УДК 539.26:621.315.592:548.73

ФОРМИРОВАНИЕ МАЛОУГЛОВОЙ ГРАНИЦЫ В ВИЦИНАЛЬНОЙ ГЕТЕРОСИСТЕМЕ GeSi/Si (001)

© *2014 г.* **А. В. Колесников, Е. М. Труханов, А. С. Ильин, И. Д. Лошкарев**

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
просп. Лаврентьева, д. 13, Новосибирск, 630090, Россия

Исследовано структурное состояние пленок Ge_xSi_{1-x}, выращенных на подложках Si вицинальной ориентации (1 1 13), отклоненной вокруг направления [1$\bar{1}$0] на угол 6,2° от сингулярной ориентации (001). В пленках Ge_xSi_{1-x} содержание германия *x* в различных образцах составляло от 0,083 до 0,268. С помощью развитой авторами методики определения структурных параметров эпитаксиальных слоев по данным рентгеновской дифрактометрии проанализированы триклинные искажения, возникающие в кристаллической решетке пленки. Установлено, что в процессе эпитаксии решетка пленки поворачивается вокруг направления поверхностных ступеней в результате накопления в границе раздела дислокаций несоответствия, скользящих в плоскости (111). Дислокации с общим вектором Бюргерса типа *a*/2<110>, не параллельным границе раздела, формируют аналог малоугловой границы. Значение угла разворота ψ прямо пропорционально плотности дислокаций несоответствия. Природа этого явления связана с уменьшением симметрии границы раздела, что приводит к изменению эффективности снятия несоответствия дислокациями, принадлежащими к разным дислокационным семействам. Рассмотрено участие этих семейств в процессе образования малоугловой границы. Для направлений [13 13 $\bar{2}$] и [$\bar{1}$10], лежащих в границе раздела (1 1 13), определены экспериментальные значения углов разворота ψ и сдвиговой деформации. Представлено сравнение экспериментальных и расчетных значений ψ для направления [13 13 $\bar{2}$].

Ключевые слова: кремний, германий, рентгеновская дифрактометрия, дислокации несоответствия.

Введение

В современной экспериментальной и технологической практике все чаще используют подложки с несингулярными ориентациями границы раздела **(ГР)**. Например, использование подложек, специально отклоненных на угол порядка нескольких угловых градусов от плоскости (001), позволяет существенно снизить вероятность образования антифазных границ при росте соединений $A^{III}B^{V}$ на подложках кремния [1]. Однако в гетеросистемах с вицинальными ориентациями (001) возникают дополнительные искажения кристаллической решетки пленки: ее разворот и сдвиговая деформация.

Впервые явление разворота между решетками пленки и подложки было обнаружено H. Nagai [2] на примере гетеросистемы InGaAs/GaAs с вицинальными ориентациями ГР (001), полученных поворотом вокруг кристаллографического направления <110>, принадлежащего ГР. H. Nagai предложил модель, в которой явление разворота рассмотрено как следствие двух факторов: значения угла α между вицинальной и сингулярной ориентациями и параметра несоответствия *f* между размерами ячеек кристаллических решеток пленки и подложки в ненапряженном состоянии. Для определения угла β между плоскостями (001) в пленке и подложке H. Nagai предложил формулу

$$\mathrm{tg}(2\beta) = \mathrm{tg}(\alpha) f \frac{1+\nu}{1-\nu}, \qquad (1)$$

где ν — коэффициент Пуассона.

Последующие исследования [3] показали, что модель H. Nagai справедлива только для псевдоморфных пленок, когда дислокации несоответствия полностью отсутствуют. В ходе дальнейшего развития этой модели авторами работ [4, 5] было получено следующее выражение:

$$\beta = \alpha\left[f + \frac{\varepsilon 2\nu}{1-\nu}\right] + (f-\varepsilon)\frac{b_\perp}{b_\parallel}. \qquad (2)$$

Здесь ε — нерелаксированная часть исходного несоответствия *f*; $b_\perp$, $b_\parallel$ — проекции краевой компоненты вектора Бюргерса на нормаль и плоскость ГР соответственно. Первое слагаемое в правой части уравнения (2) описывает разворот по модели Нагаи с учетом частичного снятия исходного несоответствия; а второе — разворот, связанный с дислокациями несоответствия **(ДН)**. (Предполагается, что все параллельные ДН принадлежат к одному семейству). Однако эта модель не учитывает сдвиговые деформации, возникающие в эпитаксиальной пленке. Кроме того, она позволяет оценить только максимально возможный разворот, создаваемый ДН.

Колесников Алексей Викторович — кандидат физ.–мат. наук, старший научный сотрудник, e–mail: kolesn@isp.nsc.ru; **Труханов Евгений Михайлович** — доктор физ.–мат. наук, ведущий научный сотрудник, e–mail: trukh@isp.nsc.ru; **Ильин Александр Сергеевич** — инженер, e–mail: ias@isp.nsc.ru; **Лошкарев Иван Дмитриевич** — кандидат физ.–мат. наук, младший научный сотрудник, e–mail: idl@isp.nsc.ru

Образцы и методы исследования

Для определения с помощью рентгеновской дифрактометрии структурного состояния полупроводниковой эпитаксиальной гетеросистемы используют модель тетрагональных искажений кристаллической решетки [6]. Модель надежно работает в случае сингулярной ГР (001). Для обработки кривой дифракционного отражения **(КДО)** от образцов с не сингулярной ориентацией ГР и ненулевой пластической релаксацией ρ в работе [7] выполнено развитие идей тетрагональной модели и модели Нагаи. В дополнение к используемым в тетрагональной модели рентгеновским деформациям решетки пленки $\varepsilon_{\perp}$ и $\varepsilon_{\parallel}$ введены еще два угла сдвига δ_{XZ} и δ_{ZX}. Можно показать, что

$$\varepsilon_{xz} = \frac{1}{2}(\delta_{XZ} + \delta_{ZX});\ \psi = \frac{1}{2}(\delta_{XZ} - \delta_{ZX}). \qquad (3)$$

где ψ — угол разворота; ε_{xz} — упругая сдвиговая деформация. Модель [7] позволяет анализировать наиболее общий случай триклинных искажений кристаллической решетки эпитаксиальной пленки.

С использованием развитой в работе [7] модели исследовали гетеросистемы Ge_xSi_{1-x}/Si с вицинальной (001) ориентацией, полученной поворотом на 6,2° вокруг направления [110] (таблица).

Результаты и их обсуждение

В таблице приведены экспериментальные значения параметров, характеризующих структурное состояние ГС Ge_xSi_{1-x}/Si.

Анализ представленных в таблице значений углов разворота ψ для двух взаимно ортогональных направлений позволяет сделать следующие выводы. Для направления [13 13 $\bar{2}$] наблюдается приблизительно прямо пропорциональная зависимость угла разворота от плотности ДН. Это согласуется с моделью формирования рядом ДН аналога малоугловой границы [8], так как вектор Бюргерса не лежит в плоскости ГР. Для направления [$\bar{1}$10] среднее значение угла разворота близко к нулю. Разброс значений, возможно, связан со случайным характером возникновения ДН. Таким образом, можно сделать вывод, что разворот кристаллической решетки пленки возникает вокруг направления поверхностных ступеней, т. е. направления отклонения от (001).

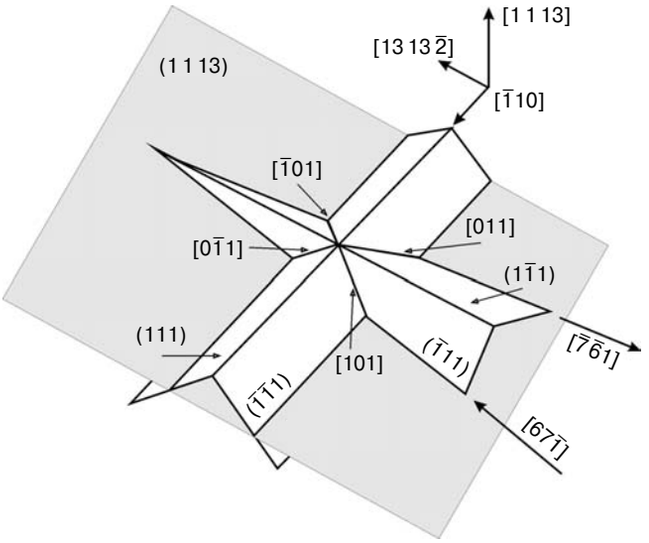

Рис. 1. Схема взаимного расположения плоскостей скольжения {111} для ГР (1 1 13)

Так же, как и угол разворота, для направления [$\bar{1}$10] среднее значение сдвиговой деформации ε_{xz} близко к нулю. Разброс значений связан, скорее всего, с точностью ориентации исходных подложек (линия отклонения вицинальной ориентации от сингулярной не строго параллельна направлению [110]). Для направления [13 13 $\bar{2}$] среднее значение сдвиговой деформации ε_{xz} отлично от нуля и составляет ~60″. Выделить какую–либо зависимость нельзя: если для псевдоморфных образцов А3 и А6 соотношение сдвиговых деформаций ε_{xz} так же, как и состав x, отличается почти в 2 раза, то для остальных образцов это соотношение не подтверждается. Несмотря на то, что ДН не создают дальнодействующих напряжений σ_{xz} неоднородности распределения ДН, по–видимому, существенно влияют на сдвиговые деформации ε_{xz}, связанные с системой ступеней в ГР [2, 4].

Проанализируем возможности формирования малоугловых границ сетками ДН. Для установления природы обсуждаемого явления воспользуемся схемой, представленной на рис. 1, где изображены возможные плоскости скольжения {111} и векторы Бюргерса <110> семейств 60°–ных ДН в случае вицинальной границы раздела (1 1 13).

Экспериментальные значения углов разворота ψ и сдвиговых деформаций ε_{xz} для образцов Ge_xSi_{1-x}/Si (1 1 13)

Образец	x	ρ, %	ψ, угл. с	ε_{xz}, угл. с	ψ, угл. с	ε_{xz}, угл. с
			[13 13 $\bar{2}$]		[$\bar{1}$10]	
А1	0,083	50	311	–81	–42,5	–15,5
А2	0,248	54	514,5	–101,5	–4	26
А3	0,229	0	–106	–126	–4,5	–4,5
$А3_{отжиг}$	0,233	54	561	–42	102	–33
А4	0,182	63	690	–90	9	0
А5	0,268	81	1674,5	–41,5	–26	–35
А6	0,101	0	–55	–61	–0,5	–1,5
А7	0,176	10	16	–25	5,5	–5,5
$А7_{отжиг}$	0,202	48	618,5	–67,5	12	6

Примечание. Разворот от сингулярной ориентации (001) вокруг направления [$\bar{1}$10] составляет 6,2°.

Дислокация, расположенная вдоль направления $[\bar{1}10]$ (см. рис. 1), может скользить как в плоскости (111), имея векторы Бюргерса $(a/2)[\bar{1}01]$ и $(a/2)[0\bar{1}1]$, так и в плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$, имея векторы Бюргерса $(a/2)[101]$ и $(a/2)[011]$. В случае сингулярной границы (001) возникновение ДН с любым из указанных векторов Бюргерса **b** равновероятно. Для вицинальной ориентации (1 1 13) угол между плоскостью (111) и ГР уменьшается, и вероятность введения ДН, скользящих в этой плоскости, увеличится, а в плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$ вероятность введения ДН уменьшится. Если это приведет к тому, что генерация ДН в плоскости $(\bar{1}\bar{1}1)$ прекратится, то угол разворота кристаллических решеток пленки и подложки $\alpha_{МГ}$ будет максимален и равен

$$\alpha_{МГ} = \frac{b^{\perp}_{(\bar{1}11)}}{D_{(111)}}. \quad (4)$$

Здесь $D_{(111)}$ — расстояние между ДН, скользящими в плоскости (111); $b^{\perp}_{(\bar{1}11)}$ — проекция вектора Бюргерса на нормаль к ГР. Векторы $(a/2)[\bar{1}01]$ и $(a/2)[0\bar{1}1]$ создают одинаковый разворот, поэтому для простоты можно принять, что формируются ДН только с одним вектором Бюргерса. Выражение (4) является аналогом второго слагаемого в формуле (2).

Линиями пересечения плоскостей $(1\bar{1}1)$ и $(\bar{1}11)$ с ГР являются направления $[\bar{7}\bar{6}1]$ и $[67\bar{1}]$, которые не перпендикулярны к направлению ступеней. Вследствие этого возникает вклад ДН, скользящих в плоскостях $(1\bar{1}1)$ и $(\bar{1}11)$, в результирующий разворот $\alpha_{МГ}$ вокруг направления $[\bar{1}10]$. Зависимость угла разворота $\alpha_{МГ}$ от азимутального угла φ можно записать как

$$\alpha_{МГ}(\varphi) = \alpha_{мах}\cos(\varphi - \varphi_0), \quad (5)$$

где φ_0 — азимутальное положение образца, соответствующее максимальному значению угла разворота $\alpha_{мах}$.

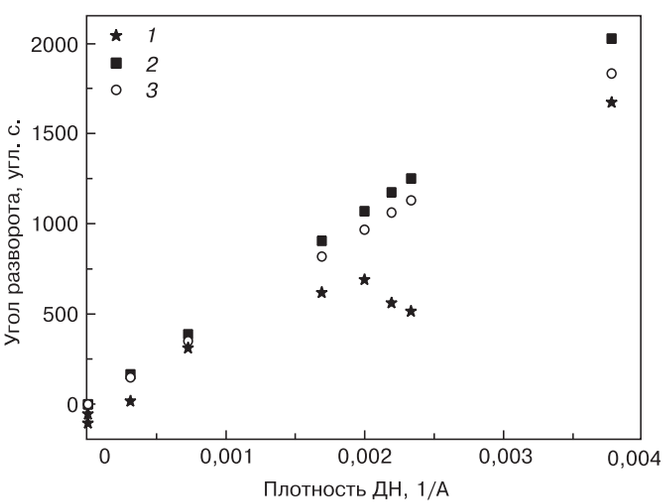

Рис. 2. Экспериментальные (*1*) и расчетные (*2*, *3*) значения углов разворота ψ для направления $[13\,13\,\bar{2}]$: *2*, *3* — результаты расчета по формулам (4) и (7) соответственно

Вероятности введения ДН в плоскости $(1\bar{1}1)$ и $(\bar{1}11)$ одинаковы [9, 10]. Поэтому примем, что их плотности равны. Тогда значения $\alpha_{мах}$ для обеих плоскостей равны, углы дислокационных линий с направлением $[13\,13\,\bar{2}]$ составляют 4,4° и 175,6° соответственно. Суммарный разворот вокруг направления $[13\,13\,\bar{2}]$ при этом будет равен нулю, что соответствует экспериментальным данным.

Углы с направлением $[\bar{1}10]$ для ДН, скользящих в плоскостях $(1\bar{1}1)$ и $\bar{1}11)$, одинаковы и составляют 94,4°. Таким образом, уравнение (6) можно записать как

$$\alpha_{МГ} = \frac{b^{\perp}_{(\bar{1}11)}}{D_{(111)}} + \frac{b^{\perp}_{(1\bar{1}1)}\cos(94{,}4)}{D_{(1\bar{1}1)}} + \frac{b^{\perp}_{(\bar{1}11)}\cos(94{,}4)}{D_{(\bar{1}11)}}. \quad (6)$$

Так, как предполагаем, что $D_{(1\bar{1}1)} = D_{(\bar{1}11)}$, а $b^{\perp}_{(1\bar{1}1)} = b^{\perp}_{(\bar{1}11)}$ из–за симметрии ГР, то второе и третье слагаемые в выражении (6) равны. Поэтому выражение (6) можно переписать в виде

$$\alpha_{МГ} = \frac{b^{\perp}_{(\bar{1}11)}}{D_{[111]}} + 2\frac{b^{\perp}_{(1\bar{1}1)}\cos(94{,}4)}{D_{[1\bar{1}1]}}. \quad (7)$$

На рис. 2 представлено сравнение экспериментальных данных с результатами расчета по формулам (4) и (7). Хотя для образцов А2 и $А3_{отжиг}$ (см. таблицу) существует значительное расхождение между экспериментом и расчетом, в целом наблюдается довольно близкое соответствие. Учет ДН, скользящих в плоскостях $(1\bar{1}1)$ и $(\bar{1}11)$, уменьшает это расхождение.

Заключение

С использованием ранее развитой модели исследовано явление разворота кристаллической решетки пленки Ge_xSi_{1-x} на подложках Si вицинальных ориентаций (001). Установлено, что ось разворота совпадает с линией отклонения вицинальной ориентации от сингулярной. Этот эффект можно объяснить накоплением в гетерогранице ДН с одинаковыми векторами Бюргерса, создающих аналог малоугловой границы. Показано, что причиной такого накопления является уменьшение симметрии ГР и, как следствие, повышение вероятности введения одних семейств ДН и низкая вероятность формирования других.

Библиографический список

1. **Bolkhovityanov, Yu. B.** GaAs epitaxy on Si substrates: modern status of research and engineering / Yu. B. Bolkhovityanov, O. P. Pchelyakov // Phys. Usp. – 2008. – V. 51. – P. 437—456.

2. **Nagai, H.** Structure of vapor–deposited $Ga_xIn_{1-x}As$ crystals / H. Nagai // J. Appl. Phys. – 1974. – V. 45. – P. 3789.

3. **Auvray, P.** Interface roughness of GaAs/AlAs superlattices MBE–grown on vicinal surfaces / P. Auvray, A. Poudoulec, M. Baudet, B. Guenais, A. Regreny, C. d'Anterroches, J. Massies // Appl. Surf. Sci. – 1991. – V. 50. – P.109.

4. **Riesz, F.** Crystallographic tilting in latticemismatched heteroepitaxy: A Dodson–Tsao relaxation approach / F. Riesz // J. Appl. Phys. – 1996. – V. 79, N 8. – P. 4111.

5. **Riesz, F.** Crystallographic tilting in high–misfit (100) semiconductor heteroepitaxial systems / F. Riesz. // J. Vac. Sci. Technol. A. – 1996. – V. 14, N 2. – P. 425.

6. **Van der Sluis, P.** Determination of strain in epitaxial semiconductor layers by high–resolution X–ray diffraction / P. van der Sluis. // J. Phys. D: Appl. Phys. – 1993. – V. 26. – P. A188.

7. **Kolesnikov, A. V.** X–ray diffraction analysis of epitaxal film distortions on miscut substrates (001) / A. V. Kolesnikov, A. S. Ilin, E. M. Trukhanov, A. P. Vasilenko, I. D. Loshkarev, A. S. Deryabin // Bull. Rus. Acad. Sci.: Phys. – 2011. – V. 75, N 5. – P. 652.

8. **Халл, Д.** Введение в дислокации / Д. Халл. – М. : Атомиздат, 1968. – 280 с.

9. **Trukhanov, E. M.** Film quality effects associated with formation of misfit dislocations at semiconductor interfaces / E. M. Trukhanov, A. V. Kolesnikov // Appl. Surf. Sci. – 1998. – V. 123/124. – P. 669.

10. **Trukhanov, E. M.** Properties of misfit dislocations and pseudodislocations not typical for homogeneous crystal defects / E. M. Trukhanov // Surface. – 2010. – N 1. – P. 43.

Работа выполнена при поддержке Интеграционного междисциплинарного проекта СО РАН № 72 и гранта РФФИ (проект № 14–02–00677–а).

Статья поступила в редакцию 25 июля 2012 г.

ISSN 1609–3577 Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2014, vol. 17, no. 2, pp. 148—151.

Tilt Boundary Formation in GeSi/Si (001) Vicinal Heterosystem

Aleksei Viktorovich Kolesnikov[1] — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Senior Researcher (kolesn@isp.nsc.ru); **Evgenii Mikhailovich Trukhanov[1]** — Dr. Sci. (Phys.–Math.), Leading Researcher (trukh@isp.nsc.ru); **Aleksandr Sergeevich Ilin[1]** — Engineer (ias@isp.nsc.ru); **Ivan Dmitrievich Loshkarev[1]** — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Junior Researcher (idl@isp.nsc.ru).

[1]Institute of Semiconductor Physics SB RAS,
13 Lavrenteva Ave., Novosibirsk 630090, Russia

Abstract: The structural state of Ge_xSi_{1-x} films grown on Si substrates with the vicinal orientation (1 1 13) has been studied. The (1 1 13) orientation has been obtained by rotating the singular plane (001) around the [1$\bar{1}$0] axis. The *x* parameter of Ge_xSi_{1-x} films in different samples ranged from 0.083 to 0.268. Triclinic distortions arising in film crystal lattice have been analyzed using our technique developed for the determination of epitaxial layer structural parameters based on the *X*–ray diffractometry data. It has been established that during the epitaxial process the film lattice turns around the direction of surface steps due to the introduction of misfit dislocations into the interface. Dislocations with Burgers vector *a*/2<110> which is not parallel to the interface create an analog of a tilt boundary. The turning angle value ψ is proportional to the misfit dislocation density. This phenomenon is associated with a decrease of the interface symmetry that leads to a change in the efficiency of stress relieving by dislocations belonging to different families. The influence of these families on the low–angle boundary formation is considered. Experimental values of the ψ angle and shear strain for the [13 13 $\bar{2}$] and [$\bar{1}$10] directions lying in the interface (1 1 13) have been defined. A comparison of the experimental and calculated values of ψ for the [13 13 $\bar{2}$] direction is provided.

Key words: silicon, germanium, *X*–ray diffractometry, misfit dislocations.

References

1. Bolkhovityanov Yu. B., Pchelyakov O. P. GaAs epitaxy on Si substrates: modern status of research and engineering. *Phys. Usp.* 2008, vol. 51, pp. 437—456.

2. Nagai H. Structure of vapor–deposited $Ga_xIn_{1-x}As$ crystals. *J. Appl. Phys.* 1974, vol. 45, p. 3789.

3. Auvray P., Poudoulec A., Baudet M., Guenais B., Regreny A., d'Anterroches C., Massies J. Interface roughness of GaAs/AlAs superlattices MBE–grown on vicinal surfaces. *Appl. Surf. Sci.* 1991, vol. 50, p. 109.

4. Riesz F. Crystallographic tilting in latticemismatched heteroepitaxy: A Dodson–Tsao relaxation approach. *J. Appl. Phys.* 1996, vol. 79, no. 8, p. 4111.

5. Riesz F. Crystallographic tilting in high–misfit (100) semiconductor heteroepitaxial systems. *J. Vac. Sci. Technol. A.* 1996, vol. 14, no. 2, p. 425.

6. Van der Sluis P. Determination of strain in epitaxial semiconductor layers by high–resolution X–ray diffraction. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 1993, vol. 26, p. A188.

7. Kolesnikov A. V., Ilin A. S., Trukhanov E. M., Vasilenko A. P., Loshkarev I. D., Deryabin A. S. X–Ray Diffraction Analysis of Epitaxal Film Distortions on Miscut Substrates (001). *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.* 2011, vol. 75, no. 5, p. 652.

8. Khall D. *Vvedenie v dislokatsii* [Introduction to dislocations]. Moscow: Atomizdat, 1968. 280 p. (In Russ.)

9. Trukhanov E. M., Kolesnikov A. V. Film Quality Effects Associated with Formation of Misfit Dislocations at Semiconductor Interfaces. *Appl. Surf. Sci.* 1998, vol. 123/124, p. 669.

10. Trukhanov E. M. Properties of misfit dislocations and pseudodislocations not typical for homogeneous crystal defects. *Surface.* 2010, no. 1, p. 43.

Acknowledgements: *This work was supported by Integration Interdisciplinary Project of SB RAS No. 72 and the RFBR Grant (project No. 14–02–00677–a).*

Received July 25, 2012

* * *