

# Гетероэпитаксия пленок $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ ( $x \sim 0.4-0.5$ ) на подложках $\text{Si}(001)$ , отклоненных к $(111)$ : формирование только коротких краевых дислокаций несоответствия в направлении отклонения

© Ю.Б. Болховитянов, А.С. Дерябин, А.К. Гутаковский, Л.В. Соколов

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,  
Новосибирск, Россия

E-mail: bolkhov@isp.ncs.ru

(Поступила в Редакцию 27 апреля 2009 г.  
В окончательной редакции 27 мая 2009 г.)

Исследовалась релаксация механических напряжений несоответствия в эпитаксиальных пленках  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  ( $x \sim 0.4-0.5$ ), выращиваемых методом молекулярной эпитаксии на подложках  $\text{Si}$ , отклоненных от точной ориентации  $(001)$  на угол  $6^\circ$ . Рассмотрены возможные варианты наведенного зарождения и взаимодействия  $60^\circ$  дислокаций несоответствия (ДН), распространяющихся в направлении отклонения с образованием отрезков коротких краевых ДН, проведена их классификация и приведены экспериментально обнаруженные с помощью ПЭМ различные формы таких конфигураций. Показано, что образование коротких краевых ДН происходит по двум различным механизмам: *A* — коррелированное или наведенное зарождение комплементарной  $60^\circ$  дислокационной полупетли и затем образование отрезка краевой дислокации; *B* — образование  $90^\circ$  сегмента ДН при пересечении уже существующих комплементарных  $60^\circ$  ДН, скользящих в противоположно наклонных плоскостях  $\{111\}$ . Показана неэквивалентность взаимодействия  $60^\circ$  ДН, распространяющихся в противоположных направлениях вдоль направления отклонения подложки.

PACS: 61.72.Lk, 81.05.Cy, 81.15.-z

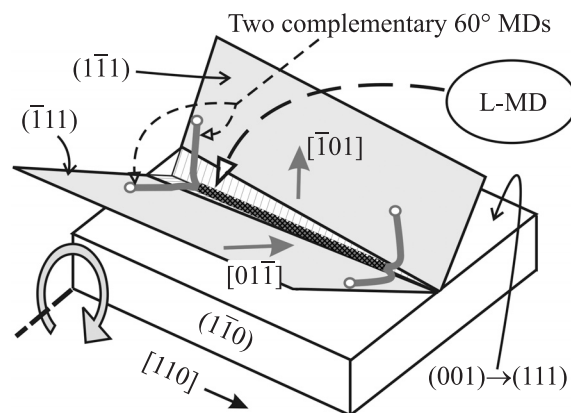
## 1. Введение

В ходе пластической релаксации пленок  $\text{GeSi}$ , выращиваемых на подложках  $\text{Si}(001)$ , формируются в основном подвижные  $60^\circ$  дислокации несоответствия (ДН) с векторами Бюргера ( $\mathbf{b}$ )  $a/2\langle 110 \rangle$  ( $a$  — параметр решетки), наклонными к гетерогранице. При скольжении двух  $60^\circ$  дислокаций по наклонным взаимно пересекающимся в плоскости гетерограницы плоскостям  $\{111\}$  возможно их взаимодействие по реакциям, известным из теории дислокаций, например  $a/2[\bar{1}01] + a/2[01\bar{1}] = a/2[\bar{1}10]$ . Такие  $60^\circ$  дислокации были названы комплементарными [1]. В результате такой реакции по линии пересечения наклонных плоскостей  $\{111\}$  (например, в направлении  $[110]$ ) формируется чисто краевая ДН (или дислокация Ломера, L-MD), вектор Бюргера которой перпендикулярен дислокационной линии и лежит в плоскости  $(001)$ . При выращивании пленок с содержанием  $\text{Ge}$  40–50% в большинстве случаев наблюдаемые краевые дислокации расположены точно в границе раздела пленка–подложка и обнаруживаются на начальных стадиях пластической релаксации. Это предполагает наличие механизмов их образования, не основанных на случайной встрече двух комплементарных  $60^\circ$  ДН.

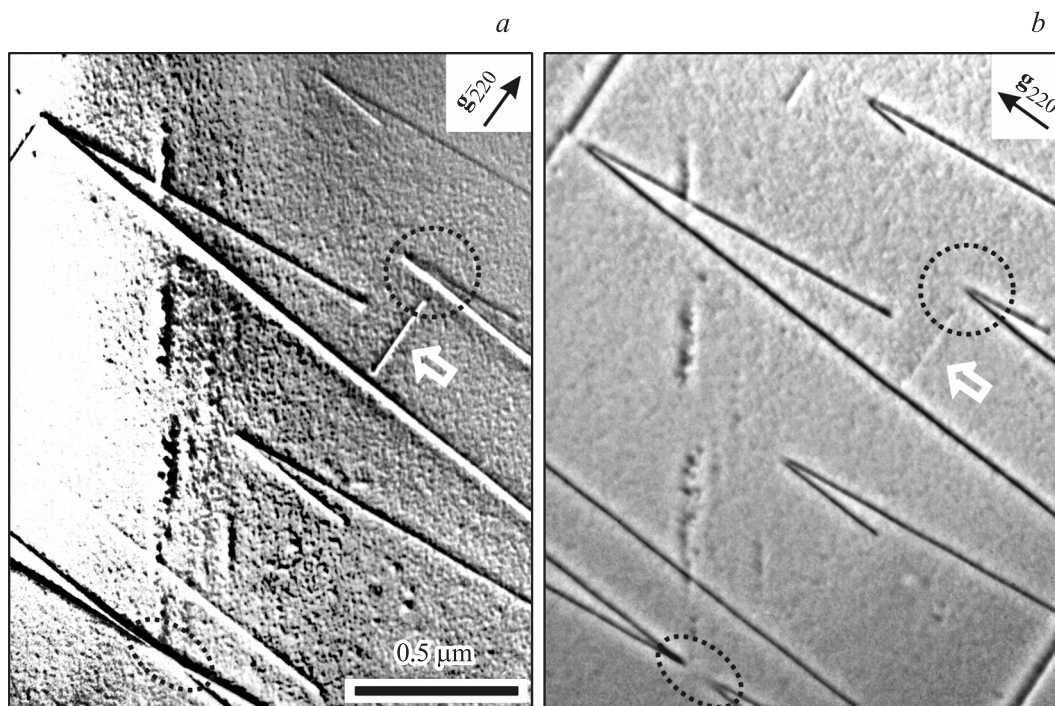
Кват с соавторами [1] предложили как вариант зарождение комплементарной  $60^\circ$  дислокационной полупетли на поверхности тонкого слоя под воздействием поля напряжений уже существующей в границе раздела  $60^\circ$  ДН. Gosling [2] теоретически показал, что акт зарождения такой полупетли в районе уже существующей  $60^\circ$  ДН (с последующим превращением в  $90^\circ$  ДН)

имеет существенно меньший энергетический барьер, чем при зарождении одиночной дислокационной полупетли в отсутствие ДН. Назовем такой процесс механизмом наведенного зарождения комплементарной  $60^\circ$  ДН.

Если подложка отклонена от грани  $(001)$  вокруг оси  $[\bar{1}10]$  так, как показано на рис. 1, то направление  $[110]$  (вдоль которого образуются краевые дислокации) уже не лежит в границе раздела, а пересекает ее под углом отклонения. Поэтому длинные краевые ДН не могут существовать в направлении отклонения подложки, так как их окончания при удлинении дислокации удаляются от границы раздела. Нами ранее было пока-



**Рис. 1.** Формирование короткой краевой ДН (L-MD) в направлении отклонения.  $60^\circ$  ДН, которые лежат на пересечениях наклонных плоскостей  $\{111\}$  с подложкой, разделены на две подгруппы, распространяющиеся под углом друг к другу, как это видно из рис. 2 и 5.



**Рис. 2.** Двухволновые темнопольные ПЭМ-изображения дислокационной сетки пленки  $Ge_xSi_{1-x}/Si$  с долей  $x \sim 0.5$ . Пунктирными овалом и окружностью выделены участок с перекрестием  $60^\circ$  ДН и один из  $Y$ -центров соответственно.

зано [3,4], что на отклоненной подложке краевые ДН, лежащие в направлении отклонения, образуются на пересечениях  $60^\circ$  ДН, принадлежащих к разным подсистемам. Была также обнаружена дислокационная конфигурация ( $Y$ -центр), состоящая из короткого отрезка краевой ДН и расходящихся от него вдоль направления отклонения двух  $60^\circ$  ДН.

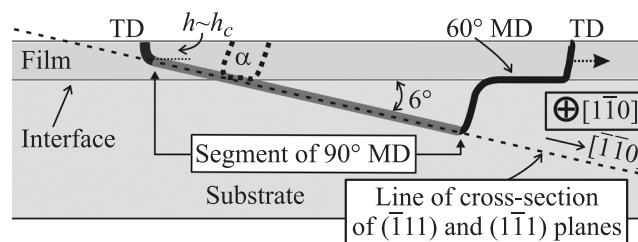
В настоящей работе рассмотрены возможные варианты наведенного зарождения и взаимодействия  $60^\circ$  ДН, распространяющихся в направлении отклонения с образованием отрезков краевых ДН, проведена их классификация и приведены экспериментально обнаруженные с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) различные формы таких конфигураций.

## 2. Методика эксперимента

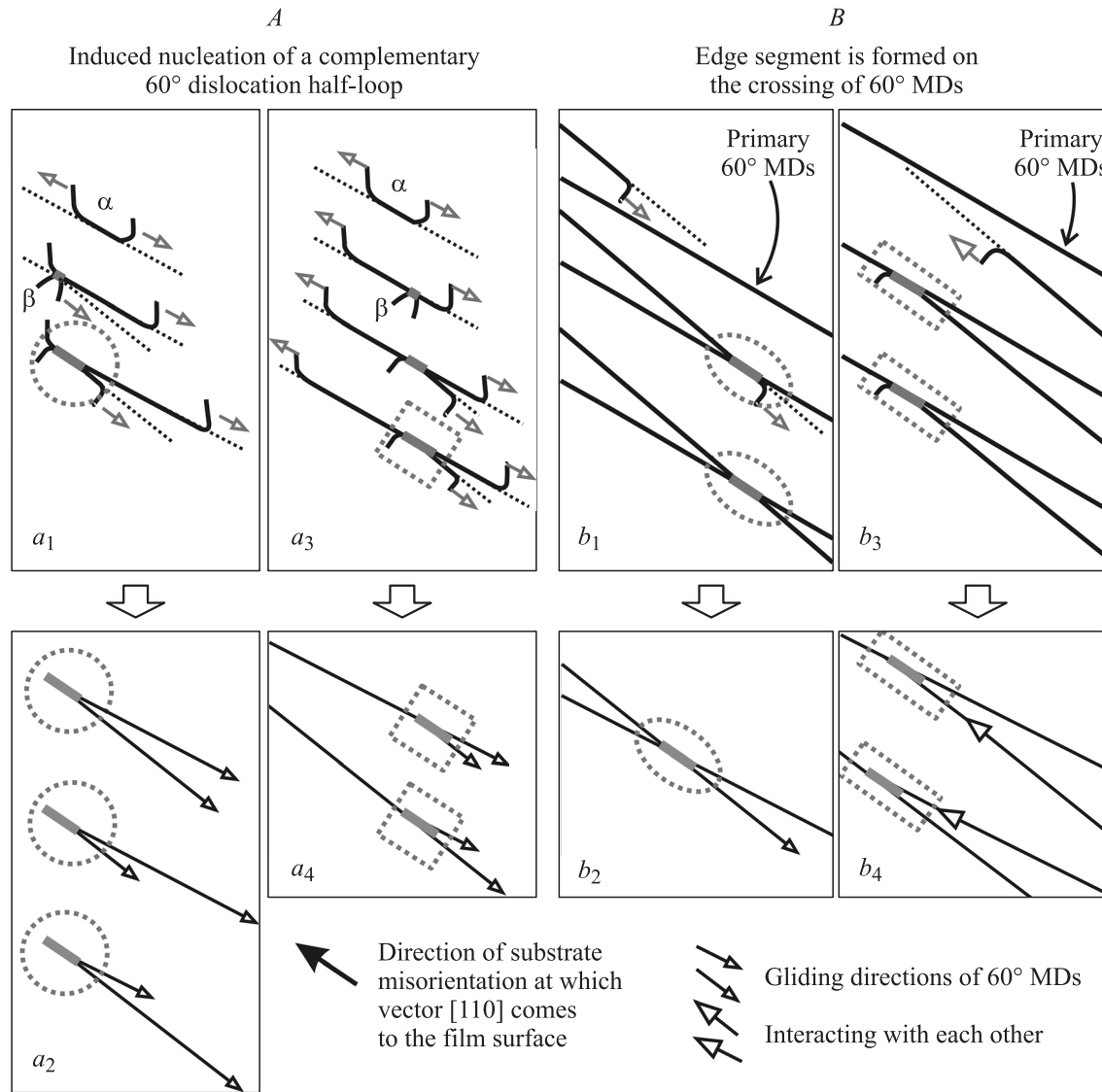
Слой твердого раствора  $Ge_xSi_{1-x}$   $x \sim 0.4-0.5$  выращивались в установке молекулярно-лучевой эпитаксии „Катунь“. Подложки  $Si$  были отклонены на  $6^\circ$  вокруг оси  $(011)$ . Толщина пленок была около  $20\text{ nm}$ , и поэтому они находились на начальной стадии пластической релаксации. Основные условия выращивания пленок  $GeSi$  описаны в [5]. Тип структурных дефектов и их пространственное распределение изучались с помощью ПЭМ на микроскопе JEM-400EX. Изображения продольных срезов образцов анализировались по стандартной методике дифракционного анализа в режиме двухволновой дифракции с использованием условия погасания изображения дислокаций, когда  $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ , где  $\mathbf{g}$  и  $\mathbf{b}$  — векторы дифракции и Бюргера соответственно.

## 3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Отклонение подложки от сингулярной грани  $(001)$ , приводя к расщеплению одной из систем, параллельных  $60^\circ$  ДН на две подсистемы пересекающихся ДН, позволило выявить новые особенности образования и зарождения ДН, как  $60^\circ$ , так и  $90^\circ$ . На отклоненной подложке краевые ДН, лежащие в направлении отклонения, образуются на пересечениях  $60^\circ$  ДН, принадлежащих к разным подсистемам. Обнаружена дислокационная конфигурация ( $Y$ -центр), состоящая из короткого отрезка краевой ДН и расходящихся от него вдоль направления отклонения двух  $60^\circ$  ДН. Обе конфигурации приведены на рис. 2. Отрезки краевых ДН, распространяющиеся в направлении отклонения и видимые на рис. 2, *a*, становятся неконтрастными на рис. 2, *b* вследствие выполнения условия  $\mathbf{g} \cdot \mathbf{b} = 0$ . Это отчетливо видно на при-



**Рис. 3.** Схема скольжения пронизывающих дислокаций (threading dislocations — TD), образующих сегмент краевой дислокации, распространяющейся в направлении  $[110]$ .



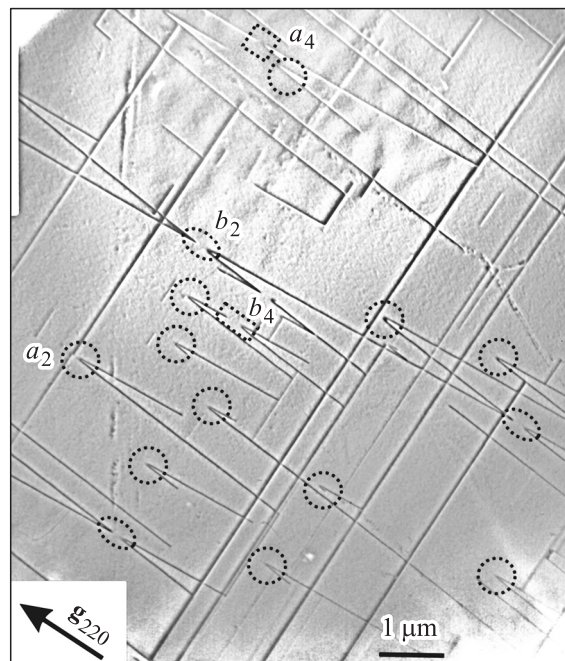
**Рис. 4.** Схемы зарождения  $60^\circ$  ДН, их скольжения и взаимодействия, при которых может наблюдаться формирование коротких краевых ДН в направлении отклонения. Стрелками показывают направления, в которых скользят  $60^\circ$  ДН. Внизу (варианты  $a_2, a_4$  и  $b_3, b_4$ ) показаны формы дислокационных конфигураций, соответствующие видимым на ПЭМ-изображениях пленок GeSi/Si.

мере конфигурации, окаймленной пунктирным кругом. Короткая  $60^\circ$  ДН, распространяющаяся в направлении оси отклонения (отмечена светлой стрелкой) и видимая на обоих изображениях, может служить тестовым объектом для сравнения левого и правого изображений.

Формирование конфигурации, названной нами в [3]  $Y$ -центром, можно объяснить, взяв за основу предположение о коррелированном (одновременном) образовании комплементарных полупетель  $60^\circ$  ДН, которые формируют краевой отрезок ДН по приведенной выше реакции, либо наведенном образовании  $60^\circ$  полупетли вблизи уже существующей  $60^\circ$  ДН так, как ранее предположили Kvam с соавторами [1]. На рис. 3 представлена схема образования такой конфигурации. Комплементарные полупетли  $60^\circ$  ДН ( $\alpha$  на рис. 3) расширяется каждая в своей наклонной плоскости  $\{111\}$  в противо-

положных направлениях, образуя на пересечении этих плоскостей в направлении  $[\bar{1}\bar{1}0]$  отрезок краевой ДН. Так как это направление пересекает границу раздела пленка–подложка, то условия скольжения  $60^\circ$  дислокаций, тянущих за собой отрезок краевой ДН в обе стороны, будут неэквивалентными при их скольжении в противоположных направлениях. При распространении влево ветвь  $60^\circ$  ДН, выходящая на поверхность пленки и являющаяся пронизывающей дислокацией (TD на рис. 3), становится все более короткой. При расстоянии до поверхности пленки, близком к  $h_c$  — критической толщине по Matthews и Blakeslee [6], ее скольжение прекращается, поскольку увеличение длины дислокации становится энергетически невыгодным. Изучение в настоящей работе ПЭМ-изображений других образцов показало, что конфигурации типа  $Y$ -центра формиру-





**Рис. 5.** Двухлучевое темнопольное ПЭМ-изображение пленки  $\text{GeSi}/\text{Si}(001)$   $6^\circ$  к  $(111)$ . Толщина пленки 20 нм. Все краевые дислокационные сегменты, параллельные вектору дифракции, находятся вне контраста. Большинство из них показано пунктирными фигурами (такими же, как на рис. 4). Буквы у дислокационных форм также соответствуют схемам на рис. 4.

ются не только при одновременном зарождении двух комплементарных полупетель  $60^\circ$  дислокаций (как было сообщено в работах [3–5]), но и путем „наведенного“ зарождения  $60^\circ$  дислокационной полупетли фронтом уже сформированной  $60^\circ$  ДН, комплементарной этой полупетле. В этом случае лучи  $60^\circ$  ДН, отходящие от сегмента краевой ДН, на ПЭМ-изображениях имеют разную длину (рис. 4 и 5).

Исходя из анализа часто встречающихся дислокационных конфигураций, наблюдаемых на ПЭМ-изображениях, можно выделить два механизма образования краевых ДН в направлении отклонения подложки: *A* — коррелированное или наведенное зарождение комплементарной  $60^\circ$  дислокационной полупетли и затем образование отрезка краевой ДН; *B* — образование  $90^\circ$  сегмента ДН при пересечении уже существующих комплементарных  $60^\circ$  ДН, скользящих в противоположно наклонных плоскостях  $\{111\}$ .

Как было отмечено выше, при отклонении подложки противоположные направления скольжения  $60^\circ$  ДН при их взаимодействии становятся неэквивалентными в силу того, что дислокация, идущая в направлении  $[\bar{1}10]$ , отклоняясь от плоскости границы раздела, заглубляется в подложку, а идущая в противоположном направлении  $[110]$  отклоняется в объем пленки. Разумно предположить, что в каждом из механизмов существуют два варианта, обусловленные этой неэквивалентностью. На рис. 4 представлены схемы образования и возможные

дислокационные конфигурации как результат зарождения и взаимодействия  $60^\circ$  ДН, распространяющихся вдоль направления отклонения.

**3.1. Механизм А.** В основе этого механизма лежит наведенное зарождение комплементарной  $60^\circ$  полупетли либо первичной  $60^\circ$  полупетли (одновременное зарождение пары комплементарных ДН), либо уже сформированной  $60^\circ$  ДН. Если вторичная (комплементарная) полупетля (вариант  $a_1$  на рис. 4, полупетля  $\beta$ ) зарождается под влиянием фронта поля напряжений  $60^\circ$  ДН, движущейся вдоль  $[110]$  в направлении выхода из границы раздела в объем пленки (для варианта  $a_1$  влево), то после образования краевого сегмента ДН наблюдается остановка распространения обеих  $60^\circ$  ДН в этом направлении. Соответствующие конфигурации указанного взаимодействия, такие как  $a_2$  на рис. 4, наблюдались нами в большом количестве на изображениях ПЭМ (рис. 2 и 5). Если же вторичная (комплементарная) полупетля зарождается под влиянием уже сформированной  $60^\circ$  ДН (вариант  $a_3$  на рис. 4, полупетля  $\beta$ ), то в результате образования краевого сегмента ДН только одна ветвь вторичной  $60^\circ$  ДН, распространяющейся влево для варианта  $a_3$ , может быть остановлена по описанному ранее механизму. Соответствующие конфигурации такого взаимодействия представлены на рис. 4 (вариант  $a_4$ ).

**3.2. Механизм В.** При пересечении уже существующих комплементарных  $60^\circ$  ДН также должна наблюдаться разница, обусловленная направлением скольжения более поздней, т.е. пересекающей  $60^\circ$  ДН. Эта разница отражена на рис. 4 (варианты  $b_1$  и  $b_3$ ). Если пересекающая  $60^\circ$  ДН „набегает“ на пересекаемую в направлении заглубления в подложку (вариант  $b_1$ ), то образуется конфигурация, подобная  $b_2$  на рис. 4. Описанная выше, такая конфигурация наблюдалась нами на изображениях ПЭМ в больших количествах [3–5]. Если направление „набегания“ обратное (как показано для варианта  $b_3$  на рис. 4), то в результате образования краевого сегмента ДН скольжение набегавшей ДН останавливается. Соответствующие конфигурации такого взаимодействия представлены на рис. 4 (вариант  $b_4$ ). Из-за большой плотности  $\gamma$ -центров, стопорящих скольжение  $60^\circ$  ДН в направлении  $[110]$ , плотность таких „набегавших“ дислокаций, т.е.  $60^\circ$  ДН, скользящих в направлении  $[110]$  (влево на рис. 4), понижена, и соответственно конфигурация типа  $b_4$  (рис. 4) должна встречаться реже, чем конфигурация типа  $b_3$ .

На рис. 5 приведено одно из электронно-микроскопических изображений, где реальные конфигурации таких взаимодействий обнаружены на одной фольге одновременно. На основе этого рисунка, а также других наблюдений вычисленная плотность дислокационных конфигураций для вариантов  $a_1$  и  $b_1$  составляет  $10^7-10^9 \text{ cm}^{-2}$ , а варианты  $a_3$  и  $b_3$  встречаются на порядок реже.

При увеличении толщины пленки  $\text{GeSi}$  в процессе роста „затягивание“ краевого сегмента ДН в объем пленки прекращается, так как уменьшается энергетическая выгода от объединения комплементарных  $60^\circ$  ДН.

С дальнейшим ростом толщины пленки неподвижные пронизывающие ветви  $60^\circ$  ДН, ранее застопоренные из-за их малого расстояния до поверхности пленки, вновь могут прийти в движение. Дислокационная конфигурация, на малых толщинах имеющая форму  $Y$ -центра, преобразуется в форму перекрестия.

Представляется очевидным, что в тех случаях, когда в качестве подложки используется пластина, слабо отклоненная от плоскости (001) (отклонение стандартных пластин не превышает  $0.5^\circ$ ), длина отрезков краевых дислокаций увеличится по крайней мере на порядок. Вследствие этого вполне сформировавшиеся дислокационные конфигурации рассмотренных типов будут образовываться при большей степени релаксации. Однако их наблюдение будет затруднено из-за высокой плотности взаимно пересекающихся дислокационных линий. Тем не менее у нас нет оснований предполагать, что описанные в настоящей работе закономерности взаимодействия  $60^\circ$  ДН не будут выполняться в случае слабо отклоненной подложки при сохранении условий роста неизменными.

#### 4. Заключение

Предложены два механизма образования краевых ДН в направлении отклонения подложки: коррелированное или наведенное зарождение комплементарной  $60^\circ$  дислокационной полупетли и затем образование отрезка краевой ДН. В большинстве случаев проявлением такого механизма является дислокационная конфигурация типа  $Y$ -центра; образование  $90^\circ$  сегмента ДН при пересечении уже существующих комплементарных  $60^\circ$  ДН, скользящих в протиположно наклонных плоскостях  $\{111\}$ . Большая плотностью  $Y$ -центров на начальной стадии пластической релаксации пленок GeSi/Si свидетельствует о массовом характере образования краевых сегментов ДН путем взаимодействия наведенных комплементарных  $60^\circ$  ДН. Отсюда следует вывод: образование краевых ДН путем коррелированного или наведенного зарождения комплементарных  $60^\circ$  ДН является доминирующим в пленках GeSi/Si с долей Ge 0.4–0.5.

#### Список литературы

- [1] E.P. Kvam, D.M. Maher, C.J. Humphreys. *J. Mater. Res.* **5**, 1900 (1990).
- [2] T.J. Gosling. *J. Appl. Phys.* **74**, 5415 (1993).
- [3] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. *Appl. Phys. Lett.* **92**, 131 901 (2008).
- [4] Yu.B. Bolkhovityanov, A.S. Deryabin, A.K. Gutakovskii, L.V. Sokolov. *J. Cryst. Growth* **310**, 3422 (2008).
- [5] Ю.Б. Болховитянов, А.К. Гутаковский, А.С. Дерябин, Л.В. Соколов. *ФТТ* **50**, 1783 (2008).
- [6] J.W. Matthews, A.E. Blakeslee. *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).