проявление эффектов размерного квантования и электрон-электронного взаимодействия вплоть до комнатной температуры. Упругая релаксация деформаций в эпитаксиальных пленках и трехмерных островках Ge на Si является ключевым фактором, обуславливающим морфологический переход планарная пленка — островковая пленка. Неоднородность релаксации деформаций и их зависимость от формы и размеров островка влияют на последующие этапы эволюции трехмерных центров, включая их плотность и пространственное распределение. Это явление широко освещалось в научной литературе и в сжатом виде рассмотрено в настоящем обзоре как один из реальных путей бездефектной релаксации напряжений в пленках.

За прошедшее десятилетие появились и получили развитие новые подходы к релаксации пленок, основанные на перераспределении напряжений между растущей пленкой и тонкой (или мягкой) мембраной-подложкой, не требующие введения ДН. Принципиальная возможность бездислокационной релаксации пленок с использованием различного типа мембранных подложек была продемонстрирована многократно. Однако проблемы упругой релаксации совершенных пленок на полупроводниковых подложках больших размеров, используемых в эпитаксиальной технологии, до сих пор не решены.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 00-02-17690 и 00-02-17638), программ "Ведущие научные школы России" (грант 00-15-96806) и "Перспективные технологии и приборы для микро- и нанoeлектроники", а также INTAS (гранты 97-10628 и 99-00125).

## Список литературы

1. Kvam E P, Maher D M, Humphreys C J J. *Mater. Res.* **5** 1900 (1990)
2. Frank F C, Van der Merwe J H *Proc. Roy. Soc. London Ser. A* **198** 205 (1949)
3. Matthews J W J. *Vac. Sci. Technol.* **12** 126 (1975)
4. Gillard V T, Nix W D, Freund L B J. *Appl. Phys.* **76** 7280 (1994)
5. Matthews J W, Blakeslee A E J. *Cryst. Growth* **27** 118 (1974)
6. Fitzgerald E A. *Mater. Sci. Rep.* **7** 87 (1991)
7. Fisher A. *Appl. Phys. Lett.* **64** 1218 (1994)
8. Гутаковский А К, Пчеляков О П, Стенин С И *Кристаллография* **25** 806 (1980)
9. Green M L et al. *J. Appl. Phys.* **69** 745 (1991)
10. Houghton D C et al. *Appl. Phys. Lett.* **56** 460 (1990)
11. Houghton D C et al. *J. Appl. Phys.* **67** 1850 (1990)
12. People R, Bean J C. *Appl. Phys. Lett.* **47** 322 (1985)
13. Bolkhovityanov Yu B et al. *Thin Solid Films* (2001) (in press)
14. Bai G et al. *J. Appl. Phys.* **75** 4475 (1994)
15. Hirth J P, Lothe J *Theory of Dislocations* 2nd ed. (New York: Wiley, 1982)
16. Hull R, Bean J C, Buescher C J. *Appl. Phys.* **66** S837 (1989)
17. Hull R et al. *Appl. Phys. Lett.* **65** 327 (1994)
18. Stach E A et al. *J. Appl. Phys.* **83** 1931 (1998)
19. Hull R et al. *Phys. Stat. Solidi A* **171** 133 (1999)
20. Houghton D C J. *Appl. Phys.* **70** 2136 (1991)
21. Perovic D D, Houghton D C. *Inst. Phys. Conf. Ser.* (146) 117 (1995)
22. Alexander H, Haasen P. *Solid State Phys.* **22** 27 (1968)
23. Farber B Ya, Iunin Yu L, Nikitenko V I. *Phys. Stat. Solidi A* **97** 469 (1986)
24. Иунин Ю Л и др. *ЖЭТФ* **100** 1951 (1991)
25. Iunin Yu L, Nikitenko V I. *Phys. Stat. Solidi A* **171** 17 (1999)
26. Yonenaga I. *Phys. Stat. Solidi A* **171** 41 (1999)
27. Perovic D D et al. *Thin Solid Films* **183** 141 (1989)
28. Wickenhauser S et al. *Appl. Phys. Lett.* **70** 324 (1997)
29. Stach E A et al. *Microsc. Microanal.* **4** 294 (1998)
30. Jain S C et al. *J. Appl. Phys.* **87** 965 (2000)
31. Matthews J W, Blakeslee A E, Mader S. *Thin Solid Films* **33** 253 (1976)
32. Kamat S V, Hirth J P J. *Appl. Phys.* **67** 6844 (1990)
33. Eaglesham D J et al. *Phil. Mag. A* **59** 1059 (1989)
34. Hull R, Bean J C J. *Vac. Sci. Technol. A* **7** 2580 (1989)
35. Mooney P M et al. *J. Appl. Phys.* **75** 3968 (1994)
36. Beanland R J. *Appl. Phys.* **77** 6217 (1995)
37. Vdovin V I. *Phys. Stat. Solidi A* **171** 239 (1999)
38. Jain S C, Willander M, Maes H. *Semicond. Sci. Technol.* **11** 641 (1996)
39. Tersoff J, LeGoues F K. *Phys. Rev. Lett.* **72** 3570 (1994)
40. Shchukin V A, Bimberg D. *Appl. Phys. A* **67** 687 (1998)
41. Ozkan C S, Nix W D, Gao H. *Appl. Phys. Lett.* **70** 2247 (1997)
42. Cullis A G, Pidduck A J, Emery M T J. *Cryst. Growth* **158** 15 (1996)
43. Hu S M J. *Appl. Phys.* **69** 7901 (1991)
44. Matthews J W, Mader S, Light T B J. *Appl. Phys.* **41** 3800 (1970)
45. Dodson B W, Tsao J Y. *Appl. Phys. Lett.* **51** 1325 (1987); **52** 852 (1988)
46. Fox B A, Jesser W A J. *Appl. Phys.* **68** 2801 (1990)
47. Jesser W A, Fox B A J. *Electron. Mater.* **19** 1289 (1990)
48. Hull R, Bean J C. *Appl. Phys. Lett.* **54** 925 (1989)
49. Gillard V T, Nix W D, Freund L B J. *Appl. Phys.* **76** 7280 (1994)
50. Freund L B J. *Appl. Phys.* **68** 2073 (1990)
51. Fitzgerald E A et al. *Phys. Stat. Solidi A* **171** 227 (1999)
52. Fisher A et al. *Phys. Rev. B* **54** 8761 (1996)
53. Hagen W, Strunk H. *Appl. Phys.* **17** 85 (1978)
54. Rajan K, Denhoff M J. *Appl. Phys.* **62** 1710 (1987)
55. Вдовин В И (частное сообщение)
56. Beanland R J. *Appl. Phys.* **72** 4031 (1992)
57. LeGoues F K, Meyerson B S, Morar J F. *Phys. Rev. Lett.* **66** 2903 (1991)
58. LeGoues F K. *Phys. Rev. Lett.* **72** 876 (1994)
59. Capano M A. *Phys. Rev. B* **45** 11768 (1992)
60. Tuppen C G, Gibbings C J, Hockly M J. *Cryst. Growth* **94** 392 (1989)
61. Houghton D C et al. *J. Appl. Phys.* **67** 1850 (1990)
62. Liu J L et al. *Appl. Phys. Lett.* **75** 1586 (1999)

63. Vdovin V I *J. Cryst. Growth* **172** 58 (1997)
64. Gosling T J *J. Appl. Phys.* **74** 5415 (1993)
65. Dentel D et al. *J. Cryst. Growth* **191** 697 (1998)
66. Gosling T J et al. *J. Appl. Phys.* **73** 8267 (1993)
67. Houghton D C, Davies M, Dion M *Appl. Phys. Lett.* **64** 505 (1994)
68. Тхорик Ю А, Хазан Л С *Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах* (Киев: Наукова думка, 1983) с. 135
69. Freund L B, Nix W D *Appl. Phys. Lett.* **69** 173 (1996)
70. Zhang T Y, Su Y J *Appl. Phys. Lett.* **74** 1689 (1999)
71. Lo Y H *Appl. Phys. Lett.* **59** 2311 (1991)
72. Powell A R, LeGoues F K, Iyer S S *Appl. Phys. Lett.* **64** 324 (1994)
73. Brunner K et al. *Thin Solid Films* **321** 245 (1998)
74. Antypas G A, Edgecumbe J *Appl. Phys. Lett.* **26** 371 (1975)
75. Lau W S et al. *Jpn. J. Appl. Phys.* **36** 3770 (1997)
76. Carter-Coman C et al. *Appl. Phys. Lett.* **70** 1754 (1997)
77. Ejeckam F E et al. *Appl. Phys. Lett.* **71** 776 (1997)
78. Kästner G, Gösele U, Tan T Y *Appl. Phys. A* **66** 13 (1988)
79. Jesser W A, van der Merwe J H, Stoop P M *J. Appl. Phys.* **85** 2129 (1999)
80. Bellet D, in *Properties of Porous Silicon* (Ed. L Carnham) (London: INSPEC, 1997) p. 127
81. Romanov S I et al. *Appl. Phys. Lett.* **75** 4118 (1999)
82. Asaro R J, Tiller W A *Metall. Trans.* **3** 1789 (1972)
83. Гринфельд М А *ДАИ СССР* **290** 1358 (1986)
84. Berger P R et al. *Appl. Phys. Lett.* **53** 684 (1988)
85. Srolovitz D J *Acta metall.* **37** 621 (1989)
86. Eaglesham D J, Cerullo M *Phys. Rev. Lett.* **64** 1943 (1990)
87. Guha S, Madhukar A, Rajkumar K C *Appl. Phys. Lett.* **57** 2110 (1990)
88. Mo Y W et al. *Phys. Rev. Lett.* **65** 1020 (1990)
89. Snyder C W et al. *Phys. Rev. Lett.* **66** 3032 (1991)
90. Cullis A G et al. *J. Cryst. Growth* **123** 333 (1992)
91. Ratsch C, Zangwill A *Surface Sci.* **293** 123 (1993)
92. Spencer B J, Voorhees P W, Davis S H *J. Appl. Phys.* **73** 4955 (1993)
93. Freund L B, Jonsdottir F J. *Mech. Phys. Solids* **41** 1245 (1993)
94. Johnson H T, Freund L B *J. Appl. Phys.* **81** 6081 (1997)
95. Obayashi Y, Shintani K *J. Appl. Phys.* **84** 3142 (1998)
96. Müller P, Kern R *J. Cryst. Growth* **193** 257 (1998)
97. Kern R, Müller P *Surface Sci.* **392** 103 (1997)
98. Moll N, Scheffler M, Pehlke E *Phys. Rev. B* **58** 4566 (1998); Pehlke E et al. *Appl. Phys. A* **65** 525 (1997)
99. Kamins T I et al. *J. Appl. Phys.* **85** 1159 (1999)
100. Floro J A et al. *Phys. Rev. B* **59** 1990 (1999)
101. Ozkan C S, Nix W D, Gao H *Appl. Phys. Lett.* **70** 2247 (1997)
102. Dentel D et al. *J. Cryst. Growth* **191** 697 (1998)
103. Lafontaine H et al. *J. Vac. Sci. Tech. B* **16** 599 (1998)
104. Jesson D E et al. *Phys. Rev. Lett.* **71** 1744 (1993)
105. Dorsch W et al. *Appl. Phys. Lett.* **72** 179 (1998)
106. Cullis A G, Pidduck A J, Emeny M T *Phys. Rev. Lett.* **75** 2368 (1995)
107. Cullis A G, Pidduck A J, Emeny M T *J. Cryst. Growth* **158** 15 (1996)
108. Peiro F et al. *Appl. Phys. Lett.* **74** 3818 (1999)
109. Gao H et al. *Phil. Mag. A* **79** 349 (1999)
110. Gallas B et al. *J. Cryst. Growth* **201/202** 547 (1999)
111. Olsen G H *J. Cryst. Growth* **31** 223 (1975)
112. Lutz M A et al. *Appl. Phys. Lett.* **66** 724 (1995)
113. Samavedam S B, Fitzgerald E A *J. Appl. Phys.* **81** 3 108 (1997)
114. Dargys A, Kundrotas J *Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP* (Vilnius: Science and Encyclopedia Publ., 1994)
115. Liu L, Lee C S, Marshak A H *Solid State Electron.* **37** 421 (1994)
116. Whall T E, Parker E H C *Thin Solid Films* **367** 250 (2000)
117. König V, Glück M, Höck G *J. Vac. Sci. Technol. B* **16** 2609 (1998)
118. Ahlgren D C, Jagannathan B *Solid State Technol.* **43** 53 (2000)
119. Abrahams M S et al. *J. Mater. Sci.* **4** 223 (1969)
120. Burd J W *Trans. Metall. Soc. AIME* **245** 571 (1969)
121. Schäffler F *Semicond. Sci. Technol.* **12** 1515 (1997); *Thin Solid Films* **321** 1 (1998)
122. Paul D J *Thin Solid Films* **321** 172 (1998)
123. Fitzgerald E A et al. *Appl. Phys. Lett.* **59** 811 (1991)
124. Schäffler F et al. *Semicond. Sci. Technol.* **7** 260 (1992)
125. Fitzgerald E A et al. *J. Vac. Sci. Technol. A* **15** 1048 (1997)
126. Currie M T et al. *Appl. Phys. Lett.* **72** 1718 (1998)
127. Samavedam S B et al. *Appl. Phys. Lett.* **73** 2125 (1998)
128. Iwano H et al. *Thin Solid Films* **317** 17 (1998)
129. König U *Phys. Scripta* **68** 90 (1996)
130. Valtueña J F et al. *J. Cryst. Growth* **182** 281 (1997)
131. Sieg R M et al. *Appl. Phys. Lett.* **73** 3111 (1998)
132. Fitzgerald E A et al. *J. Appl. Phys.* **65** 2220 (1989)
133. Noble D B et al. *Appl. Phys. Lett.* **56** 51 (1990)
134. Hammond R et al. *Appl. Phys. Lett.* **71** 2517 (1997)
135. Rupp T et al. *Thin Solid Films* **294** 27 (1997)
136. Fischer R et al. *J. Appl. Phys.* **60** 1640 (1986)
137. Samonji K et al. *Appl. Phys. Lett.* **69** 100 (1996)
138. Obata T et al. *J. Appl. Phys.* **81** 199 (1997)
139. Osten H J, Bugiel E *Appl. Phys. Lett.* **70** 2813 (1997)
140. Pchelyakov O P et al. *Thin Solid Films* **367** 75 (2000); Пчеляков О П и др. *ФТП* **34** 1281 (2000)

### Silicon-germanium epilayers: physical fundamentals of growing strained and fully relaxed heterostructures

Yu.B. Bolkhovityanov, O.P. Pchelyakov, S.I. Chikichev

*Institute of Semiconductor Physics, Siberian Division of the Russian Academy of Sciences  
pros. Lavrent'eva 13, 630090 Novosibirsk, Russian Federation  
Tel./Fax (7-3832) 33-35 02  
E-mail: pch@isp.nsc.ru*

$\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  heterostructures involving two elemental semiconductors are becoming an important element in microelectronics. Their epitaxial growth requires a detailed knowledge of the mechanisms of elastic and plastic deformations in continuous and island films both at the early stages of epitaxy and during the subsequent heat treatment. The present work is a systematic review of current ideas on the fundamental physical mechanisms governing the formation of elastically strained and plastically relaxed  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  heterocompositions. In particular, the use of compliant and soft substrates and the epitaxial synthesis of nanometer-sized islands ('quantum dots') are discussed.

PACS numbers: 61.72.Lk, **62.25.+g**, 73.40.Kp, **81.15.+z**

Bibliography — 140 references

Received 17 October 2000