

ЭПИТАКСИАЛЬНЫЕ СЛОИ И МНОГОСЛОЙНЫЕ КОМПОЗИЦИИ

EPITAXIAL LAYERS AND MULTILAYERED COMPOSITIONS

УДК 539.26:621.315.592

ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИЕ НАПРЯЖЕНИЯ В ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ ПЛЕНКЕ, СОЗДАННЫЕ ДИСЛОКАЦИЯМИ НЕСООТВЕТСТВИЯ

© 2013 г. Е. М. Труханов, А. В. Колесников, И. Д. Лошкарев
Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия

Для границы раздела (ГР) произвольной ориентации (hkl) впервые получено выражение, устанавливающее взаимосвязь между параметром несоответствия эпитаксиальной гетеросистемы f , числом дислокационных семейств, участвующих в процессе снятия напряжений несоответствия, линейными плотностями дислокаций несоответствия (ДН) каждого семейства, а также значениями проекций краевых компонент векторов Бюргерса ДН на ГР. Для получения выражения рассмотрены дальнедействующие поля нормальных и сдвиговых напряжений, возникающие в приповерхностном слое эпитаксиальной пленки. Сформулированы критерии оптимального и неоптимального протекания релаксационного процесса снятия напряжений несоответствия. Для ГР (001) и (111) обсуждена проблема уменьшения плотности пронизывающих дислокаций при введении пересекающихся ДН, имеющих одинаковые векторы Бюргерса (Г-образных ДН). Показано, что эффективная генерация таких ДН возможна только на начальной стадии релаксационного процесса, поскольку сопровождается увеличением уровня дальнедействующих сдвиговых напряжений.

Ключевые слова: кремний, германий, дальнедействующие напряжения, дислокации несоответствия, оптимальная и неоптимальная релаксация.

Введение

На заре исследований дислокаций несоответствия (ДН) Дж. Мэтьюзом была предложена формула [1, 2]

$$D = \frac{b^e}{f}, \quad (1)$$

характеризующая зависимость междислокационного расстояния D в полностью пластически релаксированной гетеросистеме от параметра несоответствия f и проекции краевой составляющей вектора Бюргерса на границу раздела b^e . Однако ни в указанных работах, ни в последующих публикациях по теории ДН различных исследователей не было рассмотрено влияние ориентации границы раздела (ГР) на зависимость D от b^e и f . Выражение (1) по умолчанию практически до настоящего времени использовали при анализе равновесной дислокационной ГР произвольной ориентации. Так, например, в работах [3–5] оно было применено для анализа дислокационной ГР (111). Только в 2011–2012 гг. было показано [6, 7],

что в случае дислокационной ГР (111) необходимо использовать формулу

$$D = \frac{3 b^e}{2 f}, \quad (2)$$

а в случае ГР произвольной ориентации (hkl) — формулу [8]

$$\sum_{k=1}^n \left(\frac{b_k^e}{D_k} \right) = 2f. \quad (3)$$

Здесь n — число дислокационных семейств, участвующих в релаксационном процессе; D_k и b_k^e — соответствующие k -му семейству междислокационное расстояние и краевая проекция вектора Бюргерса на ГР. Корректность формулы (2) была проверена при анализе как экспериментальных работ авторов [6, 7], так и литературных данных [3, 5]. В работах [6, 7] было продемонстрировано, что анализы, выполненные с использованием формул (1) и (2) приводят к радикально отличающейся интерпретации зарегистрированных дислокационных картин. Как будет показано ниже, формулы (1) и (2) являются частными случаями выражения (3). Ниже представлен разверну-

Труханов Евгений Михайлович — доктор физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник, e-mail: trukh@isp.nsc.ru, **Колесников Алексей Викторович** — кандидат физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, **Лошкарев Иван Дмитриевич** — кандидат физ.-мат. наук, младший научный сотрудник, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, 630090, Россия, Новосибирск, просп. Лаврентьева, д. 13.

тый анализ вопросов, кратко рассмотренных в работе [8]. Протекание релаксационного процесса может быть как оптимальным, так и неоптимальным. В первом случае приповерхностный слой пленки является полностью ненапряженным, однако во втором случае он содержит поле чисто сдвиговых напряжений. Одной из задач предлагаемой статьи является получение математического выражения, позволяющего различать указанные случаи релаксации. Цель работы также включает анализ напряженного состояния полупроводниковых гетеросистем с ГР типа (001) и (111). Рассмотрено влияние распространенных в технологической и экспериментальной практике вариантов введения ДН на уровень напряжений и энергию гетеросистемы, а также на структурное состояние эпитаксиальной пленки. Предполагается, что слои системы имеют кристаллические решетки типа алмаза или сфалерита.

Выражение для плотности дислокаций несоответствия

Примем, что в исходном псевдоморфном состоянии (когда в ГР отсутствуют ДН) эпитаксиальная пленка является однородной по площади и толщине. Тогда, как показано в работе [9], для изотропного приближения тонкой пленки на толстой подложке создаваемое в пленке поле напряжений несоответствия описывается тензором, содержащим всего две отличные от нуля компоненты:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = -2Gf \left(\frac{1+\nu}{1-\nu} \right).$$

Параметры семейств 60°-ных дислокаций несоответствия, залегающих в границах раздела (001) и (111) гетеросистем с кристаллической решеткой алмаза и сфалерита

№	Данные о семействах дислокаций		Ориентация границы раздела			
	Плоскость скольжения	Направление вектора Бюргерса	Тип винтовой составляющей	Направление дислокационной линии	Тип винтовой составляющей	Направление дислокационной линии
1	(111)	[101]	Для (001) Левая		Для (111) Правая	
2	(111)	[011]	Правая		Левая	
3	(111)	[110]	—		—	
4	(111)	[110]	—		Левая	
5	(111)	[011]	Левая		Правая	
6	(111)	[101]	Правая		—	
7	(111)	[110]	—		—	
8	(111)	[101]	Левая		Любая	
9	(111)	[011]	Правая			
10	(111)	[011]	Левая		Произвольное	
11	(111)	[101]	Правая		Левая	
12	(111)	[110]	—		Правая	

Примечание. Принято, что параметр решетки пленки превышает параметр подложки. В противном случае типы винтовых составляющих дислокаций надо изменить на противоположные.

Здесь G — модуль сдвига; ν — коэффициент Пуассона. В диадной записи [8, 10] тензор напряжений несоответствия можно записать как

$$\sigma_{nn} = -2Gf \left[\frac{1+\nu}{1-\nu} \right] (\mathbf{ii} + \mathbf{jj}). \quad (4)$$

В гетеросистеме с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита напряжения несоответствия снимаются, как правило, ДН, скользящими в плоскостях типа {111} и имеющими вектор Бюргерса типа $(a/2)\langle 110 \rangle$. Это происходит в рамках 12 дислокационных систем скольжения, которые показаны в таблице, представленной для ГР (001) и (111). Обозначим вектор Бюргерса k -го дислокационного семейства b_k , а его винтовую компоненту — b_k^s . В соответствии с обозначениями, введенными в формулу (3), будем также использовать параметры b_k^e и D_k . Если для k -го семейства ДН, которое параллельно оси OY , расстояние D_k меньше толщины пленки h , то, как показано в работе [11], это семейство формирует в верхнем слое пленки дальнедействующие нормальные напряжения (ДАНН), равные

$$\sigma_{xx} = \frac{2Gb_k^e}{D_k(1-\nu)}. \quad (5)$$

Впервые аналогичное выражение (отличающееся на коэффициент 2) установлено в работе [12], где рассмотрена дислокационная граница между двумя полубесконечными однородными кристаллами. Отметим, что ни в монографии [12], ни в последующих работах не рассмотрена вторая компонента нормальных напряжений σ_{yy} , формируемая семейством ДН, параллельным оси OY . По аналогии с выражением

для компоненты σ_{yy} , создаваемой одиночной прямолинейной дислокацией [12, 13], для рассматриваемого случая семейства эквидистантных ДН получим

$$\sigma_{yy} = \frac{2\nu G b_k^e}{D_k(1-\nu)}. \quad (6)$$

Выражения (5) и (6) позволяют записать тензор ДАНН, создаваемых k -м семейством ДН, которые параллельны оси OY :

$$\sigma_{k(\text{нн})} = \frac{2G b_k^e}{D_k(1-\nu)}(\mathbf{ii} + \nu \mathbf{jj}). \quad (7)$$

Если обсуждаемое семейство ДН содержит также винтовую составляющую b_k^s , то дополнительно возникает поле действующих сдвиговых напряжений, тензор которых равен

$$\sigma_{k(\text{сд})} = \frac{2G b_k^s}{D_k}(\mathbf{ij} + \mathbf{ji}). \quad (8)$$

Полный тензор действующих напряжений σ_k , создаваемых k -м семейством ДН, можно записать как

$$\sigma_k = \frac{2G b_k^e}{D_k(1-\nu)}(\mathbf{ii} + \nu \mathbf{jj}) + \frac{2G b_k^s}{D_k}(\mathbf{ij} + \mathbf{ji}). \quad (9)$$

Пусть в ГР введено n дислокационных семейств, каждое из которых характеризуется параметрами D_k , b_k^e и b_k^s , причем $1 \leq k \leq n$. Обозначим через D наибольшее из всех D_k . Согласно работам [12, 14], существует такой линейный параметр $L > D$, что при $L < h$ в верхнем слое пленки глубиной $h-L$ возникает однородное поле действующих напряжений. Однако в расположенном вблизи ГР слое толщиной L все компоненты напряжений распределены неоднородно. Значение параметра L в литературе не определено. По-видимому, значение L несущественно превышает величину D .

Пусть толщина пленки h достигла значения, когда все n семейств формируют действующие поля. Если сумма всех этих n полей, каждое из которых определяется формулой (9), полностью компенсирует напряжения несоответствия, то выполняется

$$\sum_{k=1}^n \sigma_k = -\sigma_{\text{нн}}, \quad (10)$$

и верхний слой эпитаксиальной пленки растет полностью ненапряженным. Такой вариант релаксации напряжений псевдоморфной пленки является оптимальным. Для суммирования тензоров σ_k их следует привести к общей системе координат путем поворота вокруг нормали в ГР (ось OZ). При повороте тензора первая инварианта напряжений ($\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}$) сохраняется [15]. Поэтому сумма первых инвариантов тензоров σ_k равна взятой с обратным знаком первой инварианте тензора (4), т. е. $4Gf(1+\nu)/(1-\nu)$. В результате получим выражение (3), впервые представленное в работе [8].

При выводе формулы (3) использовали не равенство тензоров $\Sigma \sigma_k$ и $-\sigma_{\text{нн}}$, а равенство их первых инвариантов. Поэтому при выполнении уравнения (3) равенство (10) может как выполняться, так и не выполняться. Если оно не выполняется, то приведенный к главным направлениям тензор напряжений приповерхностного слоя пленки глубиной $(h-L)$ можно записать как $\sigma_{\text{ч.с}} = \sigma_{\text{ч.с}}(\mathbf{ii} - \mathbf{jj})$, где $\sigma_{\text{ч.с}}$ — величина напряжений чистого сдвига этого приповерхностного слоя. Если выполняется формула (3), но не выполняется формула (9), то такой вариант релаксации напряжений псевдоморфной пленки является неоптимальным.

Авторами установлено, что $\sigma_{\text{ч.с}} = 0$, если выполняется

$$\sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{D_k} \right) (b_k^e \sin 2\alpha_k - b_k^s \cos 2\alpha_k) = 0, \quad (11)$$

где α_k — угол между осью Ox и направлением залегания дислокационного семейства с номером k . Для выполнения условия (10) необходимо и достаточно, чтобы одновременно выполнялись условия (3) и (11).

Если в случае ГР (001) в выражении (3) принять $n = 2$ и $b_1^e = b_2^e = b^e$, то получим известную в теории дислокаций формулу (1). Формула (2) также является частным случаем выражения (3), если принять $n = 3$ и $b_1^e = b_2^e = b_3^e = b^e$. Если же в ГР (111) ввести не три, а два эквивалентных семейства ДН, то, как следует из формулы (3), корректной оказывается формула (1). На рентгеновской топограмме, полученной авторами в работе [16] (см. рис. 2, б), приведен именно такой случай для ГР (111): $n = 2$ и $b_1^e = b_2^e = b^e$. Далее мы еще вернемся к этому вопросу.

Возникновение действующих сдвиговых напряжений в случае границы раздела (001)

В таблице для ГР(001) представлены 60° -ные ДН с однотипными векторами Бюргера, для которых проекции b^e являются одинаковыми. ДН залегают в двух ортогональных направлениях в ГР и формируют прямоугольную дислокационную сетку. Для анализа возникающих действующих сдвиговых напряжений примем, что дислокации в ГР вводятся полосами 60° -ными ДН одного семейства. Номера семейств, в соответствии с данными таблицы, указаны в верхней строке и левом столбце рис. 1. Каждая полоса создает действующие сдвиговые напряжения, знак которых характеризуется наклоном ромба, расположенного рядом с номером семейства. Если на поверхности псевдоморфной пленки «нарисовать» квадрат со сторонами, параллельными направлениям $[110]$ и $[\bar{1}10]$, то после введения ДН под влиянием действующих сдвиговых напряжений он трансформируется в ромб. В результате пересечения полос ДН значение действующих сдвиговых напряжений либо

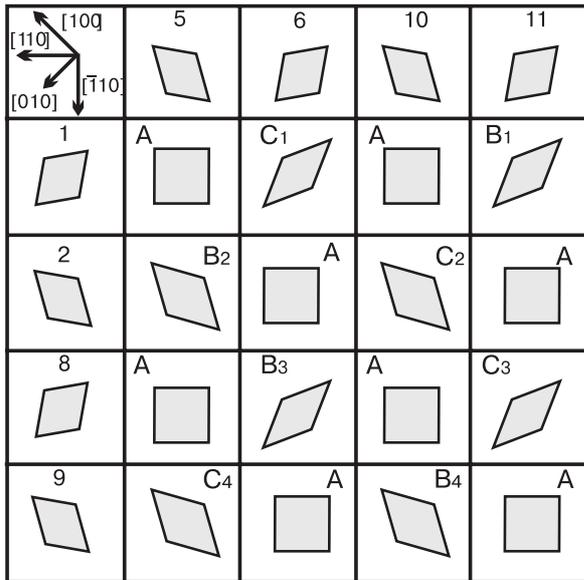


Рис. 1. Возникновение ненапряженных (А) и напряженных (В и С) приповерхностных областей пленки под действием дальнедействующих сдвиговых напряжений, создаваемых двумя семействами взаимно перпендикулярных 60°-ных ДН

возрастает в 2 раза (наклон ромба увеличивается, возникают области В-типа или С-типа), либо дальнедействующие сдвиговые напряжения пересекающихся полос взаимно компенсируются, и возникают неискаженные квадраты, что обозначено областями А-типа. Если полосы пересекающихся ДН имеют одинаковые векторы Бюргерса **b**, то при пересечении возникают области В-типа. Природу областей С-типа можно связать с уменьшением критической толщины эпитаксиальной пленки для введения первых ДН при переходе от сингулярной ГР (001) к вицинальным границам в результате поворотов вокруг направлений типа <010>. Возможны 4 варианта образования таких вицинальных плоскостей (001). Они получаются поворотами по часовой стрелке вокруг направлений $n_1 = [\bar{1}00]$, $n_2 = [010]$, $n_3 = [100]$ и $n_4 = [0\bar{1}0]$. В соответствии с номерами этих поворотов на рис. 1 и обозначены участки С₁, С₂, С₃ и С₄.

В работах [14, 16] показано, что при отсутствии дальнедействующих сдвиговых напряжений (см. области А-типа на рис. 1) упругая энергия гетеросистемы с увеличением толщины пленки *h* выходит на насыщение, и дальнейший рост пленки происходит без накопления энергии, т. е. аналогично гомоэпитаксиальному росту. Однако при наличии дальнедействующих сдвиговых напряжений, начиная с некоторой толщины, упругая энергия гетеросистемы $E_{гс}$ с увеличением *h* линейно возрастает, причем теоретически неограниченно. В реальных гетеросистемах такое возрастание невозможно, поэтому в дополнение к уже присутствующим двум пересекающимся семействам начнется введение других семейств ДН, понижающих значение дальнедействующих сдвиговых напряжений. Увеличение числа семейств приведет к повышенной плотности

так называемых пронизывающих дислокаций (ПД). (Последнее название является переводом английского термина «*threading dislocations*» и используется, например, в работах [11, 16]. В более ранних работах (см., например, [17]) данные дислокации называют прорастающими.) Если ПД начнут накапливаться вдоль кристаллографических направлений <110>, то это будет сопровождаться образованием фрагментарной структуры [17].

Неблагоприятным видом дефектов, понижающих уровень дальнедействующих сдвиговых напряжений, является образование трещин, показанное на рис. 2 для гетеросистемы Ge на Si. Они возникают при сравнительно низкой температуре эпитаксии (500 °С), когда пластическая релаксация дальнедействующих сдвиговых напряжений затруднена [17]. Трещинам характерны углы поворота на 90° [17], что можно объяснить с помощью рис. 1 и рис. 3. Если на рис. 1 привести тензор дальнедействующих сдвиговых напряжений к главным направлениям (поворот системы координат X0Y на 45° вокруг оси 0Z), то вместо ромбов возникнут прямоугольники, как на рис. 3. Ромбам, вытянутым на рис. 1 вдоль направления [010], т. е. областям В-типа и С-типа, имеющим индексы 1 и 3, соответствует изображение на рис. 3, а.

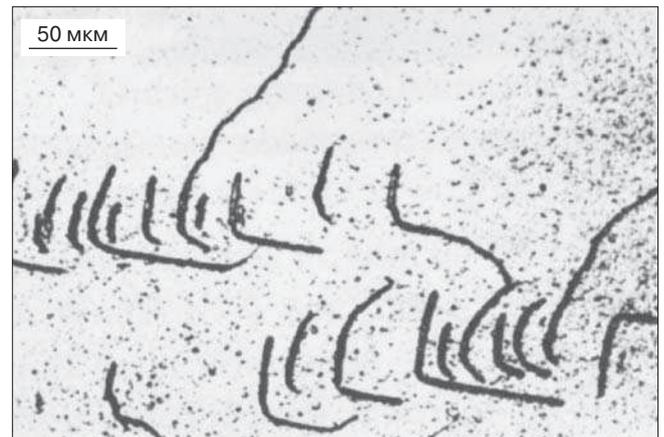


Рис. 2. Оптическое изображение трещин в эпитаксиальной пленке Ge на подложке Si(001), которые изменяют направления распространения на 90°

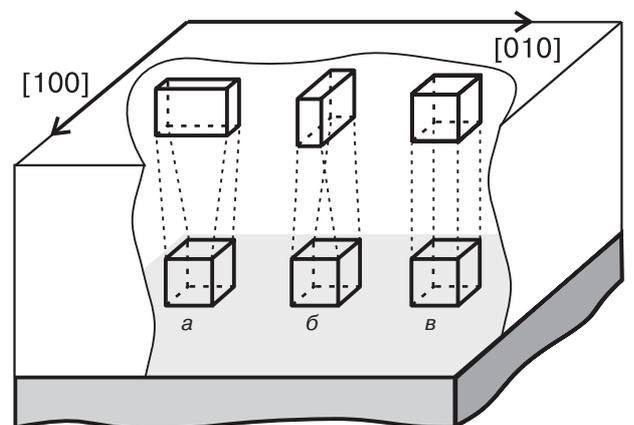


Рис. 3. Возникновение по-разному растянутых (а, б) и неискаженных (в) приповерхностных областей пленки под действием дальнедействующих сдвиговых напряжений ДН

Однако ромбам, вытянутым вдоль [100], (т. е. областям с индексами 2 и 4), соответствует изображение на рис. 3, б. Изображение на рис. 3, в соответствует областям А-типа на рис. 1. Если трещина возникает, например, в области B_2 (см. рис. 1), то приближаясь к любой из областей V_1 , C_1 , V_3 или C_3 , она повернет на 90° в соответствии с экспериментальными данными (см. рис. 2).

Укажем также, что представленные исследования позволяют объяснить возможность образования трещин в исходно сжатых пленках. Слой Ge на Si-подложке является примером гетеросистемы, в которой пленка в псевдоморфном состоянии, а также на начальной стадии пластической релаксации является сжатой. Анализ экспериментальных данных свидетельствует, что образование трещин в сжатых пленках маловероятно [18]. Представленные результаты исследований показывают, когда это становится возможным. Согласно изложенным выше рассуждениям, в пленках после полной пластической релаксации напряжений несоответствия могут возникать расположенные в шахматном порядке сжимающе-растягивающие области, не зависящие от знака напряжений в исходных псевдоморфных пленках.

Дальнействующие сдвиговые напряжения при введении Г-образных дислокаций несоответствия

Как было отмечено выше, при образовании областей В-типа взаимно перпендикулярные ДН имеют одинаковые векторы Бюргерса \mathbf{b} . В результате их пересечения образуются так называемые Г-образные ДН, впервые экспериментально зарегистрированные и проанализированные в работе [9]. Согласно данным таблицы и рис. 1, в ГР (001) возникновение Г-образных ДН при пересечении взаимно перпендикулярных дислокаций с одинаковыми \mathbf{b} имеет место в следующих случаях:

- пересечение семейств 1 и 11 формирует участок V_1 на рис. 1;
- пересечение семейств 9 и 10 — участок V_4 ;
- семейств 8 и 6 — участок V_3 ;
- семейств 2 и 5 — участок V_2 .

В ГР (111) Г-образные ДН возникают при взаимодействии дислокаций, пересекающихся под углом 120° : это семейства 1 и 11, 2 и 5, а также 4 и 12.

По данным работы [19], образование Г-образных ДН облегчает устранение ПД, поскольку все они имеют одинаковые или противоположные векторы Бюргерса, и их взаимная аннигиляция облегчена. Обсудим эту возможность как в рамках общераспространенных в литературе представлений, не учитывающих возникновение дальнействующих сдвиговых напряжений, так и с учетом этих напряжений.

Общераспространенный подход. При пересечении двух ДН с одинаковыми \mathbf{b} происходит распад четверного дислокационного узла и образование

двух Г-образных изломов. Один из изломов отклоняется от границы раздела в пленку с образованием дислокационного источника Хейгена–Шранка [20], а второй — в подложку с образованием модифицированного дислокационного источника Франка–Рида [21]. Если специально подготовить подложку [16], которая содержит однотипные дислокации (т. е. дислокации с одинаковыми векторами Бюргерса), выходящие на поверхность среза (001) или (111), то на начальной стадии релаксации гетероэпитаксиальной пленки возникнет группа ДН с идентичными \mathbf{b} . Количество этих дислокаций сравнимо с количеством дислокаций подложки. Согласно работам [2, 22], первые 60° -ные ДН создаются в результате изгиба дислокаций, прорастающих в пленку из подложки. При толщине пленки, превышающей критическую, когда становится энергетически выгодным переход из псевдоморфного состояния в дислокационное, такой изогнутый участок дислокации превращается в скользящую ПД и начинает скользить в наклонной плоскости {111} пленки параллельно границе раздела. Поскольку подложка содержит дислокации с идентичными векторами Бюргерса, то и возникающие в пленке ДН будут иметь одинаковые \mathbf{b} . Если в процессе формирования ДН движущаяся ПД закрепится на дефекте кристаллической решетки пленки и создаст неподвижную ПД, то участок данной ПД может изогнуться во вторичной плоскости скольжения {111} и начать формирование перпендикулярной ДН [23, 24]. Если эффект закрепления многократно повторится, то возникнет ломаная линия, которая содержит прямолинейные взаимно пересекающиеся участки ДН. В результате возникают новые дислокационные источники, генерирующие ДН с теми же \mathbf{b} .

Согласно модели, развиваемой F. K. LeGoues с соавторами [19, 21, 25], в рамках такого подхода можно сформировать сетку ДН, обеспечивающую как полную релаксацию напряжений несоответствия, так и оптимальные условия для аннигиляции неподвижных ПД (практически все ДН будут иметь одинаковые векторы Бюргерса). Заключительным этапом предлагаемого варианта оптимального протекания процесса релаксации является формирование сетки ДН предельной плотности. Поскольку практически все ДН будут иметь одинаковые \mathbf{b} , то условия для аннигиляции неподвижных ПД окажутся максимально облегченными. Однако столь оптимистичный вывод, предложенный в работе [19], сделан без учета влияния винтовой составляющей ДН на протекание релаксационного процесса. Как будет показано ниже, введение Г-образных ДН с идентичным вектором Бюргерса без образования ДН других семейств возможно только на начальной стадии процесса релаксации.

Влияние дальнействующих сдвиговых напряжений на образование Г-образных дислокаций несоответствия. Как показали расчеты, выполненные для пленок $\text{Ge}_{0,25}\text{Si}_{0,75}$ на подложке Si(001), упругая

энергия гетеросистемы $E_{ГС}$ изменяется практически одинаково как в областях А–типа, так и в областях В–типа (см. рис. 1) при увеличении толщины пленки h от 0 до 10 нм. При дальнейшем увеличении h до 50 нм в областях А–типа значение $E_{ГС}$ выходит на насыщение ($E_{нас} \approx 0,5$ Дж/м²). Однако в областях В–типа значение $E_{ГС}$ при $h = 50$ нм приблизительно в полтора раза превышает указанное значение энергии насыщения, и при дальнейшем увеличении h упругая энергия возрастает практически линейно. При $h = 100$ нм значение $E_{ГС}$ в областях В–типа достигает $\sim 1,2$ Дж/м², т. е. более чем в 2 раза превышает $E_{нас}$. Представленные расчетные величины получены в предположении, что вводятся два взаимно перпендикулярных дислокационных семейства ДН. Если для областей А–типа такое предположение вполне оправдано, то в областях В–типа при $h > 10$ нм начнется введение дополнительных семейств. Очевидно, что возрастание числа генерируемых семейств приводит к увеличению плотности ПД. Полученные результаты расчета свидетельствуют о несостоятельности оптимистичной рекомендации Ф. К. LeGoues [19] об использовании источников генерации Г–образных ДН в технологической практике для уменьшения плотности ПД. Название статьи [19] содержит слова «The key to low threading dislocation densities...», что переводится как «Ключевая методика для уменьшения плотности пронизывающих дислокаций...». Авторы работы [19] не учли влияние винтовой дислокационной составляющей на напряженное состояние и энергию гетеросистемы.

Рассмотренное выше образование Г–образных ДН по модели Риды [26] происходит в рамках призматического дислокационного скольжения, когда различные ветви Г–образной дислокации скользят в различных плоскостях типа {111}, как показано в работе [9]. Для гетеросистем с ГР (111) обсудим еще один (по крайней мере, теоретически возможный) механизм образования Г–образных ДН в рамках обычного (непризматического) дислокационного скольжения. Для систем скольжения 7, 8 и 9 (см. таблицу) ДН могут залегать в любом направлении. Примеры криволинейных дислокаций этих семейств, которые непрерывно изменяют направление своего залегания в широком диапазоне углов, представлены в работе [27]. Поэтому для систем 7–9 возможны 6 семейств 60°–ных ДН: по два семейства для каждой системы скольжения. В каждой паре таких семейств с общим вектором Бюргерса одно является правовинтовым, а второе — левовинтовым. Обратим внимание, что при пересечении двух ДН, имеющих общий вектор Бюргерса и общую систему скольжения, четверному дислокационному узлу энергетически выгодно распастись на две Г–образные ДН по механизму скольжения. Однако, в отличие от Г–образных ДН, возникающих по механизму Риды [26], скольжение распавшихся дислокаций будет не призматическим, а простым, т. е. будет происходить не в двух, а в одной

плоскости.

Укажем, что в случае «непризматически» скользящих Г–образных ДН в ГР (111) вводится не три, а два дислокационных семейства. Очевидно, что они имеют одинаковую линейную плотность ($1/D$). Анализ показал, что если эту плотность принять соответствующей формуле (1), то выражения (10) и (3) будут выполняться, т. е. далекодействующие сдвиговые напряжения не возникнут.

Заключение

Представлена теоретическая модель напряженного состояния эпитаксиальных слоев, когда полностью завершен процесс пластического снятия напряжений несоответствия. Показано, что при отсутствии далекодействующих сдвиговых напряжений выполняются выражения (3), (10) и (11), а при их наличии — только выражение (3). Впервые детально обсуждено выражение (3), которое является фундаментальным, поскольку справедливо для ГР любой ориентации. Оно характеризует зависимость между параметрами дислокационных семейств. Для установления величины h — L приповерхностного однородно напряженного (или полностью ненапряженного) слоя пленки требуется проведение специальных исследований.

Библиографический список

1. **Matthews, J. W.** Fracture and the formation of misfit dislocations between PbS and PbSe / J. W. Matthews // *Phil. Mag.* – 1971. – V. 23, N 186. – P. 1405–1416.
2. **Matthews, J. W.** Defects associated with the accommodation of misfit between crystals / J. W. Matthews // *J. Vac. Sci. Technol.* – 1975. – V. 12. – P. 126–133.
3. **LeGous, F. K.** Strain-relief mechanism in surfactant-grown epitaxial germanium films on Si(111) / F. K. LeGous, M. Horn-von Hoegen, M. Copel, R. M. Tromp // *Phys. Rev. B.* – 1991. – V. 44. – P. 12894–12902.
4. **Волынец, А. Б.** Наследственная механика дислокационных ансамблей. Компьютерное моделирование и эксперимент / А. Б. Волынец. – Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. – 288 с.
5. **Пинтус, С. М.** Дислокационная структура границы раздела Ge—Si (111) / С. М. Пинтус, А. В. Латышев, А. Л. Асеев, В. Ю. Карасев // *Поверхность.* – 1984. – № 8. – С. 60–65.
6. **Труханов, Е. М.** Напряженное состояние и дислокационная структура гетеросистем германий/кремний с интерфейсами (001), (111) и (7710) / Е. М. Труханов, И. Д. Лошкарев, К. Н. Романюк, А. С. Ильин, А. К. Гутаковский, А. В. Колесников, М. М. Качанова // *Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы: электрон журн.* 2011.05.07. URL: <http://ptosnm.ru/>.
7. **Труханов, Е. М.** Структурное состояние гетеросистем Ge/Si с интерфейсами (001), (111) и (7710) / Е. М. Труханов, И. Д. Лошкарев, К. Н. Романюк, А. К. Гутаковский, А. С. Ильин, А. В. Колесников // *Изв. РАН. Сер. физ.* – 2012. – Т. 76, № 3. – С. 373–376.
8. **Труханов, Е. М.** Возникновение далекодействующих полей нормальных и сдвиговых напряжений при введении дислокаций несоответствия / Е. М. Труханов, А. В. Колесников, И. Д. Лошкарев // *Тез. докл. Междунар. конф. «Кремний-2012».* – Санкт-Петербург, 2012. – С. 84.
9. **Trukhanov, E. M.** Specific features of the dislocation structure of germanium in the system Ge—SiO₂ / E. M. Trukhanov, E. V. Gorokhov, S. I. Stenin // *Phys. status solidi.* – 1976. – V. 33. – P. 435–442.
10. **Димитриенко, Ю. И.** Тензорное исчисление / Ю. И. Димитриенко. – М.: Высшая школа, 2001. – 575 с.
11. **Труханов, Е. М.** Влияние типа дислокаций несоответствия на энергию и структуру эпитаксиальных пленок / Е. М. Труханов // *Поверхность.* – 1995. – № 2. – С. 13–21.

12. Хирт, Дж. Теория дислокаций / Дж. Хирт, И. Лоте. – М.: Атомиздат, 1972. – 599 с.
13. Фридель, Ж. Дислокации / Ж. Фридель. – М.: Мир, 1967. – 643 с.
14. Труханов, Е. М. Влияние типа винтовой составляющей дислокаций несоответствия на образование пронизывающих дислокаций в полупроводниковых гетероструктурах / Е. М. Труханов, А. В. Колесников, А. П. Василенко, А. К. Гутаковский // ФТП. – 2002 – Т. 36, № 3. – С. 309–316.
15. Тимошенко, С. П. Теория упругости / С. П. Тимошенко, Дж. Гудер. – М.: Наука, 1975. – 576 с.
16. Труханов, Е. М. Роль винтовой составляющей при формировании дислокационной структуры в гетеросистемах, приготовленных на основе Ge и Si / Е. М. Труханов, А. С. Ильин, А. Ю. Красотин, А. П. Василенко, А. С. Дерябин, М. М. Качанова, А. К. Гутаковский, А. В. Колесников // Поверхность. – 2007. – № 5. – С. 28–36.
17. Тхорик, Ю. А. Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах / Ю. А. Тхорик, Л. С. Хазан. – Киев: Наукова Думка, 1983. – 135 с.
18. Мильвидский, М. Г. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников / М. Г. Мильвидский, Б. В. Освенский – М.: Металлургия, 1985. – С. 51.
19. LeGoues, F. K. Self-aligned sources for dislocation nucleation: the key to low threading dislocation densities in compositionally graded thin films grown at low temperature / F. K. LeGoues // Phys. Rev. Lett. – 1994. – V. 72, N 6. – P. 876–879.
20. Strunk, H. Low-density dislocation arrays at heteroepitaxial ge/gaas-interfaces investigated by high voltage electron mi-

- croscopy. / H. Strunk, W. Hagen, E. Bauser // J. Appl. Phys. – 1979. – V. 18. – P. 67–75.
21. LeGoues, F. K. Mechanism and conditions for anomalous strain relaxation in graded thin-films and superlattices. / F. K. LeGoues, B. S. Meyerson, J. F. Morar, P. D. Kirchner // J. Appl. Phys. – 1992. – V. 71, N 9. – P. 4230–4243.
22. Vdovin, V. I. Misfit dislocations in epitaxial heterostructures: Mechanisms of generation and multiplication. / V. I. Vdovin // Phys. status solidi. (a). – 1998. – V. 171. – P. 239–250.
23. Beanland, R. Dislocation multiplication mechanisms in low-misfit strained epitaxial layers / R. Beanland // J. Appl. Phys. – 1995. – V. 77, N 12. – P. 6217–6222.
24. Jasinski, J. Structural, electrical and optical studies of GaAs implanted with MeV As or Ga ions / J. Jasinski, Z. Lilientalweber, J. Washburn, H. H. Tan, C. Jagadish, A. Krotkus, S. Marcinkevicius, M. Kaminska // J. Electronic Mater. – 1997. – V. 26, N 5. – P. 449–458.
25. LeGoues, F. K. Relaxation of SiGe thin-films grown on Si/SiO₂ substrates. / F. K. LeGoues, A. Powell, S. S. Iyer // J. Appl. Phys. – 1994. – V. 75, N 11. – P. 7240–7246.
26. Рид, В. Т. Дислокации в кристаллах / В. Т. Рид. – М.: Гос. н.-т. изд-во литературы по черной и цв. металлургии 1957. – 114 с.
27. Лошкарёв, И. Д. Теоретическое и экспериментальное определение начальной стадии пластической релаксации напряжений несоответствия в гетеросистеме «подложка (111) – островки пленки» / И. Д. Лошкарёв, Е. М. Труханов, К. Н. Романюк, М. М. Качанова // Изв. РАН. Сер. физ. – 2012. – Т. 76, № 3. – С. 425–428.

Статья поступила в редакцию 25 июля 2012 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronic Technics. 2014, vol. 17, no. 1, pp. 24–31.

Long Range Stresses in Epitaxial Films Generated with Misfit Dislocations

Trukhanov Evgeny Mikhailovich* — Doctor of Physico-Mathematical Sciences, Leading Researcher, e-mail: trukh@isp.nsc.ru; Kolesnikov Alexey Viktorovich* — Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Senior Researcher; Loshkarev Ivan Dmitriyevich* — Candidate of Physico-Mathematical Sciences, Junior Researcher.
*Institute of Semiconductor Physics SB RAS, 630090, Russia, Novosibirsk, Lavrenteva ave., 13.

Abstract. The equation connecting the misfit parameter f , the number of misfit dislocation (MD) families and the distances between MDs of the same family with the edge Burgers vector components taken for different dislocation families is obtained for the first time. It is valid for various interface boundaries (hkl). To get the equation, the long range normal and shear stresses associated with MD distribution have been considered. The optimum and non-optimum stress releasing processes are discussed. The problem of threading dislocation density diminution with generation of intersecting MDs with the same Burgers vector (L-shape MDs) is also considered for (001) and (111) interfaces. It is shown that such type MDs grow the level of the long range shear stresses and can be effectively generated only at an early stage of relaxation.

Key words: silicon, germanium, long range stresses, misfit dislocations, optimum and non-optimal relaxation.

References

- Matthews J. W. Fracture and the formation of misfit dislocations between PbS and PbSe. *Phil. Mag.* 1971, vol. 23, no. 186, pp. 1405–1416.
- Matthews J. W. Defects associated with the accommodation of misfit between crystals. *J. Vac. Sci. Technol.* 1975, vol. 12, pp. 126–133.
- LeGoues F. K., Horn-von Hoegen M., Copel M., Tromp R. M. Strain-relief mechanism in surfactant-grown epitaxial germanium films on Si(111). *Phys. Rev. B.* 1991, vol. 44, pp. 12894–12902.
- Volynceev A. B. Nasledstvennaya mekhanika dislokatsionnykh ansamblei. Komp'yuternoe modelirovanie i eksperiment [Hereditary mechanics of dislocation ensembles. Computer modeling and experiment]. *Irkutsk, Izd-vo Irkut. un-ta*, 1990. 288 p. (In Russ.)

- Pintus S. M., Latyshev A. V., Aseev A. L., Karasev V. Yu. Dislocation structure of limit of the section Ge—Si (111). *Poverhnost'*. 1984, no. 8, pp. 60–65. (In Russ.)
- Truhanov E. M., Loshkarev I. D., Romanyuk K. N., Ilin A. S., Gutakovskii A. K., Kolesnikov A. V., Kachanova M. M. Napryazhennoe sostoyanie i dislokatsionnaya struktura geterosistem germanii/kremnii s interfeisami (001), (111) i (7710) [Tension and dislocation structure of heterosystems Ge/Si with interfaces (001), (111) and (7710)]. *Fazovye perehody, uporyadochennyye sostoyaniya i novyye materialy: elektron zhurn.* 2011.05.07. URL: <http://ptosnm.ru/>. (In Russ.)
- Trukhanov E. M., Loshkarev I. D., Romanyuk K. N., Gutakovskii A. K., Ilin A. S., Kolesnikov A. V. Structural state of Ge/Si heterosystems with (001), (111), and (7710) interfaces. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya.* 2012, vol. 76, no. 3, pp. 373–376. (In Russ.)
- Trukhanov E. M., Kolesnikov A. V., Loshkarev I. D. Vozniknovenie dal'nodeistviyushchikh polei normal'nykh i sdvigovykh napryazhenii pri vvedenii dislokatsii nesootvetstviya [Emergence of dalnodelistviyushchy fields of normal and shift tension at introduction of dislocations of discrepancy]. *Tez. dokl. Mezhdunarodnoi konf. «Kremnii-2012».* Sankt-Peterburg, 2012. P. 84. (In Russ.)
- Trukhanov E. M., Gorokhov E. B., Stenin S. I. Specific features of the dislocation structure of germanium in the system Ge—SiO₂. *Phys. status solidi.* 1976, vol. 33, pp. 435–442.
- Dimitrienko Yu. I. Tenzornoe ischislenie [Tensor calculation]. *Moscow: Vysshaya shkola*, 2001. 575 p. (In Russ.)
- Trukhanov E. M. Influence of type of dislocations of discrepancy on energy and structure of epitaxial films. *Poverhnost'*. 1995, no. 2, pp. 13–21. (In Russ.)
- Hirth Dzh., Lote J. Teoriya dislokatsii [Theory of dislocations]. *Moscow: Atomizdat*, 1972. 599 p. (In Russ.)
- Fridel Zh. Dislokatsii [Dislocations]. *Moscow: Mir*, 1967. 643 p. (In Russ.)
- Trukhanov E. M., Kolesnikov A. V., Vasilenko A. P., Gutakovskii A. K. Influence of type of a screw component of dislocations of discrepancy on formation of penetrating dislocations in semiconductor heterostructures. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov.* 2002, vol. 36, no. 3, pp. 309–316. (In Russ.)
- Timoshenko S. P., Guder Dzh. Teoriya uprugosti [Elasticity theory]. *Moscow, Nauka*, 1975. 576 p. (In Russ.)
- Trukhanov E. M., Ilin A. S., Krasotin A. Yu., Vasilenko A. P., Deryabin A. S., Kachanova M. M., Gutakovskii A. K., Kolesnikov A. V. Role of a screw component when forming dislocation structure in the heterosystems prepared on the basis of Ge and Si. *Poverhnost'*. 2007, no. 5, pp. 28–36. (In Russ.)

17. Tkhorik Yu. A., Hazan L. S. Plasticheskaya deformatsiya i dislokatsii nesootvetstviya v geteroepitaksial'nykh sistemakh [Plastic deformation and discrepancy dislocations in heteroepitaxial systems]. *Kiev: Naukova Dumka*, 1983. 135 p. (In Russ.)

18. Mil'vidskii M. G., Osvenskii B. V. Strukturnye defekty v epitaksial'nykh sloyakh poluprovodnikov [Structural defects in epitaxial layers of semiconductors]. *Moscow, Metallurgiya*, 1985. p. 51. (In Russ.)

19. LeGoues F. K. Self-aligned sources for dislocation nucleation: the key to low threading dislocation densities in compositionally graded thin films grown at low temperature. *Phys. Rev. Lett.* 1994, vol. 72, no. 6, pp. 876—879.

20. Strunk H., Hagen W., Bauser E. Low-density dislocation arrays at heteroepitaxial Ge/GaAs-interfaces investigated by high voltage electron microscopy. *J. Appl. Phys.* 1979, vol. 18, pp. 67—75.

21. LeGoues F. K., Meyerson B. S., Morar J. F., Kirchner P. D. Mechanism and conditions for anomalous strain relaxation in graded thin-films and superlattices. *J. Appl. Phys.* 1992, vol. 71, no. 9, pp. 4230—4243.

22. Vdovin V. I. Misfit dislocations in epitaxial heterostructures: Mechanisms of generation and multiplication. *Phys. status. solidi. (a)*. 1998, vol. 171, pp. 239—250.

23. Beanland R. Dislocation multiplication mechanisms in low-misfit strained epitaxial layers. *J. Appl. Phys.* 1995, vol. 77, no. 12, pp. 6217—6222.

24. Jasinski J., Lilientalweber Z., Washburn J., Tan H. H., Jagadish C., Krotkus A., Marcinkevicius S., Kaminska M. Structural, electrical and optical studies of GaAs implanted with MeV As or Ga ions. *J. Electronic Mater.* 1997, vol. 26, no. 5, pp. 449—458.

25. LeGoues F. K., Powell A., Iyer S. S. Relaxation of SiGe thin-films grown on Si/SiO₂ substrates. *J. Appl. Phys.* 1994, vol. 75, no. 11, pp. 7240—7246.

26. Rid V. T. Dislokatsii v kristallakh [Dislocations in crystals]. *Moscow: Gos. n.-t. izd-vo literatury po cherno i tsv. metallurgii*, 1957. 114 p. (In Russ.)

27. Loshkarev I. D., Truhanov E. M., Romanyuk K. N., Kachanova M. M. Theoretical and experimental determination of the initial stage of plastic relaxation of misfit stresses in a (111) substrate-film islands heterosystem. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya*. 2012, vol. 76, no 3, pp. 425—428. (In Russ.)

Received July 25, 2012

УДК 621.315.592

О ГРАНИЧНЫХ ПРОЦЕССАХ В МЕЖФАЗНОЙ ОБЛАСТИ ЭЛЕКТРОЛИТ—КРЕМНИЙ ПРИ САМООРГАНИЗАЦИИ МОЗАИЧНОЙ СТРУКТУРЫ 3D-ОСТРОВКОВ НАНОКРИСТАЛЛИТОВ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ ПРИ ДЛИТЕЛЬНОМ АНОДНОМ ТРАВЛЕНИИ p-Si (100) В ЭЛЕКТРОЛИТЕ С ВНУТРЕННИМ ИСТОЧНИКОМ ТОКА

© 2013 г. К. Б. Тыныштыкбаев, Ю. А. Рябикин, С. Ж. Токмолдин, Б. А. Ракыметов, Т. Айтмуқан, Х. А. Абдуллин*
Физико-технический институт МОН РК, г. Алматы, Казахстан
*Казахский национальный университет им. Аль Фараби, г. Алматы, Казахстан

Рассмотрен процесс образования и самоорганизации мозаичной структуры поверхности пористого кремния (por-Si) при длительном анодном травлении Si (100) p-типа проводимости (p-Si) в электролитах с внутренним источником тока. Показано, что образование 3D-островков нанокристаллитов мозаичной структуры por-Si происходит с участием осажденных адсорбированных атомов кремния, образующихся в результате реакций диспропорционирования при травлении монокристалла кремния, как это имеет место в случае эпитаксиального роста нанокристаллитов при молекулярно-лучевом осаждении атомов кремния на поверхности полупроводников A^{III}B^V и Si и их дальнейшем спонтанном самоупорядочении. При этом учтены квантово-размерные эффекты, имеющие место на локальных участках атомно-шероховатой поверхности реального кристалла кремния. Отмечена существенная роль окисления поверхности кремния в процессе образования и самоорганизации мозаичной структуры por-Si при длительном анодном травлении p-Si (100) в электролите HF : H₂O₂.

Ключевые слова: пористый кремний, межфазная граница, самоорганизация.

Введение

Известно [1, 2], что самоорганизация наноразмерных систем с образованием периодически упорядоченных структур на реальной поверхности твердого тела определяется квантовыми эффектами, которые обусловлены атомными шероховатостями [3] в виде атомных ступеней и выступов и определяют возникновение дальнедействующих капиллярно-упругих сил поверхностных натяжений [4—6]. Эффекты самоорганизации

наноразмерных структур на поверхности твердого тела под действием этих сил отчетливо проявляются, например, в процессах их эпитаксиального роста [7—9].

Помимо действия дальнедействующих капиллярно-упругих сил [4—6] в процессах самоорганизации наноструктур на реальной поверхности твердого тела. существенную роль играют также дефектно-деформационные силы упорядочения поверхностных точечных дефектов, возникающих при низкоэнергетических воз-

Тыныштыкбаев Курбангали Байназарович — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, e-mail: kt011@sci.kz, **Рябикин Юрий Алексеевич** — кандидат физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник, **Токмолдин Серекбол Жарылкапович** — доктор физ.-мат. наук, директор, **Ракыметов Багдат Ахметович** — инженер, **Айтмуқан Талант** — инженер, **Физико-технический институт МОН РК**, 040907, Казахстан, Алматы, пос. Алатау, ул. Ибрагимова, д. 11; **Абдуллин Хабиб Абдуллаевич** — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, Казахский национальный университет им. Аль Фараби, 050013, Казахстан, Алматы, ул. Сатпаева, д. 22а.