

УДК 539.2

НАПРЯЖЕНИЯ НЕСООТВЕТСТВИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ НАНОПЛЕНОК Ge НА Si(111), СОДЕРЖАЩИХ ПОВЕРХНОСТНЫЕ ФАЗЫ ПОНИЖЕННОЙ ПЛОТНОСТИ

© 2020 г. С. А. Тийс¹, Е. М. Труханов^{1, *}, А. В. Колесников¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт физики полупроводников имени А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук,
Новосибирск, Россия

*E-mail: trukh@isp.nsc.ru

Поступила в редакцию 19.03.2020 г.

После доработки 10.04.2020 г.

Принята к публикации 27.05.2020 г.

Для физики конденсированного кристаллического состояния впервые установлено, что переходы сверхструктурных фаз на поверхности эпитаксиальной нанопленки могут сопровождаться релаксацией напряжений несоответствия σ_H . В случае зарегистрированного в работе фазового перехода $7 \times 7 \rightarrow 5 \times 5$ это явление протекает при толщине пленки Ge равной 1 нм на подложке Si(111), когда отсутствует образование дислокаций несоответствия. Введено понятие эффективного параметра несоответствия, что позволило определить изменения σ_H , сопровождающие протекание перехода.

DOI: 10.31857/S0367676520090367

ВВЕДЕНИЕ

В полупроводниковой наноэлектронике широкое распространение получили гетеросистемы, содержащие эпитаксиальные пленки. Под действием напряжений несоответствия σ_H они подвергаются упругой, а также (при достижении критической толщины пленки) пластической деформации, протекание которой в значительной мере определяется параметром несоответствия f . Согласно литературным данным, при докритической толщине уменьшение σ_H возможно только в рамках упругих взаимодействий. Процесс молекулярно-лучевой эпитаксии напряженных пленок часто сопровождается изменением сверхструктурных фаз на поверхности пленки. В предлагаемой работе на примере поведения нанослоев Ge при эпитаксии на Si(111) [1] исследован необычный механизм релаксации σ_H , который может сопровождать протекание поверхностных фазовых переходов при любой толщине пленки.

СВЯЗЬ НАПРЯЖЕНИЯ С УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ И ПАРАМЕТРОМ НЕСООТВЕТСТВИЯ В ОДНОРОДНО НАПРЯЖЕННОЙ ПЛЕНКЕ

Если Декартовы координаты обозначить как x_1 , x_2 и x_3 , то в общем виде основное уравнение теории упругости, связывающее нормальные компо-

ненты тензоров деформаций ϵ_{xi} и напряжений σ_{xi} , запишется как [2]

$$\epsilon_{xi} = [\sigma_{xi} - \nu(\sigma_{x(i+1)} + \sigma_{x(i+2)})] / [2G(1 + \nu)], \quad (1)$$

где G – модуль сдвига. Индекс i циклически изменяется от 1 до 3. В частности, если $i = 3$, то первая квадратная скобка в правой части выражения (1) примет вид $[\sigma_{x3} - \nu(\sigma_{x1} + \sigma_{x2})]$. В полупроводниковой технологии нашли применение гетеросистемы, которые содержат сплошную эпитаксиальную пленку, находящуюся в однородном плосконапряженном состоянии. Плоскости, в которых изменяются компоненты напряжений, параллельны границе раздела $x_3 = 0$. Тогда $\sigma_{x1} = \sigma_{x2}$, а $\sigma_{x3} = 0$. Кроме того, выполняется $\epsilon_{x1} = \epsilon_{x2} \neq \epsilon_{x3}$. В результате формула (1) существенно упрощается и трансформируется в уравнение

$$\sigma_{x1} = \epsilon_{x1} 2G(1 + \nu) / (1 - \nu), \quad (2)$$

которое только множителем ϵ_{x1} отличается от выражения

$$\sigma = f 2G(1 + \nu) / (1 - \nu). \quad (3)$$

Последнее выражение в течение ряда десятилетий используется в расчетных моделях дислокаций несоответствия [3, 4]. Здесь, как и в (2), σ – нормальная компонента тензора напряжений.

Формула (2) получена в строго теоретических рамках, а формула (3) является полуэмпирической, и условия ее корректности в литературе не-

достаточно проанализированы. В (2) деформация ϵ является переменной величиной, которая зависит от целого ряда характеристик кристалла, в частности, от его упругих постоянных и от геометрии гетеросистемы. В (3) параметр f , заменяющий упругую деформацию ϵ , представляет собой постоянную величину. Поскольку все остальные члены выражений (2) и (3) равны между собой, то следует установить, в каких случаях имеет место тождественное совпадение величин ϵ и f .

В литературе известны различные варианты определения f [5, 6]. Покажем, что для совпадения обсуждаемых величин в качестве параметра несоответствия следует принять $f = (a_s^{\circ} - a_f^{\circ})/a_f^{\circ}$, где a_s° и a_f° – постоянные кристаллических решеток подложки (s – substrate) и пленки (f – film). Надстрочный индекс “ \circ ” означает, что подложка и пленка приведены в неискаженное (релаксированное) состояние. Такой вариант формулы для f в литературе известен (см., например, [6–8]). Примем пленку полностью упруго напряженной, т.е. псевдоморфной, а подложку неискаженной, когда в любой ее точке выполняется $a_s = a_s^{\circ}$. Тогда латеральные координаты атомов пленки совпадут с постоянными координатами узлов решетки подложки $a_f = a_s^{\circ}$. В теории упругости деформацию обозначают как $\epsilon = (a_f - a_f^{\circ})/a_f^{\circ}$. В нашем случае эта запись трансформируется в $\epsilon = (a_s^{\circ} - a_f^{\circ})/a_f^{\circ}$. Последнее выражение совпадает с использованной нами формулой для f .

Тождественное равенство величин ϵ и f возможно в двух случаях. Обозначим толщины пленки и подложки через h и H , соответственно. Первый случай равенства имеет место, если $H \gg h$, а второй – если $G_s \gg G_f$ [6]. В обоих случаях подложку можно считать абсолютно жесткой, когда любые деформации пленки не приводят к возникновению деформаций подложки.

Отметим, что определенное по формуле (3) значение σ в общем случае характеризует перепад нормальных напряжений между контактирующими кристаллическими слоями. Если один из слоев находится в ненапряженном состоянии (например, толстая подложка гетеросистемы, содержащей тонкую пленку), то по (3) вычисляется не только перепад напряжений, но их величина в напряженном слое. В данной статье мы вычислим σ для двух границ раздела. Величина σ_1 будет определена для основной границы кремний-германий, ее значение будет характеризовать как перепад напряжений, так и их уровень в пленке. Величина σ_2 будет равна перепаду напряжений в границе между псевдоморфной прослойкой Ge и сверхструктурной фазой на поверхности пленки.

НАЧАЛЬНАЯ СТАДИЯ РОСТА Ge НА Si(111)

На начальном этапе эпитаксии Ge формируются треугольные островки высотой h около 1 нм, ограниченные вдоль направлений типа $\langle 110 \rangle$. Вблизи границы раздела Ge–Si они содержат два бислоя псевдоморфной фазы Ge, а вблизи свободной поверхности пленки – три неполных атомных слоя сверхструктурной фазы 7×7 . В квазиравновесных условиях эпитаксиального роста высота h не изменяется, а происходит только латеральное разрастание островков [1]. Когда площадь островка приблизительно в 100 раз превышает площадь элементарной ячейки 7×7 , на его поверхности начинается фазовый переход $7 \times 7 \rightarrow 5 \times 5$. На рис. 1 приведены изображения сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) поверхностных фаз 7×7 , 5×5 и $c2 \times 8$. Последняя фаза наблюдается только на (111) поверхности объемных монокристаллов Ge(111). На эпитаксиальных пленках Ge она зарегистрирована лишь на горизонтальных площадках 3D островков, причем, как правило, в сочетании с фазами 2×2 , $2 \times \sqrt{3}$ и 7×7 . На рис. 1 контуры элементарных ячеек изображены ромбами и параллелограммом. На всех СТМ-изображениях темные области соответствуют углублениям, а светлые – выступающим элементам рельефа. По углам ромбовидных элементарных ячеек хорошо видно расположение темных угловых вакансий, пронизывающих три верхних слоя поверхностных фаз (ПФ; англ. вариант: SP – surface phase). Эти три слоя имеют пониженный процент заполнения атомных плоскостей по сравнению со 100% заполнением в объеме кристалла. Процент заполнения указан для каждого слоя ПФ в правой части рисунка. Средний процент для трех слоев приведен после фигурной скобки. Наглядно атомное заполнение в каждом из слоев изображено в центральной части рисунка. Четыре нижних слоя пленки Ge представляют собой кристалл, аналогичный объемному. Он является напряженной псевдоморфной прослойкой (ПП; англ. вариант: PI – pseudomorphic interlayer) между подложкой кремния и ПФ пленки.

На начальной стадии эпитаксии на поверхности пленки возникает фаза Ge- 7×7 . Аналогичная фаза Si- 7×7 регистрируется на поверхности подложки перед эпитаксией. Поскольку пленка псевдоморфная, то для фазы 7×7 размеры элементарных ячеек ПФ Si и Ge одинаковы. В процессе латерального разрастания островков происходит обсуждавшийся выше фазовый переход $7 \times 7 \rightarrow 5 \times 5$. При этом изменяется перепад σ_2 и происходит дополнительная релаксация напряжений несоответствия. Для количественного анализа этого явления необходимо рассмотреть структуру нижних (третьих) атомных слоев поверхностных фаз 7×7 и 5×5 . Эти слои содержат в каждой элементарной ячейке на один атом меньше (т.е. 48 и

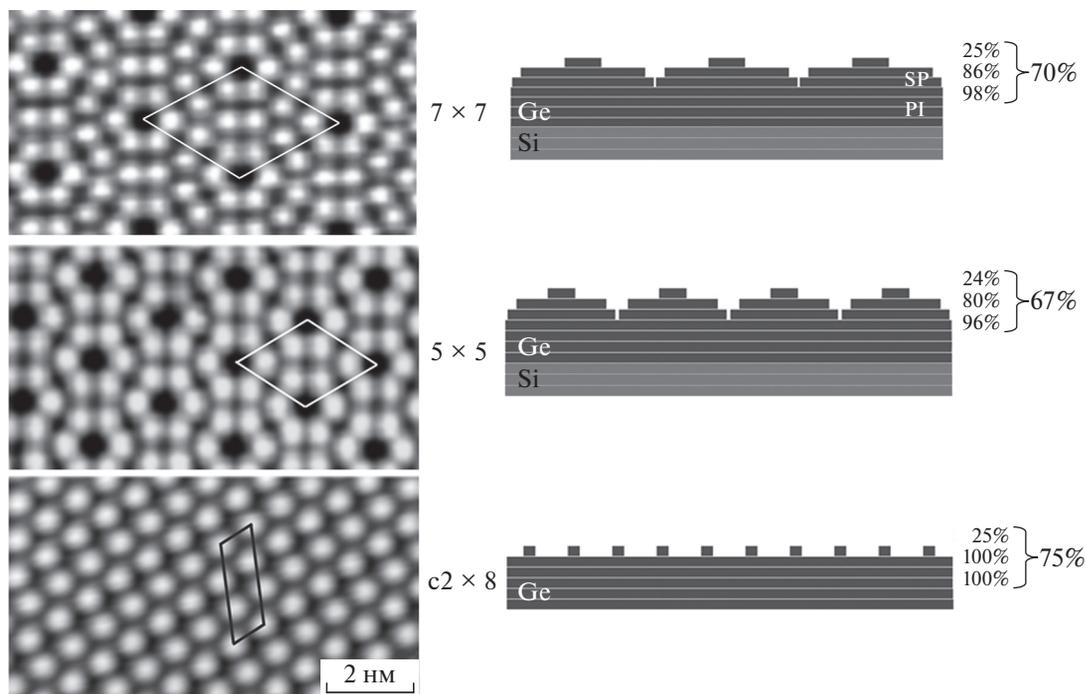


Рис. 1. СТМ изображения поверхностных структур и схематичные сечения псевдоморфных слоев Ge с указанием процентного заполнения атомами трех верхних перестроенных слоев относительно объемных слоев кристалла. После фигурной скобки указан средний процент заполнения атомами трех верхних слоев.

24 атома, соответственно) по сравнению с кристаллическими ячейками в объеме кристалла, имеющими те же размеры. Это обуславливает значения приведенных на рис. 1 заполнений атомных плоскостей, равные 98 и 96% для обсуждаемых фаз. Атомные плотности нижних слоев ПФ, приходящиеся на единицу площади, равны $\rho_{7 \times 7} = 7.67$ и $\rho_{5 \times 5} = 7.52$ ат./ nm^2 , что меньше объемной плотности $\rho_{1 \times 1} = 7.83$ ат./ nm^2 .

Поскольку поверхностная фаза 5×5 наименее плотная, то происходит переход $7 \times 7 \rightarrow 5 \times 5$, способствующий снижению сжимающих напряжений пленки Ge на Si(111). В данном случае процесс фазового перехода является механизмом релаксации напряжений несоответствия. Ниже представлены количественные результаты, демонстрирующие явление уменьшения σ_H при фазовом переходе.

РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ И ЭФФЕКТИВНЫЙ ПАРАМЕТР НЕСООТВЕТСТВИЯ

Определенная по формуле (3) величина σ_1 составляет $-6.9 \cdot 10^9$ Н/ м^2 . Вычисления выполнены при $G = 5.64 \cdot 10^{10}$ Н/ м^2 , $\nu = 0.200$ [9] и $f = -4\%$. Толщина подложки в исследованной гетеросистеме составляет около 350 мкм, а толщина эпитаксиальной пленки Ge – 1 нм. Поэтому напряжения в подложке пренебрежимо малы, и σ_1 по-

казывает как перепад напряжений, так и их величину в пленке. Отрицательный знак демонстрирует сжимающий характер напряжений.

С целью вычисления по формуле (3) перепада напряжений σ_2 между слоями ПП и ПФ воспользуемся понятием эффективного параметра несоответствия $f_{\text{эф}}$. Для этого в верхнем атомном слое ПП выберем площадку $S_{7 \times 7}$, которая по размеру совпадает с размером элементарной ячейки 7×7 . Внутри площадки возьмем произвольный участок площадью $(48/49) \cdot S_{7 \times 7}$ и приложим к нему такое поле однородно растягивающих напряжений σ_2 , чтобы площадь участка возросла до величины $S_{7 \times 7}$. Величина относительного увеличения площади равна $\Delta S/S = 1/49$, что приблизительно в два раза больше, чем $\Delta L/L$ – относительное линейное увеличение латеральных размеров расширяющегося участка. Величина $\Delta L/L \approx 1/98$ (или 1.02%) и является эффективным параметром несоответствия $f_{\text{эф}}^{7 \times 7}$. Подобным образом для ПФ 5×5 получим $f_{\text{эф}}^{5 \times 5} \approx 2.0\%$. На основе полученных величин $f_{\text{эф}}$ по формуле (3) вычисляем значения σ_2 для обсуждаемых поверхностных фаз: ${}^{7 \times 7}\sigma_2 = 1.7 \cdot 10^9$ и ${}^{5 \times 5}\sigma_2 = 3.4 \cdot 10^9$ Н/ м^2 . Если рассматривать σ_2 не как перепады, а как дополнительные напряжения, суммируемые с σ_1 , то их следует считать положительными, т. к. слой ПФ менее сжат, чем слой ПП. Результирующие значения σ в слое любой из

поверхностных фаз остаются сжимающими. Они составляют: $7 \times 7 \sigma = (-6.9 + 1.7) \cdot 10^9 = -5.2 \text{ Н/м}^2$ и $5 \times 5 \sigma = -3.5 \cdot 10^9 \text{ Н/м}^2$.

Аналогичная картина понижения атомной плотности растущей пленки Ge зарегистрирована в случае ориентации (001) [10]. При эпитаксии первого монослоя германия на поверхности подложки Si(001), содержащей реконструированную фазу 1×2 , формируется фаза $2 \times n$, где параметр “ n ” постепенно изменяется от 12 до 8. При дальнейшем росте на верхнем атомном слое начинает возникать фаза $m \times n$. Стороны элементарных ячеек поверхностных фаз параллельны направлениям типа $\langle 110 \rangle$. Все ячейки окружены димерными вакансионными рядами, суммарная площадь которых монотонно увеличивается. Как следствие, атомная плотность слоя Ge понижается, в результате чего уменьшается и уровень напряжений несоответствия σ_H .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В эпитаксиальной гетеросистеме Ge/Si(111) для двух границ раздела определены перепады напряжений несоответствия σ_H . Для границы Si подложка–Ge пленка установлено, что перепад σ_H равен уровню нормальных напряжений в пленке ($-6.9 \cdot 10^9 \text{ Н/м}^2$). Для поверхностных фаз 7×7 и 5×5 уровни напряжений составляют $7 \times 7 \sigma = -5.2 \cdot 10^9$ и $5 \times 5 \sigma = -3.5 \cdot 10^9 \text{ Н/м}^2$, что по модулю

заметно превышает перепады напряжений на границе поверхностная фаза – псевдоморфная прослойка германия. Исследование выполнено с привлечением понятия эффективного параметра несоответствия сопрягаемых слоев.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-52-41006).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Teys S.A.* // Appl. Surf. Sci. 2017. V. 392. P. 1017.
2. *Тимошенко С.П., Гудьер Дж.* Теория упругости. М.: Наука, 1975. С. 28.
3. *Тхорик Ю.А., Хазан Л.С.* Пластическая деформация и дислокации несоответствия в гетероэпитаксиальных системах. Киев: Наукова Думка, 1983. 135 с.
4. *Skiba N.V.* // Mater. Phys. Mech. 2014. V. 19. P. 68.
5. *Matthews J.W.* // J. Vac. Sci. Technol. 1975. V. 12. P. 126.
6. *Romanov A.E, Wagner T.* // Scr. Mater. 2001. V. 45. № 3. P. 325.
7. *Ayers J.E., Kujofsa T., Rago P., Raphael J.E.* Heteroepitaxy of semiconductors: theory, growth and characterization. Boca Raton: Taylor & Francis Group, 2017. P. 181.
8. *Труханов Е.М., Тийс С.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2016. Т. 80. № 6. С. 708; *Trukhanov E.M., Teys S.A.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2016. V. 80. № 6. P. 641.
9. *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. С. 563.
10. *Voigtlander B.* // Surf. Sci. Rep. 2001. V. 43. P. 127.