

УДК 621.315.592

Возможности и основные принципы управления пластической релаксацией пленок GeSi/Si и Ge/Si ступенчато изменяемого состава

Обзор

© Ю.Б. Болховитянов[¶], А.К. Гутаковский, А.С. Дерябин, О.П. Пчеляков, Л.В. СоколовИнститут физики полупроводников Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

(Получен 26 марта 2007 г. Принят к печати 14 мая 2007 г.)

Гетероструктуры GeSi/Si, состоящие из пластически релаксированного слоя с разной долей Ge, выращенного на Si(001), перекрывают параметр решетки от равного кремнию до равного германию. Такие подложки принято называть искусственными. За последние годы разработан ряд методик выращивания совершенных слоев GeSi, вплоть до 100% Ge на подложках Si(001) через промежуточный слой GeSi переменного состава. Однако во многих случаях для практических применений желательно иметь супертонкие (< 1 мкм) слои GeSi и Ge непосредственно на подложке Si(001). Авторы анализируют результаты новых методик, таких как использование в пластической релаксации гетероструктур типа GeSi/Si(001) низкотемпературного (300–400°C) буферного слоя Si, а также поверхностно-активных примесей — сурфактантов (сурьма, водород). Рассмотрены примеры искусственного введения центров зарождения дислокаций несоответствия, альтернативного их введению с шероховатой поверхности. Авторы приходят к выводу, что для расширения возможностей выращивания совершенных пластически релаксированных пленок GeSi(001) необходимо: а) иметь возможность дозированного создания центров зарождения дислокаций несоответствия и б) замедлить или полностью подавить переход механизма роста от двух- к трехмерному, чтобы затормозить зарождение дополнительных дислокаций несоответствия с поверхности напряженной пленки и соответственно дополнительных пронизывающих дислокаций.

PACS: 61.72.Ff, 68.35.Dv, 68.55.Nq, 81.05.Cy, 81.40.Ef

1. Введение

Для создания электронных приборов, использующих полупроводниковые материалы, технологии эпитаксиального наращивания которых достаточно хорошо отработана, желательно иметь набор подложек, базирующихся на Si и обеспечивающих выращивание гетероструктур с различными параметрами решетки. Гетероструктуры, состоящие из пластически релаксированного слоя Ge_xSi_{1-x} с разной величиной x , перекрывают параметр решетки от равного Si до равного Ge. Такие подложки принято называть искусственными („artificial substrates“). В последние годы технология получения таких подложек и слоев Ge_xSi_{1-x} находит все более эффективное применение в опто-, микро- и нанoeлектронике. Выдающиеся примеры приборных применений SiGe-технологии уже с 2003 года демонстрирует фирма IBM. Здесь были созданы интегральные цифровые схемы с быстродействием до 40–56 Гб/с [1]. В настоящее время на этой фирме технология эпитаксии твердых растворов Ge_xSi_{1-x} становится ключевой при создании интегральных схем с наибольшей интеграцией, минимальным энергопотреблением и максимальным быстродействием. Для приемопередатчиков в интегральных схемах достигнуты рабочие частоты свыше 60 ГГц [2]. Компания IBM совместно с Технологическим университетом штата Джорджия создала GeSi-процессор, который при комнатной температуре работает на частоте 350 ГГц. При

должном охлаждении новинка способна „разогнаться“ до 500 ГГц, в то время как современные процессоры, используемые в персональных компьютерах, имеют максимальные частоты около 4 ГГц. Использование германия в кремниевых микросхемах позволяет производителю добиться так называемого эффекта „растянутого кремния“ и снизить токи утечки, добившись, таким образом, повышенной производительности. По мнению специалистов, рекордная частота, которой можно добиться от SiGe-чипов, составляет 1 ТГц. Вполне возможно, что в будущем подобные процессоры будут использоваться в суперкомпьютерах [3]. Сотрудники Технологического института в Массачусетсе под руководством Fitzgerald разработали технологию создания виртуальных GeSi-подложек на кремнии [4–6]. На этих подложках выращены слои GaAs и практически реализованы светодиодные структуры, интегрированные с высокоскоростными цифровыми схемами для световой передачи и обработки сигналов [7]. Под руководством Koeneel была разработана новая технология выращивания пленок GeSi/Si — так называемая low-energy plasma enhanced chemical vapor deposition (LEPECVD) [8]. Искусственные подложки, полученные с применением низкоэнергетической плазмы, были использованы совместно с немецкой фирмой RWE Space Solar Power GmbH для роста пленок GaAs и получены действующие однокаскадные элементы для солнечных батарей [9]. В этом же институте изготовлены гетеропереходные GeSi-фотоприемники, работающие на длине волны 1.55 мкм [10]. Приведенные здесь примеры

[¶] E-mail: bolkhov@isp.nsc.ru

приборных применений кремниево-германиевой (SiGe) технологии открывают новую эру в эволюции элементной базы устройств опто-, микро- и нанoeлектроники.

Упомянутые выше методики выращивания совершенных слоев $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x \rightarrow 1$) основаны на использовании промежуточных буферных слоев GeSi переменного состава [4–10]. При этом толщина такого слоя составляет около 10 мкм, что для практических применений не всегда пригодно. Кроме того, необходима химическая полировка поверхности буферного слоя GeSi как на промежуточном этапе его роста ($x = 0.5$) [5], так и в процессе последующих технологических операций [7]. Однако в некоторых случаях желательно иметь супертонкие (< 1 мкм) слои $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ и Ge непосредственно на подложке Si(001).

Совершенные пленки $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ со ступенчато-изменяемым составом и с плотностью пронизывающих дислокаций не более 10^6 см^{-2} можно вырастить разными методами до $x \approx 0.15$ [11]. Проблема пластической релаксации пленок GeSi/Si с большей долей Ge, ступенчато отличных по параметру решетки, по-прежнему актуальна и находится в стадии дискуссий и поисков новых методик. В наших обзорах [11,12], опубликованных ранее, был систематизирован и обобщен достигнутый к тому времени уровень понимания фундаментальных физических механизмов формирования пластических релаксированных гетерокомпозиций в системе $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$. Цель данной работы — продолжить анализ результатов исследований, опубликованных за прошедшие после публикации предыдущих обзоров годы, включив обсуждение проблем и результатов прямого выращивания германиевых пленок на кремниевых подложках.

Как известно, в напряженных пленках GeSi/Si(001), выращиваемых на современных установках методом молекулярно-лучевой эпитаксии (а также другими методами), пластическая релаксация, т. е. образование дислокаций несоответствия (ДН), начинается при толщинах, в 10 и более раз превышающих критическую толщину псевдоморфной пленки, определяемую по Matthews и Blakeslee [13]. Это связано с отсутствием центров зарождения ДН, в частности с отсутствием пронизывающих дислокаций. Тем не менее при достижении больших толщин ДН появляются в достаточном количестве для accommodations несоответствия параметров решеток сопрягаемых материалов (f) и обеспечения равновесной остаточной упругой деформации пленок. В настоящее время общепринятыми механизмами формирования ДН являются следующие.

Наиболее популярным механизмом генерации дислокаций несоответствия в гетеросистемах типа $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ является зарождение дислокационных полупетель с поверхности растущей пленки с последующим распротранением их в гетерограницу. Такой механизм был предложен еще в 1975 г. Matthews [14] и затем регулярно обсуждался в обзорах на эту тему (см., например, [15,16]). Однако в конце 80-х годов в ряде работ было показано, что на гладкой поверхности растущей пленки

$\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ при $x \leq 0.5$ зарождение таких полупетель мало вероятно вследствие большой величины энергетического барьера, составляющего десятки и сотни эВ [17,18]. Основное внимание исследователей было обращено на обнаружение и анализ внутренних центров — источников ДН, которыми считаются различного рода дефекты [17,19–21], а также размножение (мультипликация) ранее возникших дислокаций [22–24].

Энергетический запрет на поверхностное зарождение дислокаций может сниматься при огрублении поверхности. Поверхность напряженного слоя может становиться шероховатой в процессе роста в силу действия механизма упругой релаксации. Движущей силой формирования шероховатой поверхности напряженной пленки является понижение свободной энергии системы за счет уменьшения упругих деформаций в области вершин трехмерного рельефа [25], а механизмом реализации — поверхностная миграция адатомов. Теоретические основы этого механизма, который носит название механизма АТГ [26], были заложены в работах Asaro et al [27] и Гринфельда [28]. Эффект огрубления поверхности в настоящее время получил широкое практическое применение при гетероэпитаксии сильнонапряженных структур — наноостровков Ge на Si и InAs на GaAs (см., например, обзоры [29,30]). На шероховатой поверхности вследствие геометрического усиления напряжений на неоднородностях рельефа барьер для образования ДН снижается. Jesson et al [31], по-видимому, впервые обратили внимание на то, что морфологически неустойчивая поверхность может явиться источником ДН. Причем в результате появления концентраторов напряжений на участках поверхности с резкими углублениями возможно безактивационное зарождение дислокаций. Начало введения ДН будет определяться переходом поверхности растущей напряженной пленки от планарного, соответствующего двумерному (2D или layer-by-layer) росту, к шероховатому (3D — three-dimensional) состоянию. Эти же авторы отметили, что известное влияние сурфактантов на выглаживание поверхности растущей пленки может повлиять и на ход пластической релаксации. В работе [32] авторы сравнили расчетные значения энергии активации зарождения ДН на внутренних и на поверхностных концентраторах напряжений. Энергия активации первых пропорциональна $1/f$, в то время как огрубление поверхности и связанный с ним процесс зарождения ДН пропорциональны $1/f^4$. Соответственно при небольших рассогласованиях (менее 1% по расчетам авторов) доминирующим является зарождение на внутренних дефектах структуры и мультипликация дислокаций. При f , больших чем 1%, зарождение на поверхностных концентраторах напряжений становится основным. Так как процесс огрубления поверхности термически активируемый, повышение температуры роста пленки должно способствовать появлению первых ДН при меньших толщинах. Это согласуется с многочисленными экспериментами по определению критической толщины введения ДН [15]: чем выше температура роста пленок GeSi, тем меньше эффективная критическая толщина.

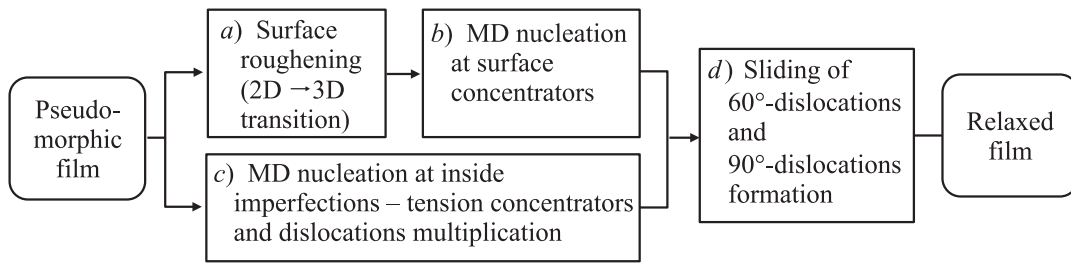


Рис. 1. Схема взаимодействия лимитирующих механизмов зарождения ДН (misfit dislocations (MD)) и их участия в пластической релаксации первоначально напряженной пленки.

Величина пластической релаксации первоначально напряженной пленки определяется суммарной длиной ДН, которая увеличивается в процессе релаксации за счет скольжения наклонных сегментов ДН, выходящих на поверхность, называемых пронизывающими дислокациями (ПД), а также за счет возрастания количества ДН. Поэтому процессами, лимитирующими развитие пластической релаксации, являются зарождение ДН, их удлинение, а при большом их количестве — взаимодействие.

Основываясь на вышеприведенных положениях, эти лимитирующие механизмы можно изобразить в виде схемы, приведенной на рис. 1. На этом рисунке зарождение ДН и скольжение ПД, обеспечивающее увеличение длины ДН и соответственно величины пластической релаксации, „включены“ последовательно. Процессы зарождения ДН на внутренних и поверхностных источниках являются конкурирующими и „включены“ параллельно. Проблемам управления факторами *a)–d)* посвящена следующая часть работы.

2. Использование особенностей низкотемпературной эпитаксии Si и GeSi

Пластически релаксированные гетероструктуры $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ со ступенчатым изменением доли Ge более 0.15, выращенные при температуре 550°C и выше (назовем их классическими), имеют плотность ПД на уровне $10^8–10^9\text{ см}^{-2}$ [18,33–36] (рис. 2). За последнее десятилетие вышел ряд работ [37–44], в которых было показано, что пленки $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ со значениями x до 0.3 релаксируют с конечной плотностью ПД $10^5–10^6\text{ см}^{-2}$, если на подложке Si предварительно выращивается буферный слой Si при температурах 350–400°C и толщиной 50–200 нм — LT-Si (Low-temperature Si). Основные данные из этих работ также представлены на рис. 2. Выделенные штрихпунктирной окантовкой значения плотности ПД в таких гетероструктурах на 3–4 порядка ниже, чем в пленках тех же составов, но выращенных без LT-Si. На рис. 3 показано типичное изображение поперечного среза такой гетероструктуры, полученное методом просвечивающей элек-

тронной микроскопии (ПЭМ). ПД в слое GeSi не обнаруживаются. Наблюдаемые дислокационные полупетли, распространяющиеся в подложку, по утверждению авторов работы [45] свидетельствуют о реализации размножения дислокаций по механизму Франка–Рида (MFR). Авторы этой работы считают, что такой механизм начинает работать вынужденно при недостаточной плотности ПД для обеспечения пластической релаксации. При этом необходимо достижение определенной толщины пленки для „включения“ этого механизма [46]. По предположению авторов [45], инжекция дислокаций в подложку, сопровождающая работу этого механизма, может счи-

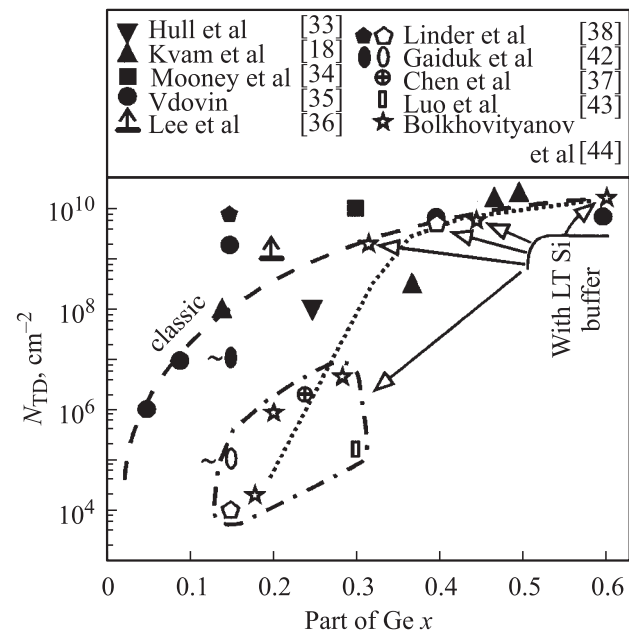


Рис. 2. Плотность пронизывающих дислокаций (ПД) в пластически релаксированных пленках GeSi ступенчато изменяемого состава в зависимости от доли Ge по данным разных авторов. Затусованные символы — рост пленок без LT-Si при температурах 550°C и выше („классический“ вариант). Открытые символы — плотность ПД в слоях, выращенных с использованием буферного слоя LT-Si. Штриховая и пунктирная линии нанесены для визуализации общей тенденции изменения величин. Штрихпунктирная линия окантовывает данные по росту слоев GeSi с пониженной плотностью ПД.

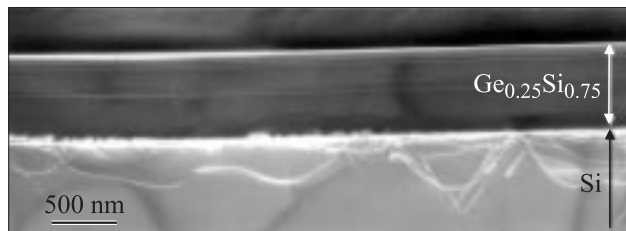


Рис. 3. ПЭМ-изображение поперечного среза образца $\text{Ge}_{0.25}\text{Si}_{0.75}/\text{Si}(001)$, выращенного с использованием низкотемпературного буферного слоя Si (350°C). Светлые полосы — встроены слои напряженного Si толщиной 15–20 нм.

таться косвенным признаком низкой плотности дефектов структуры в объеме релаксированной пленки.

Анализ литературных данных свидетельствует о том, что низкотемпературные буферные слои Si (и GeSi) по-разному воздействуют на процесс пластической релаксации пленки GeSi в зависимости от температуры их выращивания. Так, Luo et al [43] показали, что с увеличением толщины буферного слоя LT-Si (температура роста $T \approx 400^\circ\text{C}$) степень пластической релаксации пленки GeSi существенно уменьшается, а полуширина пика пленки на рентгеновской кривой качания сужается при прочих равных условиях, что предполагает пассивацию внутренних центров зарождения дислокаций и уменьшение плотности ПД. В работах [47–49] было показано, что наряду с уменьшением начальной плотности пронизывающих дислокаций в выращенных при таких условиях гетероструктурах $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ с $x \leq 0.3$ (температура роста LT-Si $T \approx 350\text{--}400^\circ\text{C}$) наблюдается увеличение скорости их скольжения по сравнению со скоростью в классических гетеросистемах, выращиваемых при температуре 550°C без буферных слоев. Такое увеличение скорости скольжения ПД является одной из причин уменьшения их конечной плотности в пластически релаксированных гетероструктурах $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ с $x \leq 0.3$ (подробности см. в разд. 8). В то же время буферные слои Si и GeSi, выращенные при температурах ниже 200°C , оказывают обратное воздействие на ход пластической релаксации основной пленки GeSi. Так, из работ [50,51] следует, что буферные слои Si и GeSi, выращенные при температурах вблизи 150°C , приводят к 100%-й пластической релаксации основной пленки GeSi и высокой плотности ПД (подробности см. в разд. 7).

Как видно из рис. 2, с ростом доли Ge свыше 0.3, несмотря на применение LT-Si, плотность пронизывающих дислокаций вновь возрастает [47,48], достигая больших величин $10^8\text{--}10^9\text{ см}^{-2}$. Основной причиной ограниченного положительного действия низкотемпературного буферного слоя Si, по нашему мнению, является все возрастающий с ростом доли Ge вклад поверхностных несовершенств как источников зарождения ДН, которые становятся доминирующими [32].

3. Зарождение дислокаций на поверхностных источниках

Поверхность напряженной пленки всегда предполагалась одним из основных источников ДН [31], однако прямых экспериментальных подтверждений до последнего времени не было. В ряде работ при электронномикроскопических исследованиях поперечных срезов пластически релаксированных гетероструктур наблюдались только довольно сложные дефекты, находившиеся в понижениях грубошероховатой поверхности пленок InGaAs/GaAs [52], а также пленок GeSi/Si, отожженных при 800°C [53]. Впервые дислокационные полупетли, зарождающиеся вблизи поверхности, были обнаружены в нашей работе при изучении начальных стадий пластической релаксации пленок GeSi с долей Ge, близкой к 0.3 [54].

При выращивании пленок GeSi такого состава при температуре 350°C наблюдалось существенное изменение картины дифракции быстрых электронов (ДБЭ) по достижению пленкой толщины 40–50 нм, что свидетельствовало о переходе от двумерного к трехмерному

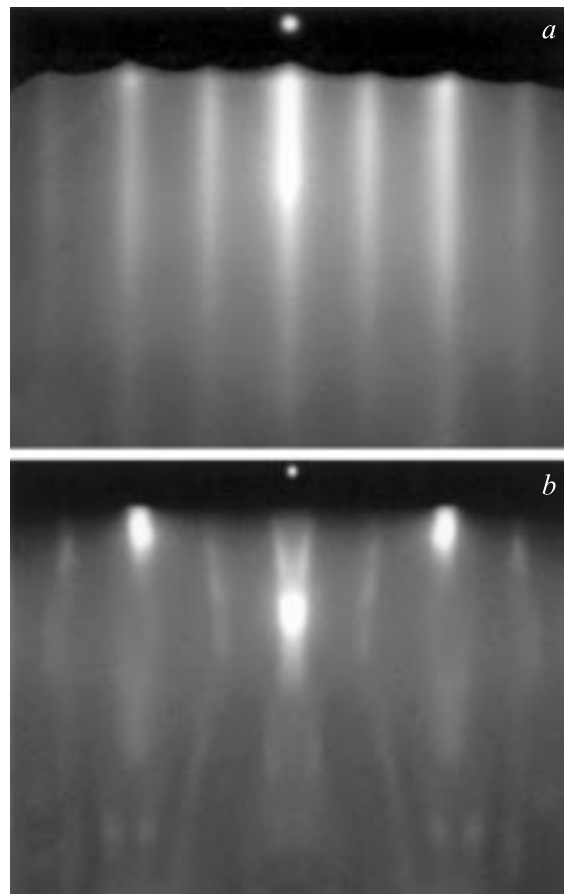


Рис. 4. Картины дифракции быстрых электронов: *a* — от гладкой поверхности пленки $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}/\text{Si}(001)$ толщиной 30 нм и *b* — более толстой пленки того же состава. Данные из работы [47].

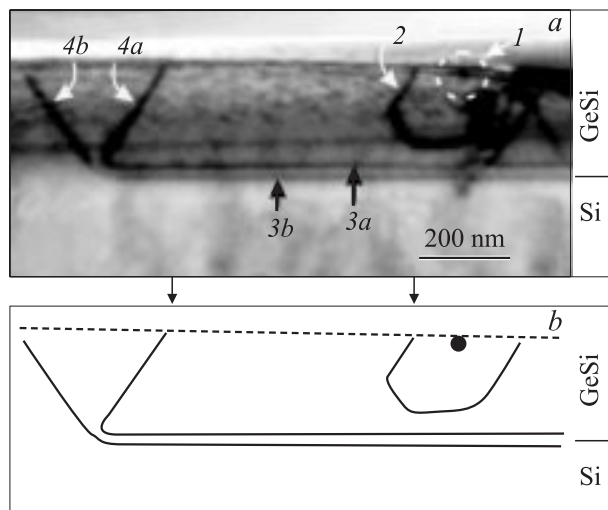


Рис. 5. *a* — светлопольное двулучевое ПЭМ-изображение поперечного среза образца $\text{Ge}_{0.32}\text{Si}_{0.68}/\text{Si}(001)$ после его отжига при 350°C в течение 10 мин. *1* — предполагаемое место зарождения ДН; *2* — дислокационная полупетля; *3a*, *3b* — дислокации несоответствия; *4a*, *4b* — пронизывающие дислокации. Гетерограница $\text{Ge}/\text{Si}(001)$ наклонена на 10° вокруг $[110]$. *b* — схема залегания дислокаций. Данные из работы [59].

механизму роста (2D–3D). Этот переход показан на рис. 4. Наблюдаемая на начальной стадии роста дифракционная картина в виде протяженных рефлексов (рис. 4, *a*) видоизменяется: на ней появляются точечные рефлексы (рис. 4, *b*). Это свидетельствует о появлении трехмерного рельефа. Дополнительные полосы, идущие под углом, так называемые шевронподобные (chevron-like) рефлексы, свидетельствуют о появлении на растущей поверхности пленки видцинальных плоскостей типа (115) или (117).

Появившийся трехмерный поверхностный рельеф может способствовать зарождению дислокаций [55]. Понижение температуры роста препятствует формированию 3D рельефа, однако, как будет видно из дальнейшего, зарождение дислокаций несоответствия на поверхностных неоднородностях оказывается возможным даже при 350°C .

На рис. 5 представлен фрагмент изображения поперечного среза гетероструктуры $\text{Ge}_{0.32}\text{Si}_{0.68}/\text{Si}(001)$ и соответствующая схема конфигурации дислокационных линий. На этом изображении видно предполагаемое место поверхностного зарождения дислокации — потемнение у поверхности пленки *1*, симметрично расположенное по отношению к боковым ветвям дислокационной полупетли *2*, распространяющейся с поверхности в глубь пленки, но еще не достигшей границы раздела. Видна также полупетля, уже сформировавшая отрезок дислокации несоответствия *3a* и пронизывающую дислокацию *4a*. (Дислокация несоответствия *3b* и ее выходящая на поверхность ветвь *4b* расположены в плоскости скольжения (111), наклоненной в другую сторону, и, по-

видимому, принадлежат к дислокационному семейству, образованному другим центром зарождения).

Более подробный анализ ПЭМ-изображений этого образца приведен в работе [54]. Авторам этой работы удалось впервые экспериментально зафиксировать начальную стадию образования ДН благодаря следующим факторам. Во-первых, низкая температура роста пленки $\text{Ge}_{0.32}\text{Si}_{0.68}/\text{Si}(001)$, равная 300°C , что позволило получить эту пленку в псевдоморфном состоянии при толщине 200 нм и затем изучить самые начальные стадии ее релаксации. Во-вторых, низкая температура послеростового отжига (350°C), при которой скорость скольжения возникающих дислокационных полупетель имеет величину не более 10^{-6} см/с [49]. И в-третьих, высокая плотность центров зарождения ДН ($\sim 10^7$ см $^{-2}$) вследствие высокого уровня напряжений из-за большой доли Ge в пленке. При таких условиях некоторые дислокационные полупетли, зародившись в приповерхностной области пленки, не успевали за время отжига распространиться до границы с подложкой и были визуализированы с помощью поперечных ПЭМ-срезов.

После 10 мин отжига в атмосфере аргона плотность поверхностных центров — источников дислокаций несоответствия в этом образце, по данным ПЭМ, составляла $(2-3) \cdot 10^7$ см $^{-2}$, а плотность ПД — $1.1 \cdot 10^8$ см $^{-2}$. Плотность ПД превышает плотность центров зарождения ДН в несколько раз вследствие того, что эти центры являются многозачетными. Так, на рис. 5 видно, что источник *1* является центром зарождения по крайней мере двух дислокационных полупетель. Другой пример формирования нескольких близко расположенных ДН одного знака показан на рис. 6. Здесь на фрагменте (рис. 6, *a*) цифрами *1-4* отмечены прорастающие сегменты ДН, имеющие одинаковый наклон и скользящие в одном и том же семействе плоскостей $\{111\}$. Эти факты косвенно указывают на наличие одного общего для данных ДН многозачетного дислокационного источника. На увеличенном фрагменте этого же рисунка (рис. 6, *b*) стрелкой *A* отмечена темная область, имеющая дифракционный контраст и расположенная на линии, соединяющей два прорастающих сегмента более крупной дисло-

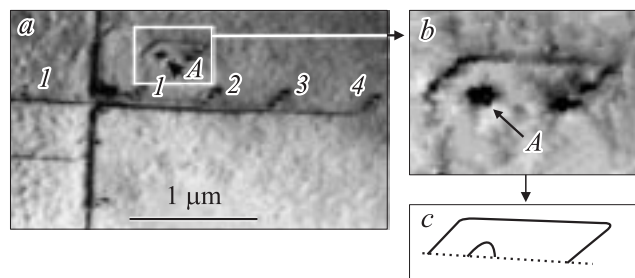


Рис. 6. Планарное ПЭМ-изображение гетеросистемы $\text{Ge}_{0.32}\text{Si}_{0.68}/\text{Si}(001)$ (*a*), увеличенный фрагмент этого изображения (*b*) и соответствующая схема дислокаций (*c*). Стрелкой *A* отмечен дислокационный источник; направление электронного пучка — $[001]$.

кационной полупетли. Такой контраст может возникать на изображении как мелкого концентратора напряжений, так и маленькой дислокационной петли (см. схему на рис. 6, с). Этот пример является дополнительным подтверждением работы приповерхностных источников ДН. В последнем случае таким источником сформирована только одна дислокационная полупетля, достигшая гетерограницы и сформировавшая сегмент ДН.

4. Пассивация зарождения дислокаций несоответствия на поверхностных несовершенствах. Сурфактанты

Возможность использования сурфактантов как рычага влияния на процесс пластической релаксации была отмечена еще Jesson et al [31]. В условиях, при которых переход от двумерного к трехмерному механизму роста напряженной пленки приводит к массовому зарождению ДН на возникающих при этом шероховатостях поверхности, пассивация такого перехода отодвигает начало интенсивной пластической релаксации этой пленки. Как известно, выглаживающими свойствами обладают сурфактанты — сурьма и атомарный водород [56–58]. В процессе изучения гетероструктуры $\text{Ge}_{0.32}\text{Si}_{0.68}/\text{Si}(001)$ после отжига в атмосфере различных газов [54] было обнаружено существенное уменьшение величины пластической релаксации, а также плотности пронизывающих дислокаций в образце, отожженном в водороде, по сравнению с образцом, отожженным в аргоне, при прочих равных условиях (см. таблицу). Уменьшение степени пластической релаксации напряжений и плотности ПД при отжиге в атмосфере водорода косвенно указывают на снижение скорости зарождения ДН и темпа пластической релаксации.

Еще более существенная разница наблюдалась после отжига аналогичной гетероструктуры в вакууме и водороде [59]. На рис. 7 представлены зависимости величины пластической релаксации в образцах этой гетероструктуры от температуры отжига. Наибольшее различие наблюдается на начальных стадиях пластической релаксации исходно псевдоморфных пленок. Видно, что при отжиге в водороде при $T_{\text{ann}} \approx 400^\circ\text{C}$ степень релаксации в 20 раз ниже, чем при отжиге в вакууме. В процессе дальнейшего отжига при более высоких

Плотность пронизывающих дислокаций (ПД) и степень релаксации напряжений в пленках $\text{Ge}_{0.32}\text{Si}_{0.68}$, отожженных при температуре 350°C в атмосфере Ar и H_2

Время отжига, мин	Атмосфера отжига	Плотность ПД, см^{-2}	Степень релаксации
30	Ar	$(4-8) \cdot 10^8$ *	9**
30	H_2	10^8 *	2*

Примечание. * по данным ПЭМ, ** по данным рентгеновской дифрактометрии.

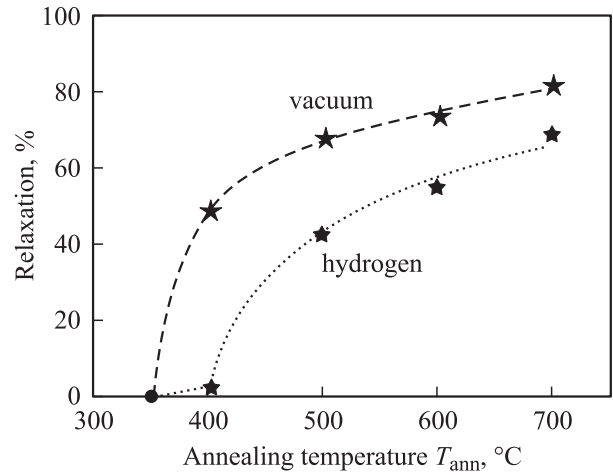


Рис. 7. Увеличение доли пластической релаксации пленки $\text{Ge}_{0.28}\text{Si}_{0.72}/\text{Si}(001)$ с температурой отжига T_{ann} в течение 1 ч в вакууме (верхняя кривая) и в водороде (нижняя кривая). Толщина пленки — 200 нм. Линии нанесены для удобства сравнения.

температурах это различие уменьшается, но тем не менее степень релаксации пленок, отожженных в вакууме, всегда оказывается выше.

Учитывая, что при температуре $T_{\text{ann}} \approx 400^\circ\text{C}$ диффузия водорода в объем пленки незначительна, приведенные результаты указывают на следующее. Во-первых, они подтверждают тезис о зарождении ДН из приповерхностных источников. Во-вторых, образование таких источников при отжиге в водороде существенно замедляется, т.е. происходит пассивация поверхности напряженной пленки водородом и нет огрубления рельефа поверхности. Несмотря на низкий коэффициент диссоциативной адсорбции H_2 на $\text{Si}(001)$ при температурах $400-500^\circ\text{C}$ [60], можно предположить, что атомарный водород присутствует на поверхности пленки, если образец отжигается в водороде при атмосферном давлении. Vasek et al [61] определили, что небольшие величины покрытия водородом увеличивают энергию активации движения адатомов Si на поверхности $\text{Si}(001)$. LaPierre et al [62] предположили, что атомарный водород понижает диффузионную длину поверхностной миграции адатомов. В соответствии с этими представлениями наличие атомарного водорода на поверхности растущей пленки GeSi расширяет диапазон условий, при которых механизм роста напряженной пленки $\text{GeSi}/\text{Si}(001)$ является двумерным (layer-by-layer) [63]. Таким образом, на основе этих результатов можно заключить, что управляя рельефом ростовой поверхности напряженных пленок, можно управлять процессом их пластической деформации.

Особенности пластической релаксации пленок GeSi/Si в присутствии Sb как сурфактанта были изучены нами в работах [64,65]. На рис. 8 приведены величины плотности ПД в релаксированных пленках $\text{GeSi}/\text{Si}(001) : \text{Sb}$ в

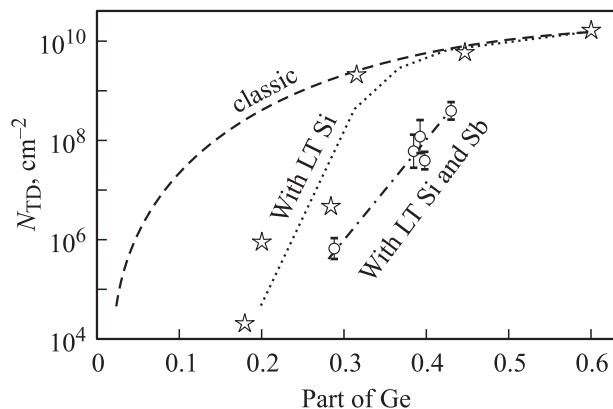


Рис. 8. Плотность пронизывающих дислокаций в зависимости от состава пластически релаксированной пленки GeSi/Si(001), выращенной с участием сурфактанта Sb. Для сравнения штриховая и пунктирная линии, а также часть экспериментальных точек взяты из рис. 2.

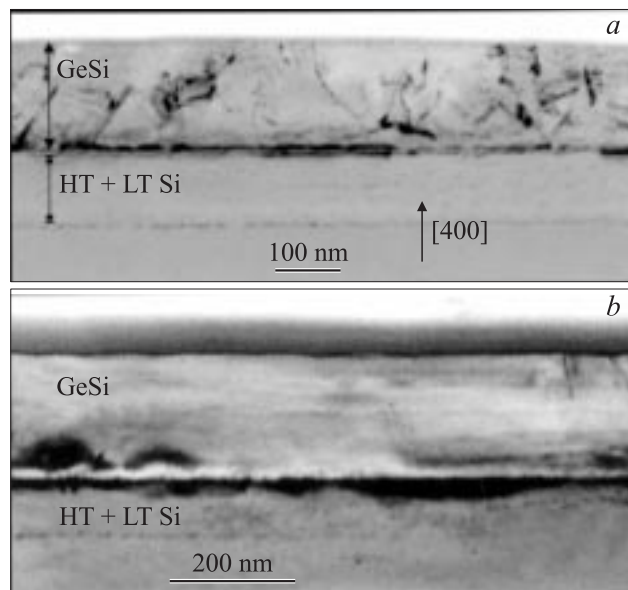


Рис. 9. ПЭМ-изображение поперечных срезов пленок $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$, выращенных: *a* — без использования сурфактанта, $x = 0.45$; *b* — с использованием Sb в качестве сурфактанта, $x = 0.43$. Данные из работы [65].

зависимости от состава. Для сравнения и обнаружения тенденции часть данных перенесена из рис. 2. Введение сурфактанта Sb (рис. 8, штрихпунктирная кривая), выглаживающего поверхность пленки на стадии псевдоморфного роста, понижает плотность ПД в пластически релаксированной гетероструктуре более чем на порядок величины. На рис. 9 показаны изображения поперечных срезов образцов с пленками GeSi близкого состава, выращенных без (рис. 9, образец *a*) и с использованием сурфактанта (рис. 9, образец *b*). Из сравнения поперечных срезов видно, что образец *b* имеет плотность

ПД на порядок меньше. По-видимому, при доле Ge в пленках GeSi более 0.3 использование Sb как сурфактанта, замедляя образование шероховатой поверхности напряженной пленки, отодвигает начало образования ДН. Тем не менее, несмотря на уменьшение плотности ПД, их число для составов пленок GeSi с $x \approx 0.4$ остается слишком велико для того, чтобы такие пленки были востребованы для практических применений.

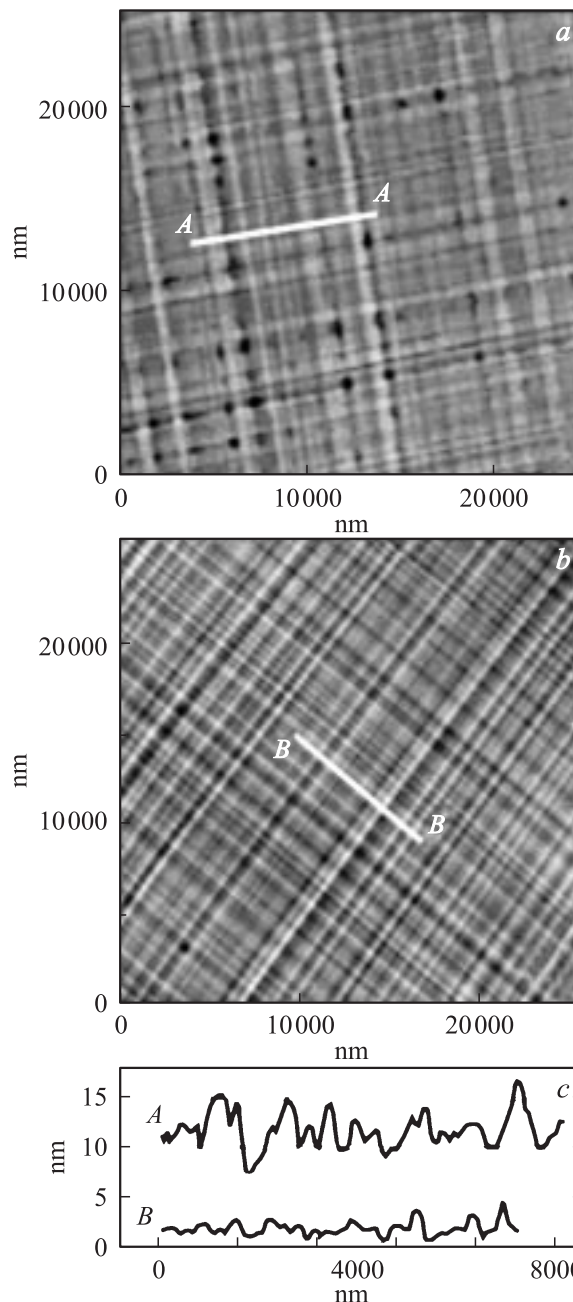


Рис. 10. *a* и *b* — АСМ-изображения поверхности пленок GeSi/LT-Si(001) с долей Ge 0.28 (*a*) и 0.29 (*b*). Пленка (*b*) выращена с использованием Sb. Среднеквадратичная шероховатость — 2.2 нм для (*a*) и 0.85 нм — для (*b*). (*c*) — профили изменения толщины вдоль сечений A-A и B-B, произвольно выбранных на изображениях (*a*) и (*b*). Данные из работы [64].

В то же время пленка $\text{Ge}_{0.29}\text{Si}_{0.71}$ (рис. 10, образец *b*) с долей Ge, равной 0.29, выращенная с использованием 1 монослоя Sb (LT-Si + 1ML Sb), имеет не только достаточно низкую плотность ПД (что достигалось и без участия Sb), но также очень малую величину поверхностной шероховатости. На рис. 10, *b* показано изображение поверхности этой пленки, полученное с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ). Для сравнения на рис. 10, *a* приведено изображение поверхности пленки $\text{Ge}_{0.28}\text{Si}_{0.72}$ аналогичной толщины, но выращенной без сурфактанта. Обе картины поверхности, приведенные на рис. 10, демонстрируют рельеф в виде длинных прямых полос, обусловленных присутствием в пленке протяженных ДН, но пленка GeSi, выращенная с использованием Sb, имеет среднеквадратичную шероховатость (RMS roughness) 0.85 нм, — одну из самых низких для пленок GeSi/Si(001) составов, близких к доле Ge ≈ 0.3 . На рис. 10, *c* в одном масштабе представлены профили рельефа вдоль линий А–А и В–В на соответствующих АСМ-изображениях. Видно заметное уменьшение шероховатости на образце *b*.

Уменьшение шероховатости поверхности пластически релаксированной гетероструктуры в присутствии Sb можно объяснить как уменьшением кратности действия поверхностных источников дислокаций несоответствия в присутствии сурфактанта, так и уменьшением латеральной подвижности адатомов в его присутствии. Таким образом, использование сурфактанта в процессе пластической релаксации напряженной гетероструктуры является полезным приемом, позволяющим отдалить начало введения ДН, зарождающихся на поверхностных источниках, и уменьшить их плотность. Одновременно уменьшается величина шероховатости поверхности релаксированной гетероструктуры.

5. Зарождение дислокаций несоответствия на внутренних источниках

К внутренним источникам ДН можно отнести различного рода концентраторы напряжений, связанные с остаточными загрязнениями поверхности подложки или с дефектами кристаллической структуры наращиваемых слоев [66]. Современные методики очистки поверхности подложки кремния перед ростом позволяют существенно уменьшить концентрацию остаточных загрязнений [67], а с помощью наращивания буферных слоев Si пространственно отдалить напряженную пленку от этих несовершенств.

На рис. 11 представлено электронно-микроскопическое изображение пленки $\text{Ge}_{0.42}\text{Si}_{0.58}$ на начальной стадии пластической релаксации. По данным рентгеновской дифракции, величина релаксации этой пленки составила 0.7%. На изображении наблюдаются в основном короткие линии ДН, характерные для начальных стадий процесса пластической деформации. Кроме этого,

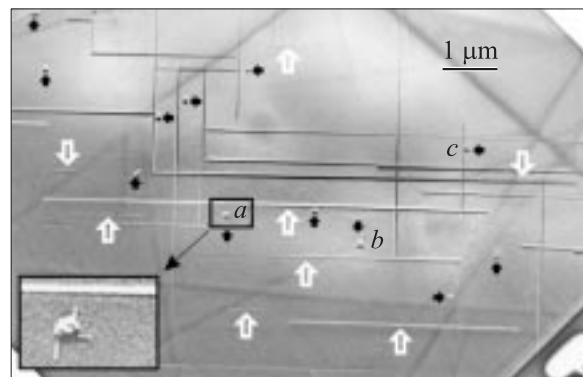


Рис. 11. ПЭМ-изображение продольного среза пленки $\text{Ge}_{0.42}\text{Si}_{0.58}/\text{Si}(001)$ толщиной 20 нм, выращенной с использованием LT-Si (350°C) и ~ 1 монослоя Sb при 450°C . Наблюдаемая плотность пронизывающих дислокаций $6 \cdot 10^7 \text{ см}^{-2}$. Данные из работы [65].

визуализируются локальные области с черно-белым дифракционным контрастом, обычно возникающим на концентраторах напряжений в объеме исследуемой тонкой фольги (отмечены черными стрелками). По нашему мнению, эти концентраторы могут быть связаны с остаточными карбидными частицами на поверхности подложки. Как видно на рис. 11, только вблизи трех из всех видимых на изображении концентраторов напряжений визуализируются дислокации, которые в дальнейшем могут сформировать ДН (центры *a*, *b*, *c*). (Подробно механизм образования ДН на таких концентраторах описан в нашей работе [68]). Следует обратить внимание на то, что все дислокационные линии, полностью уместающиеся в пределах рисунка (отмечены белыми стрелками), не связаны с какими-либо видимыми дефектами структуры. Можно предположить, что, несмотря на использование Sb как сурфактанта, эти дислокации несоответствия были генерированы поверхностными источниками. Таким образом, в данном случае имеются как поверхностные, так и внутренние центры зарождения. При этом в данных условиях зарождение ДН на поверхностных несовершенствах оказывается доминирующим по сравнению с генерацией ДН внутренними концентраторами напряжений. Плотность ПД в этой пленке уже на самой начальной стадии пластической релаксации была близка к 10^8 см^{-2} (что видно также и на рис. 8). Отсюда следует, что для выращивания релаксированных пленок с низкой плотностью ПД необходимо реализовать сравнительно небольшое ($\sim 10^5 \text{ см}^{-2}$) количество контролируемо создаваемых центров зарождения ДН, которые, во-первых, должны иметь малую энергию активации зарождения дислокаций и, во-вторых, должны быть многоразовыми, т. е. должны генерировать более одной дислокации.

Внутренние концентраторы напряжений как центры зарождения ДН могут быть созданы искусственно: либо путем применения специальных режимов роста [50,51], либо методом ионной бомбардировки [69–72]. В недавно

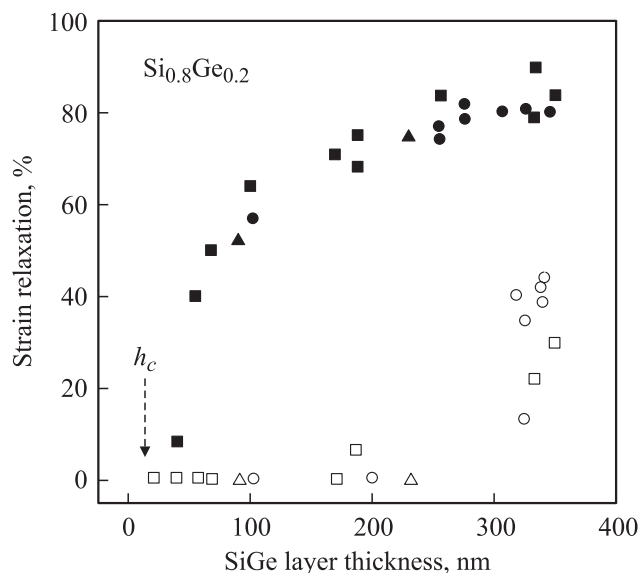


Рис. 12. Величина пластической деформации в зависимости от толщины пленок GeSi/Si(001), выращенных и затем отожженных при 850°C. Открытые символы — для пленок сразу после роста, заштрихованные — после создания центров зарождения ДН путем ионной бомбардировки. Три типа точек соответствуют трем разным установкам. С разрешения авторов работы [72].

опубликованной работе Cai et al [72] приводятся результаты по искусственному стимулированию пластической релаксации ранее выращенных пленок GeSi/Si(001) путем создания центров зарождения ДН в приповерхностной области подложки ионной бомбардировкой He^+ и последующего отжига. Для создания центров зарождения ДН перед отжигом пленок проводилась имплантация He^+ в область гетерограницы. На рис. 12 представлены взятые из этой работы данные по величинам пластической релаксации для разных толщин пленок GeSi/Si(001), отожженных при 850°C. Пленки GeSi, свободные от искусственно введенных источников ДН (нижняя кривая), не релаксируют до толщин ~ 300 нм, что более чем в 20 раз превышает критическую толщину псевдоморфной пленки h_c . После превышения этой толщины на 50 нм степень релаксации напряжений составляет $\sim 50\%$. Те же пленки, но облученные перед отжигом ионами He^+ , начинают активно релаксировать уже при толщинах, превышающих h_c не более чем в 3 раза. Эти результаты свидетельствуют о существовании конкуренции между зарождением ДН на поверхностных и внутренних источниках. Тот факт, что псевдоморфное состояние пленок наблюдается до толщин, в 10 и более раз превышающих величину h_c , свидетельствует об отсутствии необходимых для пластической релаксации центров зарождения ДН, как внутренних, так и поверхностных. При достижении определенных толщин реализуется переход 2D–3D и происходит „огрубление“ поверхности по механизму АТГ. Начинается „лавинно-

образная“ генерация ДН поверхностными источниками. В пользу этого свидетельствует относительно узкий диапазон увеличения толщин (~ 50 нм), внутри которого „уместилась“ величина релаксации от 0 до 50% (рис. 12). Те же пленки, в которых искусственно введены источники ДН с помощью ионной бомбардировки, начинают релаксировать во время отжига при гораздо меньших толщинах, при которых „огрубление“ поверхности еще не происходит. В этих условиях нет предпосылок для образования поверхностных дислокационных источников, и поэтому интенсивная пластическая релаксация осуществляется дислокациями, генерируемыми внутренними источниками. Подбором дозы облучения и глубины проникновения He^+ авторы работы [72] добились практически полной релаксации напряжений в пленках $\text{Ge}_{0.2}\text{Si}_{0.8}$ при плотности ПД на уровне 10^7 см^{-2} . Таким образом, контролируемым введением центров генерации ДН можно добиться снижения плотности ПД в пластически релаксированных пленках $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ даже без применения LT-Si.

6. Мультипликация дислокаций несоответствия

Beanland [73] обращает внимание на две стадии пластической релаксации напряженного слоя. Первая стадия реализуется при малых толщинах слоя и обусловлена первичными источниками ДН. Вторая стадия развивается на основе вторичных источников, связанных с различными вариантами мультипликации дислокаций. Наиболее известными многократными источниками считаются два из них: источник на основе механизма, предложенного Hagen et al [22], и источник Франка–Рида [74]. Схема работы первого предполагает его работу в тонких пленках, так как необходим выход ветвей расщепившейся ДН на поверхность. Для начала работы источника Франка–Рида требуется толщина пленки, существенно превышающая критическую [46], и именно он наиболее подходит для объяснения возникновения второй волны пластической релаксации, что и было отмечено в более ранней работе Beanland [75].

Формирование новой дислокационной петли по механизму Франка–Рида связано с возникновением закрепления ПД внутри напряженной пленки. LeGoues et al [23,76,77] посвятили ряд работ изучению такого источника в напряженных пленках градиентного состава GeSi/Si(001), который они назвали модифицированным источником Франка–Рида (MFR), работающим на пересекающихся плоскостях скольжения (111). Характерной особенностью такого механизма является возникновение групп близко расположенных дислокаций несоответствия с вектором Бюргера одного знака. Следствием этого является глубокое проникновение дислокаций в подложку, такое, как, например, показано на рис. 3. Поэтому наблюдение такой картины на изображении

поперечного среза пленки считается признаком работы MFR [45].

Однако, как видно из материалов, представленных выше, вторая волна пластической релаксации пленки ступенчатого состава может быть и, скорее всего, обусловлена массовым зарождением ДН на поверхности пленки, которая при достижении определенной толщины становится шероховатой. Как уже отмечалось, было обнаружено, что поверхностные источники являются многозависимыми, также создавая семейства дислокаций несоответствия с векторами Бюргера одного знака. Можно предположить, что в условиях, при которых зарождение дислокаций несоответствия с поверхности является доминирующим, именно мультипликативность поверхностных источников ответственна за „выдавливание“ дислокаций в подложку.

7. Возможности контролируемой генерации дислокаций несоответствия в процессе эпитаксиального роста

Предложенный в ранее рассмотренной работе [72] метод создания центров зарождения ДН путем ионной бомбардировки может быть использован только после предварительного выращивания пленки GeSi, которая должна находиться в псевдоморфном состоянии. Это ограничивает его применение для пленок, пластическая релаксация которых необходима в процессе роста. Кроме того, использование этого метода требует дополнительного оборудования для проведения ионной имплантации, в то время как желательно иметь возможность влияния на процесс пластической релаксации непосредственно в установках эпитаксиального роста. Для искусственного создания центров зарождения ДН, по-видимому, можно было бы использовать предложенный в работах [50,51] метод „быстрой“ пластической релаксации пленок GeSi. Авторы перед основной пленкой GeSi, выращиваемой в стандартных условиях, вводят тонкие слои Si и GeSi, температура роста которых находится в пределах 150–200°C. По предположениям авторов в этих слоях содержится большое количество центров зарождения ДН. На рис. 13, взятом из работы [51], представлено изменение величины релаксации в слое $\text{Ge}_{0.26}\text{Si}_{0.74}$ толщиной около 100 нм, выращенном при 550°C, в зависимости от температуры роста начальной части пленки, состоящей из Si и GeSi. Видно, что величина пластической релаксации увеличивается от нескольких процентов до 100% при понижении температуры роста первой ступени от 200 до 150°C. Следовательно, такой буферный слой, выращенный при супернизких температурах, близких к аморфизации, является встроенным источником ДН. Как видно из анализа демонстрируемого в работе тех же авторов электронно-микроскопического изображения

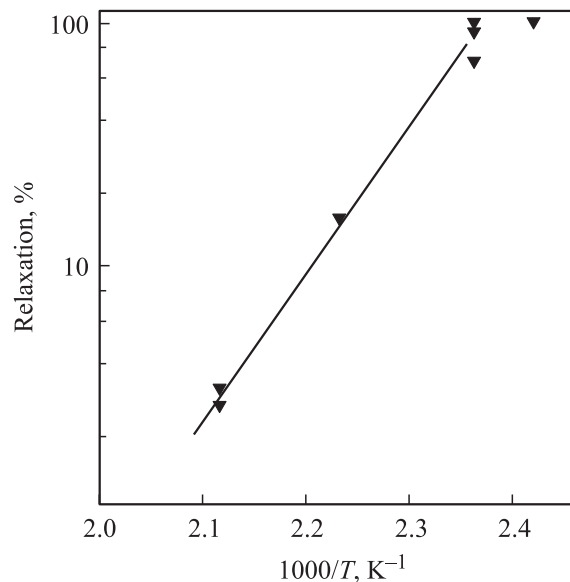


Рис. 13. Зависимость величины пластической релаксации слоя $\text{Ge}_{0.26}\text{Si}_{0.74}$ от температуры роста низкотемпературного буферного слоя. С разрешения авторов работы [51].

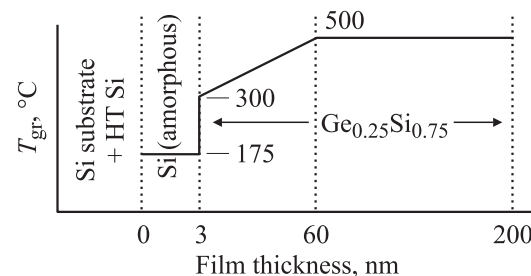


Рис. 14. Схема изменения условий роста гетероструктуры GeSi/Si по данным Rahman et al [78]. T_{gr} — температура роста.

поперечного среза [50], плотность ПД в таких релаксированных композициях превосходит 10^9 см^{-2} . Можно предположить, что и количество центров зарождения ДН в низкотемпературно выращенном буферном слое имеет тот же порядок величины. Однако, как видно из рис. 13, при повышении температуры осаждения начального слоя до 200°C пластическая релаксация основной части напряженной пленки, выращенной при 550°C, составляет не более 3%, что означает уменьшение количества центров зарождения ДН с увеличением температуры роста буферного слоя.

Ход зависимости, демонстрируемый на рис. 13, позволяет предположить, что, варьируя температуру роста низкотемпературного слоя, а также его толщину, можно контролировать величину плотности центров зарождения ДН. Опираясь на такой подход, Rahman et al [78] вырастили пленки GeSi толщиной 200 нм в двухступенчатом варианте, используя в качестве первой ступени тонкий (1–3 нм) слой Si, осаждаемый при температуре 175°C. По наблюдениям авторов этот слой был

распространяющиеся ПД с антипараллельными векторами Бюргерса типа $(a/2)[101]$ и $(a/2)[10\bar{1}]$ взаимно уничтожаются, либо после встречи двух ПД с векторами Бюргерса типа $(a/2)[0\bar{1}\bar{1}]$ и $(a/2)[101]$ остается одна ПД с вектором Бюргерса типа $a/2[1\bar{1}0]$ [82]. Если ПД скользят навстречу друг другу не по одной и той же плоскости $\{111\}$, а по близко расположенным параллельным плоскостям, то для реализации этих реакций необходимы акты переползания ПД, распространяющихся вблизи друг друга. Поэтому вводится некоторый эффективный радиус их взаимодействия. Ясно, что при понижении плотности ПД среднее расстояние между ними возрастает, вероятность их встречи снижается и эффективность аннигиляции падает. Так, в работе [83] было показано, что уменьшение плотности ПД путем аннигиляции, обусловленное действием напряженных сверхрешеток, становилось неэффективным при плотности ПД ниже чем 10^8 см^{-2} . Теоретический расчет [82], основанный на учете аннигиляционных реакций между дислокациями, показал, что плотность ПД уменьшается с ростом толщины пленки h как $1/h$ и в интервале плотностей ПД $10^8 - 10^9 \text{ см}^{-2}$ согласуется с экспериментально наблюдаемыми зависимостями. В то же время при более низких плотностях ПД эти зависимости становятся более пологими, т.е. слабо зависящими от увеличивающейся толщины. Следовательно, если на этапе пластической релаксации пленки GeSi/Si(001) плотность ПД достигла величины $\sim 10^8 \text{ см}^{-2}$, то для ее понижения до величины 10^6 см^{-2} толщина пленки должна была быть увеличена более чем в 100 раз, что в большинстве случаев неприемлемо.

При наличии большой концентрации точечных дефектов скорость аннигиляции ПД может возрасти из-за увеличения радиуса взаимодействия ПД, распространяющихся в близких плоскостях скольжения [84]. Обычно процесс роста напряженных слоев проводится при температуре, когда переползанием дислокаций можно пренебречь. Высокая концентрация точечных дефектов, образовавшихся вследствие облучения или выращивания низкотемпературного буферного слоя, должна из общих соображений повысить вероятность „включения“ этого механизма в процесс аннигиляции прорастающих дислокаций, находящихся в близко расположенных плоскостях скольжения. Как известно, в буферных слоях LT-Si или LT-GeSi, выращенных в интервале температур роста 300–400°C, плотность точечных дефектов вакансионного типа находится на уровне 10^{18} см^{-3} [80]. Такая плотность дефектов, по-видимому, не может быть достаточной для существенной активации механизмов аннигиляции ПД и понижения их плотности до уровня $10^5 - 10^6 \text{ см}^{-2}$. Доказательством работы механизма аннигиляции могло бы служить экспериментально наблюдаемое уменьшение плотности ПД до величин $10^5 - 10^6 \text{ см}^{-2}$ в процессе отжига при постоянной температуре пластически релаксирующего образца больших латеральных размеров (последнее необходимо для того, чтобы исключить артефакты, связанные с уменьшением

плотности ПД за счет их выхода на боковые грани отжигаемого образца). Однако таких данных в литературе нами не найдено. Напротив, имеются данные, свидетельствующие об увеличении плотности ПД при отжиге таких систем. Например, в работе [47] представлены результаты по изменению плотности ПД в пленках GeSi/Si(001), выращенных при тех же температурах, что и температура роста LT-Si, т.е. 300–400°C. Плотность ПД только увеличивалась с ростом величины пластической релаксации, что свидетельствует в пользу дополнительной генерации ДН в процессе отжига. Этот факт подвергает сомнению механизм, предполагающий уменьшение плотности ПД за счет аннигиляции наклонных сегментов ДН в „облаке“ точечных дефектов [84], по крайней мере в гетероструктурах с LT-Si, выращенных при температурах 300–400°C.

Поэтому рассмотрим другой фактор, который может повлиять на понижение плотности ПД. Темп пластической релаксации напряженной пленки зависит от средней скорости удлинения ДН, т.е. от скорости скольжения ПД. Если по каким-либо причинам эта скорость может возрасти при прочих равных условиях (температура, величина рассогласования пленки и подложки), то на начальном этапе уменьшение напряжений в пленке будет происходить быстрее, а для ее полной пластической релаксации потребуется меньшее количество ПД, что в конечном счете является одной из основных целей при создании искусственных подложек на основе GeSi/Si(001). Впервые предположение, что одной из причин, способствующих понижению плотности ПД в пленках GeSi, выращенных на LT-Si, может быть увеличение скорости скольжения ПД, было высказано нами в работах [47,48], а в работе [49] это предположение получило экспериментальное подтверждение.

Согласно классическим представлениям [85], скорость движения дислокации может быть представлена в виде

$$V_d = V_0 \tau_{\text{eff}}^m \exp(-E_V/kT), \quad (1)$$

где V_0 — константа, E_V — энергия активации движения дислокации путем скольжения, τ_{eff} — эффективное скалывающее напряжение, являющееся движущей силой распространения ПД в напряженных пленках толщиной h . Величина эффективного напряжения пропорциональна деформации ε (на начальной стадии релаксации $\varepsilon \propto f$) и возрастает с увеличением толщины пленки h после того, как преодолена критическая толщина по Matthews et al [13] (более подробное рассмотрение можно найти в обзоре Fitzgerald [15]).

На рис. 16 представлены скорости скольжения ПД, определенные в процессе отжига низкотемпературно выращенных пленок $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ при $x \approx 0.3$ [49]. Представлены как средние, так и рассчитанные по измерениям длины единичных ДН величины скоростей скольжения ПД в сравнении с известными литературными данными, определяемыми нами как классические. Сплошные зависимости построены на основе расчета по выражению (1)

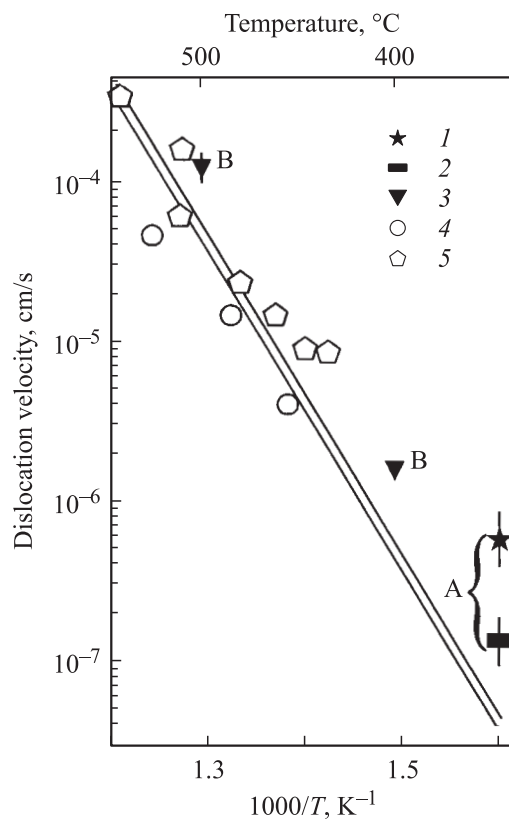


Рис. 16. Скорости скольжения ПД в зависимости от температуры. Теоретические зависимости вычислены для напряженных пленок $\text{Ge}_{0.3}\text{Si}_{0.7}$ с толщинами: 200 нм — верхняя сплошная линия и 50 нм — нижняя. 1–3 — наши данные. 1 и 2 — скорость единичной дислокации и средняя скорость, определенные на образце А — $\text{Ge}_{0.32}\text{Si}_{0.68}/\text{LT-Si}/\text{Si}(001)$. 3 — средние скорости, определенные на образце В — $\text{Ge}_{0.28}\text{Si}_{0.72}/\text{LT-Si}/\text{Si}(001)$ толщиной 200 нм. Подробности для данных 1–3 в [49]. 4, 5 — данные из работы [87]: 4 — $x = 0.3$, $h = 35$ нм; 5 — $x = 0.33$, $h = 45$ нм.

с учетом параметров по данным Turpen et al [86] для $x = 0.3$ и толщины напряженной пленки 50 и 200 нм. Точки 4, 5 — экспериментальные данные из работы Hull et al [87] для пленок GeSi с долей Ge, наиболее близкой к 0.3. Видно, что они удовлетворительно накладываются на теоретическую зависимость. Точки 1–3 — наши данные, полученные на низкотемпературно выращенных пленках GeSi с долей Ge, близкой к 0.3. Скорости определялись как по длине ДН, обнаруженных на ПЭМ-изображениях продольных срезов образцов после их кратковременного отжига, так и по изменению величины пластической релаксации с учетом плотности ПД, также определенной на электронно-микроскопических изображениях [49]. Видно, что все величины как средних, так и вычисленных по длине отдельных ДН скоростей скольжения ПД в пленках с низкотемпературным буферным слоем Si и выращенных нами при низких (300–350°C) температурах, находятся выше классических данных.

Скорость скольжения ПД, вычисленная по длине отдельных дислокаций несоответствия в гетероструктуре А (символ 1 на рис. 16), превышает на порядок величины расчетную прогнозируемую скорость единичной дислокации, вычисляемую по (1). Средняя расчетная скорость V_d для той же гетероструктуры А оказалась, как и предполагалось, в несколько раз меньше (символы 2 на рис. 16). Тем не менее она также превышает расчетную прогнозируемую скорость единичной дислокации для данной температуры отжига. Величины средней скорости V_d для гетероструктуры В, отожженной при 400 и 500°C, также превысили расчетную прогнозируемую скорость единичной дислокации.

Механизм, приводящий к увеличению скорости скольжения ПД в таких пленках, может заключаться в следующем. Известно [87], что скольжение дислокации происходит за счет образования на ней двойных перегибов (double kinks). Расширяющийся вдоль линии дислокации двойной перегиб приводит к переходу дислокационной линии в соседнюю энергетическую долину. Hull et al. [87] показали, что в условиях молекулярной эпитаксии тонких пленок GeSi с ограниченной длиной ПД в каждый момент времени на всей дислокационной линии образуется только один двойной перегиб и скорость скольжения дислокации становится зависимой от частоты их образования. Если предположить, что в результате появления вакансионных кластеров в определенной части пленки на пересекающей их дислокационной линии образуется одновременно два и более двойных перегиба, то это должно способствовать убыстрению скольжения ПД.

Таким образом, в интервале составов пленок $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{LT-Si}/\text{Si}(001)$ с $x < 0.3$ основными причинами понижения плотности ПД в релаксированных слоях GeSi можно признать следующие: меньшая по сравнению с „классическим“ ростом плотность центров зарождения ДН и увеличение скорости скольжения их пронизывающих ветвей по сравнению со скоростью в классических гетеросистемах, выращиваемых при температуре 550°C без буферных слоев.

9. Образование краевых дислокаций несоответствия

Как следует из классической модели энергетического баланса Мэтьюза [14,15], чисто краевые дислокации более выгодны по сравнению с 60-градусными дислокациями. Если равновесная линейная плотность краевых дислокаций определяется как f/b (b — величина вектора Бюргера), то плотность 60-градусных дислокаций для гетерограницы (001) должна быть в 2 раза выше — $2f/b$. Однако краевые ДН не являются скользящими в материалах с кристаллической решеткой алмаза (сфалерита) и введение их в гетерограницу (001) по механизму скольжения по плоскостям {111} невозможно. В то же

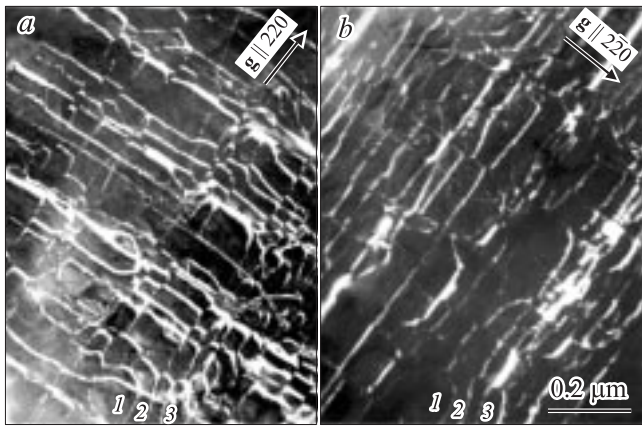


Рис. 17. Планарные ПЭМ-изображения дислокаций несоответствия в системе $\text{Ge}_{0.29}\text{Si}_{0.71}/\text{Si}(001)$, выращенной при $T = 400^\circ\text{C}$ и отожженной в течение 1 ч при $T_{\text{ann}} = 800^\circ\text{C}$. Толщина пленки 100 нм. Изображения получены в условиях „слабого пучка“ при: $a - \mathbf{g} \parallel \langle 220 \rangle$, $b - \mathbf{g} \parallel \langle 2\bar{2}0 \rangle$. Цифрами помечены реперные дислокации.

время, согласно большому количеству экспериментальных данных, этот тип ДН практически всегда присутствует в гетерогранице пленка–подложка. При этом их доля в общем количестве ДН тем выше, чем больше f и чем выше степень релаксации гетероэпитаксиальных напряжений [88]. В качестве примера на рис. 17 приведены полученные нами с помощью ПЭМ-изображения сетки ДН в гетеросистеме $\text{Ge}_{0.29}\text{Si}_{0.71}/\text{Si}(001)$, отожженной при 800°C .

Два темнопольных изображения одного и того же участка (рис. 17, a и b), полученные в условиях двухволновой дифракции от взаимоперпендикулярных семейств плоскостей $\{220\}$, иллюстрируют полное погасание чисто краевых ДН Ломера при выполнении условия $\mathbf{g} \times \mathbf{b} = 0$, $\mathbf{g} \parallel \langle 220 \rangle$. При величине пластической релаксации в этом образце около 60% доля краевых дислокаций составила $\sim 50\%$.

Вопрос об образовании краевых ДН в большом количестве в процессе пластической релаксации напряженных гетеросистем до сих пор остается дискуссионным. Одна из моделей, объясняющих появление краевых ДН в гетерогранице (001) (дислокации Ломера), основана на том, что при больших значениях f (таких, как в системе Ge-Si) напряженная пленка на начальной стадии роста трансформируется в островковую. При этом большая доля краевых ДН, доходящая до 100%, объясняется введением дислокаций с краев островков. Однако это противоречит тому факту, что в объеме этих пленок наблюдаются только 60-градусные дислокации, с наклонными к гетерогранице векторами Бюргерса. Эти дислокации, как хорошо известно, являются прорастающими сегментами ДН. А одна и та же дислокация должна иметь одинаковый вектор Бюргерса по всей своей длине. Кроме того, чисто краевые ДН наблюдаются и при значительно меньших значениях f (см. рис. 17),

при которых рост пленки на всех стадиях протекает по слоевому механизму без образования трехмерных островков.

Другой механизм образования дислокаций Ломера в гетеросистемах с большой величиной f впервые был обнаружен нами при исследовании границ раздела в системе InAs–GaAs(001) ($f = 7\%$) [89,90] и независимо Eaglesham [17], затем подробнее рассмотрен в работе Вдовина [91]. Суть этого механизма заключается в следующем. При скольжении двух комплиментарных 60-градусных дислокаций по наклонным взаимопересекающимся плоскостям $\{111\}$ происходит их взаимодействие по классической реакции, известной из теории дислокаций:

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

На рис. 15 видно, что в такие реакции могут вступать системы (1) и (4), (2) и (3), (5) и (8), (6) и (7) (см. обозначения на рис. 15), т.е. те дислокации, которые лежат в плоскостях $\{111\}$, отклоненных в разные стороны от оси $\langle 110 \rangle$. При этом если плоскости скольжения пересекаются не точно в гетерогранице, то близлежащие 60-градусные ДН или их отдельные ветви должны либо подняться в пленку, либо опуститься в подложку до линии пересечения наклонных плоскостей скольжения. Такие конфигурации наблюдались экспериментально в работе [91]. Однако в большинстве случаев наблюдаемые краевые дислокации расположены точно в границе раздела пленка–подложка, что предполагает наличие других механизмов их образования, не предполагающих случайную встречу двух комплиментарных 60-градусных ДН. Kvam et al [18] предлагают как вариант зарождение комплиментарной 60-градусной дислокационной петли

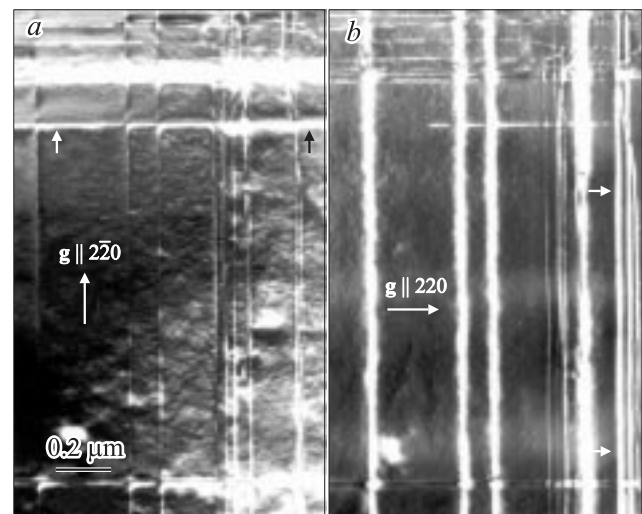


Рис. 18. Темнопольные планарные ПЭМ-изображения дислокаций несоответствия, полученные в условиях „слабого пучка“ для выявления дислокаций Ломера. Пленка $\text{Ge}_{0.33}\text{Si}_{0.67}$ толщиной 100 нм выращена на Si(001) при $T = 400^\circ\text{C}$. Изображения получены при: $a - \mathbf{g} \parallel \langle 2\bar{2}0 \rangle$, $b - \mathbf{g} \parallel \langle 220 \rangle$.

на поверхности тонкого слоя под воздействием поля напряжений уже существующей в границе раздела 60-градусной ДН. Gosling [92] теоретически показывает, что акт зарождения такой петли в районе уже существующей 60-градусной ДН (с последующим превращением в 90-градусную ДН) имеет существенно меньший энергетический барьер, чем при зарождении одиночной петли в отсутствие ДН. Одному из этих механизмов может соответствовать ситуация, изображенная на рис. 18. Здесь еще на начальной стадии пластической релаксации (около 10%) в пленке GeSi/Si(001), выращенной при температуре $\sim 450^\circ\text{C}$, наблюдаются длинные краевые ДН (отмечены стрелками).

В литературе отмечается, что доля краевых ДН в релаксирующих пленках возрастает с ростом начальной величины рассогласования, т.е. с ростом доли Ge [88]. По-видимому, с увеличением f механизмы введения ДН претерпевают существенные изменения. В системе GeSi предельным и наиболее важным случаем является эпитаксиальное наращивание „чистого“ Ge на подложках Si(001). Рассмотрим этот случай более подробно.

10. Проблемы эпитаксии при большом несоответствии параметров решеток сопрягаемых материалов

Для гетеросистемы Ge–Si несоответствие параметров решеток f составляет $\sim 4\%$. Кроме этого, имеется большое рассогласование линейных коэффициентов термического расширения: $5.92 \cdot 10^{-6}$ и $2.3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ для Ge и Si соответственно. Проблема аккомодации кристаллических решеток для этой пары решается в основном путем использования буферных слоев $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$, в которых величина x изменяется от 0 у гетерограницы до 1 на поверхности буферного слоя [5]. При этом, чтобы обеспечить плотность ПД в этом слое менее 10^6 см^{-2} , его толщина должна составлять около 10 мкм. При таких больших толщинах, что само по себе часто не приемлемо для практических применений, возникает достаточно развитый рельеф поверхности буферного слоя и впоследствии эпитаксиального слоя Ge, выращенного на нем, что требует финишной полировки поверхности [93]. Поэтому в последнее время исследователи вновь вернулись к выращиванию пленок Ge непосредственно на подложках Si. При этом на первый план вновь выходят проблемы большой плотности пронизывающих дислокаций и разницы в коэффициентах термического расширения пленки и подложки Si.

Методики, применяемые для уменьшения плотности ПД в таких гетеросистемах, можно разделить на две группы.

1. „Off line“ методы — борьба с пронизывающими дислокациями после процесса гетероэпитаксии.
2. „On line“ методы — борьба с пронизывающими дислокациями в процессе гетероэпитаксии.

Основным постэпитаксиальным методом является использование циклических отжигов выращенной релаксированной гетероструктуры с верхним пределом температуры до 900°C [94,95]. Эффективность термоциклирования обусловлена тем, что при широком диапазоне колебаний температуры пленка Ge становится то сжатой, то растянутой, что заставляет двигаться ПД то в одном, то в противоположном направлении. Встречаясь в разных комбинациях, ПД активно аннигилируют. Кроме этого, при высоких температурах (900°C) значительно ускоряются процессы переползания дислокаций, что также облегчает их аннигиляцию. Высокие температуры циклического отжига приводят к диффузионному размыванию границы раздела Ge/Si, снижая величину скачка напряжений, обусловленного разницей коэффициентов термического расширения сопрягающихся материалов. Однако верхний предел нагрева гетероструктур близок к температуре плавления Ge (937°C), что в большинстве случаев неприемлемо при выращивании сложных композиций с предварительно созданными $p-n$ -переходами.

Прежде чем рассмотреть вторую группу методов снижения плотности ПД, обозначим причины высокой плотности ПД в гетеросистемах с большим значением f . Хорошо известно, что при гетероэпитаксии пленок с большой величиной f реализуются либо механизм роста Фольмера–Вебера, либо — Странского–Крастанова. Оба этих механизма характеризуются образованием 3D эпитаксиальных островков. В случае механизма Фольмера–Вебера островки формируются сразу на поверхности подложки, в случае механизма Странского–Крастанова — на поверхности тонкого сплошного смачивающего слоя. При этом в зависимости от типа материала и от условий эпитаксии возможно формирование как когерентных напряженных островков без дефектов структуры, так и релаксированных островков с ДН в границе раздела. В настоящее время эта особенность роста пленок с большим значением f нашла широкое практическое применение в нанотехнологии для создания массивов островков большой плотности, имеющих нанометровые размеры, так называемых „квантовых точек“ (см., например, обзоры [29,30]). В то же время образование островков на начальной стадии гетероэпитаксии является нежелательным явлением при выращивании сплошных сравнительно толстых слоев. Причины этого заключаются в следующем.

При формировании островков на начальных стадиях роста возможна ситуация, когда пластическая релаксация (образование ДН) начнется до образования первого сплошного слоя. В этом случае длина ДН будет ограничена латеральными размерами островков в момент их коалесценции и на границах коалесценции возникнут ПД. Поскольку размеры островков при коалесценции обычно не превышают нескольких десятков нанометров, плотность ПД оказывается очень высокой ($> 10^{10} \text{ см}^{-2}$). По мере увеличения толщины пленки часть этих дислокаций аннигилирует, но это очень малая часть (см. разд. 8). Эффект возникновения ПД при

коалесценции островков очень подробно был изучен нами в работах [96–98], в которых впервые было сформулировано одно из необходимых условий получения гетероэпитаксиальных пленок с малой плотностью ПД. Это условие заключается в следующем: *критическая толщина псевдоморфной пленки должна быть больше толщины первого сплошного слоя*. Это условие является необходимым, но недостаточным. Так, при релаксации механизма Странского–Крастанова релаксация напряжений начинается после образования сплошного (смачивающего) слоя за счет образования упругорелаксирующих островков (механизм АТГ). Но эти островки также являются эффективными центрами зарождения ДН (см. разд. 3). Все вышесказанное имеет прямое отношение к системе Ge–Si.

Хорошо известно [26], что рост Ge на Si начинается по механизму Странского–Крастанова, при котором первые четыре монослоя пленки Ge являются сплошными (смачивающий слой), а при превышении этой толщины образуются островки Ge с плотностью 10^{10} – 10^{11} см⁻². В результате такой поверхностной неоднородности появление концентраторов напряжений большой плотности [32] приводит к образованию большого ($\sim 10^{10}$ см⁻²) количества дефектов, пронизывающих пленку Ge [99]. Именно на устранение этой причины направлены методы борьбы с дефектами структуры „on line“. Рассмотрим некоторые из них.

Чтобы кинетически затормозить образование островков на смачивающем слое, в некоторых работах проводилась гетероэпитаксия Ge на Si при пониженных температурах на начальном этапе роста. Рост начинался при температурах 330 [100], 350 [94] и 370°С [101]. Было обнаружено, что низкотемпературные слои Ge после повышения температуры вновь проявляли тенденцию к островкованию и повышенному введению дефектов. Так, Halbwax et al [100] показали, что низкотемпературно выращенные пленки нестабильны при толщинах, не превышающих 27 нм. Несмотря на практически полную релаксацию, наблюдаемую при толщине 7.5 нм, существенно бóльшая толщина необходима для того, чтобы пленка росла по-прежнему по двумерному механизму при увеличении температуры роста до 600°С.

Другая возможность для подавления островкового роста Ge — введение поверхностно-активных примесей-сурфактантов для стабилизации двумерно-слоевого механизма роста. Действительно, при использовании таких сурфактантов, как мышьяк, сурьма или атомарный водород, при выращивании Ge на подложках Si(001) двумерный рост пленок продолжается при толщинах, больших чем 4 монослоя [102–106]. Однако это обстоятельство не может предотвратить в дальнейшем огрубления ростовой поверхности пленки Ge, обусловленного работой механизма АТГ, т.е. появлением упругой релаксации через образование 3D рельефа поверхности. Как видно из рис. 8, плотность пронизывающих дислокаций в релаксированной пленке GeSi превышает 10^8 см⁻² уже при доле Ge более 0.4, несмотря на

присутствие Sb. Следовательно, переход 2D–3D, по-прежнему, является основной причиной высокой плотности центров зарождения дислокаций, хоть и происходит это при несколько большей доле Ge, чем без Sb. Можно предположить, что и псевдоморфная пленка Ge, несмотря на присутствие сурфактанта, с ростом ее толщины также будет становиться шероховатой, что в дальнейшем спровоцирует высокую плотность ПД и других дефектов. Действительно, как сообщают Horn-von Hoegen et al [107], при использовании Sb как сурфактантов и температуры роста $\sim 500^\circ\text{C}$ пленка Ge остается сплошной, но шероховатость ее поверхности возрастает и при среднем покрытии ~ 12 монослоев генерируются дефекты большой плотности.

Основываясь на рассуждениях о конкуренции источников зарождения ДН, приведенных в разд. 5, можно предположить, что использование низкотемпературного слоя Ge или сурфактанта в процессе роста Ge на Si(001) не привело к нахождению условий, при которых проявились бы источники ДН малой плотности, конкурентные поверхностным источникам большой плотности.

Положительные результаты были достигнуты при гетероэпитаксии пленок Ge:Sb на подложках Si с ориентацией (111) (см., например, работу [108] и ее ссылки). В работах [109,110] было показано, что в этом случае на границе раздела формируется упорядоченная сетка дислокаций несоответствия, которые являются краевыми, т.е. наиболее энергетически выгодными. Механизм образования такой дислокационной сетки, предложенный этими авторами, заключается в том, что подвижные дислокации, зарождаясь на шероховатой поверхности еще тонкой пленки (8 и более монослоев Ge [111,112]), скользят по наклонным плоскостям {111} к границе раздела, которая является для них плоскостью скольжения. Это обстоятельство облегчает взаимодействие дислокаций, в результате которого и формируется упорядоченная сетка краевых дислокаций несоответствия в границе раздела, а пронизывающие сегменты, по предположению авторов, эффективно аннигилируют. В результате плотность ПД не превышает 10^8 см⁻² [111].

Как видно из анализа механизмов пластической релаксации в системе Ge/Si(111), необходимым шагом на пути снижения плотности ПД является образование упорядоченной сетки ДН краевого типа на ранней стадии пластической релаксации. По-видимому, в системе Ge/Si(111) этому благоприятствуют более высокая энергия образования ступени на плоскости {111} по сравнению с {001} [113], что затрудняет „огрубление“ поверхности и способствует формированию протяженных островков с плоскими вершинами. Другой фактор — возможность скольжения дислокаций вдоль границы раздела, что облегчает аннигиляцию прорастающих сегментов. Поверхность {001} такими свойствами не обладает и попытка вырастить тонкие (~ 1 мкм) совершенные пленки Ge на подложках этой наиболее употребляемой в полупроводниковой технике ориентации, несмотря на

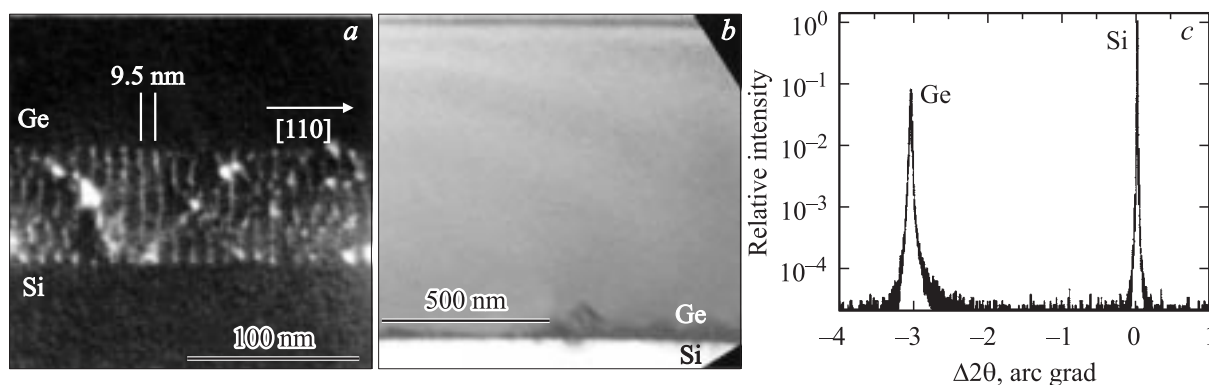


Рис. 19. Темнопольное ПЭМ-изображение в условиях „слабого пучка“ гетерограницы Ge/Si(001), наклоненной на 25° вокруг оси [110] — *a*. Светлопольное ПЭМ-изображение поперечного среза пленки Ge, толщиной 1 мкм, выращенной на Si(001) — *b*. Рентгеновские кривые качания от плоскостей (004) для пленки Ge, толщиной 1 мкм, выращенной на Si(001) — *c*. С разрешения авторов работы [116].

применение сурфактантов [107,114,115], не были успешными до 2005 г.

В 2005–2006 гг. появились работы Wietler et al [116], в которых было продемонстрировано выращивание совершенных пленок Ge толщиной не более 1 мкм на подложках Si(001). На интерфейсе наблюдалась упорядоченная и плотная сетка дислокаций несоответствия (рис. 19, *a, b*). Судя по рис. 19, *c*, полуширина рентгеновской кривой качания от пленки Ge была на уровне 100'', что является рекордным для пленок Ge толщиной не более 1 мкм, выращенных непосредственно на Si(001).

Основными изменениями, осуществленными в этой работе по сравнению с предыдущими исследованиями, были: а) повышение температуры роста пленки Ge на Si(001) до 700°C и б) непрерывный поток Sb в течение всего времени роста. Последнее обстоятельство является вынужденным и необходимо вследствие того, что при этой температуре сурьма интенсивно десорбирует с поверхности. Чтобы сохранить ее влияние как элемента, пассивирующего переход 2D–3D, и был необходим непрерывный поток Sb. Можно предположить, что в этом случае, вследствие повышенной температуры роста пленки, механизмы зарождения комплиментарных дислокаций и образование упорядоченной сетки краевых дислокаций несоответствия стали основными, определяющими процесс пластической релаксации на его самых ранних стадиях, а спонтанное введение дислокаций вследствие огрубления поверхности было заторможено присутствием поверхностно-активной примеси Sb.

Известен еще один путь выращивания тонких совершенных пленок Ge на подложках Si(001). Bauer et al [117] использовали метод CVD с применением дейтерий-стабилизированных гидридов олова, что позволило выращивать пленки GeSn с долей олова в несколько процентов. Авторы этой и следующих работ [118,119] утверждают, что даже при толщине

менее 100 нм пленки были релаксированными с сеткой краевых дислокаций Ломера на границе раздела. На такой платформе были выращены пленки Ge в конфигурации Ge/Sn_{0.02}Ge_{0.98}/Si. Утверждается, что пленки Ge имели низкую концентрацию дефектов (~ 10⁶ см⁻²), а полуширина рентгеновских кривых качания в отражении (004) составляла 250''.

11. Заключение

Проблема выращивания совершенных релаксированных пленок Ge_xSi_{1-x} на подложках Si(001) остается по-прежнему актуальной и все еще находится в стадии поиска путей снижения плотности структурных дефектов (в основном пронизывающих дислокаций) для слоев сравнительно малой толщины (< 1 мкм) с минимальной шероховатостью ростовой поверхности.

Использование низкотемпературного (300–400°C) буферного слоя кремния (LT-Si), осаждаемого на подложке Si непосредственно перед ростом твердого раствора GeSi, позволяет решить эту проблему для твердых растворов с содержанием Ge не более 30% и выращивать релаксированные слои Ge_{0.3}Si_{0.7} толщиной менее 1 мкм с низкой плотностью пронизывающих дислокаций (10⁵–10⁶ см⁻²). Основными причинами такого понижения плотности ПД являются уменьшение количества центров и скорости генерации ДН, а также увеличение скорости скольжения пронизывающих дислокаций по сравнению со скоростью в классических гетеросистемах, выращиваемых при температуре 550°C без буферных слоев. Однако при $x > 0.3$ понижение температуры роста буферного и основного слоев не дает желаемого эффекта, и плотность пронизывающих дислокаций остается на уровне 10⁸–10⁹ см⁻². Основной причиной этого является переход от слоевого (layer-by-layer) к трехмерному механизму роста напряженной пленки (переходу

2D–3D), при котором возрастает количество центров генерации ДН.

На основе анализа приведенных выше экспериментальных данных можно заключить, что для расширения возможностей выращивания совершенных пластически релаксированных пленок GeSi/Si(001) необходимо: а) иметь возможность дозированного создания центров зарождения ДН и б) замедлить или полностью подавить переход 2D–3D, чтобы затормозить зарождение дополнительных ДН с поверхности напряженной пленки и соответственно дополнительных ПД. Зарождение ДН с поверхности происходит на концентраторах напряжений, обусловленных трехмерным рельефом. Использование поверхностно-активной примеси — сурьмы позволяет затормозить переход к трехмерному поверхностному рельефу и тем самым затормозить введение ДН и дополнительно улучшить структурные свойства пленок $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ с $x \approx 0.3$. Тем не менее связанное с этим улучшение структурных свойств пленок GeSi/Si(001) с долей Ge более 0.3 недостаточно, так как поверхностный рельеф по-прежнему формируется по механизму ATG одновременно по всей площади гетероструктуры, а плотность центров зарождения ДН коррелирует с плотностью псевдоостровков, которая находится на уровне 10^8 – 10^{10} см⁻². Поэтому возможность контролируемого введения ДН с поверхности с существенно меньшей плотностью маловероятна. В то же время контролируемое введение ДН путем зарождения их внутри объема пленки представляется более перспективным. Возможность воздействия на скорость скольжения ПД в процессе пластической релаксации пленок GeSi/Si, а именно ее увеличение, является, на наш взгляд, одним из перспективных путей снижения плотности ПД, но до настоящего времени этот эффект мало изучен.

Попытки вырастить малодислокационные пленки Ge микронных толщин непосредственно на подложке Si(001) без использования режима послеростового термоциклирования до последнего времени были малоуспешными. Появление работ Wietler et al [116] и Roucka et al [118,119] показало, что существуют условия, при которых возможно выращивание совершенных пленок Ge на подложках Si(001). Пластическая релаксация таких пленок осуществляется на малых толщинах с образованием упорядоченной сетки краевых ДН без образования большого количества прорастающих дефектов. Поиск расширенного диапазона этих условий и детализация механизмов релаксации являются наиболее актуальной задачей текущего момента.

Список литературы

- [1] D.J. Friedman, M. Meghelli, B.D. Parker, Y. Jang, H.A. Ainspan, A.V. Rylyakov, Y.H. Kwark, M.B. Ritter, L. Shan, S.J. Zier, M. Sorna, M. Soyuer. *IBM J. Res. & Dev.*, **47**, 259 (2003).
- [2] B. Gaucher, B. Floyd, S. Reynolds. *Semicond. Sci. Technol.*, **22**, S236 (2007).
- [3] <http://www.cnews.ru/news/line/index.shtml.2006/06/20/203976>.
- [4] E.A. Fitzgerald, Y.H. Xie, M.L. Green, D. Brasen, A.R. Kortan, J. Michel, Y.J. Mii, B.E. Weir. *Appl. Phys. Lett.*, **59**, 811 (1991).
- [5] M. Currie, S.B. Samavedam, T. Langdo, C.W. Leitz, E.A. Fitzgerald. *Appl. Phys. Lett.*, **72**, 1718 (1998).
- [6] S.B. Samavedam, M. Currie, T. Langdo, E.A. Fitzgerald. *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 2125 (1998).
- [7] K. Chilukuri, M.J. Mori, C.L. Dohrman, E.A. Fitzgerald. *Semicond. Sci. Technol.*, **22**, 29 (2007).
- [8] C. Rosenblad, H.R. Deller, A. Dommann, T. Meyer, P. Schroeter, H. von Koene. *J. Vacuum Sci. Technol. A*, **16**, 2785 (1998).
- [9] R. Ginige, B. Corbett, M. Modreanu, C. Barrett, J. Hilgarth, G. Isella, D. Chrastina, H. von Koene. *Semicond. Sci. Technol.*, **21**, 775 (2006).
- [10] G. Isella, J. Osmond, M. Kummer, R. Kaufmann, H. von Koene. *Semicond. Sci. Technol.*, **22**, S26 (2007).
- [11] Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, Л.В. Соколов, С.И. Чикичев. *ФТП*, **37**, 513 (2003).
- [12] Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, С.И. Чикичев. *УФН*, **171**, 689 (2001).
- [13] J.W. Matthews, A.E. Blakeslee. *J. Cryst. Growth*, **27**, 118 (1974).
- [14] J.W. Matthews. *J. Vac. Sci. Technol.*, **12**, 126 (1975).
- [15] E.A. Fitzgerald. *Mater. Sci. Rep.*, **7**, 92 (1991).
- [16] S.C. Jain, M. Willander, H. Maes. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 641 (1996).
- [17] D.J. Eaglesham, E.P. Kvam, D.M. Maher, C.J. Humphreys, J.C. Bean. *Phil. Mag. A*, **59**, 1059 (1989).
- [18] E.P. Kvam, D.M. Maher, C.J. Humphreys. *J. Mater. Res.*, **5**, 1900 (1990).
- [19] D.D. Perovic, G.C. Weatherly, J.-M. Baribeau, D.C. Houghton. *Thin Sol. Films*, **183**, 141 (1989).
- [20] D.D. Perovic, D.C. Houghton. *Inst. Phys. Conf. Ser.*, No 146, 117 (1995).
- [21] R. Hull, J.C. Bean. *J. Vac. Sci. Technol.*, A **7**, 2580 (1989).
- [22] W. Hagen, H. Strunk. *Appl. Phys.*, **47**, 85 (1978).
- [23] F.K. LeGoues, B.S. Meerson, J.F. Morar. *Phys. Rev. Lett.*, **66**, 2903 (1991).
- [24] M.A. Capano. *Phys. Rev. B*, **45**, 11 768 (1992).
- [25] Y. Chen, J. Washburn. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 4046 (1996).
- [26] Ю.Б. Болховитянов, О.П. Пчеляков, Л.В. Соколов, А.И. Никифоров, Б. Фойхтлендер. *Изв. АН. Сер. физ.*, **65**, 180 (2001).
- [27] R.J. Asaro, W.A. Tiller. *Metall. Trans.*, **3**, 1789 (1972).
- [28] М.А. Гринфельд. *ДАН СССР*, **290**, 1358 (1986).
- [29] W. Seifert, N. Carlsson, M. Miller, M.-E. Pistol, L. Samuelson, L.R. Wallenberg. *Progr. Cryst. Growth Charact.*, **33**, 423 (1996).
- [30] О.П. Пчеляков, Ю.Б. Болховитянов, А.В. Двуреченский, Л.В. Соколов, А.И. Никифоров, А.И. Якимов, Б. Фойхтлендер. *ФТП*, **34**, 1281 (2000).
- [31] D.E. Jesson, S.J. Pennycook, J.-M. Baribeau, D.C. Houghton. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 1744 (1993).
- [32] J. Tersoff, F.K. LeGoues. *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 3570 (1994).
- [33] R. Hull, J.C. Bean, C. Buescher. *J. Appl. Phys.*, **66**, 5837 (1989).
- [34] P.M. Mooney, F.K. LeGoues, J. Tersoff, J.O. Chu. *J. Appl. Phys.*, **75**, 3968 (1994).

- [35] V.I. Vdovin, M.G. Mil'vidskii, T.G. Yugova, K.L. Lyutovich, S.M. Saidov. *J. Cryst. Growth*, **141**, 109 (1994).
- [36] S.W. Lee, P.S. Chen, T.Y. Chien, L.J. Chen, C.T. Chia, C.W. Liu. *Thin Sol. Films*, **508**, 120 (2006).
- [37] H. Chen, L.W. Guo, Q. Cui, Q. Hu, Q. Huang, M. Zhou. *J. Appl. Phys.*, **79**, 1167 (1996).
- [38] K.K. Linder, F.C. Zhang, J.-S. Rieh, P. Bhattacharya, D. Houghton. *Appl. Phys. Lett.*, **70**, 3224 (1997).
- [39] J.H. Li, C.S. Peng, Y. Wu, D.Y. Dai, J.M. Zhou, Z.H. Mai. *Appl. Phys. Lett.*, **71**, 3132 (1997).
- [40] C.S. Peng, Z.Y. Zhao, H. Chen, J.H. Li, Y.K. Li, L.W. Guo, D.Y. Dai, Q. Huang, J.M. Zhou, Y.H. Zhang, T.T. Sheng, C.H. Tung. *Appl. Phys. Lett.*, **72**, 3160 (1998).
- [41] J.H. Li, C.S. Peng, Z.H. Mai, J.M. Zhou, Q. Huang, D.Y. Dai. *J. Appl. Phys.*, **80**, 1292 (1999).
- [42] P.I. Gaiduk, A.N. Larsen, J.L. Hansen. *Thin Sol. Films*, **367**, 120 (2000).
- [43] Y.H. Luo, J. Wan, R.L. Forrest, J.L. Liu, M.S. Goorsky, K.L. Wang. *J. Appl. Phys.*, **89**, 8279 (2001).
- [44] Yu.B. Bolkhovityanov, A.K. Gutakovskii, V.I. Mashanov, O.P. Pchelyakov, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *J. Appl. Phys.*, **91**, 4710 (2002).
- [45] F.K. LeGoues, B.S. Meyerson, J.F. Morar, P.D. Kirchner. *J. Appl. Phys.*, **71**, 4230 (1992).
- [46] R.J. Beanland. *Appl. Phys.*, **72**, 4031 (1992).
- [47] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *Thin Sol. Films*, **466**, 69 (2004).
- [48] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *J. Appl. Phys.*, **96**, 7665 (2004).
- [49] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *J. Cryst. Growth*, **280**, 309 (2005).
- [50] M. Bauer, K. Lyutovich, M. Oehme, E. Kasper, H.-J. Herzog, F. Ernst. *Thin Sol. Films*, **369**, 152 (2000).
- [51] W.-X. Ni, K. Lyutovich, J. Alami, C. Tengstedt, M. Bauer, E. Kasper. *J. Cryst. Growth*, **227/228**, 756 (2001).
- [52] A.G. Cullis, A.J. Pidduck, M.T. Emeny. *J. Cryst. Growth*, **158**, 15 (1996).
- [53] C.S. Ozkan, W.D. Nix, H. Gao. *Appl. Phys. Lett.*, **70**, 2247 (1997).
- [54] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *Appl. Phys. Lett.*, **85**, 6140 (2004).
- [55] J. Godet, L. Pizzagalli, S. Brochard, P. Beauchamp. *Phys. Rev. B*, **70**, 054109 (2004).
- [56] M. Copel, M.C. Reuter, M. Horn von Hoegen, R.M. Tromb. *Phys. Rev. B*, **42**, 11682 (1990).
- [57] G.G. Jernigan, C.L. Silvestre, M. Fatemi, M.E. Twigg, P.E. Thompson. *J. Cryst. Growth*, **213**, 299 (2000).
- [58] A.D. Lambert, B.M. McGregor, R.J.H. Morris, C.P. Parry, D.P. Chu, G.A. Cooke, P.J. Phillips, T.E. Whall, E.H.C. Parker. *Semicond. Sci. Technol.*, **14**, L1 (1999).
- [59] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *J. Cryst. Growth*, **293**, 247 (2006).
- [60] P. Bratu, K.L. Kompa, U. Hoefler. *Chem. Phys. Lett.*, **251**, 1 (1996).
- [61] J.E. Vasek, Z. Zhang, C.T. Salling, M.G. Lagally. *Phys. Rev. B*, **51**, 17207 (1995).
- [62] R.R. LaPierre, B.J. Robinson, D.A. Thompson. *J. Cryst. Growth*, **191**, 319 (1998).
- [63] Y.J. Chun, Y. Okada, M. Kawabe. *J. Cryst. Growth*, **150**, 497 (1995).
- [64] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. *J. Cryst. Growth*, **297**, 57 (2006).
- [65] Ю.Б. Болховитянов, А.С. Дерябин, А.К. Гутаковский, А.В. Колесников, Л.В. Соколов. *ФТП*, **41**, (2007).
- [66] V.I. Vdovin. *Phys. Status Solidi A*, **171**, 239 (1999).
- [67] S.Y. Yang, J.R. Abelson. *J. Vac. Sci. Techn. A*, **11**, 1327 (1993).
- [68] Yu.B. Bolkhovityanov, A.K. Gutakovskii, V.I. Mashanov, O.P. Pchelyakov, M.A. Revenko, L.V. Sokolov. *Thin Sol. Films*, **392**, 98 (2001).
- [69] S. Mantl, B. Holländer, R. Liedtke, S. Mesters, H.J. Herzog, H. Kibbel, T. Hackbarth. *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B*, **147**, 29 (1999).
- [70] H. Trinkaus, B. Holländer, St. Rongen, S. Mantl, H.-J. Herzog, J. Kuchenbecker, T. Hackbarth. *Appl. Phys. Lett.*, **76**, 3552 (2000).
- [71] K. Sawano, Y. Hirose, S. Koh, K. Nakagawa, T. Hattori, Y. Shiraki. *J. Cryst. Growth*, **251**, 685 (2003).
- [72] J. Cai, P.M. Mooney, S.H. Christiansen, H. Chen, J.O. Chu, J.A. Ott. *J. Appl. Phys.*, **95**, 5347 (2004).
- [73] R.J. Beanland. *Appl. Phys.*, **77**, 6217 (1995).
- [74] J.P. Hirth, J. Lothe. *Theory of Dislocations* (N.Y., Wiley, 1982).
- [75] R.J. Beanland. *Appl. Phys.*, **72**, 4031 (1992).
- [76] P.B. Mooney, F.K. LeGoues, J. Tersoff, J.O. Chu. *J. Appl. Phys.*, **75**, 3968 (1994).
- [77] F.K. LeGoues. *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 876 (1994).
- [78] M.M. Rahman, S.Q. Zheng, M. Mori, T. Tambo, C. Tatsuyama. *J. Appl. Phys.*, **100**, 053505 (2006).
- [79] A.P. Knights, R.M. Gwilliam, B.J. Sealy, T.J. Grasby, C.P. Parry, D.J.F. Fulgoni, P.J. Phillips, T.E. Whall, E.H.C. Parker, P.G. Coleman. *J. Appl. Phys.*, **89**, 76 (2001).
- [80] T. Ueno, T. Irisawa, Y. Shiraki. *J. Cryst. Growth*, **227**, 761 (2001).
- [81] Y.H. Luo, J. Wan, R.L. Forrest, J.L. Liu, G. Jin, M.S. Goorsky, K.L. Wang. *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 454 (2001).
- [82] J.S. Speck, M.A. Brewer, G. Beltz, A.E. Romanov, W. Pompe. *J. Appl. Phys.*, **80**, 3808 (1996).
- [83] R. Hull, J.C. Bean, R.E. Leibenguth, D.J. Werder. *J. Appl. Phys.*, **65**, 4723 (1989).
- [84] E. Kasper, K. Lyutovich, V. Bauer, M. Oemie. *Thin Sol. Films*, **336**, 319 (1998).
- [85] H. Alexander, P. Haasen. *Sol. St. Phys.*, **22**, 27 (1968).
- [86] C.G. Tuppen, C.J. Gibbings. *J. Appl. Phys.*, **68**, 1526 (1990).
- [87] R. Hull, J.C. Bean, D. Bahnck, L.J. Peticolas, K.T. Short, F.C. Unterwald. *J. Appl. Phys.*, **70**, 2052 (1991).
- [88] D.C. Houghton, D.D. Perovic, J.-M. Baribeau, G.G. Weatherty. *J. Appl. Phys.*, **67**, 1850 (1990).
- [89] V.Yu. Karasev, N.A. Kiselev, E.V. Orlova, A.K. Gutakovskiy, S.M. Pintus, S.V. Rubanov. *Inst. Phys. Conf. Ser.* 1989, No 100, section 1, p. 33.
- [90] А.К. Гутаковский, Ю.О. Кангер, В.Ю. Карасев, Н.А. Киселев, С.М. Пинтус, С.В. Рубанов, С.И. Стенин, А.А. Федоров. *ДАН СССР*, **304**, 355 (1989).
- [91] V.I. Vdovin. *J. Cryst. Growth*, **172**, 58 (1997).
- [92] T.J. Gosling. *J. Appl. Phys.*, **74**, 5415 (1993).
- [93] Y. Bogumilowicz, J.M. Hartmann, C. Di Nardo, P. Holliger, A.-M. Papon, G. Rolland, T. Billon. *J. Cryst. Growth*, **290**, 523 (2006).

- [94] H.-C. Luan, D.R. Lim, K.K. Lee, K.M. Chen, J.G. Sandland, K. Wada, L.C. Kimerling. *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 2909 (1999).
- [95] L. Colace, G. Masini, G. Assanto, H.-C. Luan, K. Wada, L.C. Kimerling. *Appl. Phys. Lett.*, **76**, 1231 (2000).
- [96] Ю.Б. Болховитянов, Ю.Д. Ваулин, А.К. Гутаковский, С.И. Стенин, В.И. Юдаев. *Изв. АН. Сер. физ.*, **44**, 1238 (1980).
- [97] Yu.B. Bolkhovityanov, Yu.D. Vaulin, A.K. Gutakovskii, V.I. Yudaev. *Cryst. Res. Tech.*, **16**, 921 (1981).
- [98] Yu.B. Bolkhovityanov, V.I. Yudaev, A.K. Gutakovskii. *Thin Sol. Films*, **137**, 111 (1986).
- [99] P. Sheldon, B.G. Yacobi, K.M. Jones, D.J. Dunlavy. *J. Appl. Phys.*, **58**, 4186 (1985).
- [100] M. Halbwx, D. Bouchier, V. Yam, D. Débarre, L.H. Nguyen, Y. Zheng, P. Rosner, M. Benamara, H.P. Strunk, C. Clers. *Appl. Phys. Lett.*, **97**, 064907-1 (2005).
- [101] J. Liu, H.J. Kim, O. Hul'ko, Y.H. Xie, S. Sahni, P. Bandaru, E. Yablonovitch. *J. Appl. Phys.*, **96**, 916 (2004).
- [102] A. Sakai, T. Tatsumi. *Appl. Phys. Lett.*, **64**, 52 (1994).
- [103] D. Dentel, J.L. Bischoff, T. Angot, L. Kubler. *Surf. Sci.*, **402/404**, 211 (1998).
- [104] S.-J. Kahng, Y.H. Ha, J.-Y. Park, S. Kim, D.W. Moon, Y. Kuk. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 4931 (1998).
- [105] S.-J. Kahng, Y.H. Ha, D.W. Moon, Y. Kuk. *Phys. Rev. B*, **61**, 10 827 (2000).
- [106] A. Portavoce, I. Berbezier, A. Ronda. *Phys. Rev. B*, **69**, 155 414 (2004).
- [107] M. Horn-von Hoegen, B.H. Müller, A. Al-Falou. *Phys. Rev. B*, **50**, 11 640 (1994).
- [108] Th. Schmidt, R. Kröger, T. Clausen, J. Falta, A. Janzen, M. Kammler, P. Kury, P. Zahl, M. Horn-von Hoegen. *Appl. Phys. Lett.*, **86**, 111910 (2005).
- [109] F.K. LeGoues, M. Horn-von Hoegen, M. Copel, R.M. Tromp. *Phys. Rev. B*, **44**, 12 894 (1991).
- [110] M. Horn-von Hoegen, A. Al-Falou, H. Pietsch, B.H. Müller, M. Henzler. *Surf. Sci.*, **298**, 29 (1993).
- [111] M. Horn-von Hoegen, F.K. LeGoues, M. Copel, M.C. Reuter, R.M. Tromp. *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 1130 (1991).
- [112] M. Horn-von Hoegen, M. Copel, J.C. Tsang, M.C. Reuter, P.M. Tromp. *Phys. Rev. B*, **50**, 10 811 (1994).
- [113] D.J. Eaglesham, A.E. White, L.C. Feldman, N. Noriya, D.C. Jacobson. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 1643 (1993).
- [114] H.J. Osten, J. Klatt, G. Lippert, B. Dietrich, E. Bugiel. *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 450 (1992).
- [115] J.M.C. Thornton, A.A. Williams, J.E. Macdonald, R.G. van Silfhout, M.S. Finney, C. Norris. *Surf. Sci.*, **273**, 1 (1992).
- [116] T.F. Wietler, E. Bugiel, K.R. Hofmann. *Appl. Phys. Lett.*, **87**, 182 102 (2005); *Thin Sol. Films*, **508**, 6 (2006).
- [117] M. Bauer, J. Taraci, J. Tolle, A.V.G. Chizmeshya, S. Zollner, D.J. Smith, J. Menendez, C. Hu, J. Kouvetakis. *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 2992 (2002).
- [118] R. Roucka, J. Tolle, C. Cook, A.V.G. Chizmeshya, J. Kouvetakis, V.R. D'Costa, J. Menendez, Z.D. Chen, S. Zollner. *Appl. Phys. Lett.*, **86**, 191 912 (2005).
- [119] J. Tolle, R. Roucka, A.V.G. Chizmeshya, J. Kouvetakis, V.R. D'Costa, J. Menéndez. *Appl. Phys. Lett.*, **88**, 252 112 (2006).

Редактор Т.А. Полянская

Possibilities and main principles of plastic relaxation operating of GeSi/Si and Ge/Si films with stepwise changed composition

Yu.B. Bolkhovityanov, A.K. Gutakovskii, A.S. Deryabin, O.P. Pchelyakov, L.V. Sokolov

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

Abstract High quality strain-relaxed SiGe heterostructures on Si(001) substrates with different part of Ge cover the lattice parameter from that of Si to that of Ge. Now they are usually named as „artificial substrates“. The most commonly known SiGe buffer technique has been the compositionally graded layers. However, thinner buffers ($< 1 \mu\text{m}$) are more favourable for monolithic integration of devices on Si. The authors have analyzed the results of new growth methods such as low temperature Si buffer (300–400°C) growth before the main GeSi layer or using of Sb and atomic H surfactants which modify the growth mode when GeSi films grow. Examples of artificial introduction of misfit dislocations which can be as alternative to nucleation of dislocations on surface irregularities are discussed. The authors come to opinion that for enhancement of high quality strain-relaxed Ge or high-Ge content SiGe thin films it is necessary: (a) to have the possibility of dosed nucleation of misfit dislocations and (b) to reduce or fully suppress transition from layer-by-layer to three-dimensional growth mechanism and because of that to decrease the value of threading dislocations nucleated on surface irregularities.