

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова  
Сибирского отделения Российской академии наук

На правах рукописи

**Лошкарев Иван Дмитриевич**

**НАПРЯЖЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ДИСЛОКАЦИОННАЯ СТРУКТУРА  
ПЛЕНОК GaAs, GaP и GeSi НА КРЕМНИИ**

01.04.07 «Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,

в.н.с. Труханов Евгений Михайлович

Новосибирск – 2013

### **Основные использованные сокращения**

ДН – дислокация несоответствия

ЛДН – Ломеровская дислокация несоответствия

ГР – граница раздела

ПД – пронизывающая дислокация

60°-ДН – шестидесятиградусная дислокация несоответствия

ДаНН – дальнедействующие нормальные напряжения

ДаСН – дальнедействующие сдвиговые напряжения

МЛЭ – молекулярно-лучевая эпитаксия

АСЭ – атомно-слоевая эпитаксия

ДБЭО – дифракции быстрых электронов на отражение

КДО – кривая дифракционного отражения

### **Основные использованные обозначения**

$a_f$  – параметр кристаллической решетки пленки

$a_s$  – параметр кристаллической решетки подложки

$f$  – параметр несоответствия

$h$  – толщина пленки

$h_c$  – критическая толщина пленки для введения ДН

$\gamma$  – угол разориентации подложки

$\mathbf{b}$  – вектор Бюргерса дислокации

$b_e$  – краевая проекция вектора Бюргерса на границу раздела

$b_s$  – проекция вектора Бюргерса на дислокацию

$b_t$  – проекция вектора Бюргерса на нормаль к границе раздела

$\alpha$  – угол между вектором Бюргерса и линией дислокации

$\psi$  – угол разворота кристаллических решеток пленки и подложки

$\delta_{zx}$  – угол сдвига между взятым в подложке направлением, перпендикулярным ГР, и соответствующим (в рамках индексов Миллера) направлением в пленке

$\delta_{xz}$  – угол сдвига между взятым в подложке направлением, параллельным ГР, и соответствующим (в рамках индексов Миллера) направлением в пленке

$\sigma_{ii}, \tau_{ij}$  – компоненты тензора напряжений

$\epsilon$  – упругая деформация (сдвиговая или нормальная)

$\rho$  – степень релаксации

$D_i$  – междислокационное расстояние  $i$ -го семейства ДН

$D$  – наибольшее из значений  $D_i$  всех введенных дислокационных семейств

$W$  – энергия дислокации единичной длины

$E_{HS}$  – упругая накопленная энергия гетеросистемы

$E_F$  – упругая энергия пленки

$F_{tr}$  – сила, действующая на пронизывающий участок дислокации

$F_l$  – сила линейного натяжения дислокации

$G$  – модуль сдвига

$\nu$  – коэффициент Пуассона

## Содержание

<b>Введение .....</b>	<b>7</b>
<b>Глава 1. Пластическая релаксация напряжений несоответствия: методы ее исследования и анализ сопутствующих явлений.....</b>	<b>14</b>
1.1. Введение дислокаций несоответствия в границы раздела полупроводниковых гетеросистем .....	14
1.1.1. Дислокация несоответствия и ее три составляющие части.....	14
1.1.2. Образование дислокаций несоответствия и их накопление в границе раздела.....	19
1.1.3. Критическая толщина пленки при введении ДН в vicinalные границы раздела (001). Фундаментальная роль краевой составляющей ДН. ....	28
1.1.4. Проявление винтовой дислокационной составляющей при снятии напряжений несоответствия.....	33
1.2. Гетеросистемы с vicinalными ступенчатыми границами раздела (001).....	37
1.2.1. Системы ступеней на подложке Si(001) и образование антифазных доменов в эпитаксиальном слое $A^{III}B^V$ .....	37
1.2.2. Условия получения эпитаксиальных слоев GaAs и GaP на Si и их <i>in-situ</i> контроль .....	42
1.2.3. Модель разворота кристаллической решетки пленки, предложенная Нагаи. Влияние дислокаций на поворот решетки пленки. ....	45
1.3. Рентгеновские методы изучения структурного состояния эпитаксиальной пленки с vicinalной границей раздела .....	47
1.3.1. Рентгеновское излучение, рассеяние на кристаллической решетке.....	47
1.3.2. Дифрактометрия, кривая дифракционного отражения.....	48
1.3.3. Методика анализа триклинных искажений .....	50

1.3.4. Трехосевая дифрактометрия.....	56
1.3.5. Обратное пространство.....	58
1.3.6. Карты рассеяния в обратном пространстве .....	61
Формулировка задач диссертации .....	63
<b>Глава 2. Кристаллическая структура GaAs и GaP на кремнии в обратном пространстве</b> .....	<b>64</b>
Выводы по главе 2 .....	72
<b>Глава 3. Зависимость пластической релаксации пленки GaAs от способа зарождения первого монослоя на отклоненной подложке Si(001) .....</b>	<b>73</b>
3.1. Развороты кристаллических решеток пленок GaAs в зависимости от способа зарождения первого монослоя .....	73
3.1.1. Пластическая релаксация эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001), зарожденной путем осаждения.....	82
3.1.2. Пластическая релаксация эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001), зарожденной путем замещения .....	84
3.2. Развороты кристаллической решетки пленки GaAs на Si, выращенной с использованием прослойки GaP .....	85
3.3. Факторы, проявляющиеся в процессе пластической релаксации пленок GaAs .....	89
3.3.1. Природа кажущегося явления «перерелаксации» напряжений несоответствия .	89
3.3.2. Влияние Ломеровских дислокаций несоответствия .....	90
3.3.3. Сравнительный анализ структурного состояния гетеросистем, исследованных в разделах 3.1 и 3.2 .....	92
Выводы по главе 3 .....	96
<b>Глава 4. Влияние дальнедействующих полей напряжений на кристаллическую структуру эпитаксиальных слоев .....</b>	<b>97</b>

4.1. Дальнейшие напряжения в эпитаксиальной пленке, вызванные деформационными полями дислокаций несоответствия.....	97
4.2. Использование фундаментальной формулы (4.6а) для анализа дислокационной границы раздела (013) .....	103
4.3. Два варианта неоптимального протекания процесса релаксации напряжений несоответствия .....	107
4.4. Поле сдвиговых напряжений в системе с границей раздела(111) .....	113
4.5. Дислокационная структура вицинальной границы раздела (111) гетеросистемы Ge/Si .....	115
Выводы по главе 4 .....	119
<b>Основные результаты и выводы по диссертации.....</b>	<b>121</b>
<b>Список литературы.....</b>	<b>123</b>

## ВВЕДЕНИЕ

### **Актуальность темы.**

На сегодняшний момент наиболее широко используемым полупроводниковым материалом в электронике является кремний. Большинство полупроводниковых приборов изготавливаются на подложках кремния, которые относительно недороги, имеют высокую теплопроводность, малую массу и большой диаметр. Во многих областях, таких как оптоэлектроника, фотовольтаика, сверхвысокочастотное приборостроение, целесообразно использование материалов с более выгодными электрофизическими свойствами. Такими материалами являются, например  $A^{III}B^V$  и Ge, поскольку имеют высокую подвижность носителей заряда, по сравнению с распространенным кремнием. Поэтому важной задачей является получение качественных пленок Ge и  $A^{III}B^V$  на подложках кремния.

Из-за различия параметров решеток и коэффициентов термического расширения пленки и подложки в гетероструктурах возникают механические напряжения, которые могут релаксировать путем введения и перемещения дислокаций. Вследствие этого ухудшается структура пленок и прилегающего к границе раздела слоя подложки, что изменяет электрофизические свойства пленок и приборов на их основе. Изменение зонной структуры под влиянием упругой деформации приводит к изменению ширины запрещенной зоны полупроводника, концентрации неосновных носителей заряда, подвижности электронов и дырок. Поэтому знание о напряженном состоянии кристаллической решетки пленки очень важно.

Введенные дислокации несоответствия (ДН) в границе раздела формируют дислокационную сетку, которая создает в пленке поле механических напряжений. В общем случае это поле содержит нормальные и сдвиговые компоненты, однако только первые из них компенсируют напряжения несоответствия псевдоморфной пленки. Поле сдвиговых напряжений является избыточным. Оно оказывает влияние на электрофизические свойства структуры, а также находится в связке с причинами образования пронизывающих

дислокаций. Изучение напряженного состояния решетки пленки является актуальной задачей, направленной на получение высокосовершенных эпитаксиальных слоев.

Использование вицинальных подложек позволяет избежать образования антифазных границ в пленках  $A^{III}B^V$ . Сетка ДН в вицинальной границе раздела не только формирует поля напряжений, но и создает разворот кристаллической решетки пленки относительно решетки подложки. Выявление взаимосвязи между наблюдаемым разворотом, структурой дислокационной границы раздела и распределением напряжений в пленке является одной из задач диссертационной работы.

**Цель диссертационной работы.** Изучение напряженного состояния и дислокационной структуры пластически релаксированных эпитаксиальных пленок с кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита на вицинальных подложках кремния. Установление закономерностей, характеризующих процесс снятия напряжений несоответствия.

**Для достижения цели решались следующие задачи.**

1. Накопление систематической информации о структурном состоянии пленок  $A^{III}B^V$  на отклоненных подложках кремния в зависимости от способа зарождения первых монослоев.
2. Установление основных характеристик структурного состояния кристаллических решеток пленок  $A^{III}B^V$ , в зависимости от механизма формирования первого монослоя.
3. Экспериментальное определение величины разворота кристаллической решетки пленки  $\psi$  относительно решетки подложки и установление природы явлений, обуславливающих этот разворот.
4. Расчет равновесных расстояний между ДН для введенных в область границы раздела (ГР) дислокационных семейств и определение соответствующих им углов разворота решеток.
5. Установление сочетаний винтовых составляющих неортогональных дислокационных семейств, при которых имеет место компенсация дальнедействующих сдвиговых напряжений.



6. Расчет предельной накопленной энергии гетеросистемы для различных комбинаций дислокационных семейств, участвующих в процессе релаксации.

7. Установление возможных вариантов однородного распределения напряжений в приповерхностном слое эпитаксиальной пленки и определение размеров этого слоя.

### **Научная новизна**

В диссертации впервые получены следующие экспериментальные результаты и теоретически установлены следующие оригинальные зависимости.

1. Получено справедливое для произвольной ориентации границы раздела выражение, которое отражает связь между параметрами дислокационных семейств, обеспечивших снятие напряжений несоответствия. Из данного выражения вычисляется параметр  $D$ , позволяющий разделить слой пленки толщиной  $h > D$  на два субслоя с различным распределением напряжений. Слой толщиной  $D$ , расположенный вблизи границы раздела, является неоднородно напряженным. В приповерхностном слое толщиной  $h - D$  возможны следующие варианты однородного распределения напряжений: полностью ненапряженное состояние; поле нормальных напряжений; поле сдвиговых напряжений; комбинация перечисленных вариантов.

2. На примере ГР (001) установлены две, имеющие различную природу, составляющие приповерхностного поля сдвиговых напряжений. Первая составляющая обусловлена неодинаковой плотностью взаимно перпендикулярных дислокаций несоответствия, так что степень релаксации в этих направлениях разная. Вторая – сочетанием винтовых компонент дислокаций, вводимых в границу раздела. Главные направления тензоров напряжений этих двух составляющих поля взаимно развернуты на  $45^\circ$ .

3. Для гетеросистемы GaAs/Si с границей раздела  $(1\ 1\ 13)$ , отклоненной на  $6^\circ$  от сингулярной плоскости (001) экспериментально установлено, что механизм формирования первого монослоя As на Si определяет направление поворота кристаллической решетки GaAs относительно решетки Si. В случае зарождения по механизму замещения кристаллографическая ориентация поверхности слоя GaAs в процессе

снятия напряжений несоответствия приближается к ориентации  $(1\ 1\ 12)$ , а в случае зарождения по механизму осаждения – приближается к ориентации  $(1\ 1\ 14)$ . Углы поворота кристаллических решеток GaAs относительно решетки Si составляют один – два десятка угловых минут.

### **Практическая значимость**

Установленная в диссертации взаимосвязь параметров дислокационных семейств позволяет анализировать дислокационную структуру границы раздела произвольной ориентации. Выполнение расчета возможно для любых углов залегания дислокационных семейств в гетерогранице. В диссертации практическая значимость такого анализа продемонстрирована на примере ориентации  $(7\ 7\ 10)$ , которая является вицинальной границей раздела  $(111)$ .

Установлено, что для выращивания ненапряженных эпитаксиальных слоев произвольной толщины на несогласованных подложках необходимо выполнение двух следующих условий. Во-первых, должно выполняться условие  $D < h$ , где  $h$  – толщина эпитаксиальной пленки, а параметр  $D$  равен наибольшему из средних междислокационных расстояний  $(D_i)$  всех участвующих в релаксационном процессе семейств ДН. Во-вторых, суммарный тензор поля дальнодействующих напряжений, которые созданы в приповерхностном слое пленки сеткой дислокаций несоответствия, должен быть равен тензору напряжений псевдоморфной пленки, взятому с противоположным знаком. Знание этих требований необходимо, в частности, для выращивания на высокосвершенных подложках Si толстых, качественных, практически объемных слоев GeSi, GaAs и других монокристаллов.

В диссертации показано, что измерение угла поворота решетки пленки относительно решетки подложки  $\psi$  является чувствительным методом контроля технологических режимов получения эпитаксиальной пленки GaAs на вицинальной подложке Si(001). Знак угла поворота связан с полярностью осажденной пленки. Полярность определяется способом зарождения первого монослоя пленки.

Представленные результаты позволили впервые реализовать в ИФП СО РАН трехосевую схему измерений на двухкристальном рентгеновском дифрактометре ДСО-1Т. Это дает возможность получать карты распределения интенсивности рентгеновских лучей в обратном пространстве вблизи узлов обратной решетки. С их применением для гетеросистемы GaAs/GaP/Si установлено, что прослойка GaP находится в практически псевдоморфном состоянии. Получить данный результат на основе кривых дифракционного отражения не представлялось возможным.

**На защиту вынесены следующие положения.**

1. Направление поворота кристаллической решетки эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001) зависит от механизма формирования первого монослоя. Решетка пленки поворачивается относительно решетки подложки вокруг направления ступеней  $\langle 110 \rangle$  вицинальной границы раздела. Если зарождение начинается осаждением As, то ориентация пленки приближается к сингулярному направлению [001]. Если при зарождении As замещает Si, то решетка пленки поворачивается в противоположном направлении.

2. Поворот кристаллической решетки пленки GaAs обусловлен введением дислокаций несоответствия, параллельных ступеням. В случае зарождения пленки по механизму осаждения доля Ломеровских ДН, которые наиболее эффективно снимают напряжения несоответствия, не превышает 60% всех дислокаций, параллельных ступеням. В случае зарождения по механизму замещения эта доля Ломеровских дислокаций может достигать 100%.

3. Для гетеросистемы с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита при полном снятии напряжений несоответствия справедливо выражение

$$\sum_{i=1}^n (b_i^e / D_i) = 2f .$$

Здесь  $b_i^e$  - проекция краевой компоненты вектора Бюргерса на границу раздела,  $D_i$  - среднее расстояние между дислокациями несоответствия  $i$ -го семейства,  $n$  - число семейств, участвующих в снятии напряжений несоответствия. Выражение отражает удельный вклад

каждого семейства дислокаций несоответствия в дислокационную границу раздела. Оно справедливо для произвольной ориентации границы раздела.

4. Поле сдвиговых напряжений приповерхностного слоя пленки с границей раздела (001) является суммой полей двух видов, которые имеют различную природу своего образования. Главные направления тензора напряжений поля первого вида параллельны кристаллографическим направлениям [110] и [1-10], а поля второго вида – параллельны направлениям [100] и [010]. Поле сдвиговых напряжений первого вида установлено впервые, компоненты его тензора напряжений равны  $\tau_{xy}=\tau_{yx}=Gb^e/D_x-Gb^e/D_y$ . В экспериментальной практике поля сдвиговых напряжений первого и второго вида возникают в процессе снятия напряжений несоответствия и характеризуют неоптимальное протекание процесса.

**Личный вклад соискателя** в представленную работу состоит в получении экспериментальных результатов, представленных во второй и третьей главах диссертации. Выращивание образцов и их ДБЭ in-situ контроль выполнялся в группе В.В. Преображенского ИФП СО РАН. Теоретический анализ и подготовка материалов к публикации осуществлялась совместно с научным руководителем и соавторами. Лично диссертантом получены следующие теоретические результаты, представленные в четвертой главе. Сформулированы критерии, позволяющие различать оптимальное и неоптимальное протекание релаксационного процесса. Предложена гипотеза существования приповерхностного поля чистого сдвига. Получено математическое выражение для составляющей этого поля, обусловленной неодинаковой плотностью взаимно перпендикулярных ДН.

#### **Апробация работы**

Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях.

Вторая международная молодежная научная школа - семинар «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород, (2008); VI Международная конференции по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и

приборов на его основе “Кремний 2009”. Новосибирск (2009); 11<sup>th</sup> International Conference and Seminar on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices, Erlagol, (2010); Второй международный междисциплинарный симпозиум «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-2), г.Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 3-8 сентября, 2010; Первый междисциплинарный, международный симпозиум «Кристаллография фазовых переходов при высоких давлениях и температурах (СРТ HP&T)-2011» , г.Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 9-13 июня , 2011; Первый междисциплинарный, международный симпозиум «Свойства вещества при высоких давлениях и температурах. Физика, геология, механика, химия» (PSHP&T-2011) , Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 13-17 июня , 2011; IX Международная конференция и VIII Школа молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург, (2012); Третий международный междисциплинарный симпозиум «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-3), г.Ростов-на-Дону – пос. Лоо, 18-23 сентября, 2012.

### **Публикации**

По теме диссертации опубликованы 8 статей и 13 тезисов докладов на Международных и Российских конференциях.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертационная работа состоит из четырех глав, выводов и списка литературы из 117 наименований. Она содержит 135 страниц, включает 39 рисунков и 10 таблиц.

# ГЛАВА 1. ПЛАСТИЧЕСКАЯ РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ: МЕТОДЫ ЕЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И АНАЛИЗ СОПУТСТВУЮЩИХ ЯВЛЕНИЙ

## 1.1. Введение дислокаций несоответствия в границы раздела полупроводниковых гетеросистем

### 1.1.1. Дислокация несоответствия и ее три составляющие части

Дислокации несоответствия формируются в границах раздела эпитаксиальных гетеросистем, у которых не совпадают значения параметров кристаллических решеток пленки ( $a_f$ ) и подложки ( $a_s$ ). Они обеспечивают снятие напряжений несоответствия сопрягаемых кристаллических слоев. Важной характеристикой таких слоев является так называемый параметр несоответствия  $f = (a_f - a_s) / a_s$ . Эффективность снятия напряжений несоответствия определяется величиной и направлением вектора Бюргера  $\mathbf{b}$ . В общем случае  $\mathbf{b}$  имеет три составляющие: краевая проекция на границу раздела, проекция на линию дислокации и проекция на нормаль к границе раздела. Поэтому семейство ДН удобно рассматривать в виде трех систем дислокаций (рис.1.1). Все ДН рассматриваемого семейства являются идентичными, имеют одинаковый вектор  $\mathbf{b}$  и расположены эквидистантно. Для первой системы дислокаций (рис.1.1а) вектор Бюргера  $b_e$  равен проекции краевой составляющей вектора  $\mathbf{b}$  на границу раздела. Только эта система и обеспечивает компенсацию напряжений псевдоморфной пленки полем напряжений ДН. Вторая система (рис.1.1б) представляет собой винтовые дислокации, их вектор Бюргера  $b_s$  равен винтовой составляющей вектора  $\mathbf{b}$ . Третья система (рис.1.1в) краевых дислокаций формирует малоугловую границу, ее вектор Бюргера  $b_l$  равен проекции вектора  $\mathbf{b}$  на нормаль к границе раздела.

Если принять, что семейство ДН лежит в границе раздела (ГР) между двумя полубесконечными кристаллами, то согласно [1] вдали от ГР на расстоянии  $x > d$  данное семейство формирует два поля дальнедействующих напряжений. (1) Поле дальнедействующих нормальных напряжений (ДаНН), равных  $\sigma_{zz}=(Gb_e/d)/(1-\nu)$ , где  $G$  - модуль сдвига,  $\nu$  - коэффициент Пуассона,  $d$  – междислокационное расстояние. Оно создано системой (рис.1.1а). Примем, что ось  $Ox$  перпендикулярна ГР, ось  $Oy$  параллельна семейству ДН, а ось  $Oz$  ему перпендикулярна. Второе поле (2) является полем дальнедействующих сдвиговых напряжений (ДаСН), равных  $\sigma_{yz}=Gb_s/2d$ , которое создано системой (рис.1.1б).

Согласно [2-6] в случае пленки конечной толщины и полубесконечной подложки дальнедействующие нормальные напряжения в пленке удваиваются по сравнению с приведенными выше выражениями, и компонента тензора дальнедействующих напряжений  $\sigma_{zz}$  запишется как

$$\sigma_{zz}= 2(Gb_e/d)/(1-\nu). \quad (1.1)$$

Если в свободном ненапряженном состоянии параметр кристаллической решетки пленки больше, чем подложки, то в псевдоморфной пленке возникают напряжения несоответствия, равные [7]

$$\sigma_{zz}=\sigma_{yy}=2Gf(1+\nu)/(1-\nu). \quad (1.2)$$

В процессе релаксации напряжений несоответствия в ГР (001) вводятся два взаимно перпендикулярных семейства ДН. При полной релаксации линейная плотность дислокаций каждого семейства равна  $f / b_e$  [8-11], тогда формула (1.1) трансформируется в (1.2) с противоположным знаком [2] Таким образом, дальнедействующие напряжения двух взаимно перпендикулярных семейств ДН полностью компенсируют напряжения исходной псевдоморфной пленки на расстоянии  $x_0 > d$  от границы раздела [4, 12, 13]. Однако величина этого, фактически структурного параметра  $x_0$ , в литературе не установлена и определяется в предлагаемой диссертации.

Система винтовых дислокаций рис.1.1б создает поле сдвиговых напряжений [1]. На расстоянии от границы раздела, превышающем  $d$ , распределение напряжений становится практически однородным и формируется поле дальнедействующих сдвиговых напряжений

(ДаСН), которые равны  $\sigma_{yz}=Gb_s/(2d)$ . В случае пленки конечной толщины и полубесконечной подложки поле дальнедействующих напряжений в подложке равно нулю, а в пленке эти напряжения удвоятся и составят  $\sigma_{yz}=Gb_s/d$  [2, 4-6]. Дальнедействующие сдвиговые напряжения не компенсируют напряжения несоответствия. Если в границе раздела имеются два взаимно перпендикулярных семейства ДН, у которых одинаковая величина компоненты  $b_s$ , то в зависимости от знаков винтовых составляющих ДН результирующие сдвиговые напряжения окажутся, либо полностью взаимно скомпенсированными, либо удвоенными и равными

$$\sigma_{yz}=2Gb_s/d. \quad (1.3)$$

Квадрат, взятый на поверхности растущей псевдоморфной пленки, при полностью снятых напряжениях несоответствия, превращается в ромб под действием возникающих ДаСН.

В работе [3] для гетеросистем с кристаллической решеткой алмаза или сфалерита вицинальные ориентации (001) и (111) расклассифицированы на два типа. Это ориентации типа 1, когда более вероятно формирование неподвижных пронизывающих дислокаций, но не возникают поля ДаСН. К первому типу относятся: множество вицинальных плоскостей (001), возникающих при повороте вокруг направления  $[-110]$ ; вицинальные плоскости (111), образующиеся при повороте вокруг  $[-110]$ ; сингулярные ориентации (001) и (111). Под ориентациями типа 2 понимаются ориентации, когда маловероятно формирование неподвижных пронизывающих дислокаций, но возникают поля ДаСН. Это вицинальные плоскости (001), полученные поворотом вокруг  $[100]$  и вицинальные плоскости (111) повернутые вокруг  $[11-2]$ . Оси поворота для перехода от сингулярной ориентации (001) к вицинальным схематично показаны на рис.1.2: в случае оси  $[-110]$  возникают ориентации типа 1, а в случае оси  $[-100]$  – ориентации типа 2.

В мировой технологической практике активно применяются вицинальные ориентации (001), полученные поворотом вокруг направления  $[1-10]$  (ориентации типа 1). На поверхности такой подложки присутствуют ступени и террасы. Их присутствие играет принципиальную роль при эпитаксии пленок  $A^{III}B^V$  на Si. Это будет дополнительно



рассмотрено в разделе литературного обзора 1.2. В случае отклонения от плоскости (001) поворотом вокруг [100] (ориентации типа 2) также формируются системы ступеней. Это следует из результатов, полученных с помощью туннельной микроскопии (см, например, работу [14]). Одним из частных случаев ориентации типа 2 является плоскость (013), полученная отклонением от (001) на угол  $18.4^\circ$ . При использовании этой плоскости создаются оптимальные условия для эпитаксии слоев  $CdPbTe$  и  $CdZnTe$  на подложке  $GaAs$ . ДаНН и ДаСН, возникающие в гетеросистеме с границей раздела (013) в диссертации детально исследованы в Главе 4.

Система краевых дислокаций (рис.1.1в) представляет собой дислокационную стенку, которая согласно [1], не создает дальнедействующего поля напряжений. Такая стенка дислокаций формирует малоугловую границу раздела, т.е. создает разворот кристаллических решеток пленки и подложки вокруг дислокационных линий. Направление разворота зависит от знака вектора Бюргерса  $b_t$ , т.е. от расположения экстра-полуплоскости. Дислокационная стенка, изображенная на (рис.1.1в), формирует разворот пленки по часовой стрелке. Величина разворота  $\psi$  зависит от величины вектора  $b_t$  и от междислокационного расстояния  $d$ . Согласно [15, 16] величина  $\psi$  определяется как

$$\tan(\psi)=b_t/d. \quad (1.4)$$

Если в границе раздела присутствует несколько семейств ДН с малоугловой компонентой, то разворот решетки пленки является суперпозицией разворотов, созданных каждым семейством.

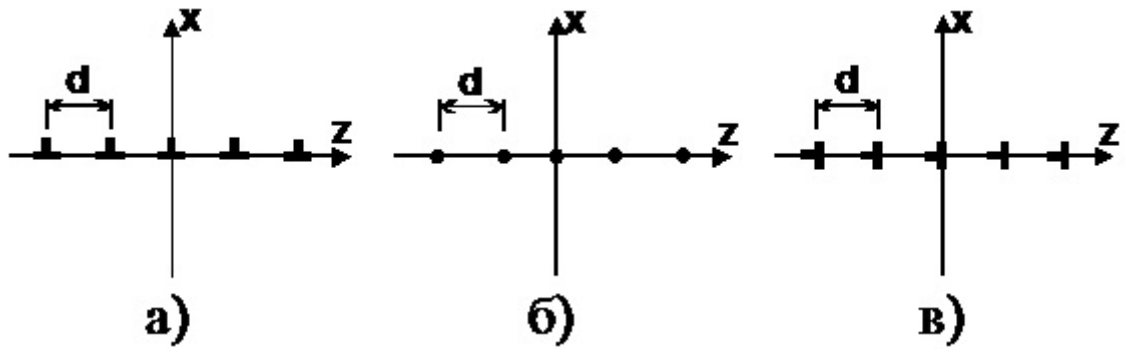


Рис.1.1. Представление семейства ДН в виде трех систем дислокаций: краевые ДН (а); винтовые дислокации (б); краевые дислокации, создающие малоугловую границу (в).

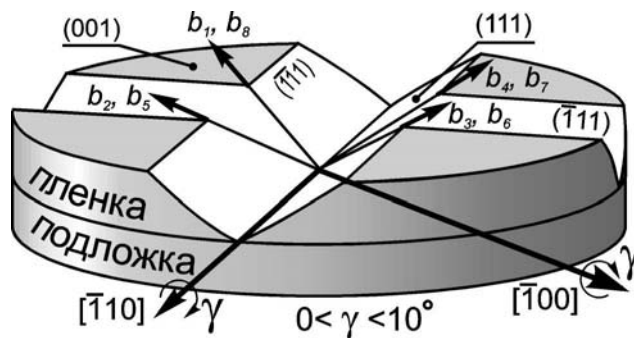


Рис.1.2. Схематическое изображение векторов Бюргера  $b_1 - b_8$  и плоскостей скольжения в случае вицинальной границы раздела (001), отклоняющейся на угол  $\gamma$  в результате поворота вокруг оси  $[-1\ 1\ 0]$  или  $[-1\ 0\ 0]$ . Номера векторов Бюргера и Миллеровские индексы плоскостей скольжения и векторов Бюргера приведены в соответствии с данными табл. 1.1 (стр.32).

### 1.1.2. Образование дислокаций несоответствия и их накопление в границе раздела

Технологи стремятся выполнять эпитаксиальный рост при пониженных температурах роста, поскольку это позволяет создавать резкие гетерограницы между слоями и снижает количество дефектов структуры. Поэтому основным механизмом образования дислокаций несоответствия является скольжение - оно происходит при более низких температурах по сравнению с перемещением дислокаций [1, 15, 17-19]. В гетеросистемах с кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита вводятся ДН в границу раздела, как правило, по плоскостям скольжения типа  $\{111\}$  и имеют векторы Бюргера типа  $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$ . В мировой литературе существует множество работ, например, [8, 20], в которых экспериментально наблюдаются указанные ДН. Всего выделяют 24 системы скольжения (рис.1.3). В каждой плоскости скольжения лежат 6 различных векторов Бюргера, в том числе с противоположным знаком [21]. Для гетеросистем с кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита взаимодействия различных ДН подробно рассмотрены в работах [22-24].

Рассмотрим отдельную дислокацию несоответствия, которая состоит из следующих частей [11, 25, 26]:

- во-первых, это прямолинейный дислокационный участок, залегающий в границе раздела, либо вблизи ее, и являющийся, непосредственно, самой ДН. Эта часть дислокации снимает несоответствие между двумя сопрягаемыми материалами и понижает энергию гетеросистемы;
- во-вторых, это один или два дислокационных участка, которые соединяют концы дислокации несоответствия с поверхностью растущей пленки. Эти участки проходят через всю толщину растущей пленки, они в литературе называются пронизывающими [3, 27, 28] или прорастающими [11] дислокациями. Встречается также термин «проникающие дислокации» [29]. В зарубежной литературе, начиная с первых работ Мэтьюза, эти дислокации называют «threading dislocations». Наиболее точным переводом английского варианта является «пронизывающие дислокации». Этот термин и будет использоваться в диссертации. Важным качеством обсуждаемых дислокаций является тот факт, что они могут

скользить вдоль границы раздела, удлиняя ДН, и в таком случае их называют подвижными пронизывающими дислокациями [3, 27]. Движение такой дислокации может прекратиться, если она встретится с каким-либо дефектом или областью неоднородности, а также в результате взаимодействия между дислокациями. При этом образуется неподвижная пронизывающая дислокация, которая, в отличие от подвижной, остается в эпитаксиальной пленке и после окончания роста и процесса релаксации. Накопление неподвижных пронизывающих дислокаций в большинстве случаев является неблагоприятным фактором, который ухудшает электрофизические параметры пленки и может привести к полной неработоспособности прибора, изготовленного на основе такой эпитаксиальной системы.

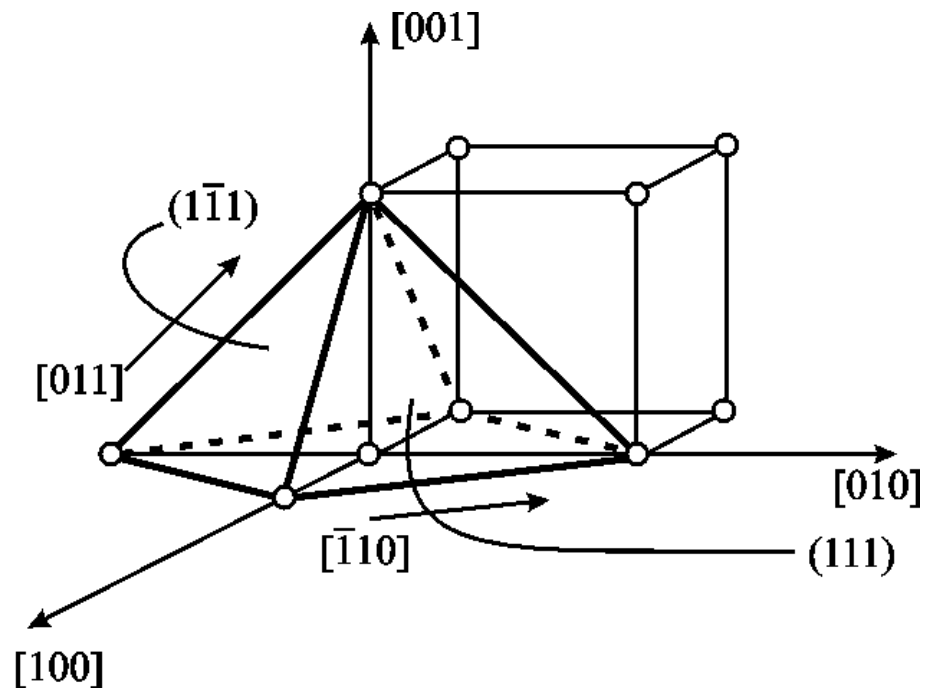


Рис.1.3. Геометрия систем скольжения типа  $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$  для (001) эпитаксиальной гетеросистемы.

Возникновению неподвижных пронизывающих дислокаций при введении ДН в гетерограницу (001) полупроводниковой системы способствует высокая симметрия кубической кристаллической решетки. Согласно рис.1.3, как в направлении  $[-110]$ , так и в направлении  $[110]$  возможно введение 4 семейств  $60^\circ$ -ДН. Если граница раздела строго сингулярная, то всем этим 8 семействам соответствует одинаковая величина критической толщины пленки  $h_c$ , при которой энергетически выгодно введение ДН. Вывод выражения для вычисления  $h_c$  представлен в разделе 1.1.3. В указанном разделе также показано, что при переходе от сингулярной границы раздела к вицинальным такое вырождение величины  $h_c$  снимается, по крайней мере, частично, и имеет место уменьшение критической толщины пленки для некоторых систем скольжения. Особенности поведения пронизывающих дислокаций в гетеросистемах с вицинальными ориентациями границ раздела изучены в [30-36].

Образование дислокаций несоответствия возможно не только введением по плоскостям скольжения, но и путем размножения, т.е. увеличением количества уже существующих в гетеросистеме дислокаций. Рассмотрим работу некоторых механизмов размножения. Приведенные ниже дислокационные источники имеют следующее свойство: все дислокации, сформированные одним дислокационным источником, имеют одинаковые векторы Бюргера.

На серии рисунков (рис.1.4) схематично изображен механизм спирального источника дислокаций [37]. Границей раздела является плоскость (001). На рисунке представлен вид сверху, т.е. вдоль направления  $[001]$ . Дислокации обозначены их векторами Бюргера  $\frac{1}{2}[101]$  и  $\frac{1}{2}[01-1]$ . На (рис.1.4) наклонная плоскость скольжения  $(-111)$  показана серым цветом. Правый край закрашенной области соответствует пересечению плоскости  $(-111)$  с поверхностью пленки (001), линия пересечения имеет направление  $[110]$ . Левый край этой области соответствует пересечению плоскости  $(-111)$  с границей раздела. Подвижная пронизывающая часть дислокации  $\frac{1}{2}[101]$ , скользящая в плоскости  $(-111)$  параллельно направлению  $[110]$ , пересекает поперечную  $\frac{1}{2}[01-1]$   $60^\circ$ -дислокацию несоответствия, залегающую вдоль направления  $[-110]$  (рис.1.4а). Энергетические барьеры, возникающие при

пересечении дислокаций, рассмотрены в [43]. Если происходит взаимодействие, то пронизывающая дислокация совершает поперечное скольжение в плоскости  $(-1-11)$  и движется вдоль  $60^\circ$ -ДН, формируя сегмент чисто краевой дислокации (рис.1.4б). Скользящий участок  $\frac{1}{2}[101]$  между границей раздела и поверхностью может теперь покинуть краевую ДН, образуя спиральный источник дислокаций (рис.1.4в-е). Этот участок может возобновить скольжение в плоскости  $(-111)$ , параллельной исходной (рис.1.4в). Одновременно происходит удлинение исходной  $\frac{1}{2}[101]$   $60^\circ$ -дислокации несоответствия. Участок, который соединяет две перпендикулярные дислокации, увеличивается и достигает поверхности. После этого ему энергетически выгодно распасться на два участка (рис.1.4г). Первый из них – это пронизывающая дислокация, скольжение которой приводит к удлинению ДН. Второй участок – соединяет краевую дислокацию с поверхностью.

Аналогичный процесс происходит и на втором конце краевой дислокации. Пронизывающая дислокация в форме незамкнутой петли расширяется и достигает границы раздела. Начиная с этого момента, под действием напряжений несоответствия происходит ее удлинение в противоположных направлениях, формируя участок  $60^\circ$ -ДН вдоль линии пересечения плоскости скольжения и границы раздела (рис.1.4д). В дальнейшем этот процесс может повториться (рис.1.4е). Заметим, что до этого пронизывающая дислокация должна продолжить скольжение вдоль направления  $[-110]$ . Это приведет к удлинению краевой дислокации и к образованию поперечной  $60^\circ$ -ДН в новом месте гетеросистемы. Подобный механизм может иметь место и при образовании краевой (Ломеровской) дислокации в результате реакции двух параллельных  $60^\circ$ -ДН с разными векторами Бюргерса.

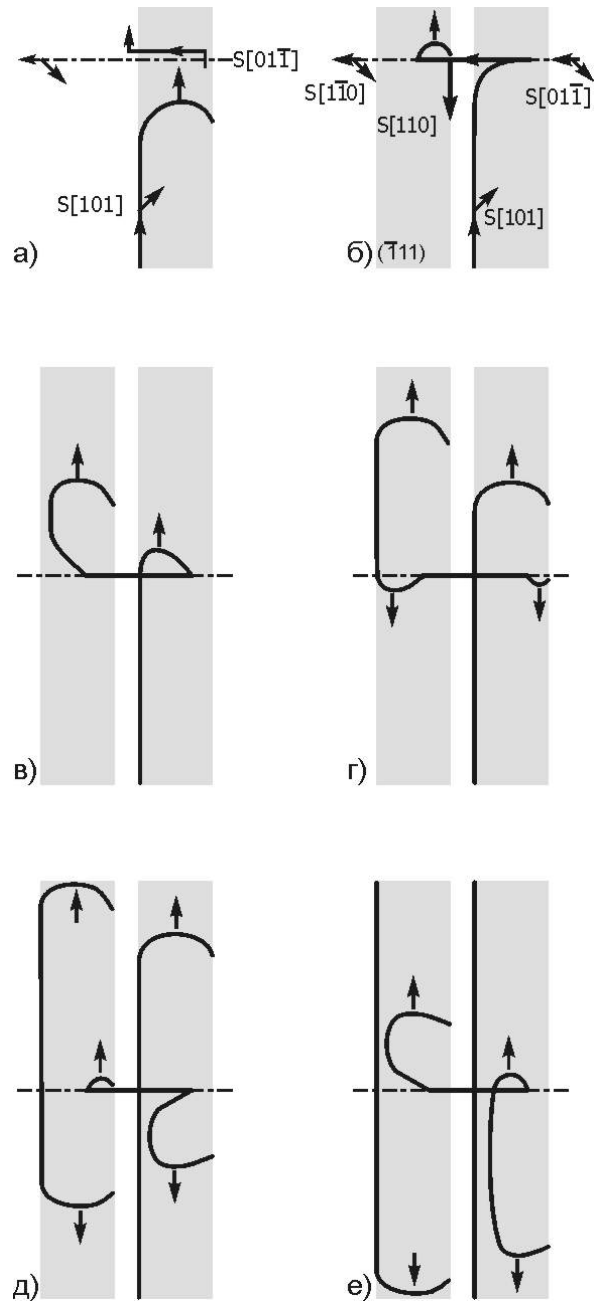


Рис.1.4. Схема образования спирального источника дислокаций и его работа [37].

Если реакция между двумя параллельными  $60^\circ$ -ДН, образующая краевую дислокацию, по какой либо причине останавливается (рис.1.5а), то одна из скользящих пронизывающих дислокаций может начать скольжение в перпендикулярном направлении (рис.1.5б). На рисунке показана  $\frac{1}{2}[0-1-1]$  дислокация, которая поменяла плоскость скольжения (1-11) на плоскость (-1-11), однако и вторая дислокация  $\frac{1}{2}[101]$  может вести себя подобным образом. По мере увеличения петли в плоскости (-1-11), она распадается (рис.1.5в) на  $60^\circ$ -дислокацию несоответствия  $\frac{1}{2}[0-1-1]$ , скользящую вправо, и пронизывающую дислокацию. В конце работы данного источника, когда обе пронизывающие дислокации скользят в разные стороны, возникает финальная конфигурация (рис.1.5г). Подобные конфигурации наблюдались авторами [37] экспериментально. Отметим, что повторение данного механизма невозможно, в отличии от спирального источника.

Обсудим источники Г-образных дислокаций, которые содержат отклоненные в противоположных направлениях изломы. Выходы изломов Г-образных ДН на поверхность пленки могут привести к размножению ДН, что было рассмотрено Хайгеном и Шранком в конце 70-ых годов [38, 39]. Начиная с 90-ых годов проводятся исследования модифицированных источников Франка-Рида, также формирующих Г-образные дислокации [39, 40, 41].

Существует несколько механизмов размножения ДН, которые образуют Г-образные дислокации. Подвижная пронизывающая дислокация может инициировать поперечное скольжение, закрепившись на дефекте кристаллической структуры. Если этот процесс будет повторяться многократно, то возможно образование перпендикулярных участков ДН с одинаковым вектором Бюргерса  $\mathbf{b}$ . В результате формируется пара Г-образных дислокаций с изломами, которые отклоняются от границы раздела в противоположных направлениях. Излом, смещающийся внутрь пленки, может преодолеть потенциальный энергетический барьер и достигнуть поверхности пленки. Уровень барьера снижается из-за появления напряжений изображения (притяжения дислокации к свободной поверхности пленки). Выход излома на поверхность может образовать источник Хайгена - Шранка, который зарождает новые Г-образные дислокации [38]. Одна из модификаций источника обсуждается в [42].



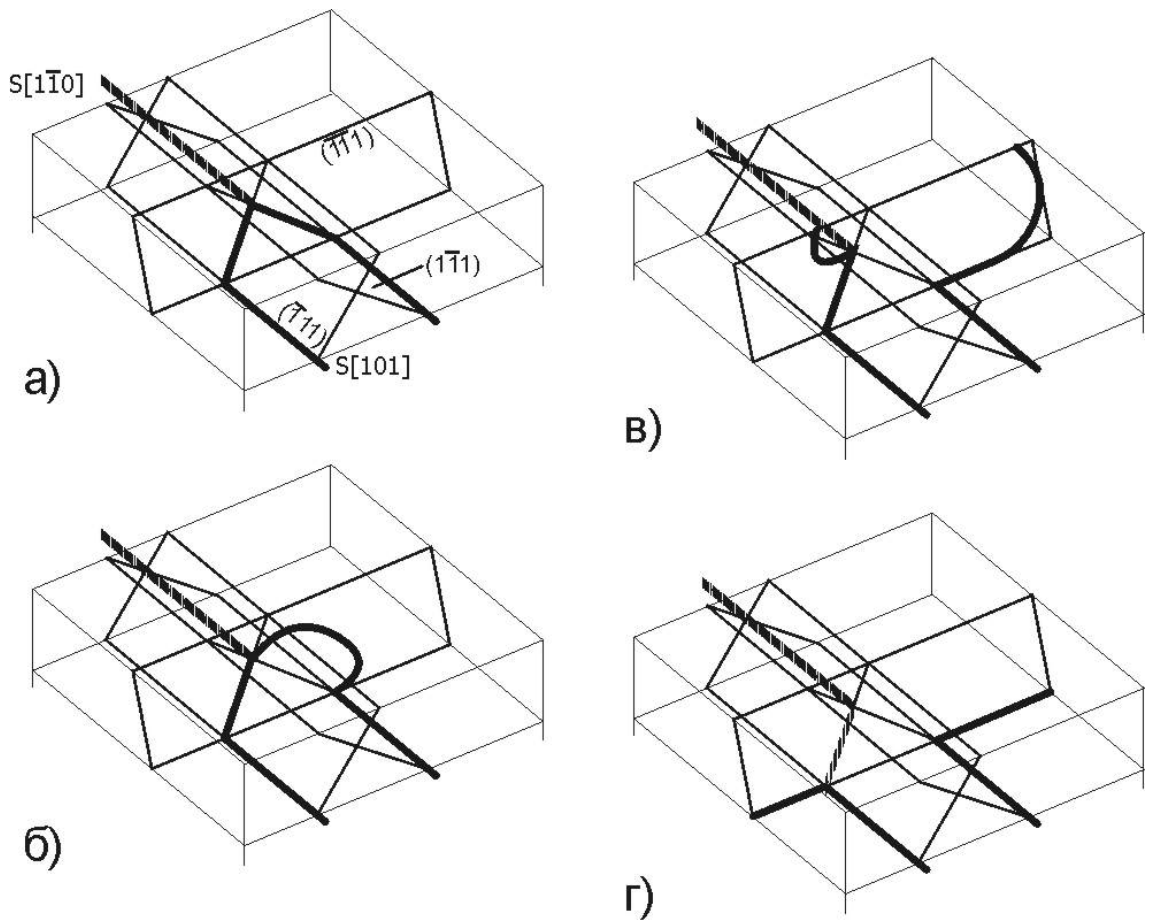


Рис.1.5. Схематическое изображение процесса формирования перпендикулярной дислокации несоответствия на конце краевой Ломеровской дислокации [37].

Второй излом, который смещается вглубь подложки, может значительно удалиться от границы раздела, т.к. в подложке поле напряжений несоответствия намного меньше, чем в пленке. В результате уменьшается сила, препятствующая изгибанию Г-образной дислокации [7]. Излом, находящийся внутри подложки, может работать как модифицированный источник Франка – Рида [39, 40, 41]. Данные источники формируют новые взаимно перпендикулярные ДН с одинаковым вектором Бюргерса. На (рис.1.6) показана схема залегания винтовых компонент векторов Бюргерса ( $b_{s1}$  и  $b_{s2}$ ) для Г-образных ДН семейств 1 и 2. Работа источников Хайгена – Шранка и модифицированных источников Франка – Рида приводит к накоплению в границе раздела  $60^\circ$ -ДН с одинаковым вектором Бюргерса. Из работ [2, 44] следует, что накопление идентичных ДН, имеющих винтовую компоненту, может приводить к возникновению дальнодействующих сдвиговых напряжений (ДаСН) в эпитаксиальной пленке. Пример экспериментального наблюдения Г-образных ДН приведен на (рис.1.7). На этом рисунке приведено изображение электронной – микроскопии (рис.1.7а) Г-образных ДН в границе раздела (001) и рентгеновская топограмма (рис.1.7б) данных ДН, зарегистрированных в границе раздела (111). Важно указать, что на снимке (рис.1.7а) представлены изображения скоплений значительного числа Г-образных дислокаций с одинаковым  $b$ , расстояние между которыми существенно меньше толщины пленки. Последнее означает, что в пленке возникают ДаСН.

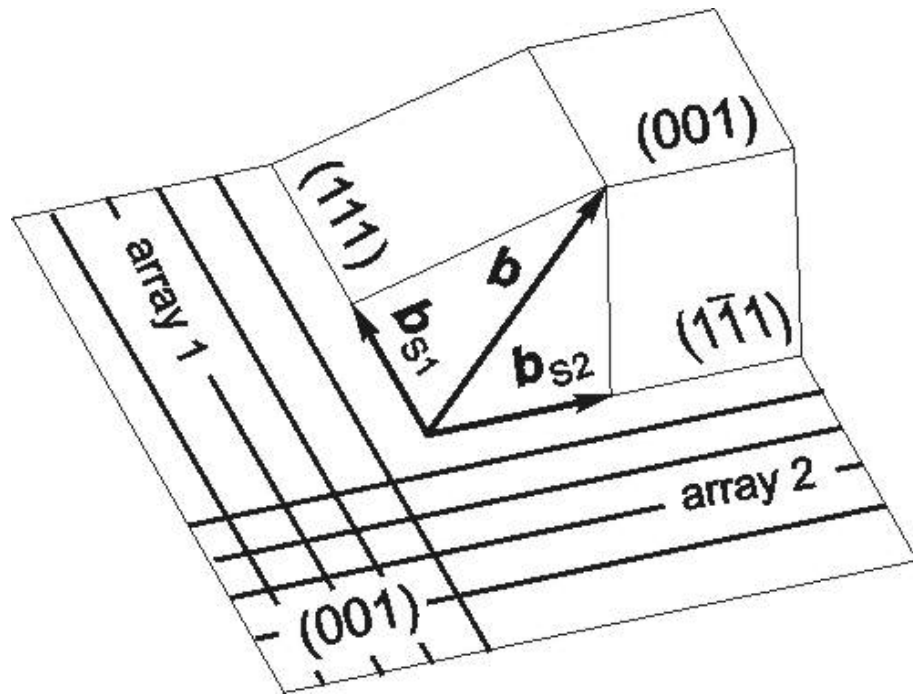


Рис.1.6. Винтовые составляющие векторов Бюргера ( $b_{s1}$  и  $b_{s2}$ ) для различных ветвей Г-образных ДН, имеющих одинаковый вектор Бюргера  $b$ .

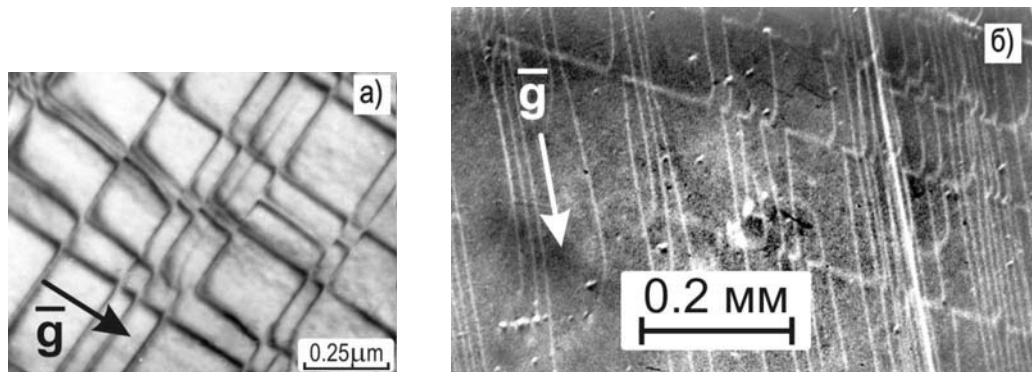


Рис.1.7. Экспериментальные изображения Г-образных дислокаций несоответствия [28]. Электронно – микроскопический снимок (а) в гетеросистеме (001). Рентгеновская топограмма (б), на которой видно два развернутых на  $120^\circ$  семейства, образующих Г-образные дислокации в нейтральной плоскости напряженного кристалла (111).

1.1.3. Критическая толщина пленки при введении ДН в vicинальные границы раздела (001). Фундаментальная роль краевой составляющей ДН.

Дислокации несоответствия начинают вводиться в границу раздела сопрягаемых слоев при так называемой критической толщине эпитаксиальной пленки  $h_c$ , когда становится энергетически выгодным переход пленки из псевдоморфного состояния в дислокационное. Одним из самых простых механизмов образования дислокаций несоответствия является изгиб дислокаций, прорастающих из подложки в пленку [8, 21]. Рассмотрим этот процесс на примере силового варианта дислокационной модели Мэтьюза [9, 10]. Если из подложки в пленку прорастает дислокация, то при увеличении толщины пленки  $h$  ее форма видоизменяется, как показано на рис.1.8. Как правило,  $h$  много меньше толщины подложки, поэтому уровень нормальных напряжений в пленке можно считать однородно распределенным, причем не зависящим как от глубины, так и от толщины пленки. Если пленка находится в псевдоморфном состоянии, то ее нормальные деформации  $\epsilon = f$ , где  $f$  – параметр несоответствия. Тогда сила, действующая на дислокацию, проросшую в пленку, равна

$$F_{tr} = 2 G h f b \cos \lambda (1+\nu)/(1-\nu),$$

где  $\nu$  - коэффициент Пуассона,  $G$  – модуль сдвига и  $\lambda$  - угол между вектором Бюргерса и линией, лежащей в границе раздела перпендикулярно ДН. Под действием  $F_{tr}$  прорастающая дислокация изгибается (см. изменение ее формы, представленное на положениях 1, 2 и 3 рис.1.8). По мере роста пленки сила, действующая на прорастающую дислокацию, увеличивается. Возникновение дислокации несоответствия АВ в плоскости границы раздела (рис.1.8, положение 3) становится энергетически выгодным, когда величина  $F_{tr}$  превысит  $F_l$  – силу линейного натяжения дислокации, расположенной в границе раздела. Укажем, что величина  $F_l$  равна энергии ДН единичной длины, т.е.

$$F_l = G b^2 (1-\nu \cos^2 \alpha) [1 + \ln(h/b)] / [4 \pi (1-\nu)],$$

где  $\alpha$  - угол между вектором Бюргерса и дислокационной линией.

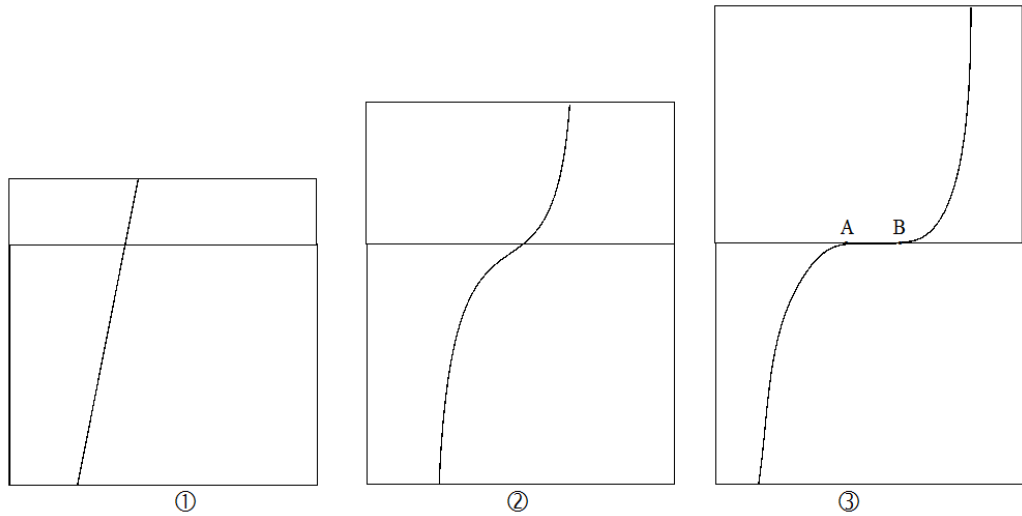


Рис.1.8. Изменение формы дислокации, проросшей из подложки в пленку, по мере увеличения толщины пленки [27]. На стадии (3) возникает участок дислокации несоответствия АВ.

Сила  $F_{tr}$  линейно зависит от  $h$ , а сила  $-F_l$  логарифмически. Поэтому при некоторой толщине пленки ( $h=h_c$ ) возникает равенство этих сил  $F_{tr} = F_l$ . Это равенство характеризует толщину  $h_c$ , при которой в границе раздела возникает участок дислокации несоответствия АВ, показанный на рис.1.8, стадия (3). Если при  $h=h_c$  на каком-то участке пленки ДН не возникли, то при  $h > h_c$ , по мере увеличения  $h$  их введение становится энергетически все более выгодным. Приведенные в данном разделе выражения позволяют получить [9]:

$$h_c = b(1-\nu \cos^2 \alpha) [\ln(h/b)+1] / [8\pi f \cos \lambda (1+\nu)]. \quad (1.5)$$

На примере рис.1.8 можно продемонстрировать различную природу прорастающих и пронизывающих дислокаций. Как показано в [27], если ДН созданы полупетлями, возникающими на свободной поверхности пленки, то для образования ДН необходимо

преодолеть энергетический барьер, величина которого находится в обратной зависимости со значением параметра несоответствия  $f$ . Если же ДН созданы петлями, возникающими внутри пленки, или «четвертьпетлями», возникающими на боковой поверхности островка, то величина энергетического барьера, соответственно, в 2 раза увеличивается или 2 раза уменьшается. Однако в случае ДН, образованной проросшей из подложки дислокацией (рис.1.8,*а*), какой-либо энергетический барьер отсутствует. По мере увеличения толщины пленки (рис.1.8,*б*) проросший участок дислокации безактивационно все сильнее наклоняется к границе раздела, и при критической толщине пленки нижняя часть этого участка становится параллельной ГР (рис.1.8,*в*). Именно по причине безактивационного процесса зарождения ДН (рис.1.8), на самой начальной стадии пластической релаксации вводится столько ДН, сколько дислокаций выходило на ростовую поверхность подложки. Затем некоторое время число ДН сохраняется неизменным, и лишь потом начинается формирование ДН пронизывающими дислокациями полупетель, возникших на свободной поверхности пленки [11].

Обсудим, как отклонение от строгой границы раздела (001) изменяет  $h_c$  для различных систем скольжения (табл. 1.1), которые обеспечивают введение ДН [45]. Будем рассматривать поворот вокруг направления  $[-110]$ . Схема расположения атомных плоскостей скольжения представлена на рис.1.2. Угол отклонения от сингулярной плоскости обозначен через  $\gamma$ . Зависимости  $h_c(\gamma)$  представлены на (рис.1.9) кривыми, обозначенными  $j;k$ , где  $j$  и  $k$  соответствуют номерам дислокационных семейств первого столбца табл. 1.1. Например, самая нижняя кривая на рис.1.9 обозначена 3;4. Она характеризует изменение  $h_c$  для дислокационных семейств номер 3 и 4. Расчет выполнен по формуле (1.5) для эпитаксиальной пленки  $Si_{0.75}Ge_{0.25}$  на  $Si$ . Данной гетеросистеме соответствует параметр несоответствия  $f=0.01$ . При использовании формулы (1.5) учитывалось, что изменение угла  $\gamma$  сопровождается изменениями углов  $\alpha$  и  $\lambda$ . При  $\gamma = 0$  (рис.1.9) всем восьми семействам (табл. 1.1) соответствует одна и та же величина  $h_c$ . Согласно [3], она равна 9.8 нм. Самая нижняя кривая 3;4 на рис.1.9 характеризует минимальную критическую толщину для ДН, возникающих в плоскости скольжения (111). Эти ДН вводятся в направлении оси поворота [-

110], т.е. параллельно ступеням, формируемым в границе раздела (001) при переходе от сингулярной ориентации к вицинальной. Из табл. 1.1 следует, что винтовые составляющие ДН, принадлежащие семействам 3 и 4, являются противоположными. Поэтому поля ДаСН, создаваемые этими семействами, имеют противоположные знаки, и при одинаковой плотности ДН у этих семейств сдвиговые напряжения взаимно компенсируются. В указанной таблице 1.1 представлены типы винтовых дислокационных составляющих  $60^\circ$ -ДН для случая, когда параметр решетки пленки превышает параметр подложки ( $a_f > a_s$ ). В противном случае, когда  $a_f < a_s$ , типы винтовых дислокационных составляющих необходимо изменить на противоположные.

В направлении [110], которое перпендикулярно оси поворота, вводятся ДН семейств 5 и 8, как показано кривой 5;8. Дислокации этих семейств скользят в различных плоскостях:  $(1-1\ 1)$  и  $(-1\ 1\ 1)$ , соответственно, (см. табл. 1.1). Линии залегания ДН, принадлежащих семействам 5 и 8, не совпадают, т.к. граница раздела является вицинальной. Из табл. 1.1 видно, что ДН данных семейств имеют противоположные винтовые компоненты. Если плотности ДН указанных семейств одинаковы, то их дальнедействующие сдвиговые напряжения взаимно компенсируются при квазиравновесном протекании релаксации. Однако данное, используемое в литературе [3, 27] утверждение, не учитывает влияние на величину ДаСН того факта, что линии залегания ДН семейств 5 и 8 не параллельны. Изучение этого эффекта выполнено в диссертации. Укажем также, что ДН семейств 5 и 8 в результате дислокационных реакций могут формировать Ломеровские дислокации [46, 47]. Такая реакция является энергетически выгодной.

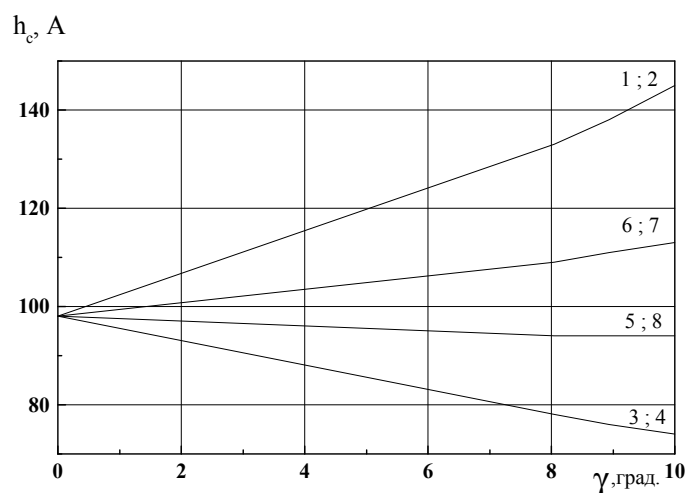


Рис.1.9. Изменение критической толщины пленки  $h_c$  для введения дислокаций несоответствия в вицинальную границу раздела, полученную в результате отклонения на угол  $\gamma$  от сингулярной плоскости (001) поворотом вокруг оси  $[-1\ 1\ 0]$  в сторону плоскости (110).

Таблица 1.1. Структурные характеристики  $60^\circ$ -дислокаций несоответствия, залегающих в сингулярной границе раздела (001) полупроводниковой гетеросистемы [28]. Параметр кристаллической решетки пленки превышает параметр подложки.

Номер семейства	Плоскость скольжения	Направление вектора Бюргерса, $b$	Направление дислокационной линии, $\xi$	Тип винтовой дислокационной составляющей
1	(-1-1 1)	[ 1 0 1]	[-1 1 0]	левая
2	(-1-1 1)	[ 0 1 1]	[-1 1 0]	правая
3	( 1 1 1)	[-1 0 1]	[ 1-1 0]	левая
4	( 1 1 1)	[ 0-1 1]	[ 1-1 0]	правая
5	( 1-1 1)	[ 0 1 1]	[-1-1 0]	левая
6	( 1-1 1)	[-1 0 1]	[-1-1 0]	правая
7	(-1 1 1)	[ 0-1 1]	[ 1 1 0]	левая
8	(-1 1 1)	[ 1 0 1]	[ 1 1 0]	правая



#### 1.1.4. Проявление винтовой дислокационной составляющей при снятии напряжений несоответствия

Рассмотрим, как в литературе учитывается влияние винтовой дислокационной составляющей на протекание релаксационного процесса. В рамках модели Мэтьюза [8, 9] увеличение доли винтовой компоненты сопровождается возрастанием числа ДН, участвующих в процессе. Согласно [1, 15, 19] энергия краевой ДН единичной длины записывается как

$$W_{кр} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{\eta R}{b},$$

где  $R$  – радиус ядра дислокации,  $\eta$  - множитель учитывающий энергию ядра дислокации.

При наличии винтовой составляющей энергия полной ДН на единицу длины запишется как

$$W = \frac{Gb^2}{4\pi} \left( \cos^2 \alpha + \frac{\sin^2 \alpha}{(1-\nu)} \right) \ln \frac{\eta R}{b}.$$

Здесь  $\alpha$  – угол между вектором Бюргерса и линией дислокации. Данное выражение преобразуется в

$$W = W_{кр} (1 - \nu \cos^2 \alpha).$$

Для 60°-ДН справедливо

$$W_{60} = W_{кр} (1 - 0.25\nu).$$

Если принять  $\nu=0.3$ , то

$$\frac{W_{60}}{W_{кр}} \approx 0.925$$

В результате получили, что энергия 60°-ДН на 7.5% меньше энергии чисто краевой, имеющей ту же величину  $b$  по модулю. Однако отношение значений  $b_e$  (см. рис.1.1) у рассматриваемых ДН равно 0.865. Как следствие, отношение линейной плотности краевых ДН и 60°-ДН также равно 0.865. Поскольку эта величина меньше, чем 0.925, то семейство 60°-ДН имеет большую энергию, чем семейство краевых ДН. Однако данное, распространенное в мировой литературе рассмотрение не учитывает возникновение

дальнодействующих сдвиговых напряжений (ДаСН) [1, 9], вызванных винтовой составляющей ДН. Эти напряжения могут приводить к структурным превращениям пленке в условиях, когда напряжения несоответствия полностью сняты [2, 4]. В литературе установлено [1, 21], что винтовые дислокации могут быть правыми или левыми, и то, что тип винтовой составляющей не зависит от направления обхода дислокационной линии. В случае краевой дислокации аналогичной характеристикой является положение экстра полуплоскости. При изменении направления обхода дислокационной линии, соответственно изменятся знаки винтовой  $b_s$  и краевой  $b_e$  составляющих вектора Бюргера. Однако положение экстра полуплоскости у краевой дислокации и тип винтовой дислокации остаются прежними. В случае кристаллических решеток типа алмаза и сфалерита в границы раздела возможно введение ДН в рамках 24 различных систем скольжения с векторами Бюргера  $\frac{a}{2}\langle 110 \rangle$  и плоскостями типа  $\{111\}$ . В случае  $a_s < a_f$ , т.е. когда параметр кристаллической решетки подложки меньше, чем параметр пленки, введение ДН обеспечивается 12 системами. В противоположном случае ( $a_s > a_f$ ) участвуют другие 12 дислокационных систем. Отметим, что если вектор Бюргера сохраняется неизменным вдоль дислокационной линии, то винтовая дислокационная составляющая может существенно изменяться по величине, и даже по знаку, вдоль непрямолинейной дислокационной линии [3].

В случае плоского скопления винтовых дислокаций, вдали от плоскости их залегания возникают однородные сдвиговые напряжения. Поле этих напряжений можно также представить как сжимающе-растягивающие напряжения [47]. Расстояние от плоскости скопления дислокаций, при котором поле напряжений становится однородным, не установлено. Как обсуждалось в разделе 1.1.1., обычно принимается допущение  $x_0 > d$  [4, 12], где  $d$  – среднее междислокационное расстояние для скопления дислокаций. Параметр  $x_0$  является характеристикой структурного состояния эпитаксиальной пленки и его установление является одной из задач диссертации. В [2, 3, 44] также установлено, что возникающие вдали от границы раздела ДаСН являются избыточными, поскольку не компенсируют какие-либо напряжения псевдоморфной пленки. При достижении

определенного уровня ДаСН могут вызывать возникновение соответствующих релаксационных процессов. Согласно [27], при пластической релаксации ДаСН возможна замена уже введенных ДН на дислокации, у которых винтовая составляющая является противоположной.

Если два взаимно перпендикулярных семейства  $60^\circ$ -ДН, расположенных в границе раздела (001), имеют одинаковую плотность, то ДаСН этих семейств, либо взаимно компенсируются, либо удваиваются. Для того, чтобы в эпитаксиальной пленке не происходили нежелательные структурные изменения, необходимо, чтобы все ДаСН были взаимно компенсированы. Однако в цитированных работах [1, 2, 3, 44] не установлено, как происходит компенсация этих напряжений в случае неперпендикулярных дислокационных семейств. Этот вопрос изучен в главе 4 диссертации.

Важным вопросом, практически не отраженным в литературе, но проанализированным в диссертации (глава 4), является изучение зависимости предельной накопленной энергии гетеросистемы от сочетаний дислокационных семейств, участвующих в процессе релаксации. Под предельной понимается энергия, которая имеет место, во-первых, при максимальной плотности ДН и, во-вторых, при такой толщине эпитаксиальной пленки  $h$ , когда энергия перестает зависеть от  $h$ . Накопление энергии гетеросистемы в литературе [3, 12, 27, 28, 48, 49] изучено только для варианта взаимно перпендикулярных семейств. В диссертации этот вопрос исследован значительно шире.

Также в круг задач настоящей диссертации входит вопрос, всегда ли образование Г-образных ДН сопровождается возникновением ДаСН. В [44] в качестве оптимального варианта введения ДН, обеспечивающего минимальную плотность пронизывающих дислокаций, предлагается применение периодически распределенных модифицированных источников Франка-Рида, при работе которых вся площадь границы раздела заполняется системой Г-образных ДН с идентичным вектором Бюргерса. Однако, как показано в [2, 3, 27], такое рассмотрение является не корректным, поскольку не учитывает влияния винтовой дислокационной составляющей на напряженное состояние гетеросистемы. Тот факт, что плотность неподвижных пронизывающих дислокаций минимальна, если в границу (001)

вводятся всего 2 семейства  $60^\circ$ -ДН, совсем не означает, что в этом случае также минимальна и накопленная упругая энергия гетеросистемы. В работе [3] показано, что имеет место взаимная компенсация ДаСН, если граница раздела (001) содержит четыре семейства  $60^\circ$ -ДН, удовлетворяющих следующим трем (1-3) требованиям. (1) Два семейства параллельны направлению [110] и имеют противоположные значения винтовой компоненты вектора Бюргерса  $b_s$ . (2) Дислокации данных семейств строго чередуются, так что две любые соседние дислокации имеют противоположные  $b_s$ . (3) Еще два семейства параллельны направлению [-110] и удовлетворяют аналогичному условию. В [3] установлено, что накопленная энергия гетеросистемы выше, если в границу (001) вводятся 2, а не 4 семейства. Однако в литературе такого рода исследования выполнены только для вариантов взаимно перпендикулярных дислокационных семейств. В диссертации варианты неперпендикулярных семейств изучены для вицинальных (001) ориентаций типа 1 (углы отклонения  $\gamma$ , показанные на рис.1.2, равны  $4^\circ$  и  $6^\circ$ ), а также вицинальных (001) ориентаций типа 2, когда при  $\gamma = 18.4^\circ$  возникает плоскость (013).

## 1.2. Гетеросистемы с вицинальными ступенчатыми границами раздела (001)

### 1.2.1. Системы ступеней на подложке Si(001) и образование антифазных доменов в эпитаксиальном слое $A^{III}B^V$

Для ряда задач полупроводникового материаловедения используются вицинальные границы раздела. Вицинальными называют высокоиндексные срезы, отклоненные на небольшой угол относительно сингулярных. При этом граница раздела представляет собой чередование ступеней и террас сингулярной грани [50].

Наличие ступеней на ростовой поверхности является важным фактором процесса кристаллизации. Вицинальные границы раздела отличаются тем, что атомные ступени на них упорядочены. Упорядоченные массивы ступеней, играя роль центров зарождения, делают возможным качественный гетерогенный рост кристалла даже при существенном различии сопрягаемых материалов [51]. Авторы этого обзора отмечают, что линейные дефекты оказывают значительное влияние на механизм гетероэпитаксиального роста пленок, ссылаясь, в частности, на работу [52]. В цитированной работе на примере  $Bi_{12}Ti_xSi_{i-1}O_2$  показано, что в зависимости от ориентации граней подложки существенно меняется механизм роста пленки, и это связывается с наличием на подложке ступеней, которые при определенных условиях приводят к образованию сигарообразных структур, оказывающих большое влияние на дальнейший ориентированный рост пленки.

Эффект самоорганизации упорядоченного роста пленки на вицинальной границе раздела широко используется в технологической практике роста соединений  $A^{III}B^V$ . Дело в том, что одной из проблем выращивания данных полярных соединений на неполярном кремнии является образование антифазных границ. Согласно литературным данным [53, 67] формирование антифазных доменов в эпитаксиальных пленках соединений  $A^{III}B^V$  обусловлено наличием на поверхности кремниевой подложки одноатомных террас. В этом случае на соседних террасах ориентация димеров Si относительно краев террас разная. На

рисунке рис.1.10а схематически представлена антифазная граница в слое GaAs, сформированном на поверхности Si(001) с одноатомными ступенями. Справа и слева от границы расположены домены GaAs, развернутые друг относительно друга в плоскости (001) на  $90^\circ$ , и смещенные друг относительно друга на одно межатомное расстояние вдоль направления [001].

Предварительный отжиг вицинальной подложки Si(001) с целью образования системы двухатомных ступеней создает условия для зарождения и роста слоя GaAs без антифазных границ [53]. Это следует из сравнения данных, приведенных на рис.1.10а и рис.1.10б. Более детально данный вопрос обсудим с привлечением рис.1.11 и рис.1.12. На поверхности кремния каждый атом имеет две оборванные связи. Стремясь к минимуму энергии, атомы кремния объединяются в димеры Si-Si. Димеры ориентируются в параллельные ряды на поверхности кристалла [50]. На вицинальных поверхностях на террасах высотой в один атомный слой ориентация димеров Si относительно их краев разная. От террасы к террасе идет чередование ориентации димеров: они располагаются то вдоль, то поперек ступеней.

Такая ситуация возникает на подложках Si(001), отклоненных вокруг  $\langle 011 \rangle$  на  $4 - 6^\circ$ . Для упорядочения ориентации димеров на террасах, подложку подвергают отжигу при  $800^\circ\text{C}$ . Одноатомные ступени (рис. 1.11) объединяются в двухатомные (рис. 1.12), т.е. возникают террасы, уровни которых отличаются на два атомных слоя [51, 53]. В этом случае на всех террасах ориентация димеров Si относительно их краев становится одинаковой: вдоль ступеней [50].

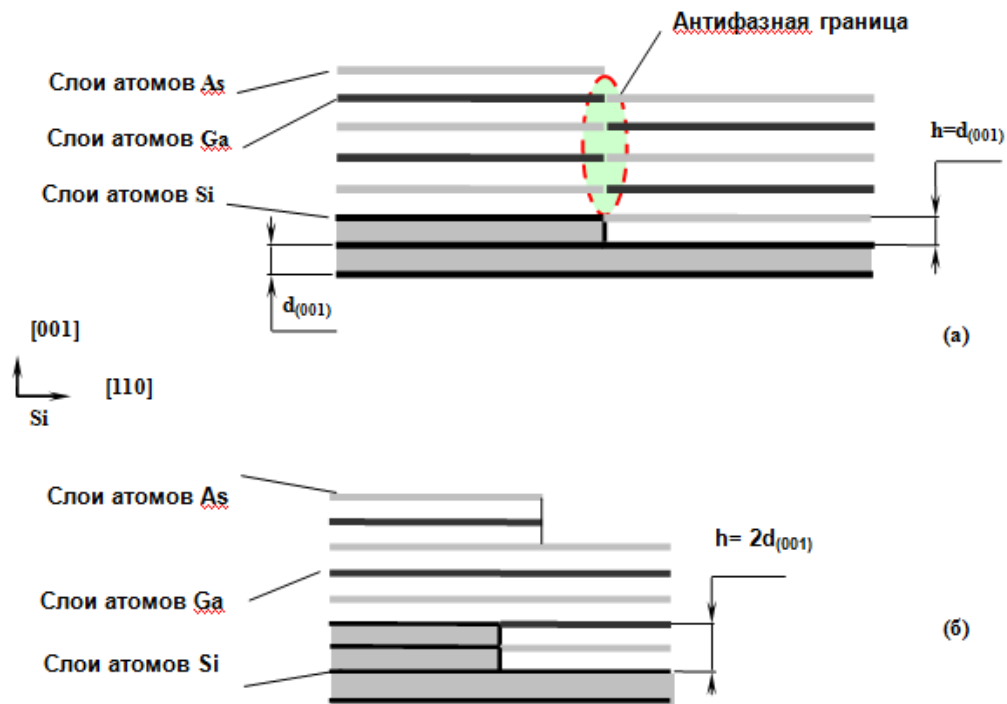


Рис. 1.10. Схематическое изображение монослоев GaAs на вицинальной подложке Si, с (а) антифазной границей в слое GaAs, и (б) без антифазной границы.

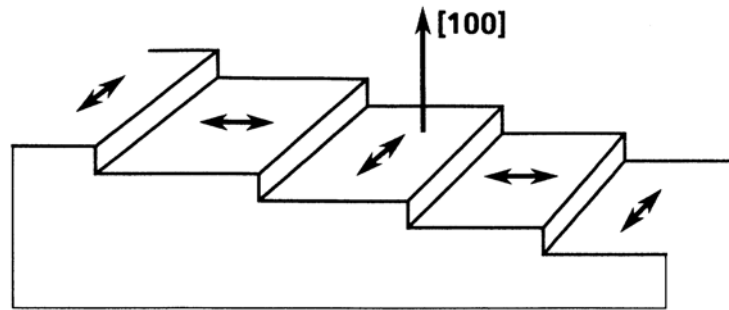


Рис. 1.11. Ориентация димеров Si на вицинальной подложке с одноатомными ступенями.

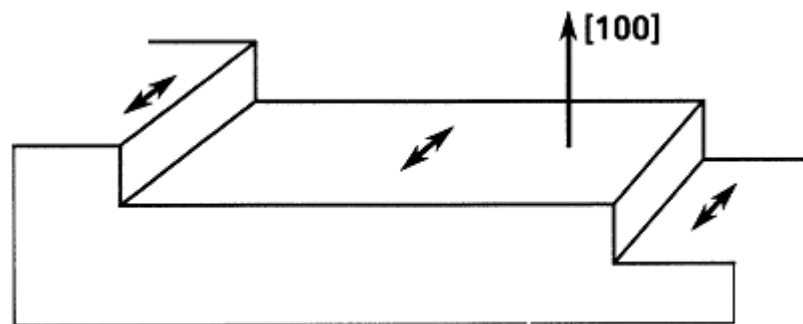


Рис. 1.12. Ориентация димеров Si на вицинальной подложке с двухатомными ступенями.



После формирования системы двухатомных ступеней, на подложку кремния осаждают монослой мышьяка (в этом случае на всей поверхности димеры мышьяка имеют одинаковую ориентацию). Этот слой весьма стоек и сохраняет свою структуру в широком температурном диапазоне, вплоть до 650°C. Зарождение и рост GaAs на такой поверхности проходит без образования антифазных границ. На рисунке 1.13б схематически изображен поперечный срез слоя GaAs, сформированного на обсуждаемой поверхности (рис. 1.12).

Описанный выше способ борьбы с антифазными доменами успешно применяется и при молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) пленок GaP. Опыт работ последних лет с границами раздела GaP/Si и GaAs/Si позволил предположить, что существует некоторая зависимость деформационного состояния гетеросистемы от способа зарождения слоев  $A^{III}B^V$  на кремнии. Поскольку не удалось найти работ, описывающих подобную зависимость, была поставлена задача на первом этапе диссертационных исследований накопить систематическую информацию о состоянии пленок в зависимости от полярности первых монослоев с целью дальнейшей разработки модели процесса релаксации слоев  $A^{III}B^V$  на отклоненных подложках кремния.

### 1.2.2. Условия получения эпитаксиальных слоев GaAs и GaP на Si и их *in-situ* контроль

Исследованные в диссертации образцы были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии на отклоненных на  $6^\circ$  ( $4^\circ$ ) подложках Si (001) вокруг  $\langle 110 \rangle$ . Режимы их выращивания и *in-situ* контроля описаны в [54-58]. Однодоменная поверхность Si(001) готовится посредством отжига образца при температуре  $850^\circ\text{C}$ . Процесс отжига и роста контролируется методом дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО). После отжига дифракционная картина вдоль  $\langle 011 \rangle$  соответствует ориентации димеров кремния на всех террасах – вдоль ступеней, как показано на рис. 1.12.

Зарождение пленки GaAs выполняется методом атомно-слоевой эпитаксии (АСЭ) [57]. Возможны два варианта зарождения первого монослоя GaAs: по механизму осаждения и по механизму замещения. В случае *осаждения* на подготовленную кремниевую поверхность подается слой атомов мышьяка при температуре  $250^\circ\text{C}$ , затем температура подложки ( $T_s$ ) повышается до  $580^\circ\text{C}$  и поверхность выдерживается в потоке As в течение 5 минут. После экспозиции поток мышьяка перекрывается, и подложка охлаждается до  $250^\circ\text{C}$ . При этой температуре поочередно осаждаются слои атомов Ga и As до толщины 20 монослоев. В результате димеры мышьяка ориентируются перпендикулярно димерам нижележащего монослоя (димерам Si) и располагаются перпендикулярно ступеням ГР. Поскольку идет чередование монослоев Ga и As, то димеры мышьяка ориентированы одинаково на любой стадии роста и по всей поверхности. Данная ориентация приводит к возникновению на террасах поверхностной фазы  $(2 \times 4)$ , причем ячейки фазы всегда вытянуты вдоль ступеней. На рис.1.13в изображен верхний слой атомов мышьяка, которые объединяются в димеры и образуют поверхностную ячейку  $(2 \times 4)$ .

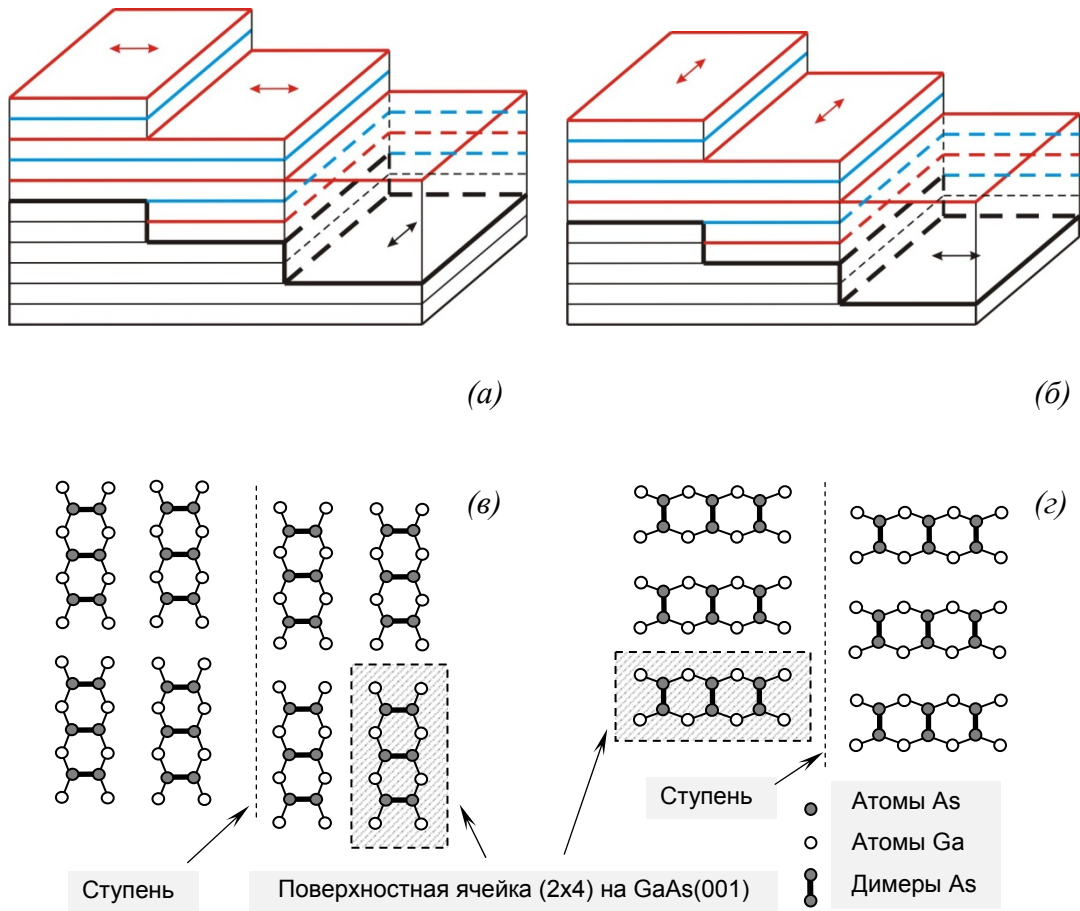


Рис. 1.13. Схематическое изображение пленок GaAs на отклоненной подложке Si (001), (a) и (e) – ступени на поверхности и ориентация димеров As, при зарождении пленки осаждением, поверхностная ячейка (2x4) расположена вдоль ступени, (б) и (z) – ступени на поверхности и ориентация димеров As, при зарождении пленки замещением, поверхностная ячейка (2x4) расположена перпендикулярно ступени. Показан только верхний слой атомов As и их ближайшие нижние соседние атомы Ga.

В случае зарождения первого монослоя As *замещением*, подложка Si после формирования двухатомных ступеней охлаждается до  $T_s=500^\circ\text{C}$  в условиях сверхвысокого вакуума. Затем на поверхность подается поток молекул мышьяка. Время экспозиции составляет 5 минут. В таких условиях верхний слой атомов Si замещается атомами As. Далее подложка охлаждается до  $250^\circ\text{C}$  и проводится процесс АСЭ GaAs. Присутствует поверхностная ячейка (2x4), длинная сторона которой располагается перпендикулярно ступеням (рис.1.13z).

Не зависимо от механизма зарождения первого монослоя GaAs методом АСЭ осаждают 20 монослоев [57] и продолжают рост пленки методом молекулярно-лучевой эпитаксии при температуре  $350^\circ\text{C}$ .

Ориентация поверхностной ячейки определяется методом ДБЭО. В случае осаждения полученная дифракционная картина показана на рис.1.14, поток электронов направлен параллельно ступеням (а), либо перпендикулярно (б). На рис.1.15. представлена дифракционная картина при зарождении первого монослоя пленки замещением.

### 1.2.3. Модель разворота кристаллической решетки пленки, предложенная Нагаи. Влияние дислокаций на поворот решетки пленки.

Нагаи (Nagai) впервые наблюдал разворот между кристаллическими решетками пленки и подложки в гетеросистеме InGaAs/GaAs с вицинальной (001) ориентацией границы раздела [59, 60]. Он предложил модель, в которой разворот является следствием наличия ступеней на поверхности подложки и несоответствия между ячейками пленки и подложки. В этой модели ось разворота относительно сингулярной ориентации и направление разворота решеток приняты параллельными. Нагаи получил формулу, связывающую угол разориентации границы раздела ( $\gamma$ ), угол разворота кристаллических решеток пленки и подложки ( $\psi$ ) и параметр несоответствия ( $f$ ):  $\text{tg}(2\psi)=\text{tg}(\gamma)\cdot f\cdot(1+v)/(1-v)$ . Последующие многочисленные исследования показали, что Модель Нагаи справедлива только для систем без дислокаций с малым несоответствием [61- 64].

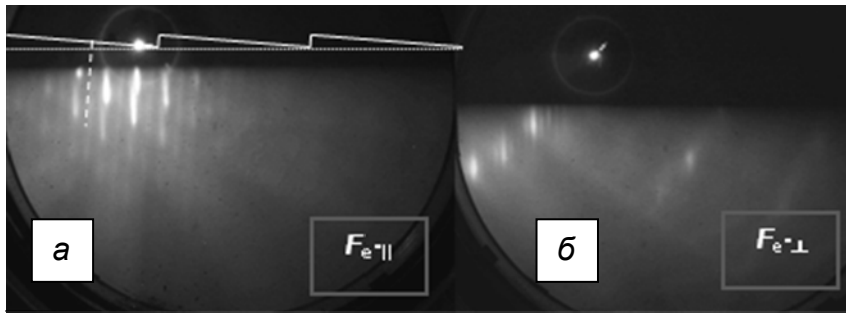


Рис. 1.14. Картина ДБЭО от пленки 25нм GaP/Si(001)  $6^\circ$  вокруг  $\langle 011 \rangle$ , зарождение первого монослоя осаждением. Поверхностная ячейка ( $2 \times 4$ ) ориентирована параллельно краям террас.

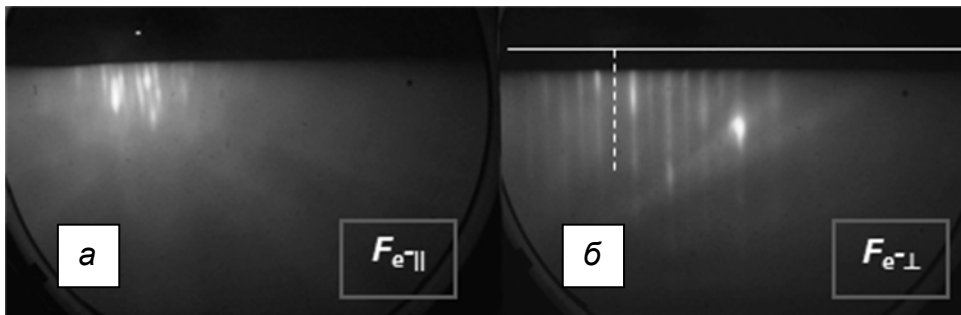


Рис. 1.15. Картина ДБЭО от пленки 25нм GaP/Si(001)  $6^\circ$  вокруг  $\langle 011 \rangle$ , зарождение первого монослоя замещением. Поверхностная ячейка ( $2 \times 4$ ) ориентирована перпендикулярно краям террас.

Исследование влияния дислокаций на разворот кристаллической решетки пленки выполнено в [65]. Изучался процесс релаксации и возникновение наклона атомных плоскостей в слоях GaP на отклоненных подложках Si(001). Согласно [65], при толщине пленки ниже критической, слои GaP являются псевдоморфными. Решетка пленки содержит триклинные искажения. Она развернута в направлении разориентации подложки, направление разворота совпадает с направлением поворота, исследованным Нагаи. При толщине больше критической для введения ДН, напряжения в слоях GaP релаксируют и вводятся шестидесятиградусные дислокации несоответствия в двух ортогональных направлениях  $\langle 110 \rangle$  в гетерогранице [65]. Релаксированные пленки с высокой плотностью дислокаций несоответствия имеют наклон в направлении, противоположном разориентации. Направление поворота объясняется энергетической выгодностью введения семейств  $60^\circ$ -ДН, у которых знак компоненты вектора Бюргерса обуславливает этот разворот решетки пленки [45]. В литературе влияние перехода от сингулярной ориентации (001) к вицинальной на обсуждаемый разворот изучено недостаточно. Для вицинальных пленок Ge на Si(001), разориентированных отклонением вокруг направления  $\langle 110 \rangle$ , показано, что вводятся два семейства ДН, которым соответствует минимальная критическая толщина (кривая 3;4 на рис. 1.9) [48, 49, 66]. Эти семейства имеют общую плоскость скольжения, и каждое из них поворачивает кристаллическую решетку пленки в направлении уменьшения отклонения от сингулярной ориентации (001).

### 1.3. Рентгеновские методы изучения структурного состояния эпитаксиальной пленки с вицинальной границей раздела

Существует широкий спектр рентген-дифрактометрических методик, которые ориентированы на анализ различных материалов: порошков, биологических объектов, органических пленок и т.д. [68-71]. Все они основаны на эффектах, возникающих при рассеянии рентгеновских лучей на периодических структурах, элементами которых могут быть как отдельные атомы, так и блоки молекул, или даже тонкие пленки с характерными размерами десятки нанометров. Ярким примером последнего варианта являются сверхрешетки [72, 73]. Ниже рассмотрены физические принципы дифракции рентгеновских лучей, а также основные способы их применения для исследования структурного состояния кристаллических эпитаксиальных гетеросистем.

#### 1.3.1. Рентгеновское излучение, рассеяние на кристаллической решетке

Рентгеновские лучи – это электромагнитное излучение, занимающее спектральную область между гамма- и ультрафиолетовым излучением в пределах длин волн от  $10^{-4}$  до  $10^3$  Å [74]. Характер взаимодействия рентгеновской волны с кристаллом определяется двумя существенными обстоятельствами: малой длиной волны, сопоставимой с межатомным расстоянием в твердом теле, и периодичностью кристаллической решетки.

Самым простым и удобным описанием дифракции в кристалле до последнего времени остается то, которое было получено Брэггом (см., например, [75]),

$$n\lambda = 2d \sin \theta,$$

где  $n$  – целое число, описывающее порядок дифракционного отражения;  $\lambda$  – длина волны;  $d$  – межплоскостное расстояние между отражающими (дифрагирующими) плоскостями;  $\theta$  – угол, который составляют падающее и дифрагированное излучения с семейством отражающих плоскостей (рис. 1.16).

Аналогичный результат получается в рамках модели Гюйгенса. Если рентгеновская волна взаимодействует с трехмерной атомной решеткой, то каждый атом становится источником вторичных сферических волн. Результатом сложения всех амплитуд рассеянных волн будет формирование сильных пучков вдоль выделенных направлений (рис.1.16) и почти полное отсутствие интенсивности вдоль остальных [76].

### 1.3.2. Дифрактометрия, кривая дифракционного отражения

Одним из эффективных методов исследования структурного состояния полупроводниковых эпитаксиальных систем является рентгеновская двухкристалльная дифрактометрия.

В дифрактометрии регистрируется кривая дифракционного отражения: зависимость интенсивности отраженного пучка от угла падения. Плосковолновая кривая качания – кривая, которую можно было бы измерить при помощи идеально параллельного монохроматического падающего пучка. Большинство теоретических расчетов базируются на этом идеализированном подходе. Любое реальное излучение имеет как спектральную ширину, так и угловую расходимость, и хорошее приближение к плосковолновой кривой качания находят при условии, что эффекты уширения из-за всех этих факторов малы в сравнении с шириной теоретической плосковолновой кривой качания.

Для рентгеновских лучей область отражения имеет величину порядка нескольких угловых секунд, и она зависит от длины волны, угла залегания отражающих плоскостей и структурного фактора, который, в свою очередь, зависит от типа атомов и их взаимного расположения. Структурный фактор определяет интенсивность отражения от конкретного семейства отражающих плоскостей. Рентгеновскими лучами можно исследовать материалы, проникая в них на миллиметры, иногда сантиметры, или, используя методы скользящего падения, можно ограничить глубину проникновения до нанометров, чтобы сделать эти методы поверхностно-чувствительными.

На рис.1.17 показаны основные узлы дифрактометра высокого разрешения. Коллиматор определяет угловую и спектральную расходимости пучка путем комбинации



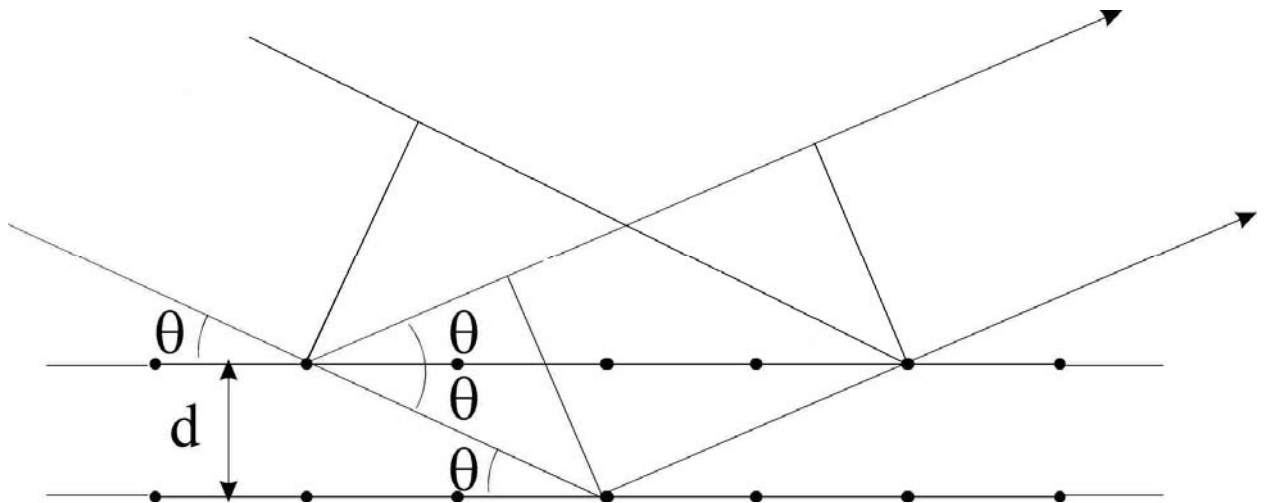


Рис.1.16 Схема дифракции рентгеновского излучения на плоскостях кристаллической решетки.

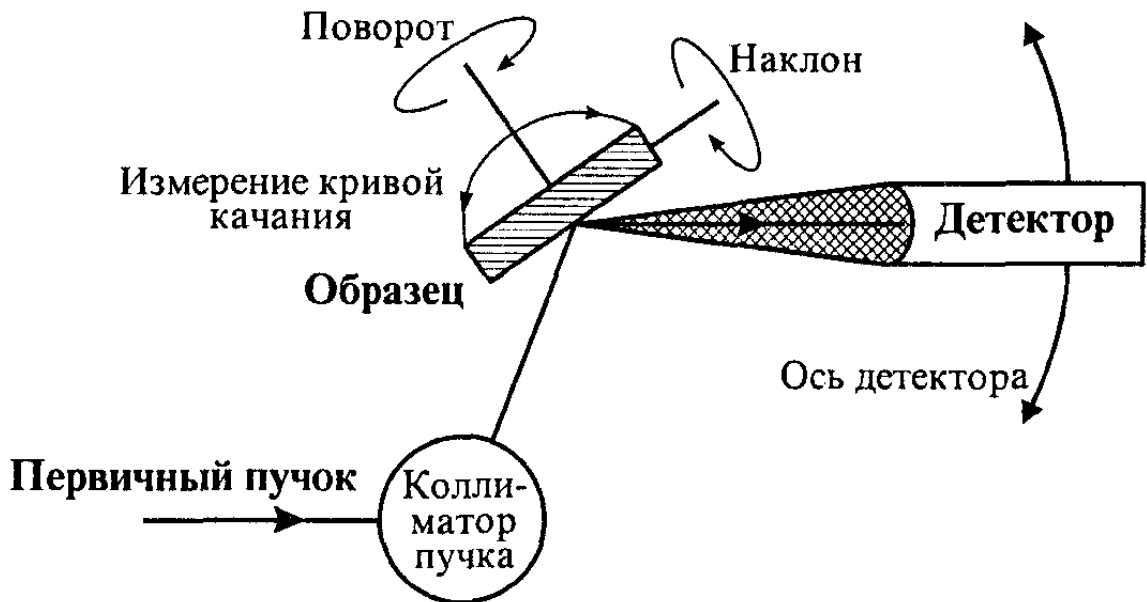


Рис. 1.17. Схема высокоразрешающего двухосевого дифрактометра.

дифрагирующих элементов и угловых апертур. Апертуры могут задавать также пространственную геометрию пучка. Отраженный пучок попадает в детектор, который собирает рассеянные образцом рентгеновские лучи в пределах своей угловой апертуры. Ось поворота (брэгговская ось) для записи кривой дифракционного отражения образца перпендикулярна плоскости рисунка и находится в точке падения пучка на образец. Образец поворачивается вокруг брэгговской оси, и с помощью детектора фиксируется интенсивность отраженного пучка.

Простейший коллиматор — это совершенный кристалл того же типа, что и образец, установленный в отражающее положение для той же системы плоскостей и отклоняющий дифрагированный пучок в другую сторону, по сравнению с образцом. Такая схема называется  $(+n, -n)$  и дает превосходные и легко интерпретируемые результаты. Однако есть много способов изменить схему, чтобы, к примеру, повысить чувствительность к деформации или усилить дифракционный вклад тонких поверхностных слоев [69]. Вообще существуют разные виды коллиматоров-монокроматоров: одиночный кристалл, коллиматор с прорезным каналом, ассиметричный коллиматор с прорезным каналом, коллиматор дю Монда и другие.

### 1.3.3. Методика анализа триклинных искажений

Традиционно деформационное состояние пленки, выращенной на сингулярной границе раздела, описывается в рамках тетрагональной модели искажений [74] - двумя нормальными компонентами рентгеновских деформаций  $\epsilon_{\perp}$  и  $\epsilon_{\parallel}$  (перпендикулярно и параллельно границе раздела, соответственно). Чаще всего процесс релаксации на сингулярной границе раздела протекает изотропно, поэтому для характеристики гетеросистемы достаточно двух компонент деформации, которые рассчитываются на основе двух кривых дифракционного отражения (рис.1.18), записанных от одного семейства отражающих плоскостей.

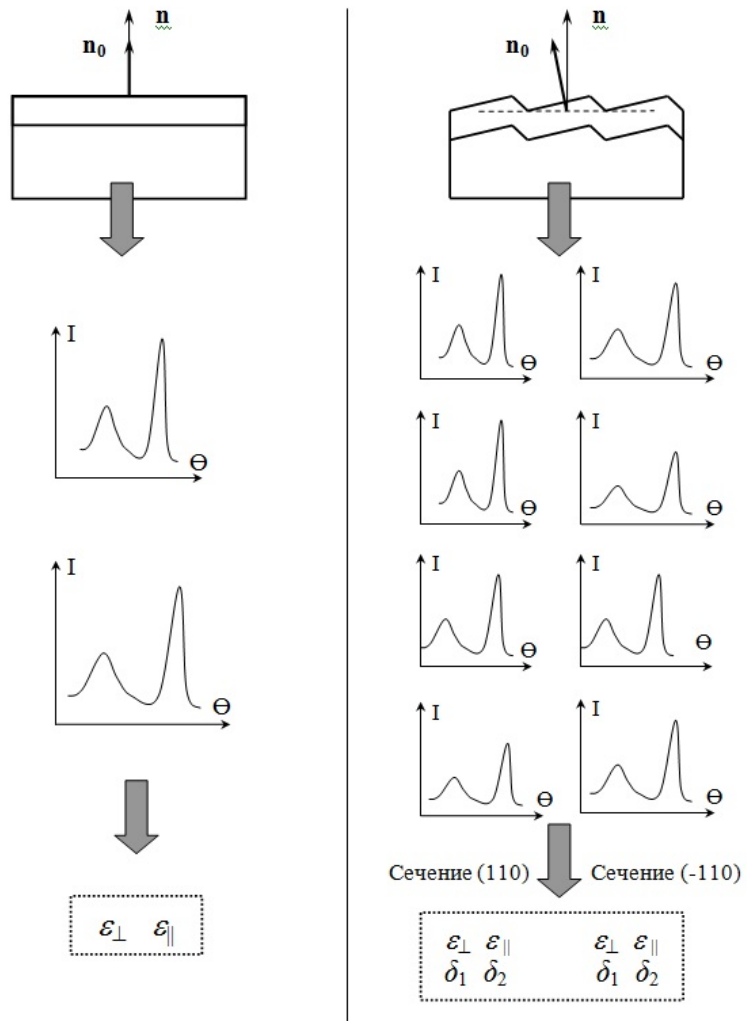


Рис.1.18. Дифракционные измерения состояния пленки на сингулярной границе раздела (а) и вицинальной (б).  $\mathbf{n}$  – нормаль к поверхности,  $\mathbf{n}_0$  – сингулярное направление.

В свою очередь, когда пленка выращивается на вицинальной границе раздела, ее кристаллическая решетка становится в общем случае триклинной и для того, чтобы описать ее деформационное состояние, двух компонент деформации становится недостаточно. В нашей группе была разработана дифрактометрическая методика характеристики деформационного состояния эпитаксиальных гетеросистем на вицинальных подложках [77]. Методика построена на модели искажений пленки "в плоскости", т.е. деформации пленки рассматриваются независимо в двух взаимно перпендикулярных сечениях. Эти сечения показаны на рисунке 1.19: одно сечение перпендикулярно ступеням и террасам и лежит в плоскости (110), другое – параллельно и соответствует плоскости (-110).

Схематичное изображение одного из сечений показано на рис. 1.20. На нем сопоставлены два выделенных объема – не искаженный в подложке (прямоугольник) и эквивалентный ему искаженный в пленке (параллелограмм). В дополнение к существующим в тетрагональной модели рентгеновским деформациям решетки пленки  $\varepsilon_{\perp}$  и  $\varepsilon_{\parallel}$ , для описания сдвиговых деформаций вводятся два угла ( $\delta_{zx}$ ,  $\delta_{xz}$ ). Угол  $\delta_{zx}$  характеризует сдвиг, направленный перпендикулярно границе раздела, а угол  $\delta_{xz}$  – сдвиг, параллельный этой границе. Для вычисления  $\varepsilon_{\perp}$ ,  $\varepsilon_{\parallel}$ ,  $\delta_{zx}$ ,  $\delta_{xz}$  в каждом сечении записываются четыре кривые в асимметричных рефлексах. Межпиковые расстояния, измеренные на этих кривых, служат входными данными для системы уравнений, описывающие деформационное состояние пленки. Система решается относительно  $\varepsilon_{\perp}$ ,  $\varepsilon_{\parallel}$ ,  $\delta_{zx}$ ,  $\delta_{xz}$ .

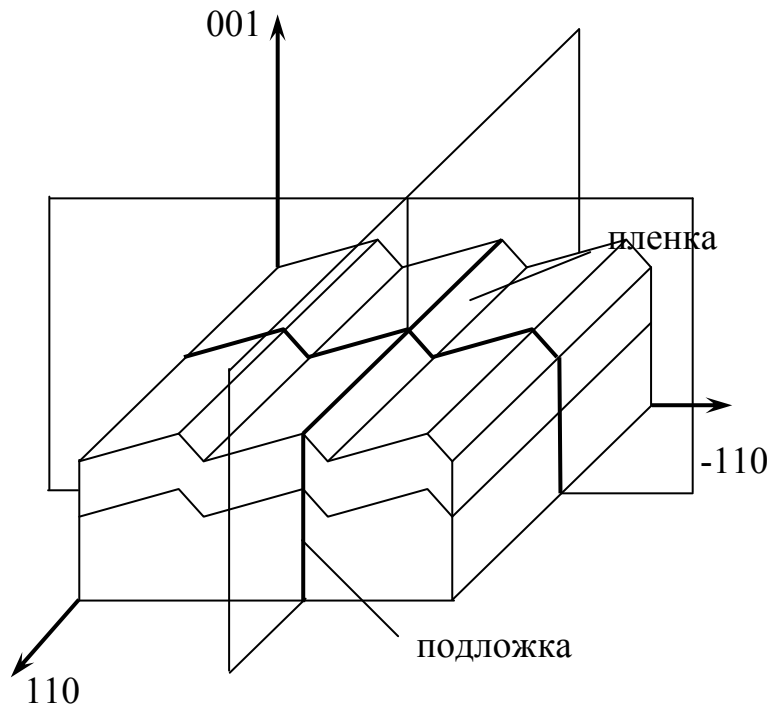


Рис.1.19. Изображение сечений перпендикулярных поверхности образца с  
вицинальной границей раздела.

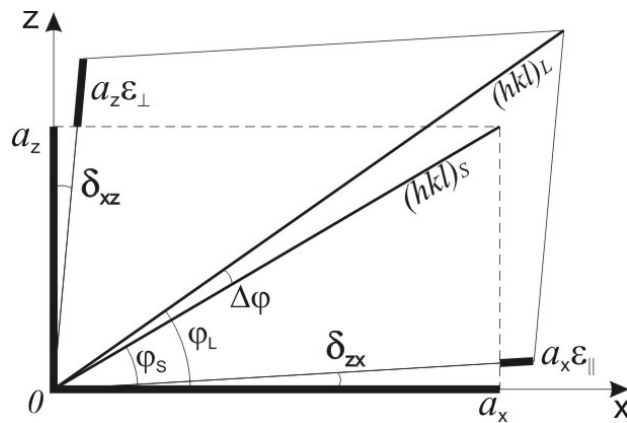


Рис.1.20. Схема деформаций кристаллической решетки пленки для одного из  
сечений на вицинальной границе раздела.

В работе [77] приведена табл.1.2 с экспериментальными и расчетными, полученными для образца  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  (1 1 13). Запись кривых дифракционного отражения (КДО) проводилась на двухкристальном рентгеновском дифрактометре с использованием ассиметричных рефлексов (115) и (224). Первая верхняя половина таблицы получена в сечении поперек ступеней, вторая половина – вдоль ступеней границы раздела. Сдвиговая деформация и поворот кристаллической решетки пленки вычислялись, как  $\varepsilon_{ij}=(\delta_{xz} + \delta_{zx})/2$  и  $\psi=(\delta_{xz} - \delta_{zx})/2$ , соответственно. В таблице исходными параметрами для вычисления  $\varepsilon_{ij}$  и  $\psi$  являются  $W_A$  и  $W_B$  – расстояния между пиками пленки и подложки на КДО, определенные, соответственно, в режиме скользящего падения и скользящего отражения, а также Миллеровские индексы отражающей плоскости и ее угол залегания. Кроме  $\varepsilon_{ij}$  и  $\psi$  результатами вычисления являются также  $x$  – состав эпитаксиальной пленки и  $\rho$  - степень ее пластической релаксации. Видно, что разброс всех вычисленных по предлагаемой авторами [77] модели параметров меньше, чем по тетрагональной модели. Значения  $\rho$ , определенные для азимута  $(0;180^\circ)$  заметно отличаются от значений, определенных для азимута  $(105;255^\circ)$ . Это свидетельствует об анизотропии пластической релаксации в направлении перпендикулярном ступеням и в параллельном направлении. Данный эффект исследуется в главе 4 диссертации.

Таблица 1.2. Экспериментальные и расчетные данные для образца  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$  (1 1 13),  
разворот от (0 0 1) на  $6,2^\circ$  вокруг  $[-1\ 1\ 0]$ .

				Тетрагональная модель		Предлагаемая модель			
Рефлекс	Азимут	$W_A$ угл.сек.	$W_B$ угл.сек.	$x$	$\rho, \%$	$x$	$\rho, \%$	$\psi$ угл.сек.	$\varepsilon_{xz}$ угл.сек.
115	0	3486	1601	0.009	-4205	0.199	47.6	660	22
-1-15	180	2254	2498	0.290	116.9				
224	0	3262	593	0.162	-26.4	0.202	48.3	618	67
-2-24	180	1905	1569	0.200	87.1				
115	0	3486	1601	0.009	-4205	0.201	48.6	607	78
-2-24	180	1905	1569	0.200	87.1				
224	0	3262	593	0.162	-26.4	0.199	48.2	651	25
-1-15	180	2254	2498	0.290	116.9				
-115	110	2726	2195	0.188	43.9	0.227	73.9	7	7
1-15	250	2709	2230	0.196	51.5				
-224	100	2529	886	0.162	22	0.187	40.2	12	6
2-24	260	2497	896	0.161	23.8				
-115	110	2726	2195	0.188	43.9	0.198	51.3	74	88
2-24	260	2497	896	0.161	23.8				
-224	100	2529	886	0.162	22	0.200	51.9	98	88
1-15	250	2709	2230	0.196	51.5				

### 1.3.4. Трехосевая дифрактометрия

В двухосевой схеме рентгеновского дифрактометра используют открытый детектор, который интегрирует рассеяние от образца в диапазоне углов, определяемых апертурой. Эта схема отличается неплохим угловым разрешением и скоростью съемки, однако она принципиально не позволяет разделить дилатационные и ориентационные эффекты в пределах одного эксперимента.

Трехосевая дифрактометрия подразумевает наличие анализатора, который выделяет отраженную от образца интенсивность в пределах своего углового разрешения [76]. Анализатор располагается между образцом и детектором, в плоскости отражения, создаваемой монохроматором и образцом. В качестве анализатора может использоваться кристалл с однократным отражением, кристалл с прорезным каналом (многократным отражением) или щель. Сканирование анализатором осуществляется независимо от углового положения образца, поэтому есть возможность построения карты распределения интенсивности по направлениям излучения, рассеянного образцом. Наличие анализатора позволяет различать ориентационные и дилатационные искажения [68].

На рис.1.21 показана схема трехосевого дифракционного эксперимента. Три оси предназначены для управления коллиматором пучка, образцом и анализатором, соответственно.

Трехосевой эксперимент дает возможность разделить в общей картине рассеяния ориентационную и дилатационную составляющие. Согласно закону Брэгга, угол рассеяния зависит от межплоскостного расстояния  $d$ . Если поворачивается только образец (анализатор неподвижен), то области с разной ориентацией, но одинаковым межплоскостным расстоянием, будут последовательно удовлетворять дифракционному условию. Кривая распределения интенсивности будет соответствовать распределению разориентированных областей в кристалле. От областей кристалла, имеющих межплоскостное расстояние отличное от  $d$ , отраженная интенсивность не пройдет через анализатор, и соответственно, не даст вклад в кривую дифракционного отражения.



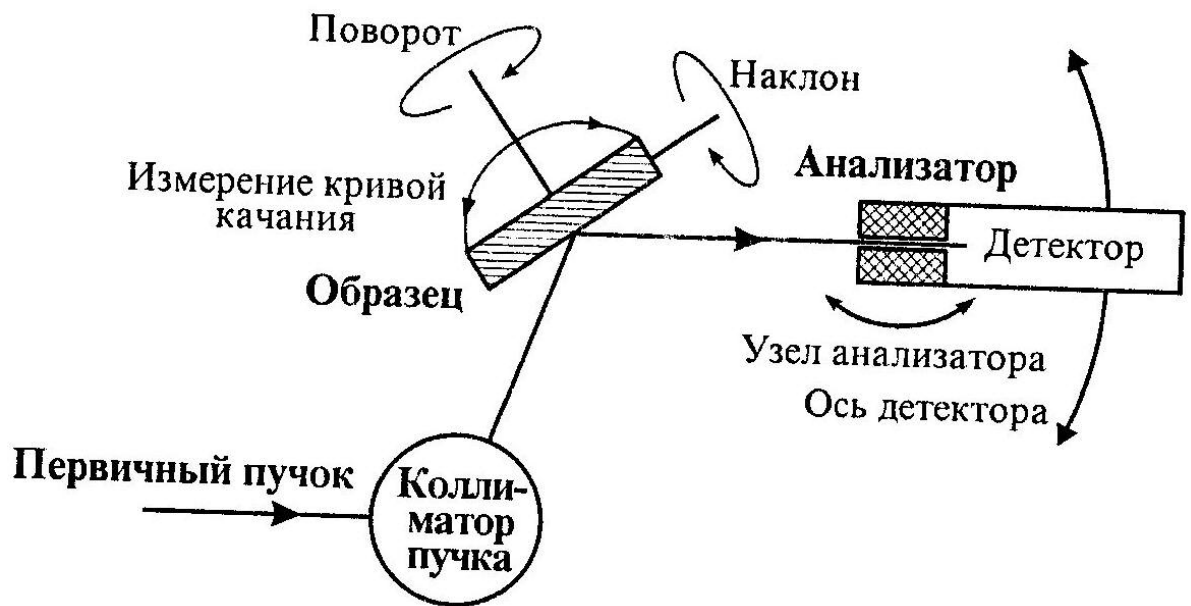


Рис.1.21. Схема высокоразрешающего трехосевого дифрактометра.

Возможен случай, когда сканирование анализатором осуществляется со скоростью, вдвое большей, чем сканирование образцом ( $\theta$ – $2\theta$ -сканирование) [78]. Область образца с параметром решетки  $d$  устанавливается в отражающее положение (угол Брэгга), а анализатор устанавливается в положение двойного угла Брэгга. При связанном  $\theta$ – $2\theta$ -сканировании, ни одна из разориентированных областей образца, которая также имеет параметр решетки  $d$ , не даст вклад в рассеяние, которое попадает в детектор. Однако область образца, имеющая параметр решетки  $d'$ , может попасть в положение, при котором выполняется закон Брэгга, и отраженное излучение достигнет детектора. Таким образом, при  $\theta$ – $2\theta$ -сканировании в кривую дифракционного отражения не дают вклад разориентированные области, зато видно распределение по параметру решетки.

### 1.3.5. Обратное пространство

Для перехода к картам распределения интенсивности необходимо ввести понятие обратной решетки, т.к. пики на картах соответствуют узлам обратной решетки. Обратная решетка — точечная трехмерная решетка в абстрактном обратном пространстве, где расстояния имеют размерность обратной длины. Понятие обратной решетки удобно для описания дифракции рентгеновских лучей, нейтронов и электронов на кристалле. Обратная решетка (обратное пространство, импульсное пространство) является Фурье-образом прямой кристаллической решетки (прямого пространства) [79]. Свойства обратного пространства:

1. Как и прямое пространство, обратное пространство трехмерно.
2. Все направления прямого пространства сохраняются в обратном пространстве.
3. Размерность обратного пространства – обратна длине в прямом пространстве.
4. Выбранное нами начало координат в обратном пространстве может совпадать или отличаться от начала координат в прямом пространстве, в зависимости от задачи.

Так как мы имеем дело с упругим рассеянием, то величины  $k_0$  и  $k_n$  всегда равны  $1/\lambda$ , где  $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения. Поэтому сфера радиусом  $1/\lambda$  определяет все возможные направления векторов падающего и рассеянного пучков. Вектор падающего пучка направлен из центра сферы Эвальда к началу координат, вектор рассеянного пучка –

из центра в любую точку на поверхности сферы, а вектор рассеяния – из начала координат в конец вектора рассеянного пучка. На рисунке 1.22 вектор рассеяния  $Q$  построен так, что он не совпадает с вектором рассеяния  $h$ , который удовлетворяет точному условию Брэгга. Вектор отклонения  $q$ , начало которого совпадает с концом вектора обратной решетки  $h$ , имеет две составляющие:  $q_y$  – горизонтальную составляющую, направленную положительным концом вправо, и  $q_z$  – вертикальную составляющую, направленную положительным концом вверх. Для симметричного отражения эти составляющие связаны с отклонениями образца ( $\Delta\psi$ ) и анализатора ( $\Delta\phi$ ) от их нулевых положений, которые задаются кинематическим углом Брэгга следующими выражениями:

$$q_z = \Delta\phi \cos \theta_B / \lambda,$$

$$q_y = (2\Delta\psi - \Delta\phi) \sin \theta_B / \lambda.$$

Таким образом, сканирование образцом (вдоль  $\Delta\psi$ ) влияет только на  $q_y$  и обеспечивает сканирование слева направо в обратном пространстве. Сканирование анализатора (щели) влияет как на  $q_y$  так и на  $q_z$  и фактически скользит вдоль сферы Эвальда. Сканирование вдоль  $q_z$  осуществляется при выполнении условия

$$(2\Delta\psi - \Delta\phi) = 0.$$

Сканирование анализатором со скоростью вдвое большей скорости образца, называют  $\theta$ - $2\theta$ -сканированием.

Общий случай асимметричного отражения несколько сложнее [68, 78, 71]. При допущении, что  $\Delta\psi$  и  $\Delta\phi$  малы, получаются выражения для декартовых составляющих вектора  $q$ :

$$q_y = 1/\lambda [\sin\psi \Delta\psi - \sin(\phi - \psi)(\Delta\phi - \Delta\psi)],$$

$$q_z = 1/\lambda [\cos\psi \Delta\psi + \cos(\phi - \psi)(\Delta\phi - \Delta\psi)],$$

где  $\psi$  и  $\Delta\psi$  - нулевое положение образца и его отклонение,  $\phi$  и  $\Delta\phi$  - нулевое положение анализатора и его отклонение, соответственно. Данные выражения подходят как для асимметричного, так и для симметричного отражения.

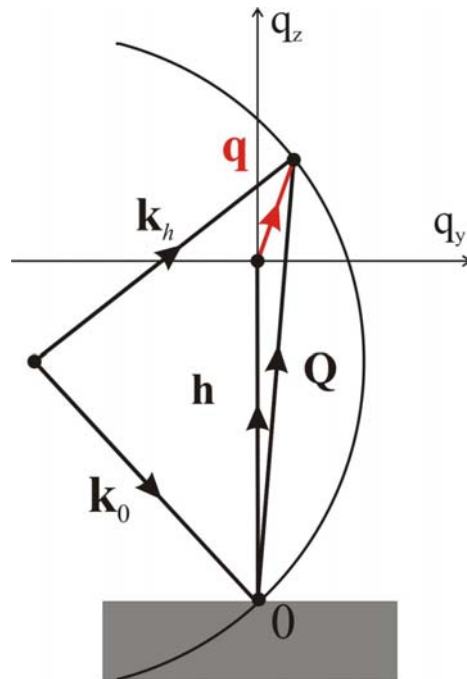


Рис.1.22. Построение в обратном пространстве.

### 1.3.6. Карты рассеяния в обратном пространстве

Карту рассеяния в обратном пространстве от образца можно получить путем регистрации интенсивности от набора угловых положений образца и анализатора, которые должны сочетаться таким образом, чтобы образовать регулярную сетку в обратном пространстве. Контурная карта схематически показана на рис.1.23, взята из работы Ииды и Кори [80]. Центральной точкой является узел обратной решетки, соответствующий пакету отражающих плоскостей, например 004.

Кристалл высокого качества формирует картину динамического рассеяния, которая вытянута вдоль вертикального направления  $q_z$  и имеет очень малую ширину в направлении  $q_y$ . Картина динамической дифракции смещена от узла обратной решетки из-за влияния преломления. Диффузное рассеяние, представляющее собой слабоинтенсивную широкую область сферической формы, не сдвинуто, и ее центр совпадает с узлом обратной решетки. Ограниченное угловое разрешение кристаллов коллиматора и анализатора приводит к возникновению на карте (рис.1.23) вытянутых областей. Эти области связаны с присутствием хвостов на кривых качания от этих кристаллов. Сквозь хвосты функции анализатора проходит небольшое количество интенсивности от главного пика. Поэтому, в дополнение к рабочему сигналу от исследуемой области обратного пространства, и появляются указанные вытянутые области. Их направления, указывающие на главный пик, определяются по слабым поворотам вектора  $k_0$  вокруг начала координат и вектора  $k_h$  вокруг центра сферы Эвальда.

Трехосевая дифрактометрия может дать нам гораздо больше сведений об исследуемом объекте, чем стандартная двухкристальная кривая качания. Стандартная кривая представляет собой горизонтальное сканирование через обратное пространство, интегрирующее всю интенсивность вдоль сферы Эвальда. При таком сканировании контроль над  $\Delta\phi$  отсутствует.

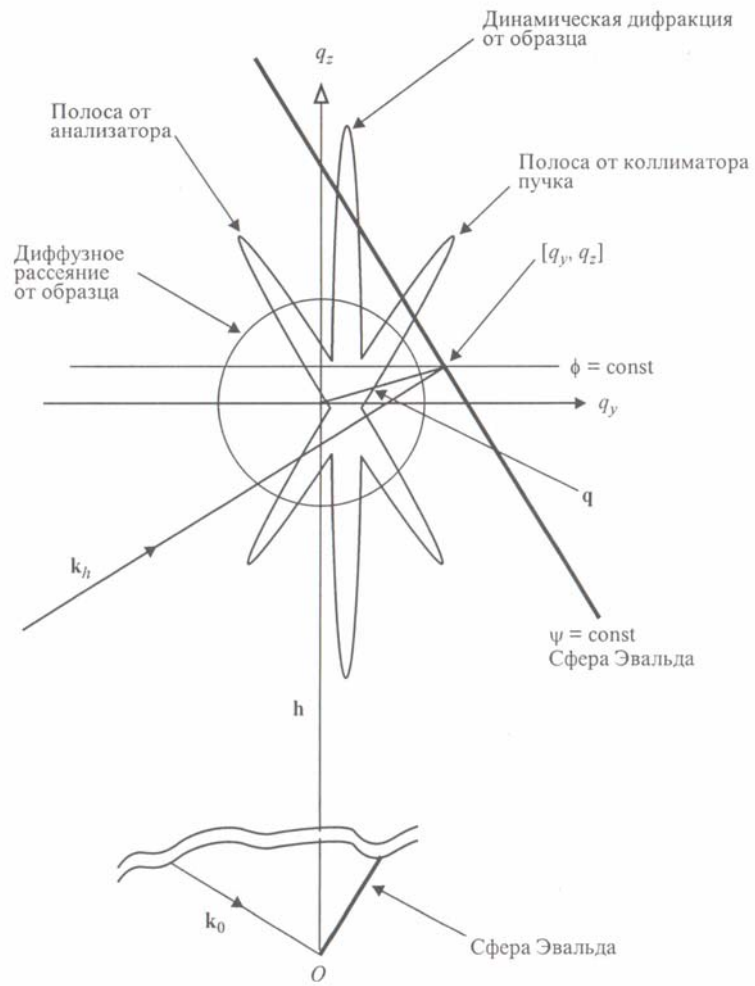


Рис.1.23. Карта рассеяния в обратном пространстве [80].

## Формулировка задач диссертации

**Цель диссертационной работы.** Изучение напряженного состояния и дислокационной структуры пластически релаксированных эпитаксиальных пленок с кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита на вицинальных подложках кремния. Установление новых зависимостей, характеризующих процесс снятия напряжений несоответствия.

**Для достижения цели решались следующие задачи.**

1. Накопление систематической информации о структурном состоянии пленок  $A^{III}B^V$  на отклоненных подложках кремния в зависимости от способа зарождения первых монослоев.
2. Установление основных характеристик структурного состояния кристаллических решеток пленок  $A^{III}B^V$ , зарожденных разными способами.
3. Экспериментальное определение величины разворота кристаллической решетки пленки  $\psi$  относительно решетки подложки и установление природы явлений, обуславливающих этот разворот.
4. Расчет равновесных расстояний между ДН для введенных в границу раздела дислокационных семейств и определение соответствующих им углов разворота решеток.
5. Установление сочетаний винтовых составляющих неортогональных дислокационных семейств, при которых имеет место компенсация дальнедействующих сдвиговых напряжений.
6. Расчет предельной накопленной энергии гетеросистемы для различных комбинаций дислокационных семейств, участвующих в процессе релаксации.
7. Установление распределения напряжений в эпитаксиальной пленке и определение расстояния от границы раздела, на котором дальнедействующие напряжения, создаваемые сеткой дислокаций несоответствия, полностью компенсируют поле напряжений несоответствия.

## ГЛАВА 2. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА GaAs и GaP НА КРЕМНИИ В ОБРАТНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Рентгеновские исследования проводились на двухкристальном рентгеновском дифрактометре ДСО-1Т с использованием излучения  $\text{CuK}_{\alpha 1}$ , а также кристалло-монохроматоров Ge(004) и Si(224). Для анализа деформационного состояния пленок GaAs с применением модели триклинных искажений [77] регистрировались серии кривых дифракционного отражения (КДО). В основном использовалась геометрия ассиметричного рефлекса (115), а для предварительной оценки качества эпитаксиальных пленок – симметричный рефлекс (004). Данная методика анализа является достаточно надежной и отработанной в нашем коллективе, но у нее есть несколько ограничений. Одно из ограничений – это невозможность анализа тонких слоев в силу того, что не на всех КДО записывается пик пленки. Поэтому была разработана и реализована схема регистрации карт распределения отраженного излучения в обратном пространстве. Укажем также, что карты обратного пространства являются инструментом наглядного наблюдения дилатационных и ориентационных искажений кристаллических решеток пленок.

Реализация трехосевой схемы предполагает использование анализатора. Выбор типа анализатора обусловлен, прежде всего, требуемой угловой апертурой. Апертура анализатора, с одной стороны, должна обеспечивать достаточное угловое разрешение для регистрации всех деталей кривой. С другой стороны, выбор предельно высокоразрешающего анализатора влечет за собой неоправданное увеличение времени накопления сигнала. Минимальное угловое расстояние между пиками Si, GaP и GaAs на кривой дифракционного отражения порядка сотен-тысяч угловых секунд. Следовательно, вполне возможно использовать в качестве анализатора щель шириной 0.05-0.1 мм, расположив ее на расстоянии 200-300 мм от точки падения пучка на образец. В эксперименте перед детектором устанавливалась щель с изменяемой геометрией. Карты записывались с угловой апертурой щели от 70 до 250 угл.с.



В ходе диссертационной работы сняты карты распределения интенсивности в обратном пространстве вокруг узла обратной решетки (004) подложки Si. На рисунке 2.1 представлены карты для образцов St953 и St958; апертура анализатора 100 угл.с. Съемки производились в сечении поперек ступеням, расположенным в границе раздела (ГР) вицинальной плоскости (001). Плоскость дифракции перпендикулярна поверхности.

На картах рассеяния видны пики (темные области) от подложки и пленки. В области начала координат на всех картах находится узкий и интенсивный пик подложки. Пик от слоя GaAs расположен в нижней части карты и имеет эллиптическую форму. Смещение пика GaAs вдоль оси  $q_y$  от положения пика подложки означает разориентацию этого слоя относительно подложки. Различное положение пиков слоя и подложки вдоль оси  $q_z$  свидетельствует о различных параметрах кристаллических решеток. Уширение пика GaAs по горизонтали показывает, что в большей мере присутствует разброс по ориентациям в пленке, чем по деформациям (по параметру решетки). На картах вблизи пика подложки видна полоса, направленная вправо вниз. Эта вытянутая область возникает из-за достаточно большого (по сравнению с шириной пика подложки, которая порядка 40 угл.с.) углового диапазона пропускания анализатора – использовалась щель с относительно малой разрешающей способностью (100 угл.с).

На карте (рис.2.1а) пик пленки отклонен вправо от пика подложки, на карте (рис.2.1б) – влево. Причиной являются развороты решетки пленок в разные стороны для образцов St953 и St958. В образце St953, зарождение пленки которого начиналось с осаждения As, кристаллическая решетка пленки поворачивается так, что ее отклонение от сингулярной ориентации уменьшается (направление поворота обозначим « $\leftarrow$ »). В образце St958, пленка зарождалась путем замещения [55, 57], решетка пленки поворачивается так, что ее отклонение от сингулярной – увеличивается (обозначим « $\rightarrow$ »). Подробно структурное состояние кристаллических решеток пленок (и, в частности, повороты) будут обсуждаться в главе 3.

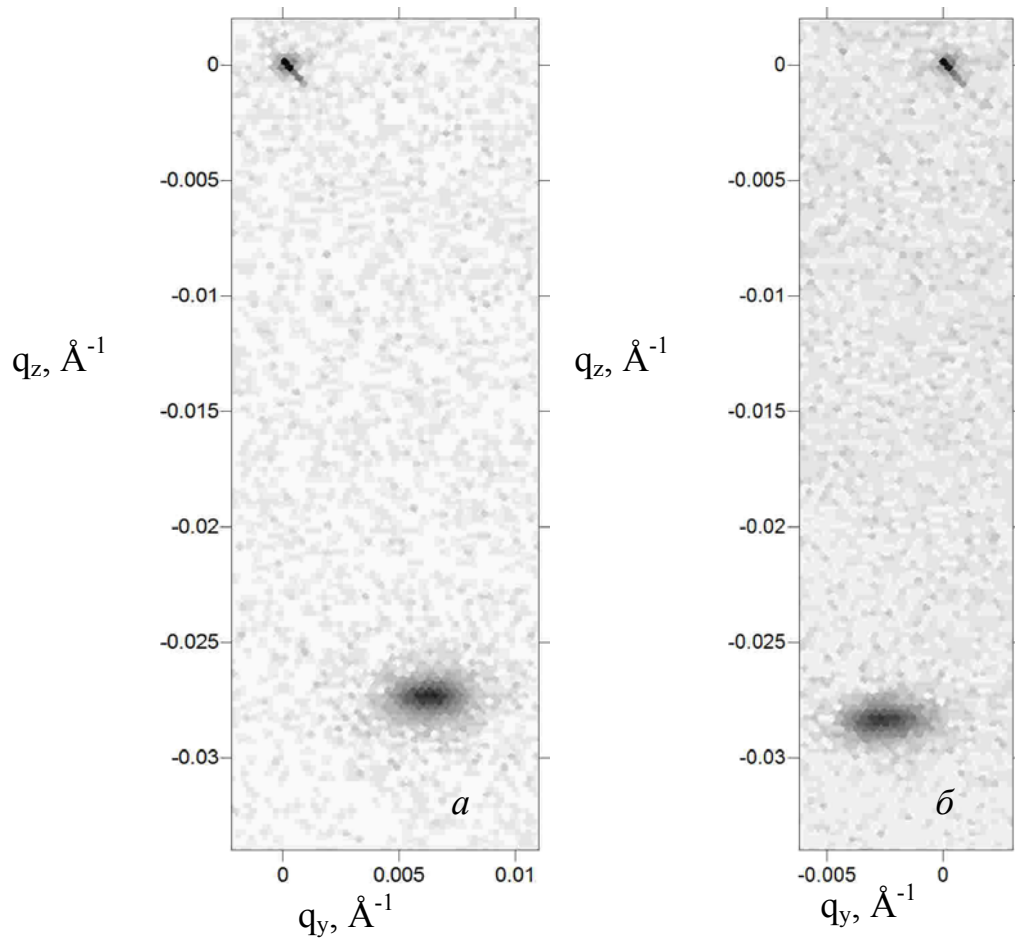


Рис. 2.1. Карты распределения интенсивности вблизи узла обратной решетки 004 для двух вариантов структурного состояния эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001) в зависимости от способа формирования первого монослоя: осаждение As на Si (*a*)- образец St953 и замещение верхнего монослоя Si атомами As (*б*) - St958.

На картах обратного пространства наглядно видны различия в параметрах кристаллических решеток и их взаимной ориентации. Однако непосредственно измерить угол поворота решетки пленки нельзя, т.к. граница раздела отклонена от сингулярного направления, и ось  $q_z$  не перпендикулярна (001). Другими словами, положение пика пленки при нулевом развороте не будет соответствовать нулевому значению  $q_y$ . Поэтому для непосредственного представления величины разворота кристаллической решетки пленки были построены карты  $\omega/2\theta$  (рис.2.2). Ось  $\Delta\omega$  соответствует сканированию образца (т.е. изменению его углового положения) при неподвижном детекторе ( $\omega$  – сканирование); а ось  $\Delta\theta$  соответствует  $\theta$  – сканированию, когда перемещается детектор со щелью-анализатором. По осям отложены относительные угловые координаты положений образца и анализатора, в начале координат находится пик подложки. Черной пунктирной линией показано угловое положение пика подложки, сплошной – положение пика пленки GaAs. По этим картам в угловых координатах легко оценить угол разворота кристаллической решетки пленки: St953 – 1000 угл.с. в сторону уменьшения отклонения от сингулярной ориентации, St958 – 1600 угл.с. в сторону увеличения отклонения от сингулярной ориентации.

На всех картах видно, что угловое положение пика пленки по оси  $\Delta\theta$  равно приблизительно -3град. Анализ показывает, что это соответствует степени релаксации  $\rho$  пленки GaAs, близкой к 100%. Точность измерения положения пика на карте равна 0.05 град, что приводит к разбросу значений  $\rho$  на 11% при расчете степени релаксации. Дальнейшие исследования, описанные в главе 3, дополнительно подтвердили, что степень релаксации для этих образцов равна ~100%.

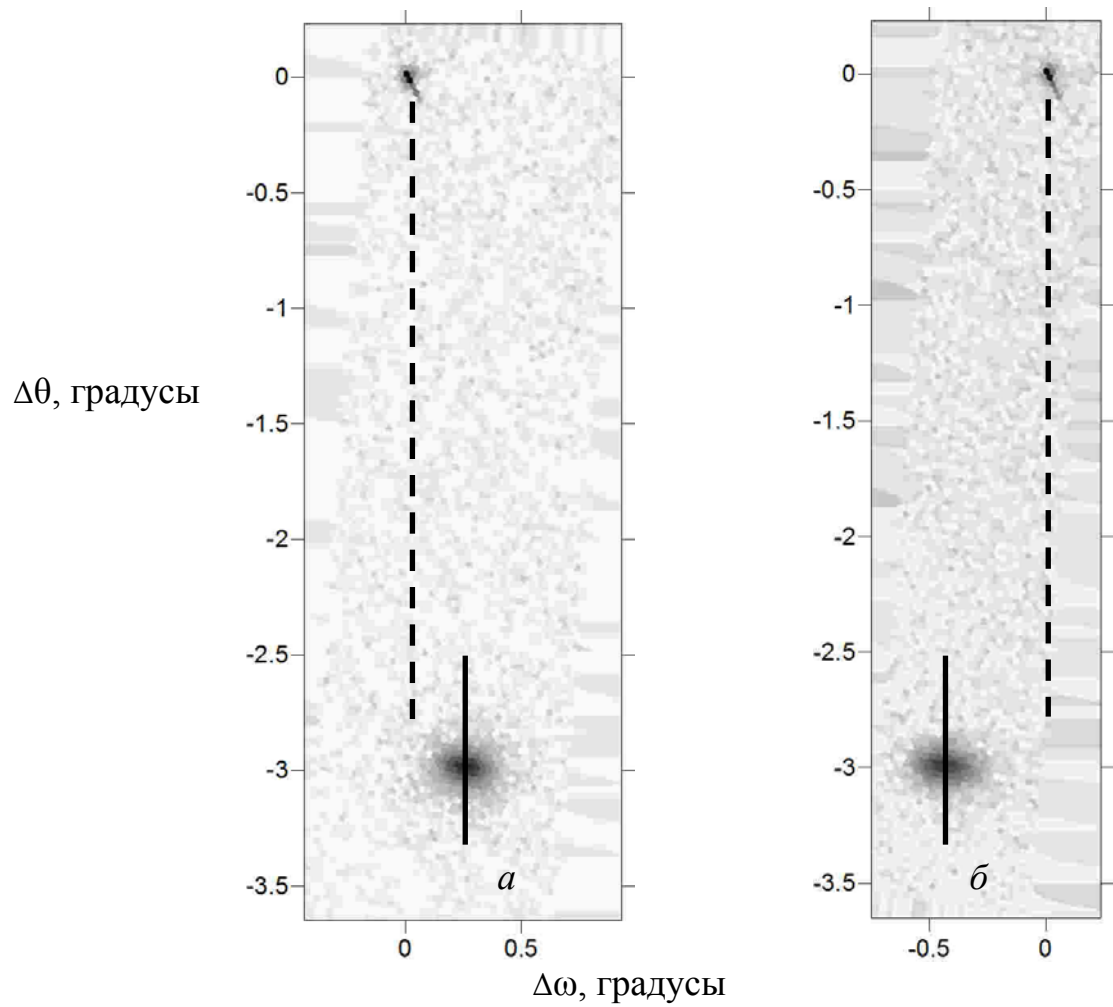


Рис. 2.2. Карты  $\omega/2\theta$  для двух вариантов структурного состояния эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001) в зависимости от способа формирования первого монослоя: осаждение As на Si (*a*)- образец St953 и замещение верхнего монослоя Si атомами As (*б*) - St958.

В начале текущей главы обсуждалось преимущество использования метода картирования для образцов с тонкими слоями. Примером таких образцов являются структуры GaAs на Si(001) с прослойкой GaP. Карты обратного пространства, представленные на рис. 2.3, сняты от одного образца St830 в геометрии скользящего падения и в геометрии скользящего отражения. Они содержат по три пика: от подложки узкий пик в начале координат, ниже – слабоинтенсивный пик от прослойки GaP, и внизу – пик от пленки GaAs толщиной 1 мкм. Качественно карты этих образцов идентичны картам от вышеописанных образцов GaAs на Si(001), за исключением наличия дополнительного пика прослойки. Дифрагированное излучение на прослойке GaP имеет низкую интенсивность из-за малой толщины, которая равна 50 нм. Большая ширина пика объясняется неоднородностями ориентации и параметра решетки прослойки.

Чтобы наблюдать развороты кристаллических решеток, карты обратного пространства были построены в угловых координатах (рис.2.4). Поскольку пики от слоев GaAs и GaP находятся по разные стороны от пика подложки, значит, кристаллические решетки пленки и прослойки имеют развороты в разные стороны. Как показано в работе Такаги [65], псевдоморфная пленка GaP на отклоненной подложке кремния имеет разворот в одном направлении, а после релаксации – в противоположном. Поворот кристаллической решетки GaP, измеренный по карте (рис.2.4), составляет приблизительно  $-90$  угл.с., а поворот для решетки GaAs – приблизительно  $+80$  угл.с. Поскольку пленка GaAs полностью релаксирована, и на карте наблюдается поворот ее решетки «влево», то можно утверждать, что повернутая «вправо» прослойка GaP либо псевдоморфна, либо слабо релаксирована. Подтверждением того, что пленка псевдоморфна, являются данные из работы [65], в которой экспериментально установлено, что критическая толщина для введения дислокаций несоответствия в гетерограницу GaP/Si более 50 нм (примерно 70-80 нм). Поэтому в нашей гетеросистеме дислокации несоответствия должны находиться вблизи границы раздела GaP-GaAs. Дислокации в границу раздела (001) вводятся по наклонным плоскостям скольжения  $\{111\}$  с поверхности пленки, и, доходя до верхней границы раздела GaP-GaAs, дислокации останавливаются и формируют сетку ДН.

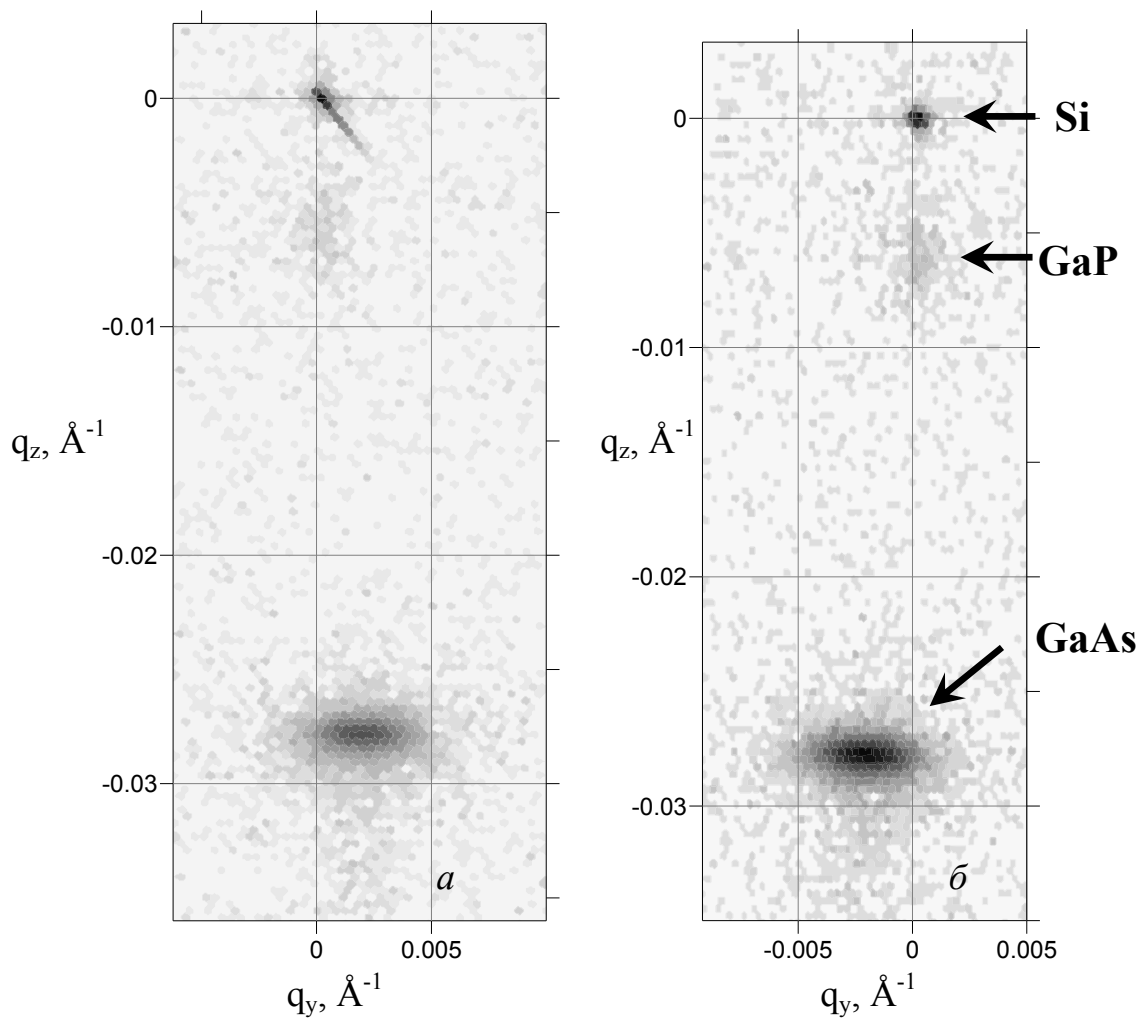


Рис. 2.3. Карты обратного пространства вокруг узла обратной решетки Si(004), снятые от образца St830 в геометрии скользящего падения пучка (а) и в геометрии скользящего отражения (б).

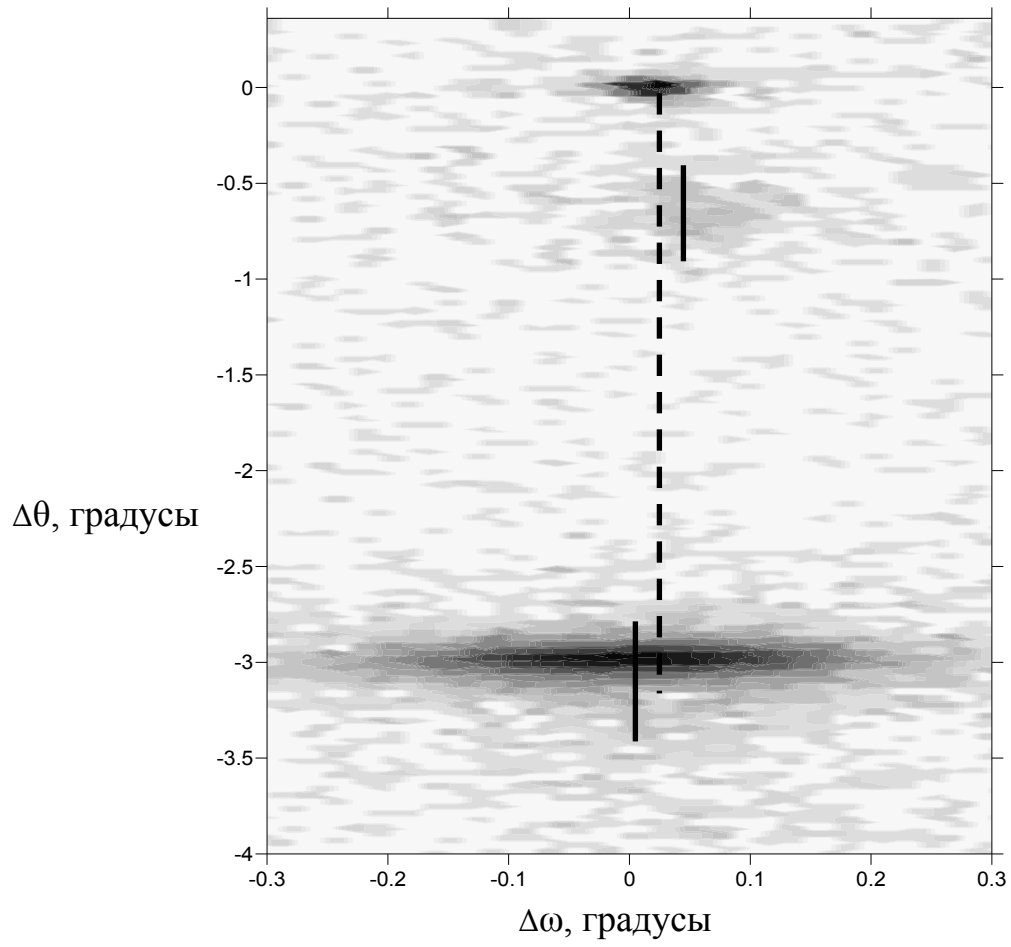


Рис. 2.4. Карта  $\omega/2\theta$  эпитаксиальной пленки GaAs/GaP/Si(001).

## Выводы по главе 2

1. На двухкристальном рентгеновском дифрактометре ДСО-1Т реализована трехосевая схема измерений. В качестве анализатора использована щель перед детектором с изменяемой угловой апертурой. Сканирование осуществляется перемещением детектора со щелью.

2. От образцов GaAs/Si и GaAs/ GaP/ Si зарегистрированы карты распределения интенсивности рентгеновских лучей в обратном пространстве вблизи узла обратной решетки (004). Получены также карты в угловых координатах  $\Delta\omega$  и  $\Delta\theta$ .

3. Для кристаллических решеток пленок GaAs, полученных разным способом зарождения первого монослоя, зарегистрирован разнонаправленный поворот относительно решетки подложки Si. Кристаллическая решетка пленки, зарождение которой начиналось путем осаждения As на Si, повернута в сторону уменьшения отклонения от сингулярного направления [001]. Кристаллическая решетка пленки, зарождение которой начиналось путем замещения монослоя Si на монослой As, повернута в сторону увеличения отклонения от сингулярного направления [001].

4. Для образцов GaAs на Si, содержащих промежуточный слой GaP, установлено, что кристаллические решетки GaP и GaAs повернуты в разные стороны относительно решетки подложки. Это свидетельствует о следующих фактах: (1) сетка ДН расположена в границе раздела GaP-GaAs; (2) прослойка GaP находится в псевдоморфном состоянии; (3) слой GaAs находится в релаксированном состоянии.



## ГЛАВА 3. ЗАВИСИМОСТЬ ПЛАСТИЧЕСКОЙ РЕЛАКСАЦИИ ПЛЕНКИ GaAs ОТ СПОСОБА ЗАРОЖДЕНИЯ ПЕРВОГО МОНОСЛОЯ НА ОТКЛОНЕННОЙ ПОДЛОЖКЕ Si(001)

В литературном обзоре показано, что использование вицинальных ГР (001) позволяет избежать формирования антифазных границ в пленке GaAs на Si (001) подложках. В настоящей главе представлены результаты исследования напряженного и структурного состояния пленок GaAs, полученных методами АСЭ и МЛЭ на вицинальных срезах подложек Si (001), отклоненных на 6 и на 4° вокруг направления  $\langle 110 \rangle$ . Эти вицинальные плоскости с использованием Миллеровских индексов записываются как (1 1 13) и (1 1 20), соответственно. Процесс роста in-situ контролировался методом дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО) и ex-situ – регистрацией КДО и построением карт обратного пространства. Использовались два варианта зарождения первого монослоя на вицинальных подложках Si(001): путем осаждения атомов мышьяка на поверхность кремния и путем замещения монослоя кремния монослоем мышьяка. Влияние этих вариантов зарождения на особенности строения карт обратного пространства рассмотрено в главе 2.

### 3.1. Развороты кристаллических решеток пленок GaAs в зависимости от способа зарождения первого монослоя

При взаимодействии вицинальной поверхности кремния с потоком молекул мышьяка на ней формируется упорядоченный эпитаксиальный слой димеризованных атомов мышьяка [53]. В зависимости от условий зарождения связь As-As в димерах оказывается расположенной либо параллельно ( $As_{||}$ ), либо перпендикулярно ( $As_{\perp}$ ) краям террас. При зарождении пленки путем осаждения атомов мышьяка на поверхность кремния связь As-As перпендикулярна ступеням ( $As_{\perp}$ ), а ячейка поверхностной структуры GaAs(2×4) ориентирована параллельно им (рис.3.1а). В случае зарождения пленки путем замещения

ячейка поверхностной структуры (2×4) ориентирована поперек, а димеры мышьяка, соответственно, вдоль ступеней (рис.3.1б).

На рисунке 3.2 представлена картина ДБЭО, которая получена от пленки GaAs толщиной 5 монослоев, сформированной на поверхности кремния со слоем атомов мышьяка, полученным путем замещения. Плоскость экрана перпендикулярна краям террас (т.е. поток электронов падает вдоль ступеней). Через  $\Phi$  обозначены площадка фasetки и перпендикулярное ей направление, вдоль которого вытянуты слабые тяжи (см. вставку к рисунку). Грань фasetки на поверхности растущей пленки наклонена на угол  $\sim 6^\circ$  от плоскости (1 1 13). Нами установлено, что она имеет Миллеровские индексы (2 2 13). В процессе дальнейшего роста пленки и релаксации напряжений несоответствия тяжи от фasetок постепенно исчезают. Картина ДБЭО (рис.3.2) получена сотрудниками лаб. №16 ИФП СО РАН М.А. Путьято и Б.Р. Семягиным. Проиллюстрированный на вставке к данному рисунку анализ, позволивший установить Миллеровские индексы площадки фasetки, выполнен с участием диссертанта. В литературе в процессе роста эпитаксиальных пленок  $A^{III}B^V$  возникновение фasetок зарегистрировано [66, 81], однако их индексы установлены впервые в данной диссертации.

На образцах, димеры As у которых перпендикулярны ступеням, фasetки не возникают. Это свидетельствует о том, что поверхность более однородна, состоит из чередования двухатомных ступеней и террас почти одинаковой ширины.

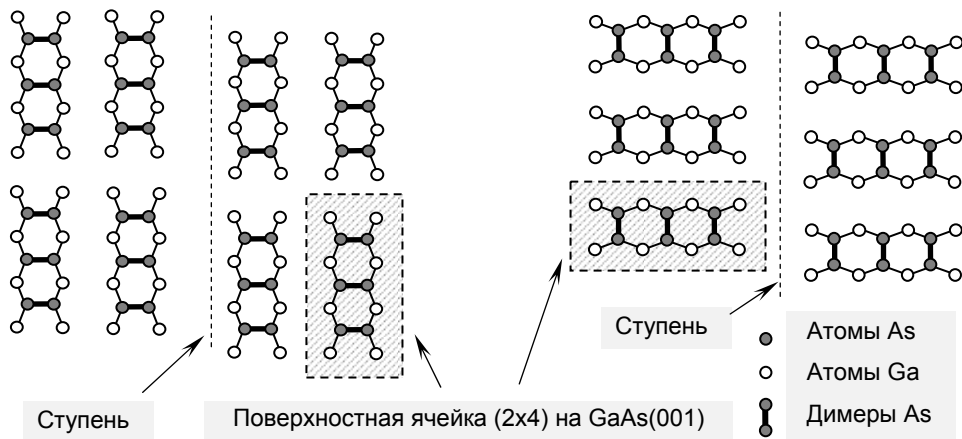


Рис.3.1. Схематическое изображение ориентации димеров As и ячейки поверхностной структуры для пленок GaAs на отклоненной подложке Si (001); (а) – зарождение пленки осаждением As, поверхностная ячейка (2x4) расположена вдоль ступени; (б) – зарождение пленки замещением атомов Si на As, поверхностная ячейка (2x4) расположена перпендикулярно ступени. Показан верхний слой атомов As и их ближайшие нижние соседние атомы Ga.

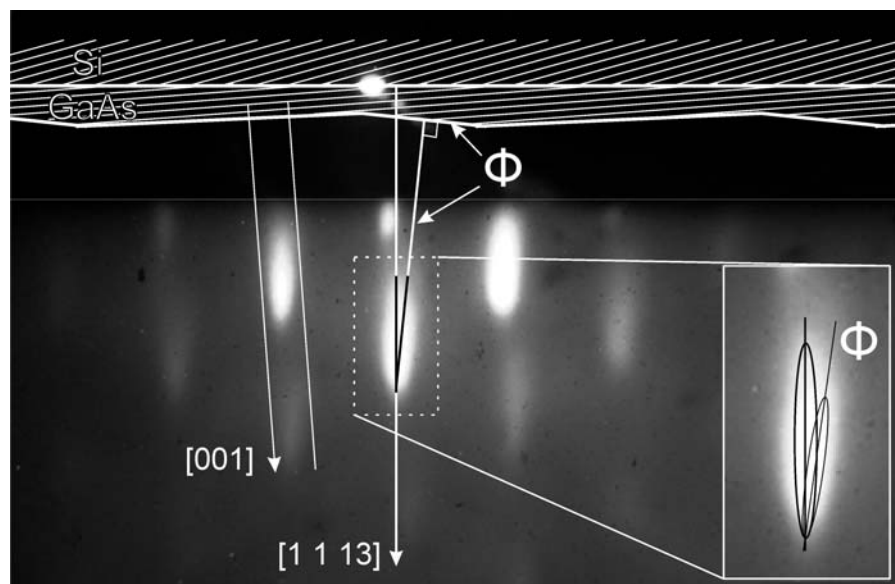


Рис.3.2. Картина ДФЭО от поверхности пленки GaAs толщиной 5 монослоев на подложке Si(001), полученной отклонением на  $6^\circ$  вокруг  $\langle 011 \rangle$ . Первый слой As выращен путем замещения монослоя кремния атомами мышьяка.

Запись КДО проводилась на двухкристальном рентгеновском дифрактометре ДСО-1Т с использованием кристалла-монокроматора Ge(004), и излучения  $\text{CuK}_{\alpha 1}$ . Для анализа деформационного состояния пленок GaAs с применением модели [77] необходима регистрация серии КДО. Был выбран асимметричный рефлекс (115), имеющий наибольший из инструментально возможных углов Брэгга ( $47,51^\circ$ ), что обеспечивало максимальные угловые расстояния между пиками на КДО. Чем больше расстояние между пиками, тем выше точность определения их углового положения. С учетом угла залегания отражающих плоскостей ( $15,79^\circ$ ), угол скользящего падения рентгеновского пучка уменьшается до  $31,72^\circ$ , что существенно превышает угол отклонения среза подложки от сингулярной ориентации (001), равный  $4-6^\circ$ , и облегчает выполнение измерений.

Полученные результаты сведены в табл. 3.1; для каждого из образцов приведены данные в двух сечениях (поперек и вдоль ступеней границы раздела). В сечении поперек ступеней по КДО на основе модели [77], рассмотренной в Главе 1, определялись сдвиговая деформация и угол поворота кристаллической решетки пленки, которые в табл. 3.1. обозначены, как  $\epsilon$  и  $\psi$ , соответственно. Степень релаксации  $\rho$  приведена для двух температур: комнатной ( $\rho_R$ ) и температуры роста ( $\rho_G$ ). При комнатной температуре возникает эффект «кажущейся перерелаксации», когда  $\rho_R$  превышает 100%. Этот эффект возникает из-за разницы коэффициентов термического расширения сопрягаемых материалов и будет рассмотрен в настоящей главе. В сечении вдоль ступеней применить модель расчета [77] не удалось, в силу достаточно большого отклонения ( $6^\circ$ ) вицинальной подложки, влияющего на точность измерений. Угол между направлением пересечения плоскости дифракции {115} с ГР и направлением ступеней составляет порядка  $20^\circ$ , что не учитывается в модели расчета. Поэтому для сечения вдоль ступеней, модифицировав классическую тетрагональную модель с учетом угла разворота  $\psi$ , измерена только степень релаксации  $\rho$ .

Данные рентгеновской дифрактометрии свидетельствуют о том, что способ зарождения первого монослоя As влияет не только на ориентацию димеров As, но и существенно влияет на результат пластической релаксации пленки GaAs. Образцы с

различной ориентацией димеров As на поверхности имеют разные знаки преимущественного поворота  $\psi$  решетки пленки (табл. 3.1). Образцы с димерами As, перпендикулярными ступеням (обозначены  $\perp$ ), имеют отрицательный поворот  $\psi$  (порядка  $10^3$  угловых секунд). Для образцов, у которых димеры As параллельны ступеням (обозначены  $\parallel$ ), возникают повороты в противоположную сторону.

Разворот  $\psi$  кристаллической решетки в процессе релаксации напряжений несоответствия появляется вследствие введения ДН. В границы раздела (001) вводятся 8 семейств  $60^\circ$ -ДН [28] в четырех плоскостях скольжения типа  $\{111\}$  (табл. 3.2). Векторы Бюргерса этих ДН имеют ненулевые проекции на нормаль к границе раздела (рис.3.3). Проекция может быть положительной (как для семейств 3, 4, 7 и 8), так и отрицательной (семейства 1, 2, 5 и 6). От знака проекции зависит направление поворота, создаваемое отдельным семейством ДН (знак поворота в табл. 3.2). Сетка ДН формирует малоугловую границу [1] в том случае, если имеет место преобладание дислокационных семейств с определенным знаком поворота. В GaAs различают ДН  $\alpha$ - и  $\beta$ -типа, причем дислокации  $\alpha$ -типа залегают в направлении  $[-1\ 1\ 0]$  (рис.3.3), которое совпадает с направлением ориентации димеров мышьяка на поверхности [66]. Дислокации  $\beta$ -типа вводятся в перпендикулярном направлении, т.е. параллельны  $[-1\ -1\ 0]$ .

Таблица 3.1. Данные рентгеновских измерений параметров структуры пленки в сечениях, перпендикулярных границе раздела, которые расположены вдоль и поперек ступеней.

№ образца	Димеры As	поперек ступеней				вдоль ступеней	
		$\rho_R, \%$	$\rho_G, \%$	$\epsilon, \text{угл.с.}$	$\psi, \text{угл.с.}$	$\rho_R, \%$	$\rho_G, \%$
St958		104.0	99.6	37	1733	103.2	98.9
St959		104.0	99.6	34	725	103.2	98.9
1077		99.7	95.5	-2	670	99.1	94.9
St953	⊥	104.0	99.6	23	-905	103.3	98.9
St954		104.0	99.6	22	-832	103.3	98.9
1076		98.5	94.4	-73	-820	99.4	95.2

Таблица 3.2. Дислокационные семейства в GaAs и соответствующие направления поворота пленки вокруг ступеней ГР.

Номер семейства	Направление и тип ДН	Вектор Бюргерса	Плоскость скольжения	Знак поворота	
				димеры⊥	димеры
1	[-1 1 0] α-тип	$a/2[1\ 0\ -1]$	(1 1 1)		-
2		$a/2[0\ 1\ -1]$			
3		$a/2[0\ 1\ 1]$	(-1-1 1)		+
4		$a/2[1\ 0\ 1]$			
5	[-1-1 0] β-тип	$a/2[0\ -1\ -1]$	(1-1 1)	-	
6		$a/2[1\ 0\ -1]$			
7		$a/2[1\ 0\ 1]$	(-1 1 1)		+
8		$a/2[0\ -1\ 1]$			

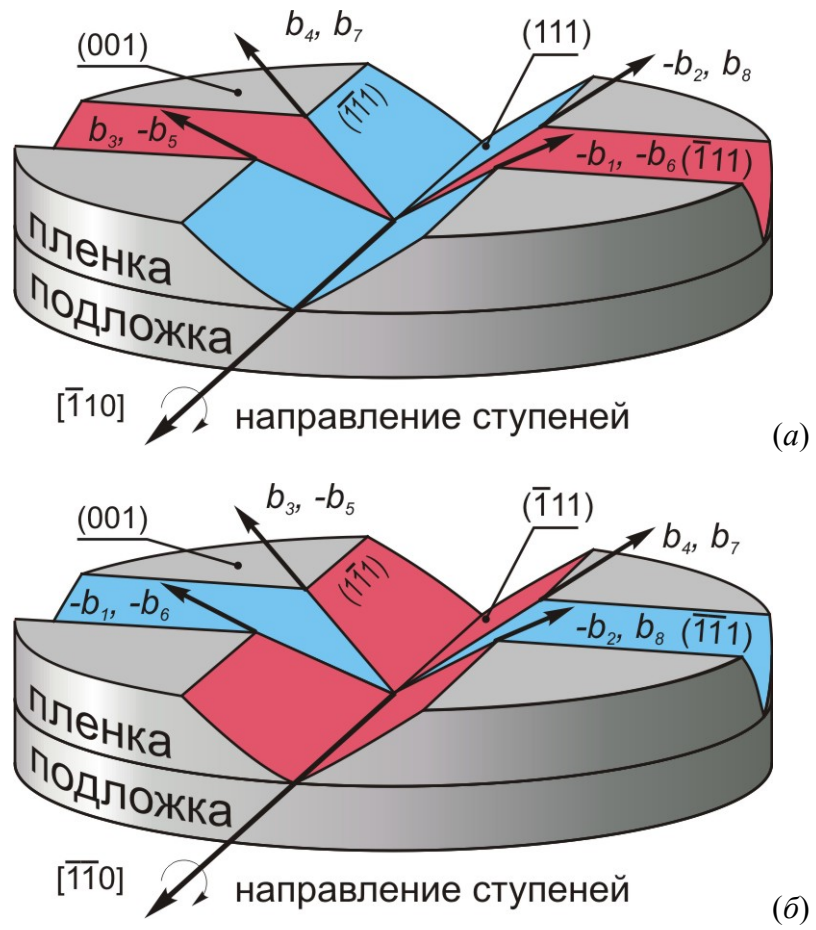


Рис.3.3. Изображение плоскостей скольжения  $\{111\}$  для  $60^\circ$ -ДН в границе раздела  $(001)$ . Показаны векторы Бюргера 8 семейств  $60^\circ$ -ДН; (а) – вариант зарождения пленок путем замещения, (б) – зарождение путем осаждения.

Рассмотрим, как влияет на поворот вокруг направления залегания ступеней тот факт, что четыре семейства ДН залегают не строго перпендикулярно ступеням, а под углом ( $90 \pm 4.4^\circ$ ). Для варианта зарождения пленки путем замещения наши рассуждения проиллюстрируем рисунком 3.4. Очевидно, что основной разворот решетки пленки вокруг направления ступеней  $[-110]$  формируют ДН, залегающие в этом направлении (семейства 1-4). На стереографической проекции (рис.3.4), нанесены направления всех участвующих в релаксации дислокационных семейств (прямолинейные отрезки, проходящие через центр полюсной фигуры) и направления их векторов Бюргерса (пятна с индексами 011, 101, 0-11 и -101). С привлечением данного рисунка можно определить направление поворотов, создаваемых семействами 5 и 7. Семейство 5 создает разворот вокруг  $[-13-13\ 2]$  в сторону  $[1-10]$ , а семейство 7 – в противоположную сторону  $[-110]$ . (Направлению соответствует вертикальный диаметр полюсной фигуры (рис.3.4), не изображенный на рисунке). Из изложенного следует, что развороты семейств 5 и 7 вокруг направления  $[-13-13\ 2]$  взаимно компенсируются. Важно указать, что семейства 5 и 7 оказывают влияние на разворот вокруг направления  $[-110]$ , т.к. они залегают не строго перпендикулярно, а под углом  $85.6^\circ$  к  $[-110]$  (см. рис.3.4). Семейства 5 и 7 создают разворот вокруг ступеней  $[-110]$  в одном и том же положительном направлении (увеличивают угол отклонения от сингулярной плоскости (001)). Суммарный поворот от семейств 5 и 7 вокруг ступеней  $[-110]$  складывается. Он равен  $\psi_A = 2 \cdot 6097 \cdot \cos(85.6^\circ) = 930$  угл.с. В приведенных рассуждениях не учитывается влияние семейств 6 и 8, т.к. они имеют повышенную критическую толщину  $h_C$  для введения ДН [49], и их доля в снятии напряжений несоответствия ничтожно мала.

Для образцов, зарождение которых начиналось с осаждения мышьяка, такой же разворот  $\psi_A = 930$  угл.с. формируют семейства 1 и 3, в ту же сторону – в сторону увеличения отклонения от сингулярного направления.



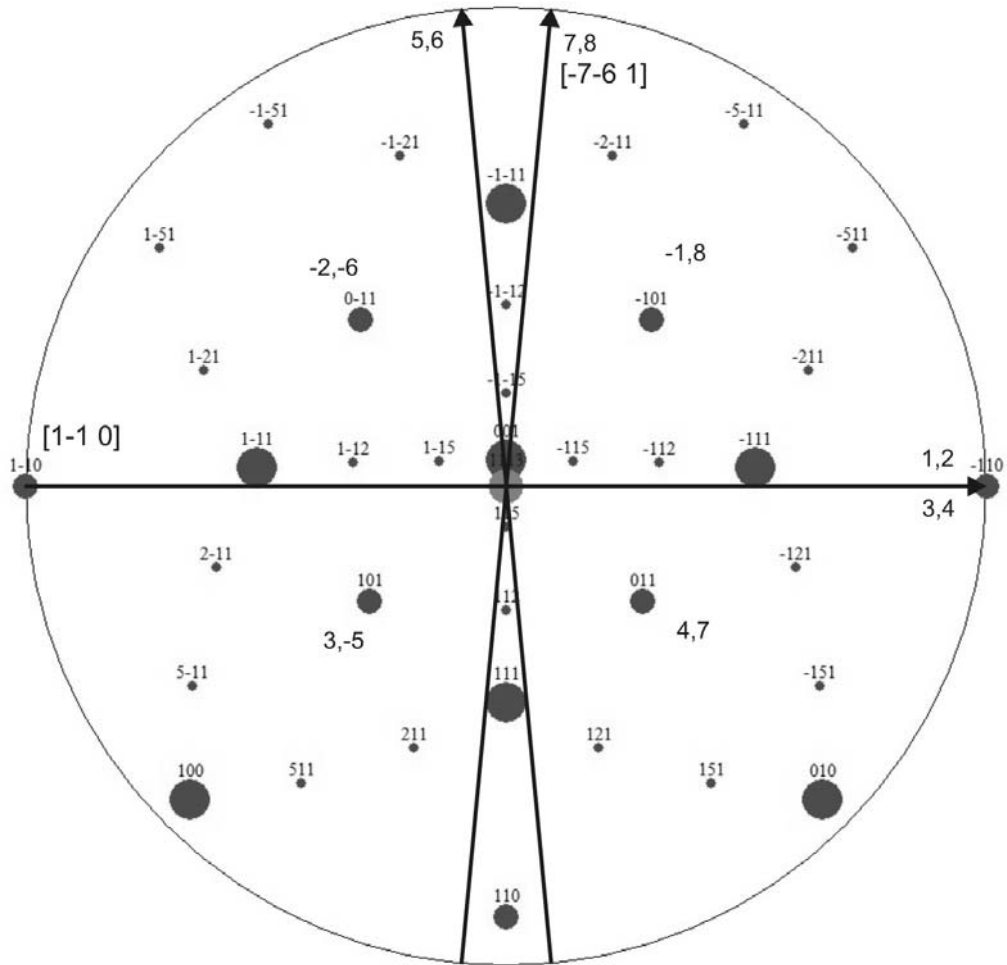


Рис.3.4. Схематическое изображение направлений дислокационных линий на полюсной фигуре плоскости (1 1 13). Вариант зарождения пленки путем замещения (см. рис.3.3a); система ступеней параллельна направлению  $[-110]$ .

### 3.1.1. Пластическая релаксация эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001), зарожденной путем осаждения

Образцы, в которых зарождение пленки начиналось с осаждения мышьяка, имеют димеры As, перпендикулярные ступеням (обозначены  $\perp$ ). Основное влияние на величину поворота оказывают семейства 5-8 (табл.3.2), залегающие вдоль ступеней [-1-10]. Поскольку зафиксировано уменьшение отклонения от сингулярной ориентации в GaAs (знак « $\rightarrow$ », см. табл. 3.1), то можно заключить, что повышенную плотность имеют ДН, принадлежащие семействам 5 и 6. Данный поворот предсказуем из соображений меньшей критической толщины  $h_c$  для введения ДН этих семейств по сравнению с прочими ДН. Аналогичный поворот наблюдался в различных гетероструктурах [65, 66, 77] с кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита.

Экспериментально измеренные углы разворота кристаллической решетки пленки, представленные в таблице 3.1, можно объяснить разностью плотностей  $60^\circ$ -ДН разных семейств. Вдоль направления [-1-10] залегают дислокации четырех семейств (5, 6, 7, 8), два из которых создают отрицательную малоугловую границу (семейства 5 и 6) и два – положительную (7 и 8). Для установления природы малоугловой границы сумму поворотов, созданных всеми семействами, приравняем повороту, зарегистрированному экспериментально:  $\psi = \psi_5 + \psi_6 + \psi_7 + \psi_8 + \psi_A$ . Поскольку семейства 5 и 6 (а также семейства 7 и 8) имеют одинаковую вероятность введения и отличаются лишь винтовой составляющей (которая не влияет на угол поворота), то для наглядности дальнейшего структурного анализа будем рассматривать только семейства 5 и 7, т.е. примем

$$\psi = \psi_5 + \psi_7 + \psi_A \quad (3.1)$$

Величина  $\psi_A$  определяется вкладом в поворот «приблизительно перпендикулярных» семейств и составляет около 930 угл.с. Степень релаксации напряжений несоответствия в пленках близка к 100%, поэтому можно записать уравнение, (см. формулу 4.6):

$$\frac{b_5^e}{D_5} + \frac{b_7^e}{D_7} = f, \quad (3.2)$$

где  $b_5^e$  – проекция краевой компоненты вектора Бюргерса ДН пятого семейства на ГР,

$D_5 = \frac{b_5^t}{\text{tg}(\psi_5)}$  является расстоянием между дислокациями указанного семейства. Здесь  $b_5^t$  –

проекция вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$  на нормаль к ГР (малоугловая составляющая  $\mathbf{b}$ ). Решая систему из двух уравнений (3.1) и (3.2), находим  $D_5$  и  $D_7$  для семейств 5 и 7. Из табл. 3.3 следует, что для того, чтобы в пленке возник экспериментально наблюдаемый разворот, плотность дислокаций 5го семейства должна быть больше, чем 7го. Преобладание 5го семейства ДН объясняется пониженной критической толщиной  $h_c$  введения ДН [49] в пленках, зарождение которых начиналось с осаждения As. Обсуждаемые данные представлены в табл. 3.3. В более полном виде полученный результат означает, что суммарная плотность дислокаций 5го и 6го семейств должна быть больше, чем 7го и 8го.

Табл. 3.3. Рассчитанные междислокационные расстояния, которые удовлетворяют экспериментальным данным. Учен разворот пленки, созданный почти перпендикулярными семействами ДН.

№ обр	$\Psi$ , угл.с.	$D_5$ , Ангстрем	$D_7$ , Ангстрем
St953	-905	80.5	129.7
St954	-832	80.8	128.5
1076	-820	80.9	128.3
		$D_1$ , Ангстрем	$D_3$ , Ангстрем
St958	1733	95.1	97.1
St959	725	88.9	107.4
1077	670	88.5	108

### 3.1.2. Пластическая релаксация эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001), зарожденной путем замещения

Образцы, в которых зарождение пленки начинается с замещения, имеют димеры As, параллельные ступеням (обозначены ||), направлением ступеней является  $[-1\ 1\ 0]$ . Поворот  $\psi$  формируют семейства 1-4, и как показано выше, при анализе его природы нужно учитывать разворот  $\psi_A = +930$  угл.с. созданный семействами 5 и 7. Эти пленки демонстрируют увеличение отклонения от сингулярной ориентации (знак «+», см. табл. 3.1) и, таким образом, суммарная плотность дислокаций 1го и 2го семейств сравнима с суммарной плотностью 3го и 4го (табл. 3.3). Экспериментально зарегистрированный поворот противоречит модели энергетически предпочтительного введения ДН, имеющих наименьшую критическую толщину  $h_C$  [49], поскольку семейства 1 и 2 имеют меньшее значение  $h_C$  (чем семейства 3 и 4), и их плотность должна быть больше.

Вероятно, экспериментально зарегистрированная ситуация связана с морфологией поверхности растущей пленки. В работах [66, 81] показано, что характерной морфологической особенностью свободной поверхности эпитаксиальной пленки  $A^{III}B^V$  является присутствие фасеток. По-видимому, они способствуют повороту кристаллической решетки пленки, который аналогичен зарегистрированному нами для пленок GaAs, в которых зарождение пленки начиналось с замещения атомов Si на As (введение семейств 3 и 4). До настоящего времени в литературе не определены Миллеровские индексы возникающих фасеток. Нами установлено (см. рис.3.2), что фасетки имеют индексы  $(2\ 2\ 13)$ . Они возникают в процессе роста пленок, которые зарождаются по механизму замещения первого монослоя Si монослоем As.

Фасетки  $(2\ 2\ 13)$  образованы эшелонами ступеней, которые в упруго напряженном слое представляют собой концентраторы напряжений. Таким образом, фасетки, вероятно, облегчают введение дислокационных семейств с большей критической толщиной  $h_C$ , которые создают разворот пленки в нетипичную (положительную) сторону.

### 3.2. Развороты кристаллической решетки пленки GaAs на Si, выращенной с использованием прослойки GaP

Для получения GaAs пленок с прослойками GaP использовались вицинальные подложки Si (001), отклоненные на  $4^\circ$  от сингулярного направления  $\langle 001 \rangle$  вокруг  $\langle 011 \rangle$ . Поверхность имеет Миллеровские индексы  $[1\ 1\ 20]$ . Непосредственно на подложке выращивалась прослойка GaP, толщиной 50 нм. Выращивание пленок GaAs осуществлялось методом МЛЭ, толщина 1 мкм. Схематическое изображение структуры образцов представлено на рис.3.5.

При зарождении слоя GaP ориентация ячейки поверхностной фазы пленки зависит от того, какой слой первым осаждается на поверхность Si(2×1) - слой атомов галлия, или слой атомов фосфора. Если на поверхности подложки первым сформировать слой атомов галлия, то димеры фосфора на поверхности кристалла окажутся ориентированными вдоль ступеней, и ячейка поверхностной структуры GaAs(2×4) ориентирована перпендикулярно ступеням (рис.3.1а). Если же на поверхности подложки первым формируется слой атомов фосфора, то димеры фосфора будут расположены поперек ступеней, а ячейка поверхностной структуры (2×4) ориентируется вдоль (рис.3.1б). В результате возникает один из двух возможных вариантов сопряжения кристаллических решеток типа алмаза и сфалерита. В работе [55] обсуждается влияние условий зарождения слоя GaP на вицинальной поверхности Si(001) на указанное сопряжение.

Нами анализировались 3 пары образцов, первая из которых была впоследствии подвергнута отжигу и измерена повторно. Различие между парами образцов заключалось в наличии или отсутствии потока атомарного водорода во время роста, а также в проведении или в отсутствии термоциклирования (табл. 3.4).

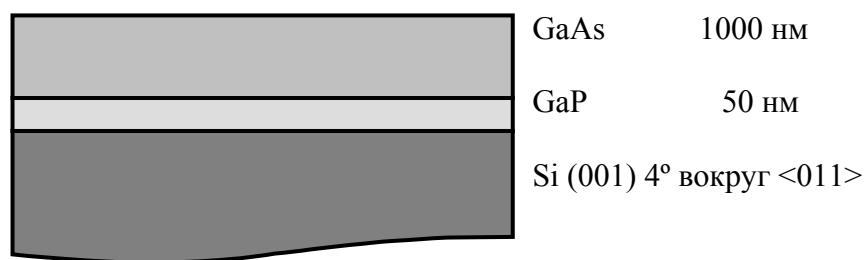


Рис. 3.5. Структура исследуемых образцов.

Таблица 3.4. Отличия в условиях приготовления образцов.

Образец	Димеры As	примечание
1.1		Рост при наличии потока +Н
1.2	⊥	
2.1		Рост при наличии потока +Н
2.2	⊥	
3.1		Финальный отжиг: 4 цикла, резкое увеличение температуры до 750°C и понижение до 400°C
3.2	⊥	
1.1отжиг		Отжиг при температуре более 800°C
1.2отжиг	⊥	

Данные измерений и результаты последующих расчетов сведены в таблице 3.5 (использовался асимметричный рефлекс (115)). Измерения производились в двух сечениях, расположенных либо вдоль, либо поперек ступеней. В таблице приведены сдвиговая деформация и угол поворота кристаллической решетки пленки, которые обозначены, как  $\varepsilon$  и  $\psi$ , соответственно. Как и в табл.3.1, степень релаксации  $\rho$  приведена для двух температур: комнатной  $\rho_R$  и температуры роста ( $\rho_G$ ).

Анализируя параметры  $\varepsilon$  и  $\psi$  можно видеть, что в большинстве случаев поворот решетки пленки  $\psi$  больше, чем ее сдвиговая деформация  $\varepsilon$ . Это характерно для пленок с релаксацией  $\rho$  около 100%.

Самое яркое различие между образцами внутри каждой пары заключается в том, что ось преимущественного поворота решетки пленки GaAs меняет направление на 45 градусов. В образцах с номерами 1.1, 2.1 и 3.1 углы поворота  $\psi_C$  в несколько раз больше соответствующих углов  $\psi_L$ . Таким образом, преимущественный поворот в этих образцах наблюдается вокруг направления ступеней  $\langle 110 \rangle$ . В свою очередь образцы с номерами 1.2, 2.2, 3.2 демонстрируют одинаковые по порядку величины углы поворота  $\psi$  в обоих сечениях. Это означает поворот вокруг одного из направлений  $\sim \langle 100 \rangle$ , лежащих в границе раздела.

Прослеживается явная зависимость деформационного состояния пленки GaAs, от способа зарождения прослойки GaP. Если слой GaP начинается со слоя атомов галлия, то (поверхностная ячейка  $(2 \times 4)$  располагается перпендикулярно ступеням), и поворот пленки GaAs вокруг ступеней заметно больше, чем поворот вокруг направления, перпендикулярного ступеням (табл.3.5). При формировании пленки GaP с фосфорного подслоя поверхностная ячейка  $(2 \times 4)$  ориентируется параллельно краям террас, и в обоих сечениях имеет место сравнимый по величине поворот кристаллической решетки пленки GaAs. Деформационное состояние пленок на отожженных образцах не претерпело существенных изменений.

Таблица 3.5. Полученные с использованием рефлекса (115) результаты рентгеновских измерений параметров структуры пленки в сечениях, которые расположены вдоль и поперек ступеней

№ образца	Димеры As	поперек ступеней				вдоль ступеней			
		$\rho_R, \%$	$\rho_G, \%$	$\varepsilon, \text{угл.с.}$	$\psi_C, \text{угл.с.}$	$\rho_R, \%$	$\rho_G, \%$	$\varepsilon, \text{угл.с.}$	$\psi_L, \text{угл.с.}$
1.1		103.9	99.6	22	656	100.4	96.3	-31	27
1.2	⊥	103.8	99.6	10	-35	104.1	99.8	-8	29
2.1		103.9	99.7	22	-277	105.2	100.9	-21	27
2.2	⊥	103.4	99.2	16	39	103.1	98.9	1	69
3.1		104.1	99.9	18	17	103.8	99.6	-4	-2
3.2	⊥	104.1	99.9	26	157	103.2	99.0	6	112
1.1 отжиг		103.9	99.7	17	643	100.2	96.1	-21	33
1.2 отжиг	⊥	103.9	99.7	20	17	103.9	99.6	9	10



### 3.3. Факторы, проявляющиеся в процессе пластической релаксации пленок GaAs

#### 3.3.1. Природа кажущегося явления «перерелаксации» напряжений несоответствия

В табл. 3.1 представлены данные рентгеновских измерений параметров структуры пленки в сечениях, перпендикулярных границе раздела, которые расположены вдоль и поперек ступеней. Приведены два значения степени релаксации  $\rho_R$  и  $\rho_G$ , которые определены, соответственно, для комнатной температуры и температуры роста, которая составляет около 580°C. Из таблицы видно, что при комнатной температуре возникает эффект «кажущейся перерелаксации», когда  $\rho_R$  превышает 100%.

Природа этого эффекта состоит в различии температурных коэффициентов расширения пленки и подложки [65]. Температурный коэффициент расширения для Si и GaAs равны  $2.6 \cdot 10^{-6}$  и  $5.73 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , соответственно. Несоответствие параметров решеток при комнатной температуре определяется как

$$f_{RT} = \frac{a_f - a_s}{a_s} = \frac{5.653 - 5.428}{5.428} 100\% = 4.15\%,$$

где  $a_f$  и  $a_s$  – параметры кристаллической решетки материалов слоя и подложки при комнатной температуре.

Параметры решеток GaAs и Si при 580°C равны  $a_f' = 5.671$  и  $a_s' = 5.436 \text{ \AA}$ , соответственно. Поэтому несоответствие параметров решеток при температуре роста равно

$$f_{GT} = \frac{a_f' - a_s'}{a_s'} = \frac{5.671 - 5.436}{5.436} = 4.32\%.$$

В процессе роста пленки в границу раздела вводятся ДН, которые снимают сжимающие напряжения несоответствия. Толщина пленки GaAs (~1 мкм) много больше критической, поэтому степень релаксации  $\rho$  пленки близка к ста процентам.

При охлаждении  $\rho$  изменяется от  $\rho_G$  до  $\rho_R$ , и возникают растягивающие напряжения в пленке из-за разницы несоответствий  $f_{RT}$  и  $f_{GT}$ . Для снятия растягивающих напряжений необходимо введение дислокаций с противоположным вектором Бюргерса, либо удаление существующих ДН. С понижением температуры вероятность протекания пластических процессов существенно уменьшается. Поэтому, после охлаждения до комнатной температуры, пленка GaAs остается в растянутом состоянии вдоль границы раздела, и при комнатной температуре измеренная степень релаксации  $\rho_R$  превышает 100%.

Связь между  $\rho_G$  и  $\rho_R$  описывается формулой  $\rho_G = \rho_R (f_{RT}/f_{GT})$ , что равно 4.1% в соответствии с данными табл.3.1 и 3.5.

### 3.3.2. Влияние Ломеровских дислокаций несоответствия

Возможно взаимодействие двух  $60^\circ$ -ДН с образованием одной Ломеровской дислокации несоответствия (ЛДН) в границе раздела. Для вицинальных ГР (001) такие реакции были рассмотрены, в частности, в [82, 83, 101]. Вблизи дислокации несоответствия, имеющей меньшую критическую толщину, вводится комплементарная дислокация, скользящая в плоскости  $(-1-1\ 1)$ . В случае ГР  $(1\ 1\ 13)$  меньшую критическую толщину имеют семейства 1 и 2, которые принадлежат плоскости (111) и представлены в табл. 3.2. Дислокация семейства 1 вступает в реакцию с ДН семейства 3, а ДН семейства 2 реагирует с дислокацией семейства 4 (табл. 3.2). В результате указанных реакций образуются Ломеровские ДН, залегающие в направлении  $[-1\ 1\ 0]$ . При образовании ЛДН возникает разворот кристаллической решетки пленки. Поясним это на «идеализированном» примере, когда все несоответствие полностью снимется только Ломеровскими ДН. Для такого варианта пластической релаксации необходимо, чтобы  $60^\circ$ -ДН семейств 1 и 3 (а также ДН семейств 2 и 4) имели одинаковые плотности.

Ломеровская ДН, залегающая в ГР  $(1\ 1\ 13)$  в направлении  $[-1\ 1\ 0]$ , формирует малоугловую границу раздела, т.к. ее вектор Бюргерса залегаєт под углом  $6^\circ$  и имеет краевую компоненту вектора Бюргерса, перпендикулярную ГР (см. рис. 3.6). Направление поворота

кристаллической решетки пленки, возникающего при образовании ЛДН, имеет знак «+». В случае GaAs на Si (1 1 13) при полном снятии напряжений несоответствия введением ЛДН возникает поворот +928 угл.с.

В GaAs различают ДН  $\alpha$ - и  $\beta$ -типа, причем дислокации  $\alpha$ -типа залегают в направлении  $[-1\ 1\ 0]$ , которое совпадает с направлением ориентации димеров мышьяка на поверхности [66]. Дислокации  $\beta$ -типа вводятся в перпендикулярном направлении, т.е. параллельны  $[-1\ 1\ 0]$ . Как было отмечено в первой главе, ДН  $\alpha$ -типа имеют более высокую подвижность по сравнению с ДН  $\beta$ -типа [84].

В образцах, зарождение пленки которых начиналось с замещения, димеры As параллельны ступеням  $[-110]$ , и следовательно в этом направлении залегают дислокации  $\alpha$ -типа. Предполагается, что более активно будут образовываться ЛДН вдоль  $[-110]$ , в силу большей подвижности пронизывающих участков  $\alpha$ -типа. В итоге, почти на каждую 60°–ДН 1го и 2го семейства будет приходиться комплементарная 60°–ДН 3го и 4го семейства, соответственно. Таким образом, за разворот кристаллической решетки пленки зародившейся в режиме замещения, будут отвечать ЛДН, которые формируют разворот в сторону увеличения вихвального угла.

В пленках, зародившихся осаждением As, вдоль ступеней  $[-1-10]$  вводятся ДН  $\beta$ -типа. В них также возможно образование ЛДН вдоль  $[-1-10]$ , но их количество заметно меньше. В соответствии с данными таблицы 3.3, плотность ДН 7го и 8го семейств существенно ниже, чем 5го и 6го семейств. Поэтому за разворот кристаллической решетки пленки, зародившейся в режиме осаждения, отвечают 60°–ДН  $\beta$ -типа 5го и 6го семейств, которые формируют разворот в сторону уменьшения вихвального угла.

На рис.3.7 приведены два высокоразрешающих электронно-микроскопических (ЭМ) изображения поперечных срезов гетеросистемы GaAs/Si(001) для обоих способов формирования первого монослоя: осаждение As на Si (рис.3.7а) и замещение верхнего монослоя Si атомами Si (рис.3.7б). На каждом снимке зарегистрированы Ломеровские ДН, которые указаны стрелками. Установить, какую долю всех дислокаций несоответствия они составляют по ЭМ изображениям не представилось возможным. Рентгеновские

дифракционные данные, полученные на основе КДО и карт обратного пространства свидетельствуют, что в случае зарождения пленки замещением доля ЛДН может составлять до 100%, однако в случае зарождения осаждением эта доля не превышает 60%.

Изображения ЭМ, приведенные на рис.3.7, получены в режиме многолучевой дифракции в.н.с. ИФП СО РАН к.ф.-м.н. А.К. Гутаковским. На них видны ряды атомных плоскостей  $\{111\}$ . На рис.3.8 показана область рис.3.7 в увеличенном масштабе, которая содержит ДН. Наклонными белыми линиями отмечены плоскости (111). В центре рисунка находится ядро дислокации, на котором обрываются две экстраполуплоскости (указаны стрелками), что свидетельствует об образовании ЛДН. Наличие экстраполуплоскости в подложке можно проверить, подсчитав количество плоскостей  $\{111\}$  в подложке и пленке между двумя параллельными белыми линиями. В подложке таких плоскостей 9, в пленке – 8. Это справедливо как для плоскостей  $(1-1\ 1)$ , так и для плоскостей  $(-1\ 1\ 1)$ , схематично показанных на рис.3.3. На рис.3.8 правая стрелка указывает на дополнительную «полуплоскость», возникшую в пакете плоскостей  $(1-1\ 1)$ , а левая стрелка - на дополнительную «полуплоскость», возникшую в пакете плоскостей  $(-1\ 1\ 1)$ .

### 3.3.3. Сравнительный анализ структурного состояния гетеросистем, исследованных в разделах 3.1 и 3.2

Результаты, полученные в разделах 3.1. и 3.2 свидетельствуют, что измерение поворота кристаллической решетки пленки  $\psi$  является чувствительным методом контроля технологических режимов получения эпитаксиальных пленок GaAs. Условия АСЭ и МЛЭ роста, представленные в разделе 3.1, являются наиболее отработанными и технологически воспроизводимыми. В результате этого на трех парах образцов из раздела 3.1 получены вполне сравнимые по порядку и воспроизводимые по знаку величины  $\psi$  на уровне  $10^3$  угл.с. Зависимость знака угла поворота  $\psi$  от условий зарождения первого монослоя позволяет рассматривать этот параметр в качестве структурной характеристики, позволяющей ex-situ контролировать эпитаксиальный процесс. Метод регистрации данного параметра является

неразрушающим, поэтому после измерения возможно дальнейшее использование образцов. Для образцов, представленных в разделе 3.2, зависимость амплитуды изменений  $\psi_C$  и  $\psi_L$  от условий зарождения выражена слабее, чем для образцов раздела 3.1. Тем не менее, направление поворота кристаллической решетки пленки зависит от условий зарождения первого монослоя. Как в первом, так и во втором случае получены зависимости релаксационного процесса снятия напряжений несоответствия от условий эпитаксиального выращивания пленок.

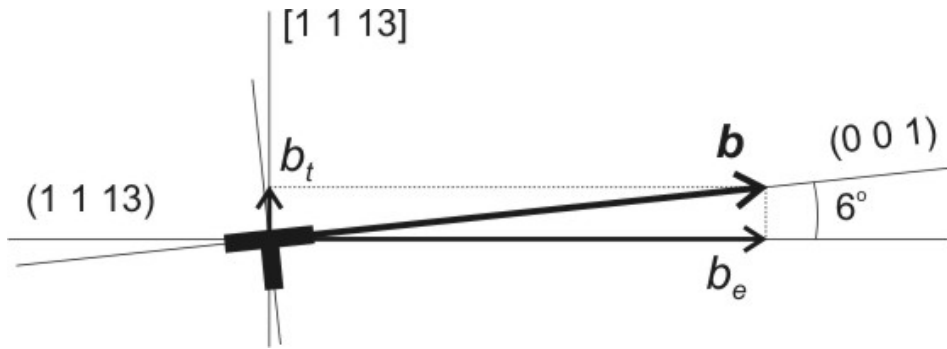


Рис. 3.6. Вектор Бюргерса  $\mathbf{b}$  Ломеровской дислокации, возникающей в ГР (1 1 13); он содержит малоугловую составляющую ( $b_t$ ), перпендикулярную ГР, и краевую составляющую ( $b_e$ ), параллельную ГР

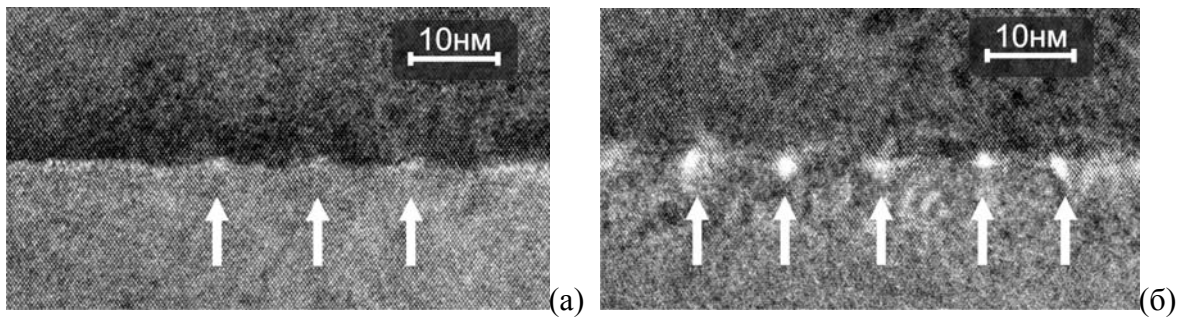


Рис. 3.7. Электронно-микроскопические изображения поперечных срезов гетеросистемы GaAs/Si(001) для обоих способов формирования первого монослоя: осаждение As на Si (a) и замещение верхнего монослоя Si атомами Si (б). Стрелками указаны Ломеровские дислокации. Изображение получено в режиме многолучевой дифракции.

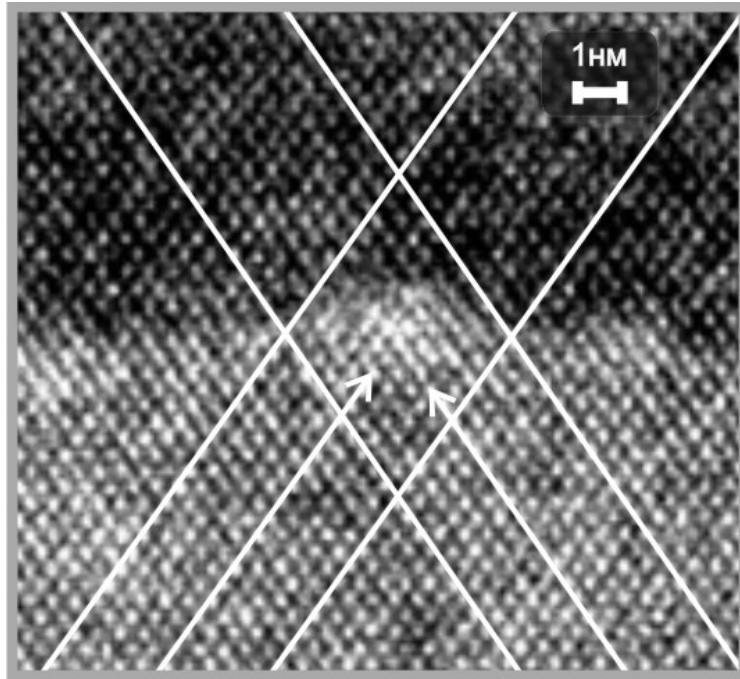


Рис. 3.8. Электронно-микроскопическое изображение Ломеровской дислокации несоответствия в границе раздела гетеросистемы GaAs/Si(001). Увеличенное изображение области рисунка 3.7а, указанной левой стрелкой.

### Выводы по главе 3

1. В пленках GaAs, первый монослой которых получен в режиме осаждения мышьяка, димеры As на поверхности террасы ориентированы поперек ступеней. ДН, расположенные параллельно ступеням, являются дислокациями  $\beta$ -типа. В процессе пластической релаксации напряжений несоответствия кристаллическая решетка пленки поворачивается вокруг оси, параллельной ступеням, на угол  $\psi$  порядка  $10^3$  угл.с. в таком направлении, что ориентация поверхности пленки приближается к сингулярной. Пластическая релаксация сопровождается преимущественным накапливанием дислокаций несоответствия, принадлежащих тем системам скольжения типа  $\{111\}^{1/2}\langle 110\rangle$ , которым соответствует меньшая критическая толщина введения ДН.

2. Если первый монослой пленки GaAs получен в режиме замещения атомов Si мышьяком, то димеры As на поверхности террасы ориентированы вдоль ступеней. Параллельно им залегают ДН  $\alpha$ -типа. В результате поворота решетки пленки на угол  $\psi \sim 10^3$  угл.с. ориентация поверхности пленки удаляется от сингулярной плоскости (001). Пластическая релаксация сопровождается накапливанием дислокаций несоответствия, принадлежащих системам скольжения  $\{111\}^{1/2}\langle 110\rangle$ . Этим семействам приблизительно в равных долях соответствует как повышенная, так и пониженная критическая толщина пленки для введения ДН. На свободной поверхности данных пленок, в отличие от GaAs, зарождающегося в режиме осаждения As, присутствуют фасетки (2 2 13), которые, по видимому, являются концентраторами напряжений, способствующими введению «энергетически невыгодных» ДН. Эти ДН, являясь комплементарными к «выгодным», образуют с ними Ломеровские ДН.

3. Результаты, полученные в разделах 3.1. и 3.2, свидетельствуют, что измерение поворота решетки пленки  $\psi$  является чувствительным методом контроля технологических режимов получения эпитаксиальной пленки GaAs.



## ГЛАВА 4. ВЛИЯНИЕ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ

### 4.1. Дальнодействующие напряжения в эпитаксиальной пленке, вызванные деформационными полями дислокаций несоответствия

Снятие напряженного состояния исходной псевдоморфной пленки обычно осуществляется в результате накапливания в ГР дислокаций несоответствия, которые начинают вводиться при критической толщине пленки  $h_c$ . В данном случае под ГР понимается слой пленки приграничной области, в котором в основном залегают ДН. Распределение ДН и их состояние в значительной мере характеризует структурное качество растущего слоя. Отметим, что ДН являются энергетически выгодными дефектами, которые понижают упругую энергию гетеросистемы  $E_{HS}$  [49], если их линейная плотность  $q \leq q_{max}$ . При значении  $q_{max}$  величина  $E_{HS}$  имеет минимум, поскольку как добавление, так и удаление даже одной ДН приводит к увеличению  $E_{HS}$ . Под линейной плотностью  $q$  понимается величина, обратная среднему междислокационному расстоянию  $D$ , определенному в плоскости ГР перпендикулярно залегающим ДН. Величина  $q_{max}$  линейно зависит от  $f$  – несоответствия параметров элементарных ячеек пленки ( $a_f$ ) и подложки ( $a_s$ ). Начиная с первых работ Мэтьюза [8], выполненных для (001) эпитаксиальных пленок, в литературе междислокационное расстояние  $D_{min}=1/q_{max}$  определяется равенством  $D_{min}=b^e/f$ , где  $b^e$  – проекции краевой компоненты вектора Бюргерса на границу раздела. В главе 4 компоненты вектора Бюргерса, введенные в разделе 1.1.1 как  $b_e$  и  $b_s$ , будем обозначать как  $b^e$  и  $b^s$ .

В гетеросистемах 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, показанных в табл. 4.1. Таблица представлена для ГР (001) и (111). Направления залегания дислокаций задаются линией пересечения плоскости

скольжения и ГР. Поскольку для каких-то систем скольжения в этом направлении располагаются винтовые дислокации, которые по определению не являются ДН, поскольку не снимают несоответствие, то число систем скольжения, обеспечивающих введение ДН, обычно меньше 12. Для ГР (001) и (111) эти числа равны 8 и 9, соответственно. Из табл. 4.1 видно, что для различных ГР винтовые составляющие ДН, определяемые одной и той же системой скольжения, могут изменять свой тип. В главе 1 было показано, что тип винтовой составляющей ДН имеет большое значение при анализе напряженного состояния эпитаксиальной пленки. В настоящей главе это явление детально исследуется. Примем, что в исходном псевдоморфном состоянии (когда в границе раздела отсутствуют ДН) эпитаксиальная пленка является однородной по площади и толщине. Тогда, как показано в [7] для изотропного приближения тонкой пленки на толстой подложке, создаваемое в пленке поле напряжений описывается тензором

$$\sigma_0 = -[2Gf(1+\nu)/(1-\nu)] \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

где  $G$  – модуль сдвига и  $\nu$  – коэффициент Пуассона. Уменьшение этих напряжений происходит благодаря введению ДН, и в процессе их формирования расстояние между дислокациями уменьшается. Обозначим вектор Бюргерса  $i$ -го дислокационного семейства  $\mathbf{b}_i$ , его винтовую компоненту –  $b_i^s$ , а проекцию краевой компоненты на ГР –  $b_i^e$ . Как известно,  $b_i^s$  является проекцией  $\mathbf{b}_i$  на дислокационную линию. Если для  $i$ -го семейства ДН, которое параллельно оси  $Oy$ , среднее расстояние между ДН этого семейства  $D_i$  меньше толщины пленки  $h$ , то, как показано в Главе 1, это семейство формирует в верхнем слое пленки дальнедействующие нормальные напряжений (ДаНН), равные

$$\sigma_{xx} = 2Gb_i^e/[D_i(1-\nu)]. \quad (4.2a)$$

Анализ показывает, что поле ДаНН, создаваемое семейством ДН в слое эпитаксиальной пленки, содержит также компоненту

$$\sigma_{yy} = 2\nu Gb_i^e/[D_i(1-\nu)]. \quad (4.2б)$$

Таблица 4.1. Параметры семейств дислокаций несоответствия, вводимых по механизму скольжения в границы раздела (001) и (111) гетеросистем с кристаллической решеткой алмаза и сфалерита в случае, когда параметр решетки пленки ( $a_f$ ) превышает параметр подложки ( $a_s$ ).

Данные о семействах дислокаций			Ориентация границы раздела			
			(001)		(111)	
№	плоскость скольжения	направление вектора Бюргерса	тип винтов. составл.	направ. дислок. линии	тип винтов. составл.	направ. дислок. линии
1	(-1 -1 1)	[ 1 0 1 ]	левая	[-1 1 0]	правая	[ 1-1 0 ]
2	(-1 -1 1)	[ 0 1 1 ]	правая	[-1 1 0]	левая	[ 1-1 0 ]
3	(-1 -1 1)	[-1 1 0]				
4	( 1 -1 1)	[ 1 1 0 ]			левая	[-1 0 1 ]
5	( 1 -1 1)	[ 0 1 1 ]	левая	[-1 -1 0]	правая	[-1 0 1 ]
6	( 1 -1 1)	[-1 0 1 ]	правая	[-1 -1 0]		
7	( 1 1 1)	[-1 1 0]			любая	произ-вольное
8	( 1 1 1)	[-1 0 1 ]	левая	[ 1 -1 0]		
9	( 1 1 1)	[ 0 -1 1 ]	правая	[ 1 -1 0]		
10	(-1 1 1)	[ 0 -1 1 ]	левая	[ 1 1 0]		
11	(-1 1 1)	[ 1 0 1 ]	правая	[ 1 1 0]	левая	[ 0 1-1]
12	(-1 1 1)	[ 1 1 0]			правая	[ 0 1-1]

Если семейство ДН содержит также винтовую составляющую  $b_i^s$ , то полное поле дальнедействующих напряжений содержит дополнительно и дальнедействующие сдвиговые напряжения (ДаСН), определяемые компонентой

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = Gb_i^s / D_i . \quad (4.3)$$

В результате тензор дальнедействующих напряжений для  $i$ -го семейства ДН записывается как

$$\sigma_i = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & 0 \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} . \quad (4.4)$$

Пусть в ГР вводится  $n$  дислокационных семейств, каждое из которых характеризуется параметром  $D_i$ , ( $1 \leq i \leq n$ ). Обозначим через  $D$  наибольшее из всех значений  $D_i$ . Если  $D < h$ , то согласно [1], в верхнем слое пленки возникает поле дальнедействующих напряжений. В слое однородно распределены не только нормальные, но и сдвиговые напряжения. Однако в расположенном вблизи ГР слое толщиной  $D$  все компоненты напряжений распределены неоднородно.

Пусть толщина пленки  $h$  достигла значения, когда все  $n$  семейств формируют дальнедействующие поля. Если сумма всех этих  $n$  полей, определяемых формулами (4.2) – (4.4), полностью компенсирует напряжения несоответствия, то выполняется

$$\sum_{i=1}^n \sigma_i = -\sigma_0 , \quad (4.5)$$

и верхний слой эпитаксиальной пленки растет полностью ненапряженным. Такой вариант релаксации напряжений псевдоморфной пленки является оптимальным. Для суммирования тензоров  $\sigma_i$  их следует привести к общей системе координат, путем поворота вокруг нормали в границе раздела (ось  $Oz$ ). При повороте тензора первая инварианта напряжений ( $\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}$ ) сохраняется [47]. Поэтому сумма первых инвариант тензоров  $\sigma_i$  равна взятой с обратным знаком первой инварианте тензора (4.1), т.е.  $4Gf(1+\nu)/(1-\nu)$ . В результате получаем оригинальное выражение

$$\sum_{i=1}^n (b_i^e / D_i) = 2f. \quad (4.6a)$$

В случае частичного снятия напряжений несоответствия, когда степень пластической релаксации  $0 < \rho \leq 1$ , следует записать

$$\sum_{i=1}^n (b_i^e / D_i) = 2f\rho. \quad (4.6б)$$

Данные формулы (4.6) справедливы, если для любого из дислокационных семейств среднее расстояние  $D_i < h$ . Укажем, что в формуле (4.6а) под  $D_i$  понимается междислокационное расстояние  $i$ -го семейства при предельной плотности ДН, когда величина  $E_{HS}$  имеет минимум. Однако в формуле (4.6б) параметром  $D_i$  является некоторая, как правило, промежуточная величина междислокационного расстояния  $i$ -го семейства, которая в процессе снятия напряжений несоответствия монотонно уменьшается.

Выражение (4.6) характеризует дислокационную сетку в границе раздела. Оно отражает удельный вклад каждого дислокационного семейства в релаксацию напряжений несоответствия. Это выражение содержит лишь краевую компоненту  $b^e$  вектора Бюргера, которая отвечает за формирование ДаНН и обеспечивает снятие напряжений несоответствия. Покажем, что данное выражение справедливо как при отсутствии, так и при наличии ДаСН в верхнем слое пленки. Согласно [3, 28, 85-87], зависимость упругой энергии гетеросистемы ( $E_{HS}$ ) от толщины растущей эпитаксиальной пленки  $h$  определяется следующим образом. Выбирается комбинация некоторых семейств ДН, обеспечивающих снятие напряжений для заданной ГР (см. например, табл.4.1), и задаются различные комбинации плотностей этих семейств. Та комбинация, при которой энергия имеет минимум, и определяет точку на зависимости  $E_{HS}(h)$ . После завершения расчетного релаксационного процесса, когда  $\rho$  становится равным 1 (или достигает 100%), любое увеличение плотности ДН будет приводить к возрастанию  $E_{HS}$ . Возможны два варианта завершеного релаксационного процесса: расчетное поле ДаСН является либо нулевым (выполняется условие 4.5), либо некоторым остаточным. В первом варианте имеет место оптимальная релаксация напряжений несоответствия, а во втором – неоптимальная. Формула (4.6) выполняется при

любом варианте. Универсальность этой формулы заключается в том, что она применима к произвольной ориентации границы раздела (hkl), и в этом смысле формула является фундаментальной.

Продemonстрируем применение полученного выражения (4.6) к границам (001) и (111). Из табл.4.1 видно, что в ГР(001) водятся  $60^\circ$ -ДН с одностипными векторами Бюргера, т.е. их проекции  $b^e$  краевой компоненты на ГР одинаковы (см. также Главу 1). Дислокации несоответствия залегают в двух ортогональных направлениях в ГР и формируют прямоугольную дислокационную сетку. Если дислокации залегают в двух перпендикулярных направлениях с одинаковой линейной плотностью, т.е.  $n=2$  и  $D_1=D_2$ , то из (4.6а) получаем общеизвестное выражение для предельной линейной плотности ДН в ГР(001)

$$D_{\min} = b^e/f. \quad (4.7)$$

Отметим, что при предельной линейной плотности ДН ( $\rho=1$ ) междислокационное расстояние является минимальным и обозначено  $D_{\min}$ .

В литературе оно очень широко используется для ГР(001), однако его нередко применяют и для ГР(111), как это имело место, например, в работах [88-90]. Нами в [91] было строго показано, что равенство (4.7) действительно справедливо для ГР(001), но не выполняется, если в ГР(111) вводятся три одностипных семейства одинаковой плотности ( $n=3$  и  $D_1=D_2=D_3$ ). При таком введении ДН все три семейства развернуты на азимутальные углы  $120^\circ$ . Согласно (4.6), для обсуждаемого введения ДН предельной линейной плотности в ГР(111) следует равенство

$$D_{\min} = (3/2) b^e/f. \quad (4.8)$$

В работах [91, 92] нами показано, что использование (4.8) для определения  $D_{\min}$  кардинально изменяет интерпретацию исследуемых дислокационных сеток. Авторы [90], приняв (4.7) для ГР(111), утверждают, что исследованные ими дислокационные семейства содержат полные  $60^\circ$ -ДН. Нами показано [91], что на электронно-микроскопических снимках авторами [90] зарегистрирована сетка частичных  $90^\circ$ -ДН Шокли.

## 4.2. Использование фундаментальной формулы (4.6а) для анализа дислокационной границы раздела (013)

В данном разделе выполнен анализ дислокационной ГР(013), которая используется для получения эпитаксиальных структур CdHgTe на подложках GaAs и Si [93, 94]. В ГР(013) могут вводиться 12 дислокационных семейств (табл.4.2), которые залегают вдоль четырех направлений, лежащих в плоскости (013). Они приведены в последнем столбце табл.4.2. В ходе анализа установлено, что минимальным количеством  $n$  семейств ДН, которое обеспечивает оптимальное снятие напряжений несоответствия (выполняется условие 4.5) является  $n_{\min}=3$ . Для указанного значения  $n$  в первом столбце табл.4.3 записаны комбинации различных семейств ДН, которые образуют дислокационную сетку в границе раздела. Например, комбинация 8, 11, 2 составлена из семейств № 8, 11 и 2, представленных в табл.4.2 (выделено серым цветом). В таблице 4.3 приведены междислокационные расстояния ( $D_i$ ) для каждого семейства, также определяемое ими значение  $D$  и толщина верхнего ненапряженного слоя  $h-D$ . В последнем столбце представлена полная упругая энергия  $E_F$ , созданная во всей пленке ( $h=1000$  ангстрем) деформационными полями ДН. В предпоследнем столбце табл.4.3 приведена энергия  $E$  – доля упругой энергии  $E_F$ , накопленная в слое пленки толщиной  $h-D$ . Для всех комбинаций дислокационных семейств величина  $E$  меньше  $E_F$  на 5-6 порядков, что свидетельствует о практически полном отсутствии ДаНН и ДаСН в верхнем слое пленки толщиной  $h-D$ . Распределение нормальных  $\sigma_{xx}$  и сдвиговых  $\sigma_{xy}$  напряжений по глубине пленки приведено на рис.4.1 для комбинации дислокационных семейств 8, 11, 2 (см. выделенную серым цветом строку табл.4.3). Несоответствие параметров решеток пленки и подложки  $f=4\%$ . В области  $D=340$  ангстрем имеет место резкое уменьшение как ДаНН, так и ДаСН.

Приведенные в табл.4.3 расчеты выполнены на основе формул (4.5) и (4.6а). Полученные результаты демонстрируют применимость формулы (4.6) для анализа дислокационной границы раздела произвольной ориентации. Результаты анализа показывают, что в эпитаксиальной пленке на расстоянии  $z \geq D$  от ГР нормальные и

сдвиговые напряжения практически отсутствуют, если выполняется условие (4.5). Отметим, что отсутствие нормальных напряжений свидетельствует о том, что суммарное поле ДАНН, созданное всеми дислокациями несоответствия, равно полю напряжений несоответствия, взятому с противоположным знаком.



Таблица 4.2. Параметры семейств дислокаций несоответствия, вводимых по механизму скольжения в границу раздела (013) гетеросистем, когда параметр решетки пленки ( $a_f$ ) превышает параметр подложки ( $a_s$ ).

Данные о семействах дислокаций			Ориентация границы раздела – ( 0 1 3 )	
№	плоскость скольжения	направление вектора Бюргера	тип винтов. составл.	направ. дислок. линии
1	(-1 -1 1)	[ 1 0 1]	левая	[-4 3 -1]
2	(-1 -1 1)	[ 0 1 1]	правая	
3	(-1 -1 1)	[-1 1 0]	правая	
4	( 1 -1 1)	[ 1 1 0]	левая	[-4 -3 -1]
5	( 1 -1 1)	[ 0 1 1]	левая	
6	( 1 -1 1)	[-1 0 1]	правая	
7	( 1 1 1)	[-1 1 0]	левая	[ 2 -3 1]
8	( 1 1 1)	[-1 0 1]	левая	
9	( 1 1 1)	[ 0 -1 1]	правая	
10	(-1 1 1)	[ 0 -1 1]	левая	[ 2 3 -1]
11	(-1 1 1)	[ 1 0 1]	правая	
12	(-1 1 1)	[ 1 1 0]	правая	

Таблица 4.3. Комбинации семейств ДН, формирующие в границе раздела (0 1 3) сетку дислокаций несоответствия.

Семейства ДН	$D_i$ , ангстрем			$D$	$h-D$	$E$ , Дж/м <sup>2</sup>	$E_F$ , Дж/м <sup>2</sup>
				ангстрем			
8 9 10	56.7	453.3	64.8	454	546	7.64E-07	0.15942
11 9 10	56.7	64.8	453.3	454	546		
8 10 2	56.7	68.0	249.5	250	750	3.72E-06	0.17384
11 9 5	56.7	68.0	249.5	250	750		
8 10 5	56.7	113.4	83.1	114	886	3.07E-06	0.20015
11 9 2	56.7	113.4	83.1	114	886		
8 11 2	340.2	68.0	41.6	340	660	2.27E-06	0.20853
8 11 5	68.0	340.2	41.6	340	660		
8 5 7	68.0	35.6	340.2	340	660	2.94E-07	0.20804
11 2 12	68.0	35.6	340.2	340	660		
8 5 12	75.5	33.3	226.8	227	773	4.35E-07	0.19858
11 2 7	75.5	33.3	226.8	227	773		

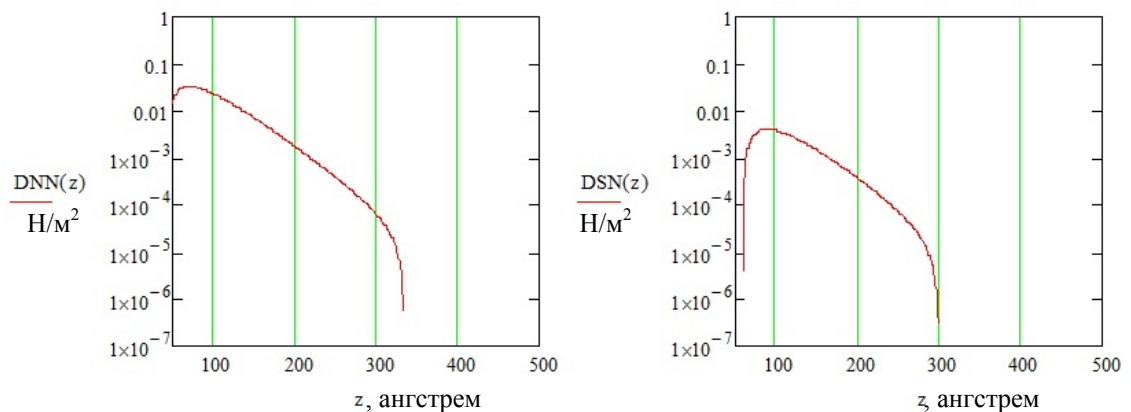


Рис.4.1. Графики распределения нормальных (а) и сдвиговых (б) напряжений по толщине пленки для комбинации семейств 8, 11, 2 (табл.4.3).

### 4.3. Два варианта неоптимального протекания процесса релаксации напряжений несоответствия

Если выполняется условие (4.5), то выполняется и условие (4.6a), однако обратное утверждение справедливо не всегда. Выполнение условия (4.5) характеризует оптимальный вариант релаксации напряжений, когда в верхнем слое пленки напряжения несоответствия полностью компенсированы и отсутствуют ДаСН. Возможен неоптимальный вариант, когда в верхнем слое толщиной  $h-D$  при выполнении условия (4.6a) присутствует поле ДаСН, из-за которых энергия гетеросистемы будет теоретически неограниченно расти с увеличением толщины пленки. В работах [2, 45] показано, что по порядку величины эти напряжения могут быть сравнимы с ДаНН. В диссертации установлены два вида полей ДаСН. Наиболее наглядно это можно показать для строго сингулярной границы раздела (001), что и представлено.

Поле ДаСН первого вида возникает при введении дислокаций несоответствия с различной плотностью в двух ортогональных направлениях, т.е. при наличии разницы в степени релаксации напряжений в двух ортогональных направлениях. Для простоты рассмотрим случай, когда в ГР присутствуют только краевые (Ломеровские) ДН, притом выполняется условие (4.6a), т.е. ДаНН отсутствуют, но не выполняется условие (4.5). Напряженное состояние пленки описывается в рассматриваемом случае тензором

$$\sum_{i=1}^n \sigma_i + \sigma_0 = \begin{pmatrix} \tau_1 & 0 & 0 \\ 0 & -\tau_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Плотность ДН вдоль оси  $0x$  примем равной  $1/D_x$ , и вдоль оси  $0y$  –  $1/D_y$ , так что  $D_x < D_{\min} < D_y$ . Степень релаксации ( $\rho=100\%$ ) в двух взаимно перпендикулярных направлениях определится как  $D_{\min}/D_x$  и  $D_{\min}/D_y$ . Для того, чтобы тензор (4.9) являлся тензором чистого сдвига, необходимо, чтобы  $D_{\min}/D_x + D_{\min}/D_y = 2 \cdot 100\%$ . Тогда среднее значение  $\rho = 100\%$ . Если исходные напряжения несоответствия являются сжимающими (как, например, в случае GeSi

на Si), то после завершения релаксационного процесса вдоль оси  $Ox$  пленка будет растянута, а вдоль  $Oy$  – сжата. Если подставить в тензоры  $\sigma_i$  и  $\sigma_o$  соответствующие выражения (4.1 – 4.3) для ДаНН, ДаСН и напряжений несоответствия, то на основе равенства (4.9) получим аналитическое выражение для величины **сдвиговых напряжений первого вида**

$$\tau_1 = Gb^e/D_x - Gb^e/D_y \quad (4.10)$$

В экспериментальной практике поле ДаСН первого вида зарегистрировано в комбинации с полем ДаНН ( $\rho < 100\%$ ), когда приведенный к главным направлениям тензор

записывается 
$$\begin{pmatrix} -\sigma + \tau_1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma - \tau_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
. Такое состояние пленки экспериментально

наблюдалось в гетеросистемах InGaAs – GaAs и описано в работе [66]. Разность значений  $\rho$  во взаимно перпендикулярных направлениях достигает  $\Delta\rho = 55\%$  (вдоль направления  $[110]$   $\rho = 96\%$ , и вдоль направления  $[-110]$  –  $41\%$ ). В главе 1 аналогичный пример поля ДаСН первого вида приведен для эпитаксиальной пленки GeSi на Si [77]. В этом случае  $\Delta\rho = 15\%$  (табл.1.2). Аналогичные результаты представлены в [95] для гетеросистемы InGaAs – GaAs, а также в работе [96] для гетеросистем ZnSe–GaAs(001) и HgCdTe–CdTe(001).

**Поле ДаСН второго вида** возникает из-за наличия в ГР сетки дислокаций, вектор Бюргерса которых имеет винтовую составляющую  $b^s$ . Напомним, что каждое семейство ДН, имеющее винтовую составляющую, формирует свое поле ДаСН. В идеальном случае вводимые в ГР дислокационные семейства взаимно компенсируют все поля ДаСН, в результате чего (4.5) выполняется. В случае не полной компенсации ДаСН, даже при полном снятии напряжений несоответствия, состояние пленки будет описываться тензором

$$\begin{pmatrix} 0 & \tau_2 & 0 \\ \tau_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
. Повернув тензор на  $45^\circ$  вокруг нормали к границе раздела (ось  $Oz$ ), получим

$$\begin{pmatrix} \tau_2 & 0 & 0 \\ 0 & -\tau_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
, что демонстрирует чистый сдвиг и является аналогом поля ДаСН первого

вида. Важно указать, что в случае поля ДаСН первого вида главными направлениями тензора

напряжений являются направления типа  $\langle 110 \rangle$ , а в случае поля ДаСН второго вида – направления типа  $\langle 010 \rangle$ . Угол между главными направлениями тензора напряжений этих двух видов сдвиговых напряжений составляет  $45^\circ$ . При частичной релаксации напряжений

несоответствия суммарный тензор поля ДаСН второго вида равен 
$$\begin{pmatrix} -\sigma & \tau_2 & 0 \\ \tau_2 & -\sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Пример полей ДаСН второго вида для ГР(001) представлен в Главе 1 (рис. 1.8), когда вводятся  $60^\circ$  Г-образные ДН в наклонных плоскостях скольжения (табл.4.1). Как показано в [3], если в перпендикулярных направлениях вводятся два одинакововинтовых семейства ДН одной плотности (например, семейства 1 и 5), то в приповерхностном слое пленки отсутствуют ДаСН. Если же вводятся разновинтовые семейства (например, 1 и 6), то поля ДаСН каждого семейства ДН складываются, в результате чего суммарное поле усиливается в 2 раза и становится равным  $\tau_2=2Gb^s/D$ . Именно это имеет место в случае (рис. 1.8).

Работа [44] озаглавлена «The Key to Low Threading Dislocation Densities...», т.е. "ключ к уменьшению плотности пронизывающих дислокаций...". Авторы рекомендуют управляемое накапливание Г-образных ДН для устранения пронизывающих дислокаций (ПД). Однако накапливание таких дислокаций сопровождается возникновением ДаСН второго вида. Пластическая релаксация этих сдвиговых напряжений требует введения дополнительных дислокационных семейств, что с неизбежностью приведет к возникновению ПД. Это свидетельствует о некорректности рекомендуемого в [44] «ключа» улучшения структурного качества гетеросистемы. Пластическая релаксация ДаСН первого вида, которые возникают при введении дислокаций несоответствия с различной плотностью в двух ортогональных направлениях, также может сопровождаться увеличением плотности ПД. Изложенный в диссертации материал демонстрирует новый подход к рассмотрению реакций между пронизывающими дислокациями, который вытекает из следующих четырех возможных вариантов напряженного состояния приповерхностного слоя: (1) чистый сдвиг, (2) однородное поле нормальных напряжений, (3) однородное поле сдвиговых и нормальных напряжений, а также (4) полностью ненапряженное состояние. Варианты (4) и

(1) характеризуют релаксационные процессы, которые завершились, соответственно, оптимально и неоптимально. Варианты (2) и (3) характеризуют процессы, находящиеся в развитии, и протекающие, соответственно, оптимально или неоптимально.

Обсудим два способа взаимодействия между ПД, которые по-разному влияют на характер релаксационного процесса. Рассмотрим несколько сравнительно коротких дислокаций несоответствия, последовательно расположенных вдоль линии, параллельной  $\langle 110 \rangle$  и лежащей в плоскости ГР (001). Для простоты примем, что все ДН имеют одинаковый вектор Бюргера  $\mathbf{b}$ . Обозначим эти отрезки ДН как  $A_1V_1$ ,  $A_2V_2$  и  $A_3V_3$ , а связанные с образованием этих ДН пронизывающие дислокации обозначим  $A_1A'_1$ ,  $V_1V'_1$ ,  $A_2A'_2$ ,  $V_2V'_2$ ,  $A_3A'_3$  и  $V_3V'_3$  (рис. 4.2а). Если толщина  $h$  небольшая ( $h < D$ ), то под действием напряжений несоответствия отрезкам ПД энергетически выгодно создавать дислокационные участки типа  $V'_iA'_{i+1}$ , показанные на рис.4.2б. Эти участки являются дислокациями несоответствия, которые залегают не в границе раздела, и снимают напряжения несоответствия. Вектор Бюргера  $\mathbf{b}$  и направление дислокационной линии на этих участках такое же, как на участках  $A_iV_i$ . Если в направлении, перпендикулярном залегающим ДН, имеет место  $\rho < 1$ , то в идеализированном случае участкам  $V'_iA'_{i+1}$  энергетически выгодно переместиться в ГР, но в реальных структурах это может быть затруднено из-за существования различных препятствий. Если же  $\rho \geq 1$ , то даже в идеализированном случае перемещение в ГР участков  $V'_iA'_{i+1}$  энергетически невыгодно из-за дополнительного увеличения  $\rho$ . В результате, формируется трехмерная сетка дислокаций вблизи ГР.

Как показано в [16], при отсутствии внешних напряжений дислокационным участкам, прилегающим к точкам  $A'_i$  и  $V'_i$  (рис. 4.2а), энергетически выгодно сблизиться и аннигилировать. Поэтому, если длины отрезков ПД сравнительно большие, и их верхние концы находятся вдали от ГР, т.е. в области нулевых результирующих напряжений, то им энергетически выгодно создавать не только дислокационные участки типа  $V'_iA'_{i+1}$  (рис.4.2б), но и участки типа  $V'_iA'_i$ , показанные на рис.4.2в. Рассмотрим более подробно последние. Участки этого типа имеют тот же вектор Бюргера  $\mathbf{b}$ , что и у дислокации  $A_iV_i$ , однако направление дислокационных линий противоположны. Таким образом, участки типа  $V'_iA'_i$  не

снимают несоответствие в пленке, а наоборот добавляют. Если для случая нереагирующих ПД (рис.4.2а) на локальном участке гетеросистемы степень пластической релаксации вдоль обсуждаемого направления  $\langle 110 \rangle$  обозначить  $\rho_a$ , то для случаев реагирующих ПД (рис.4.2б) и (рис.4.2в) будет справедливо  $\rho_{\sigma} > \rho_a > \rho_{\epsilon}$ .

Если в случае неоптимально протекающего (или неоптимально завершившегося) процесса какой-то из двух вариантов изменения степени релаксации  $\rho_o \rightarrow \rho_{\sigma}$  или  $\rho_o \rightarrow \rho_{\epsilon}$  будет способствовать переходу неоптимального процесса в оптимальный, то, соответствующие дислокационные реакции (рис.4.2б) или (рис.4.2в) и будут наиболее вероятными на различных локальных участках гетеросистемы. Из изложенного материала видно, что реакции между ПД в объеме растущей пленки находятся во взаимной связи с протеканием релаксационного процесса.

Обсуждаемые в настоящем разделе два варианта неоптимального протекания релаксационного процесса по-разному проявляются на различных стадиях процесса. На начальной стадии отчетливо зарегистрировано поле ДаСН второго вида ( $\tau_2$ ) [28], а на промежуточной – первого вида ( $\tau_1$ ) [66, 95]. В литературе нет данных о присутствии ДаСН после завершения релаксационного процесса. Одним из факторов, обеспечивающих их устранение в условиях, когда ДН перестали вводиться, но плотность ПД в растущей пленке уменьшается [96], по-видимому, являются дислокационные реакции (рис.4.2б) и (рис. 4.2в). Если, в соответствии с формулой (4.10) имеет место  $D_y > D_x$ , то в направлении  $0y$  должны доминировать реакции (рис.4.2б), а в направлении  $0x$  – реакции (рис.4.2в).

Дислокационные участки  $V'_i A'_{i+1}$  и  $V'_i A'_i$ , изображенные на рис.4.2б и рис.4.2в, формируют малоугловую границу. Участки  $V'_i A'_{i+1}$  (рис.4.2б) создают разворот в ту же сторону что и ДН, лежащие в границе раздела, поскольку имеют сонаправленные векторы Бюргерса и линии дислокаций. Участки  $V'_i A'_i$  (рис.4.2в) создают разворот в противоположную сторону, чем ДН, лежащие в границе раздела, поскольку направление их дислокационных линий противоположны. В настоящей работе исследуется разворот кристаллической решетки пленки относительно решетки подложки, сформированный трехмерной дислокационной сеткой, залегающей в ГР и приграничной области.

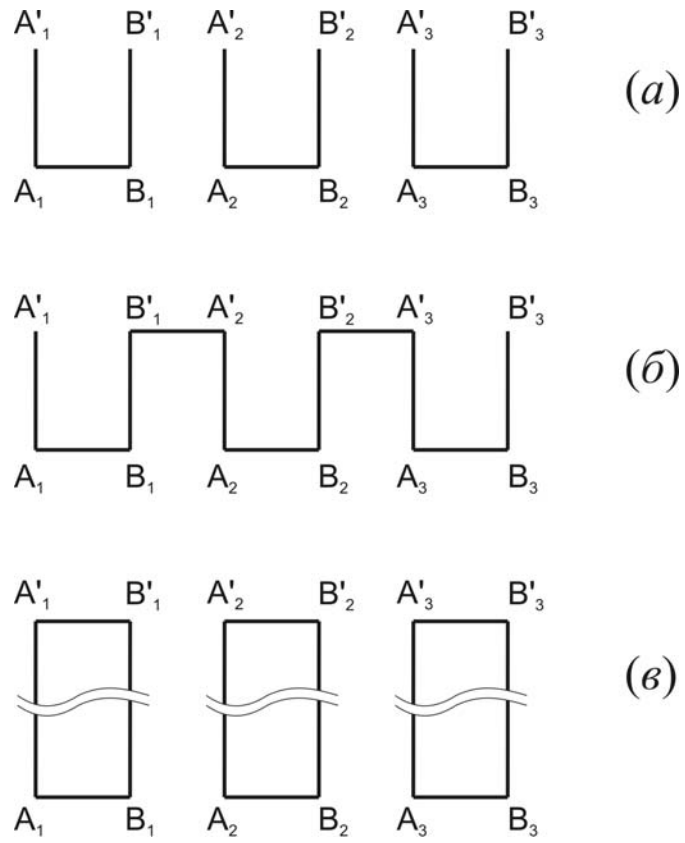


Рис.4.2. Реакции между пронизывающими дислокациями в пленке, влияющие на степень пластической релаксации  $\rho$ . Отрезками схематично изображены:  $A_i B_i$  – дислокации несоответствия;  $A_i A'_i$ ,  $B_i B'_i$  – пронизывающие дислокации;  $B'_i A'_i$  и  $B'_i A'_{i+1}$  – прореагировавшие в объеме пленки верхние участки пронизывающих дислокаций.



#### 4.4. Поле сдвиговых напряжений в системе с границей раздела (111)

В ГР(111) могут вводиться ДН как по наклонным плоскостям скольжения  $\{111\}$  (обозначим такие дислокации ДН $\{111\}$ ), так и по плоскостям (111), параллельным ГР (эти дислокации будем обозначать ДН(111)). Возникновение ДН $\{111\}$  происходит в рамках систем скольжения №1, 2, 4, 5, 11 и 12 (см. табл. 4.1), дислокации залегают в направлениях  $\langle 110 \rangle$ , расположенных через  $120^\circ$ . Анализ, выполненный с использованием данных табл. 4.1, позволяет заключить следующее. Если вводятся три правовинтовых («right screw») или три левовинтовых («left screw») семейства ДН $\{111\}$ , то при одинаковой предельной линейной плотности ДН всех трех пересекающихся семейств (когда в выражении 4.6 имеет место  $D_1=D_2=D_3$ ) условие 4.5 будет выполняться. Такой вариант снятия напряжений несоответствия является оптимальным и соответствует минимуму энергии. Если же три семейства содержат смесь правовинтовых и левовинтовых ДН, то возникает поле ДаСН. При реализации такого варианта энергия гетеросистемы будет теоретически неограниченно возрастать с увеличением толщины пленки.

Дислокационный интерфейс, содержащий только ДН(111), представляется перспективным для технологии в силу двух следующих факторов. Во-первых, возможно введение ДН Шокли, которые не просто являются краевыми дислокациями, но дополнительно имеют минимальный для кристаллической решетки германия вектор Бюргерса  $b=0.231\text{нм}$ . Дефекты упаковки, присутствующие в ГР (между ДН Шокли), не ухудшают структурные свойства гетеросистемы, поскольку в объем пленки не проникают. Во-вторых, поскольку все ДН лежат в плоскостях скольжения, которые параллельны ГР, возможно их однородное по площади распределение. Пример треугольной сетки ДН(111), являющихся краевыми ДН Шокли, приведен в наших работах [91, 92]. Укажем, что для зарождения и скольжения ДН(111) необходимо присутствие сдвиговых напряжений  $\tau_{zx}$ , имеющих максимум вблизи краев пленки [98, 99]. В работах [91, 92] на примере гетеросистемы Ge/Si(111) нами показано, что сравнительно однородное распределение ДН(111) имеет место в дислокационных интерфейсах под наноструктурами.

В системах скольжения №7, 8 и 9 дислокации ДН(111) могут залегать в любом направлении. Примеры криволинейных дислокаций этих семейств, которые непрерывно изменяют направление своего залегания в широком диапазоне углов, представлены в [98, 100]. Поэтому для систем 7-9 возможны 6 семейств  $60^\circ$ -дислокаций несоответствия – по два семейства для каждой системы скольжения. В каждой паре таких семейств с общим вектором Бюргера одно является правовинтовым, а второе – левовинтовым. Обратим внимание, что при пересечении двух ДН, имеющих общий вектор Бюргера и общую систему скольжения, четверному дислокационному узлу энергетически выгодно распасться на две Г-образные ДН по механизму скольжения. Однако, в отличие от Г-образных ДН, возникающих по механизму Рида [18], распавшиеся дислокации будут скользить в общей плоскости.

Анализ показывает, что если такие Г-образные ДН имеют линейную плотность, равную  $1/D_i = f/b_i^e$ , то выражение (4.5) будет выполняться, т.е. ДаСН не возникнут.

Возможны еще два варианта комбинации семейств  $60^\circ$ -ДН, скользящих в плоскостях (111), параллельных ГР и не создающих ДаСН. Для их формирования необходимо участие всех трех систем скольжения №7 – 9. Первым вариантом является комбинация трех семейств правовинтовых дислокаций, а второй – комбинация трех семейств левовинтовых дислокаций. Каждое из семейств должно иметь линейную плотность, равную  $1/D_i = (2/3)f/b_i^e$ . Если же с использованием всех указанных систем скольжения №7 – 9 сформировать три семейства, не являющиеся одинакововинтовыми, то ДаСН возникнут.

#### 4.5. Дислокационная структура вицинальной границы раздела (111) гетеросистемы Ge/Si

На примере гетеросистемы Ge/Si с вицинальной ориентацией (111) в диссертации продемонстрирован тот факт, что использование выражения (4.6) является принципиально важным для корректной интерпретации зарегистрированного дислокационного изображения.

Экспериментальные исследования выполнены с использованием сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Эпитаксия Ge проводилась в сверхвысоковакуумной установке СТМ производства OMICRON. В качестве вицинального среза подложки (111) использовалась плоскость  $(\bar{7} \bar{7} 10)$ , отклоненная от плоскости (111) на угол 10,02 град. Особенностью свободной поверхности подложки Si  $(\bar{7} \bar{7} 10)$  является присутствие однородной системы «трехбислойных» ступеней высотой около 1 нм, которые вытянуты вдоль направления  $\langle 110 \rangle$  [92]. В результате этого возникают протяженные террасы, на которых при снятии напряжений несоответствия формируются дислокационные интерфейсы (111).

На рис.4.3 представлены СТМ (а) и ПЭМ (б-г) изображения дислокационных островков Ge. Островки вытянуты в направлении  $[1 \bar{1} 0]$ , параллельном ступеням среза подложки Si  $(\bar{7} \bar{7} 10)$ . Правые края островков прижаты к ступеням, от которых начинался их рост, и форма этих краев сравнительно прямолинейна. ПЭМ-изображения являются комбинацией муаровой и дислокационной картин и получены в трех отражениях  $g_{\langle 220 \rangle}$ , параллельных ГР. Из-за неоднородного изгиба образца на некоторых участках островков реализуется режим получения темнопольного изображения, а на некоторых участках – режим слабого пучка. Примеры аналогичных изображений, в гетеросистеме Ge/Si(111), когда отсутствовал неоднородный изгиб образца, представлены в [88]. Четыре участка на снимках рис.4.3а и рис.4.3в, на которых наблюдаются оптимальные темнопольные сплошные муаровые картины, аналогичны приведенным в [88], обведены овалами. На прямоугольном участке W (рис.4.3в) возникли отчетливо прерывистые муаровые линии, являющиеся комбинацией муарового и дислокационного изображений. На рис.4.4а этот участок показан

в увеличенном виде. Идеализированная картина распределения муаровых полос на участке W показана на рис.4.4б системой квазипериодических горизонтальных линий. Период муара данной картины равен 9.0 нм, что для  $g_{\langle 220 \rangle}$  позволяет определить уровень снятия напряжений несоответствия  $\rho_M=55\%$ . Укажем, что  $\rho=100\%$  имеет место при  $D_{\min}$ . Согласно исследованиям, выполненным в [88], распределение дислокаций на исследуемом участке W можно получить на основании картины прерывистых муаровых линий. Они показаны на рис.4.4в двумя системами наклонных линий, параллельных  $[1 -1 0]$  и  $[-1 0 1]$ . Для обеих систем средние междислокационные расстояния совпадают и равны  $D=15.0$  нм. Установим теперь тип дислокационной структуры, используя выражение (4.8). Зная  $D$  и  $\rho=55\%$ , можно по формуле  $(D_{\min}/D) = (\rho/100\%)$  определить  $D_{\min} = 8.25$  нм. Тогда по (4.8) для  $f=4\%$  получаем  $b^e=0.22$  нм. Такому значению проекции краевой компоненты вектора Бюргерса на ГР соответствуют частичные  $90^\circ$ -ДН Шокли, для которых  $b^e=0.231$  нм. Разность этих значений  $b^e$  составляет 3.9%. Для любых других ДН, существующих в гетеросистеме Ge/Si(111), величины  $b^e$  намного значительнее отличаются от 0.22 нм. Если же для анализа дислокационной картины, возникшей в ГР(111), использовать не формулу (4.8), а формулу (4.7), то для  $D_{\min} = 8.25$  нм получаем  $b^e=0.33$  нм. Этому значению проекции краевой компоненты вектора Бюргерса на ГР(111) соответствуют полные  $60^\circ$ -ДН, имеющие  $b^e=0.346$  нм. Представленный анализ нами выполнен в работах [91, 92].

В данном случае продемонстрировано, что применение выражения (4.8) позволяет, корректно установить тип дислокационной структуры, возникшей в гетеросистеме Ge/Si(7 7 10). На рис.4.4в показаны две системы наклонных линий ( $90^\circ$ -ДН). При пересечении они образуют ромбы. Третья система  $90^\circ$ -ДН перпендикулярна муаровым линиям, т.е. параллельна длинной стороне рисунка (рис.4.4а). Для нее вектор Бюргерса  $\mathbf{b}=(a/6)[-211]$  перпендикулярен  $g[0 -2 2]$ . Изображения дислокаций с таким вектором Бюргерса на рис.4.3в и на рис.4.4 не должны иметь контраст, поскольку для них выполняются условия  $g\mathbf{b}=0$  и  $(g\mathbf{b}\mathbf{n})=0$ ; здесь  $\mathbf{n}$  – это направление ДН. Линии, соответствующие обсуждаемой третьей системе  $90^\circ$ -ДН, отчетливо видны на правой части снимка (рис.4.3г) и менее отчетливо – на

правой части снимка (рис.4.3б). Расстояние между ними, как и междислокационные расстояния на рис.4.4в, равны  $D=15.0$  нм.

Если же в соответствии с формулой (4.7) и данными работы [90] принять, что параллельно длинной стороне рисунка (рис.4.4а) расположены полные  $60^\circ$  ДН, то для них условия  $gb=0$  и  $(gbn)=0$  не выполняются и их изображения должны присутствовать на рис.4.3в. Последний вывод не соответствует экспериментальным данным и подтверждает корректность представленного в диссертации анализа.

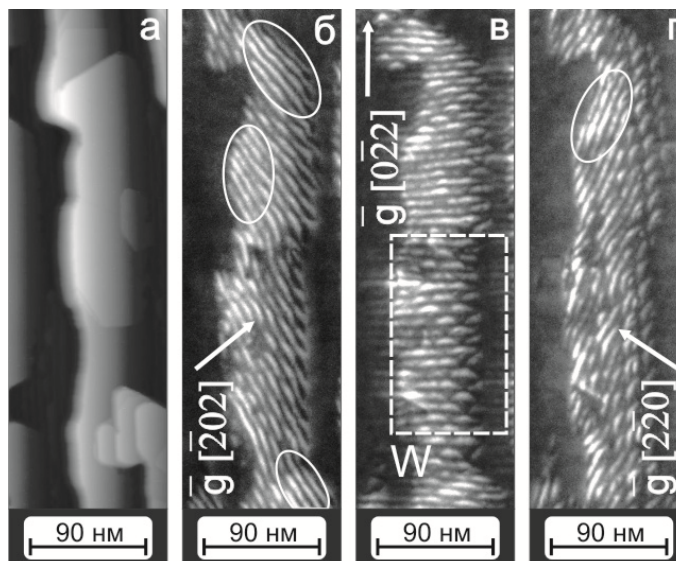


Рис.4.3. СТМ (а) и ПЭМ (б-г) изображения дислокационных островков Ge на подложке Si (7 7 10), полученные от одного образца. Стрелками указаны отражающие векторы  $\mathbf{g}$  типа  $\langle 220 \rangle$ , параллельные плоскости (111). На участках, обведенных овалами, регистрируются преимущественно муаровые картины, полученные в режиме «темного поля». На прямоугольном участке W представлена комбинация муарового и дислокационного изображений, зарегистрированная в режиме «слабого пучка».

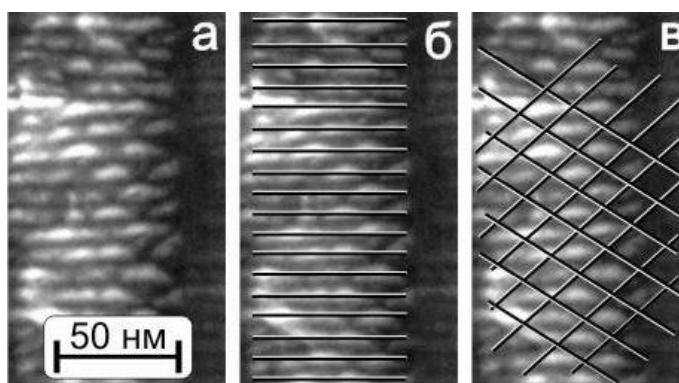


Рис.4.4. Увеличенное изображение показанного на рис. 4.3в участка W (а), а также схематичные изображения муаровых (б) и дислокационных (в) линий для этого участка.

## Выводы по главе 4

1. Для гетеросистем с кристаллической решеткой типа алмаза или сфалерита при полном снятии напряжений несоответствия в результате введения  $n$  дислокационных семейств справедливо выражение

$$\sum_{i=1}^n (b_i^e / D_i) = 2f. \quad (*)$$

Здесь  $b_i^e$  - проекция краевой компоненты вектора Бюргерса на границу раздела,  $D_i$  - среднее расстояние между дислокаций несоответствия  $i$ -го семейства,  $n$  - число семейств, участвующих в снятии напряжений несоответствия. Формула (\*) характеризует дислокационную границу раздела, т.е. отражает удельный вклад каждого дислокационного семейства. Выполнение данного выражения является достаточным условием, чтобы классифицировать процесс введения дислокаций несоответствия в качестве заверщенного процесса. Выражение справедливо для произвольной ориентации границы раздела.

2. Для гетеросистемы Ge/Si (7 7 10), полученной в результате эпитаксии Ge с использованием сурфактанта висмута, применение выражения (\*) позволило установить, что дислокационная гетерограница содержит сетку частичных  $90^\circ$ -ДН Шокли.

3. Разработана модель поиска различных комбинаций дислокационных семейств  $a/2\langle 110 \rangle \{111\}$ , обеспечивающих полную пластическую релаксацию напряжений несоответствия и отсутствие дальнедействующих сдвиговых напряжений. Модель проверена на примере гетеросистемы с границей раздела (013). Установлено 12 комбинаций, включающих по 3 дислокационных семейства.

4. В растущей эпитаксиальной пленке сетка дислокаций несоответствия формирует поле однородных дальнедействующих напряжений в приповерхностном слое толщиной  $h-D$ . Здесь  $D$  равно наибольшему из значений  $D_i$ . При максимальной (предельной) плотности ДН результирующим полем напряжений является либо плоское состояние чистого сдвига, либо полностью ненапряженное состояние пленки.

5. Для эпитаксиальных слоев с кристаллической решеткой типа алмаза и сфалерита и границей раздела (001) установлены два вида полей напряжений чистого сдвига,

характеризующих неоптимально завершённый процесс снятия напряжений несоответствия. Для одного из полей главные направления тензора напряжений параллельны кристаллографическим направлениям  $[100]$  и  $[010]$ , а для второго – параллельны направлениям  $[110]$  и  $[1-10]$ .



## Основные результаты и выводы по диссертации

Экспериментально установлено, что в процессе эпитаксии кристаллическая решетка пленки GaAs поворачивается вокруг ступеней вицинальной границы раздела (001) на угол порядка  $10^3$  угл.с. Направление поворота зависит от механизма формирования первого монослоя As. Определены варианты дислокационных семейств, обуславливающих указанный поворот. Получена оригинальная зависимость, характеризующая вклад дислокационных семейств в процесс релаксации. Установлены два типа релаксационных процессов, обеспечивающих снятие напряжений несоответствия гетеросистемы. При оптимальной релаксации какие-либо напряжения в приповерхностном слое пленки отсутствуют, а при неоптимальной – возникает однородное поле сдвиговых напряжений. Определен размер приповерхностного слоя. Данные результаты наиболее детально представлены в статьях [58, 77, 91, 92, 98], а также обсуждаются в работах [102-117].

### Выводы

1. Механизм зарождения эпитаксиальной пленки GaAs на Si(1 1 13) является фактором, характеризующим структурное состояние пластически релаксированной пленки. В процессе релаксации кристаллическая решетка пленки поворачивается относительно решетки подложки. Поворот происходит вокруг оси  $\langle 110 \rangle$ , параллельной ступеням, на угол порядка  $10^3$  угл.с. В результате поворота ориентация поверхности пленки удаляется от сингулярной плоскости (001), если первый монослой GaAs формируется замещением атомов кремния мышьяком; и ориентация этой поверхности приближается к (001), если первый монослой GaAs формируется осаждением атомов мышьяка.

2. С помощью регистрации карт распределения интенсивности рентгеновских лучей в обратном пространстве установлено деформационное и структурное состояние слоев GaP и GaAs гетеросистемы GaAs/GaP/Si(1 1 20). Слой GaP (50 нм) находится в псевдоморфном состоянии, а пленка GaAs (1000 нм) – в полностью релаксированном. Сетка дислокаций несоответствия расположена в границе, разделяющей эти слои.

3. В диссертации впервые получено справедливое для произвольной ориентации границы раздела выражение

$$\sum_{i=1}^n (b_i^e / D_i) = 2f, \quad (*)$$

которое устанавливает взаимную связь между параметрами дислокационных семейств. Здесь  $b_i^e$  - проекция краевой компоненты вектора Бюргерса на границу раздела,  $D_i$  - среднее расстояние между дислокациями несоответствия  $i$ -го семейства,  $n$  - число семейств, участвующих в снятии напряжений несоответствия. Выражение (\*) позволило показать, что сетка частичных  $90^\circ$ -ДН Шокли формируется как в сингулярной, так и в вицинальной границах раздела (111) гетеросистемы Ge/Si.

4. С использованием выражения (\*) установлено существование комбинаций неортогональных дислокационных семейств  $a/2\langle 110 \rangle \{111\}$ , которые обеспечивают полную пластическую релаксацию напряжений несоответствия и отсутствие дальнедействующих сдвиговых напряжений.

5. Величина  $D$ , равная наибольшему из значений  $D_i$  в выражении (\*), позволяет охарактеризовать распределение напряжений в эпитаксиальной пленке толщиной  $h > D$ . Расположенная вблизи границы раздела область пленки шириной  $D$  содержит неоднородное поле напряжений. Выше лежащая приповерхностная область пленки является либо ненапряженной, либо однородно напряженной.

6. Установлены 4 варианта однородного напряженного состояния приповерхностного слоя толщиной  $h-D$ : (1) поле сдвиговых напряжений, (2) поле нормальных напряжений, (3) поле, содержащее сдвиговые и нормальные напряжения, а также (4) полностью ненапряженное состояние. Варианты (2) и (3) характеризуют развивающиеся релаксационные процессы, а варианты (1) и (4) - завершённые процессы. Релаксационный процесс является оптимальным, если в приповерхностном слое отсутствуют сдвиговые напряжения (варианты 2 и 4).

Свою искреннюю благодарность автор выражает научному руководителю д.ф.-м.н. Е.М. Труханову. Автор благодарен сотрудникам ИФП СО РАН, которые оказывали помощь в получении экспериментальных и теоретических результатов, участвовали в дискуссиях, а именно: А.В. Колесникову, А.П. Василенко, К.Б. Фрицлеру, А.С. Ильину, М.А. Путято, Л.В. Соколову, А.К. Гутаковскому. Под руководством А.П. Василенко выполнена магистерская диссертация автора, которая составила существенную часть кандидатской диссертации.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

- [1] Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 599с.
- [2] Труханов Е.М. Влияние типа дислокаций несоответствия на энергию и структуру толстых эпитаксиальных пленок // Поверхность. – 1995. – №2. – С.13-21.
- [3] Колесников А.В. Роль винтовой дислокац. составляющей в пластической релаксации полупроводниковых гетеросистем (анализ процесса и моделирование) // Кандидатская диссертация, Новосибирск. – 2003. – 163с.
- [4] Василенко А.П., Колесников А.В., Труханов Е.М. Влияние дальнедействующих сдвиговых напряжений на образование метастабильной дислокационной структуры // Поверхность. – 2009. – №1. – С.66-70.
- [5] Trukhanov E.M. Effect of misfit dislocation type on the energy and structure of thick epitaxial films // Physics. Chemistry and Mechanics of Surfaces. Gordon & Breach Publishers. – 1995. – Vol.11, № 2. – P.123-132.
- [6] Trukhanov E.M. Long-range stresses and their effects on growth of epitaxial films // In the book: Growth of Crystals. – 1996. – Vol.20. – P.29-34.
- [7] Trukhanov E.M., Gorokhov E.B., Stenin S.I. Specific Features of the Dislocation Structure of Germanium in the System Ge-SiO<sub>2</sub> // Phys. Stat. Sol. – 1976. – Vol.33. – P.435-442.
- [8] Matthews J.W. The observation of dislocations to accomodate the misfit between crystals with different lattice parameters // Phil. Mag. – 1961. – Vol.6, N71. – P.1347-1349.
- [9] Matthews J.W. Defects associated with accomodation of misfit between crystals // J. Vac. Sci. Technol. – 1975. – Vol.12, N1. – P.126-133.
- [10] Jesser W.A., Matthews J. W. Evidence for Pseudomorphic growth of iron on copper // Phil. Mag. – 1967. – Vol.15, №138. – P.1097-1106.
- [11] Тхорик А., Хазан Л. С. Пластические деформации и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. – Киев, 1983. – 304с.
- [12] Труханов Е.М. Анализ природы возникновения фрагментарной структуры в гетероэпитаксиальных пленках // Поверхность. – 1995. – №2. – С.22-28.

- [13] Hirth J.P., Pond R.C. Strains and Rotations in Thin Deposited Films // *Philosophical Magazine*. – 2010. – Vol.90, № 23. – P.3129-3147.
- [14] Miki K., Tokumoto H., Sakamoto T., Kajimura K. Scanning Tunneling Microscopy of Anisotropic Monoatomic Steps on a Vicinal Si(001)-2x1 Surface // *Jap. J. Appl. Phys.* – 1989. – Vol.28, N 9. – P.1483–1485.
- [15] Фридель Ж. Дислокации. – М.: Мир, 1967. – 643с.
- [16] Халл Д. Введение в дислокации. – М.: Атомиздат, 1968. – 280с.
- [17] Legoues F. K., Powell A., Iyer S.S. Relaxation of SiGe thin-films grown on Si/SiO<sub>2</sub> substrates // *J. Appl. Phys.* – 1994. – Vol.75, №11. – P.7240-7246.
- [18] Рид В.Т. Дислокации в кристаллах. – М., Гос. н.-т. Изд. литературы по черной и цв. Metallургии, 1957. – 280с.
- [19] Read W.T. Dislocations in crystals. – New-York-London-Toronto, McGraw-Hill Publ. Company LTD, 1953. – 256p.
- [20] Амелинкс С. Методы прямого наблюдения дислокаций. – М.: Мир, 1968. – 275с.
- [21] Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. – М.: Мир, 1974. – С.234.
- [22] Romanov R.E., Pompe W., Mathis S., Beltz G.E., Speck J.S. Threading dislocation reduction in strained layers // *J. Appl. Phys.* – 1999. – Vol.85, №1. – P.182-192.
- [23] Romanov A.E., Pompe W., Beltz G.E., Speck J.S. An approach to threading dislocation 'reaction kinetics' // *Appl. Phys. lett.* – 1996. – Vol.69, №22. – P.3342-3344.
- [24] Speck J.S., Brewer M.A., Beltz G.E., Romanov R.E., Pompe W. Scaling laws for the reduction of threading dislocation densities in homogeneous buffer layers // *J. Appl. Phys.* – 1996. – Vol.80, №7. – P.3808-3816.
- [25] Мильвидский Г., Освенский Г. Б. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. – М.: Metallургия, 1985. – 159с.
- [26] Fitzgerald E.A. Dislocations in Strained-Layer Epitaxy: Theory, Experiment, and Applications // *Materials Sci. Reports.* – 1991. – Vol.7, N3. – P.87–142.

- [27] Труханов Е.М. Дислокационная структура напряженных полупроводниковых гетеросистем пленка – подложка // Докторская диссертация, Новосибирск. – 2002. – 333с.
- [28] Труханов Е.М., Ильин А.С., Красотин А.Ю., Василенко А.П., Дерябин А.С., Качанова М.М., Гутаковский А.К., Колесников А.В. Роль винтовой составляющей при формировании дислокационной структуры в гетеросистемах, приготовленных на основе Ge и Si // Поверхность. – 2007. – № 5. – С.28-36.
- [29] Ивукин И.Н., Артемьев Д.М., Бугров В.Е., Одноблюдов М.А., Романов А.Е. Моделирование напряженно-деформированного состояния в тонких структурированных пленках нитрида галлия на сапфировых подложках // Физика Твердого Тела. – 2012. – Т.54, № 12. – С.2294-2297.
- [30] Frigerl A., Brinciotti D.M., Ritchie and Donzelli G.P. On origin of strain relaxation in MOVPE InGaAs/GaAs SQWs by <010> aligned misfit dislocations // Workbook of 26<sup>th</sup> International Symposium on Compound Semiconductors, Berlin, Germany ISCS 1999, 18p.
- [31] Bullelieuwma C.W.T., Vandenhoudt D.E.W., Henz J., Onda N., Vonkanel H. Investigation of the defect structure of thin single-crystalline CoSi<sub>2</sub> (B) films on Si(111) by transmission electron-microscopy // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.73, № 7. – P.3220-3236.
- [32] Smith D.J., Tsen S.C.Y., Chen Y.P., Sivananthan S., Posthill J.B. Growth and characterization of heteroepitaxial CdTe and ZnTe on Ge(001) buffer layers // Appl. Phys. Lett. 1996. – Vol.69, № 14. – p.2086-2093.
- [33] Ishibashi A., Takeishi H., Uemura N., Kume M., Yabuuchi Y., Ban Y. Metalorganic vapor-phase epitaxy growth of a high-quality GaN/Ingan single-quantum-well structure using a misoriented SiC substrate // Jap. J. Appl. Phys. Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers. – 1997. – Vol.36, №3B. – P.1961-1967.
- [34] Lalande G., Guelton N., Cossement D., Saintjacques R.G., Dodelet J.P. Optimum growth-conditions for the epitaxy of GaAs on Ge by close-spaced vapor transport // Canadian J. Physics. – 1994. – Vol.72, № 5-6. – P.225-230.

- [35] Frigeri C., Brinciotti A., Ritchie D.M. Growth of InGaAs/GaAs on Offcut Substrates by MOVPE - Influence on Macrosteps and Dislocations Formation // CRYSTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY. – 1998. – Vol.33, N.3. – P.375-381.
- [36] Chou-WC Yang-CS Chu-AHM Yeh-AJ Ro-CS Lan-WH Tu-SL Tu-RC Chou-SC Su-YK Optical-Properties of  $Zn_{1-x}S_x$  Epilayers Grown on Misoriented GaAs Substrates // J. Appl. Phys. – 1998. – Vol.84, N.4. – P.2245-2253.
- [37] Beanland R. Dislocation multiplication mechanisms in low – misfit strained epitaxial layers // J. Appl. Phys. – 1995. – Vol.7, №12. – P.6217-6222.
- [38] Strunk H., Hagen W., Bauser E. Low-density dislocation arrays at heteroepitaxial ge/gaas-interfaces investigated by high voltage electron microscopy // Appl. Phys. – 1979. – Vol.18. – P.67-75.
- [39] Hagen W., Strunk H. A New Type of Source Generating Misfit Dislocations // Appl. Phys. – 1978. – Vol.17. – P.85–87.
- [40] 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, № 9. – P.4230-4233.
- [41] Shwarz K.W. Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. I. Methods and examples // J. Appl. Phys. – 1999. – Vol.85. – P.108-116.
- [42] Beanland B. Multiplication of misfit dislocations in epitaxial layers // J. Appl. Phys. – 1992. – Vol.72. – P.4031-4035.
- [43] Watson G.P., Ast D.G., Anderson T.J., Pathangey B. The barrier to misfit dislocation glide in continuous, strained, epitaxial layers on patterned substrates // J. Appl. Phys. – 1993. – Vol.75, № 5. – p. 3103-3109.
- [44] 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. Review Lett. – 1994. – Vol.72, N.6. – P.876-879.

- [45] Trukhanov E.M., Kolesnikov A.V. Film quality effects associated with formation of misfit dislocations at semiconductor interfaces // *Applied Surface Science*. – 1998. – Vol.123,N124. – P.669-673.
- [46] Болховитянов Ю.Б., Дерябин А.С., Василенко А.П., Гутаковский А.К., Пулято М.А., Соколов Л.В. Напряженные пленки Ge в гетероструктуре Ge/InGaAs/GaAs: образование краевых дислокаций несоответствия на границе Ge/InGaAs // *Физика твердого тела*. – 2011. – Т.53, №10. – С.1903-1909.
- [47] Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости – М.: Наука, 1975. – 576с.
- [48] Колесников А.В., Труханов Е.М. Рентгено дифракционные исследования пленок GeSi, выращенных на вицинальных (001) Si подложках // *Материалы второй международной молодежной научной школе - семинаре «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)»* 1 – 5 сентября, 2008. – С.109-110.
- [49] Труханов Е.М. Свойства дислокаций несоответствия и псевдодислокаций, не типичные для дефектов однородных кристаллов // *Поверхность*. – 2010. – № 1. – С.43-51.
- [50] Оура К. , Лифшиц В. Г. , Саранин А. А., Зотов А. В. , Катаяма М. Введение в физику поверхности. – М.: Наука, 2006. – 490с.
- [51] Кукушкин С.А., Осипов А.В. Процессы конденсации тонких пленок // *УФН*. – 1998. – Т.168, № 10. – С.1083–1116.
- [52] Кукушкин С А, Разумов С В, Калинин И П, Красинькова М В. Процессы роста тонких плёнок  $\text{Bi}_{12}\text{TixSi}_{1-x}\text{O}_2$  из жидкой фазы // *Кристаллография*. – 1990. – Т.35, №6. – С.1517-1522.
- [53] Bringans R. D., Biegelsen D. K., Swartz. L. E. Atomic-step rearrangement on Si(100) by interaction with arsenic and the implication for GaAs-on-Si epitaxy // *Phys. Rev.* – 1991. – Vol.44, N7. – P.3054 – 3063.
- [54] Болховитянов Ю. Б. , Пчеляков О. П. Эпитаксия GaAs на кремниевых подложках: современное состояние исследований и разработок // *УФН*. – 2008. – Т.178,№5. –С.459 – 480.

- [55] Путьято М. А., Семягин Б. Р., Емельянов Е. А., Феклин Д. Ф., Василенко А. П., Преображенский В. В. Молекулярно-лучевая эпитаксия GaP на вицинальной поверхности Si(001): влияние условий зарождения на кристаллографические свойства тонких пленок // Известия ВУЗов. – 2010 –Т.53, №9-2. – С.293-297.
- [56] Putyato M.A., Preobrazhenskii V.V., Semyagin B.R., Fëklin D.F., Pakhanov N.A., Emelianov E.A., Chikichev S.I. A valved cracking phosphorus beam source using InP thermal decomposition and its application to MBE growth // Semicond. Sci. Technol. – 2009. – Vol.24. –P.055014-055020.
- [57] Путьято М. А., Семягин Б. Р., Емельянов Е. А., Паханов Н. А., Преображенский В. В. Молекулярно-лучевая эпитаксия структур GaAs/Si(001) для высокоэффективных тандемных АЗВ5-преобразователей солнечной энергии на активной кремниевой подложке // Известия ВУЗов. – 2010. –Т.53, №9. – С.26 – 32.
- [58] Лошкарев И.Д., Василенко А.П., Труханов Е.М., Колесников А.В., Путьято М.А., Семягин Б.Р., Преображенский В.В., Пчеляков О.П. Зависимость пластической релаксации пленок GaAs от способа зарождения первого монослоя As на Si(001) // Известия РАН, серия физическая. – 2013. – Т.77, №3. – С.264-267.
- [59] Nagai H. Anisotropic bending during epitaxial growth of mixed crystals on GaAs substrate // J.Appl.Phys. – 1972. – Vol.43. – P.4254-4256.
- [60] Nagai H. Structure of vapor-deposited GaInAs // J. Appl. Phys. – 1974. – Vol.45. – P.3789-3794.
- [61] Auvray L., Baudet M., Regreny A. X-ray diffraction effects in Ga and Al arsenide structures MBE- grown on slightly misoriented GaAs(001) substrates // J. Cryst. Growth. – 1989. – Vol.95. – P.288-291.
- [62] Auvray L., 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.109-114.
- [63] Neumann D. A., Zabel H., Morkoc H. Terracing in strained-layer superlattices // J. Appl. Phys. –1988. – Vol.64. – P.3024-3030.



- [64] Pesek A., Hingerl K., Riesz F., Lischka K. Lattice misfit and relative tilt of lattice planes in semiconductor heterostructures // *Semicond. Sci. Technol.* – 1991. – Vol.6. – P.705-708.
- [65] Yasufumi Takagi, Yuzo Furukawa, Akihiro Wakahara, Hirofumi Kan Lattice relaxation process and crystallographic tilt in GaP layers grown on misoriented Si(001) substrates by metalorganic vapor phase epitaxy // *J. Appl. Phys.* – 2010. – Vol.107. – P.063506-1-8.
- [66] Goldman R. S., Kavanagh K. L., Wieder H. H., Ehrlich S. N., Feenstra R. M. Effects of GaAs substrate misorientation on strain relaxation in InGaAs films and multilayers // *J. Appl. Phys.* – 1998. – Vol.83, №10. – P.5137-5149.
- [67] Fang S F, Adomi K, Iyer S, Morkoc H, Zabel H, Choi C, Otsuka N. Gallium arsenide and other compound semiconductors on silicon // *J. Appl. Phys.* 1990. – Vol.68. – P.31-58.
- [68] Боуэн Д.К., Таннер Б.К. Высокоразрешающая рентгеновская дифрактометрия и топография. – Сб.-П.: Наука, 2002. – 276с.
- [69] Матвеев Ю.А., Батурин В.Е., Овценко А.Г. Метод многокристалльной рентгеновской дифрактометрии в технологии контроля процессов изготовления ИЭТ. – М.: Электроника, 1984. – 58с.
- [70] Музыков П.Г., Разумовский А.Ю., Сударшан Т.С., Чернов М.А. Влияние некомпланарности векторов дифракции на характеристики двухкристалльных кривых качания // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов.* – 2003. – Т.69, №12. – С.24-28.
- [71] Chu X, Tanner B.K. Double crystal x-ray rocking curves of multiple layer structures // *Semicond. Sci. Technol.* – 1987. – Vol.2. – P.765-771.
- [72] Номероцкий Н.В., Пчеляков О.П., Труханов Е.М. Рентгендифракционные исследования взаимной диффузии в сверхрешетке Si/Si<sub>0,3</sub>Ge<sub>0,7</sub> // *Поверхность.* – 1993. – №2. – С.57-62.
- [73] Труханов Е.М., Амиржанов Р.М., Федоров А.А. Определение градиента поля искажений периода сверхрешеток с помощью синхротронной дифракционной топографии // *Поверхность.* – 1996. – №9. – С.64-68.
- [74] Гинье А. Рентгенография кристаллов. – М.: гос. изд. физ.-мат. литературы, 1961. –604с.

- [75] Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. – М.: Издательство московского университета, 1978. – 278с.
- [76] Афанасьев А.М., Александров П.А., Имамов Р.М. Рентгеновская структурная диагностика в исследовании приповерхностных слоев монокристаллов. – М.: Наука, 1986. – 96с.
- [77] Колесников А. В., Ильин А. С., Труханов Е. М., Василенко А. П., Лошкарев И. Д., Дерябин А. С. Рентгенодифракционный анализ искажений эпитаксиальной пленки на отклоненных подложках (001) // Изв. РАН, серия физическая. – 2011. – Т.75, №5. – С.652-655.
- [78] Paul F Fewster X-ray scattering from semiconductors (2nd Edition). – London: Imperial College Press, 2003. – 299p.
- [79] Пинскер З.Г. Рентгеновская кристаллооптика. – М.: Наука, 1982. – 392с.
- [80] Iida A., Kohra K. Separate measurements of dynamical and kinematical x-ray diffractions from silicon crystals with a triple crystal diffractometer // Phys. Stat. Sol. (a). – 1979. – Vol.51. – P.533–542.
- [81] Weng X., Goldman R. S. Partin D. L., Heremans J. P., Evolution of structural and electronic properties of highly mismatched InSb films // J. Appl. Phys. – 2000. – Vol.88, №11. – P.6276-6286.
- [82] Bolkhovityanov Yu. B., Deryabin A. S., Gutakovskii A. K., Sokolov L. V. Mechanisms of edge-dislocation formation in strained films of zinc blende and diamond cubic semiconductors epitaxially grown on (001)-oriented substrates // J. Appl. Phys. – 2011. – Vol.109. – P.123519-1-8.
- [83] Bolkhovityanov Yu. B., Deryabin A. S., Gutakovskii A. K., Sokolov L. V. Formation of edge misfit dislocations in  $GexSi_{1-x}$  ( $x \sim 0.4-0.8$ ) films grown on misoriented (001)→(111) Si substrates: Features before and after film annealing // J. Appl. Phys. – 2010. – Vol.107. – P.123521-1-6.
- [84] Yonenaga I., Sumino K. Behaviour of dislocations in GaAs revealed by etch pit technique and X-ray topography // J. Cryst. Growth. – 1993. – Vol.126. – P.19-29.

- [85] Труханов Е.М., Колесников А.В., Василенко А.П., Гутаковский А.К. Влияние типа винтовой составляющей дислокаций несоответствия на образование пронизывающих дислокаций в полупроводниковых гетероструктурах // ФТП. – 2002. – Т.36, №.3. – С.309-316.
- [86] Trukhanov E. M., Kolesnikov A. V., Vasilenko A. P., Gutakovski A. K. Influence of the Misfit-Dislocation Screw Component on the Formation of Threading Dislocations in Semiconductor Heterostructures // Semiconductors. – 2002. – Vol.36,N.3. – P.290–297.
- [87] Kolesnikov A.V., Vasilenko A.P., Trukhanov E.M., Gutakovsky A.K. Stress relaxation by generation of L-shape misfit dislocations in (001) heterostructures with diamond and sphalerite lattices // Applied Surface Science. – 2000. – Vol.166/1-4. – p.57-60.
- [88] LeGous F.K., Horn-von Hoegen M., Copel M., Tromp R. M. Strain-relief mechanism in surfactant-grown epitaxial germanium films on Si(111) // Physical Review B. – 1991. – Vol.44. – P.12894-12902.
- [89] Волинцев А.Б. Наследственная механика дислокационных ансамблей. Компьютерное моделирование и эксперимент. – Иркутск: Изд-во Иркут. ун-та, 1990. – 288с.
- [90] Пинтус С.М., Латышев А.В., Асеев А.Л., Карасев В.Ю. Дислокационная структура границы раздела Ge–Si (111) // Поверхность. – 1984. – №8. – 60-65.
- [91] Труханов Е.М., Лошкарев И.Д., Романюк К.Н., Гутаковский А.К., Ильин А.С., Колесников А.В. Структурное состояние гетеросистем Ge/Si с интерфейсами (001), (111) и  $(\bar{7} \bar{7} 10)$  // Известия РАН, сер.физ. – 2012. – Т.76,№3. – С.373-376.
- [92] Труханов Е.М., Лошкарев И.Д., Романюк К.Н., Ильин А.С., Гутаковский А.К., Колесников А.В., Качанова М.М. Напряженное состояние и дислокационная структура гетеро-систем германий/кремний с интерфейсами (001), (111) и  $(\bar{7} \bar{7} 10)$  // Электронный журнал «Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы» – 2011. – [http://ptosnm.ru/\\_files/Moduls/catalog/items/T\\_catalog\\_items\\_F\\_download\\_I\\_669\\_v1.pdf](http://ptosnm.ru/_files/Moduls/catalog/items/T_catalog_items_F_download_I_669_v1.pdf)
- [93] Sidorov Yu.G., Varavin V.S., Dvoretiskii S.A., Liberman V.I., Mikhailov N.N., Sabinina I.V., Yakushev M.V. Growth of and Defect Formation in CdHgTe Films During Molecular–Beam Epitaxy. – In the book "Growth of Crystals" New York. – 1996. – Vol.20. – P.35–46

- [94] Якушев М.В., Брунев Д.В., Варавин В.С., Васильев В.В., Дворецкий С.А., Марчишин И.В., Предеин А.В., Сабина И.В., Сидоров Ю.Г., Сорочкин А.В. Гетероструктуры HgCdTe на подложках Si(310) для инфракрасных фотоприемников средневолнового спектрального диапазона // ФТП. – 2011. – Т.45. – С.396-402.
- [95] Аргунова Т.С., Рувимов С.С., Сорокин Л.М., Шульпина И.Л. 60° дислокации несоответствия в гетероструктурах типа InGaAs/GaAs (001) // ФТТ. – 1985. – Т.27№10. – С.2960-2964.
- [96] Rago P.B., Jain F.C., Ayers J.E. Effect of Epilayer Tilt on Dynamical X-ray Diffraction from Uniform Heterostructures with Asymmetric Dislocation Densities // Journal of Electronic Materials. – 2013. – DOI 10.1007/s11664-013-2628-6.
- [97] Teys S.A., Romanyuk K.N., Zhachuk R.A., Olshanesky B.Z. Orientation and structure of triple step staircase on vicinal Si(1 1 1) surfaces // Surface Science. – 2006. – Vol.600. – P.4878-4882.
- [98] Лошкарев И.Д., Труханов Е.М., Романюк К.Н., Качанова М.М. Теоретическое и экспериментальное определение начальной стадии пластической релаксации напряжений несоответствия в гетеросистеме подложка(111)–островка пленки // Изв. РАН, серия физическая. – 2012. – Т.76, №3. – С.425-428.
- [99] Fischer A., Richter H. Elastic stress relaxation in SiGe epilayers on patterned Si substrates // J. Appl. Phys. – 1994. – Vol.75. – P.657-659.
- [100] Trukhanov E.M., Stenin S.I., Noskov A.G. Dislocations and stresses in a crystal with an island film // Phys. Stat. Sol (a). – 1979. – Vol.56. – P.433-440.
- [101] Bolkhovityanov Yu.B., Sokolov L.V. Ge-on-Si films obtained by epitaxial growing: edge dislocations and their participation in plastic relaxation // Semicond. Sci. Technol. – 2012. – Vol.27,N.4. – P.043001-1-12.
- [102] Емельянов Е.А., Коханенко А.П., Пчеляков О.П., Лошкарев И.Д., Селезнев В.А., Пулято М.А., Семягин Б.Р., Преображенский В.В., Zhicuan Niu, Haiqiao Ni Морфология поверхности и кристаллографические свойства пленок GaAs, выращенных методом МЛЭ на вичинальных подложках Si(001) // Изв. Вузов. Физика. – 2013. – Т.56, №1. – С.49-54.

- [103] Loshkarev I.D., Vasilenko A.P., Putyato M.A., Semyagyn B.R., Preobrazhensky V.V. Effects of Early Monolayers Formation Technique on Strain State of GaAs Films on Vicinal Si(001) Substrate // Proceeding 11<sup>th</sup> International Conference and Seminar on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices, Erlagol. – 2010. – P.84-86.
- [104] Труханов Е.М., Лошкарёв И.Д., Качанова М.М., Василенко А.П. Начало пластической релаксации эпитаксиальной фазы высокого давления скольжением дислокаций несоответствия в плоскости интерфейса (111) // Электронный журнал «Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы» – 2011. – [http://ptosnm.ru/\\_files/Moduls/catalog/items/T\\_catalog\\_items\\_F\\_download\\_I\\_668\\_v1.pdf](http://ptosnm.ru/_files/Moduls/catalog/items/T_catalog_items_F_download_I_668_v1.pdf)
- [105] Лошкарёв И.Д., Василенко А.П., Труханов Е.М., Колесников А.В., Ильин А.С., Пчеляков О.П., Путятю М. А., Семягин Б. Р., Преображенский В. В. Ориентация ячеек поверхностной фазы 2x4 и разворот кристаллической решетки эпитаксиальной пленки GaAs на Si(001) // Материалы Международного Симпозиума «Физика низкоразмерных систем», Ростов-на-Дону – пос.Лоо. – 2012. – С.113-115.
- [106] Василенко А.П., Колесников А.В., Лошкарёв И.Д., Труханов Е.М., Путятю М.А., Семягин Б.Р., Преображенский В.В. Зависимость деформационного состояния пленок GaAs на вичинальных подложках Si(001) от способа формирования первых монослоев // Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.136.
- [107] Пчеляков О.П., Путятю М.А., Семягин Б.Р., Емельянов Е.А., Феклин Д.Ф., Василенко А.П., Лошкарёв И.Д., Паханов Н.А., Преображенский В.В. Гетероструктуры  $A^{III}B^V$  на кремнии // Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.56.
- [108] Труханов Е.М., Колесников А.В., Лошкарёв И.Д. Возникновение дальнедействующих полей нормальных и сдвиговых напряжений при введении дислокаций несоответствия // Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.84.
- [109] Колесников А.В., Труханов Е.М., Ильин А.С., Лошкарёв И.Д. "Роль дислокаций

- несоответствия при образовании малоугловых границ в гетеросистемах с несингулярными ориентациями". Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.146.
- [110] Лошкарев И.Д., Качанова М.М., Труханов Е.М., Романюк К.Н., "Начало пластического процесса снятия напряжений несоответствия скольжением дислокаций в плоскости границы раздела (111)". Тезисы докладов IX Международной конференции и VIII Школы молодых ученых «Кремний-2012», Санкт-Петербург. – 2012. – С.172.
- [111] Труханов Е.М., Лошкарев И.Д., Романюк К.Н., Ильин А.С., Гутаковский А.К., Колесников А.В., Качанова М.М. Напряженное состояние и дислокационная структура гетеросистем германий/кремний с интерфейсами (001), (111) и (7 7 10) // Материалы международного симпозиума «Конденсированные среды при высоких давлениях и температурах» г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. – 2011. – С.74-77.
- [112] Труханов Е.М., Лошкарев И.Д., Качанова М.М., Василенко А.П. Начало пластической релаксации эпитаксиальной фазы высокого давления скольжением дислокаций несоответствия в плоскости интерфейса (111) // Материалы международного симпозиума «Конденсированные среды при высоких давлениях и температурах» г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. – 2011. – С.169-172.
- [113] Колесников А.В., Ильин А.С., Труханов Е.М., Василенко А.П., Лошкарев И.Д., Дерябин А.С. Влияние ступеней гетерограницы на структурное состояние эпитаксиальной пленки // Материалы международного симпозиума «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-2) г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. – 2010. – С.271-273.
- [114] Труханов Е.М., Колесников А.В., Ильин А.С., Василенко А.П., Лошкарев И.Д., Дерябин А.С. Кристаллическое и структурное состояние эпитаксиальных пленок GeSi на кремниевых подложках различной ориентации // Материалы международного симпозиума «Физика низкоразмерных систем и поверхностей» Low Dimensional Systems (LDS-2) г. Ростов-на-Дону – п. Лоо. – 2010. – С.267-270.
- [115] Лошкарев И.Д., Василенко А.П., Колесников А.В., Труханов Е.М. Характеризация

деформационного состояния эпитаксиальных пленок на вичинальных подложках с использованием автоматизированной системы управления дифрактометром // Тезисы докладов VI Международной конференции «Кремний-2009», Новосибирск. - 2009. – С.187.

- [116] Лошкарев И.Д., Василенко А.П., Труханов Е.М. Разработка программного обеспечения автоматизированной системы управления рентгеновским трехосевым дифрактометром // Сборник материалов Второй международной молодежной научной школы - семинара «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород. – 2008. – С.113-114.
- [117] Василенко А.П., Лошкарев И.Д., Разумовский А.Ю., Труханов Е.М., Чернов М.А. Автоматический двухкристальный рентгеновский дифрактометр ДСО-1Т // Сборник материалов Второй международной молодежной научной школы - семинара «Современные методы анализа дифракционных данных (топография, дифрактометрия, электронная микроскопия)», Великий Новгород. – 2008. – С.76-78.