

# 位错芯重构缺陷对于 Si 中位错运动的影响\*

杨立军<sup>1,†</sup> 孟庆元<sup>1</sup> 李成祥<sup>1</sup> 钟康游<sup>1</sup> 果立成<sup>2</sup>

(1 哈尔滨工业大学航天科学与力学系, 哈尔滨 150001)

(2 哈尔滨工业大学复合材料与结构研究所, 哈尔滨 150001)

**摘要:** 为了研究晶格常数不匹配的异质结 SiGe/Si 生长过程中低温缓冲层内缺陷对位错运动的影响,使用位错偶极子模型在 Si 晶体内建立了一对 30° 部分位错,和导致 30° 部分位错运动的弯结结构,以及位错芯重构缺陷(RD)与弯结组合而生成的弯结-RD 结构.通过分子动力学模拟,使用 Parrinello-Rahmman 方法施加剪应力促使位错运动,得到了左右弯结-RD 结构在迁移过程中的 8 种稳定构型,并且使用 NEB 方法和紧束缚势计算了纯弯结和弯结-RD 迁移过程中势垒高度,发现弯结-RD 的迁移能力要高于纯弯结结构.从模拟结果推断出,低温层生长技术中的 Si 低温缓冲层由于低温限制了重构缺陷的运动,减少其相遇发生湮灭的概率,从而使得更多的弯结能够与重构缺陷结合生成弯结-RD 结构来提高 30° 部分位错的运动能力,由此释放异质结结构失配应力所需的位错密度会随之减小.

**关键词:** 低温缓冲层; 30° 部分位错; 弯结; 重构缺陷; 位错运动; 分子动力学

**PACC:** 6185; 6170G; 6170B

**中图分类号:** O474

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2006)11-1940-05

## 1 引言

由于 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 异质结半导体器件所表现出的优异性能<sup>[1]</sup>,怎样在 Si 基片上得到高 Ge 含量和高质量的 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 膜是被广泛研究的问题.但是由于 Si, Ge 间 4.17% 的晶格常数差的存在会导致生长过程中伴随着失配应力释放而产生影响器件质量的位错缺陷.近年来提出的低温缓冲层生长技术(LT-Si)<sup>[2]</sup>是通过在 Si 基片上加入一层相对低温(700K 左右)条件下生长的 Si,然后在该层上继续生长 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>,而最终得到低位错密度的 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 层.Si 低温缓冲层内存在的缺陷会对位错的产生和运动造成影响,因此释放应力所需要的位错密度就会降低<sup>[3]</sup>,关于此方法的机理还缺乏从原子构型角度的解释.

在金刚石结构晶体所组成的异质结结构中,最主要的位错为螺位错和 60° 位错<sup>[4]</sup>.除去 Suzuki 在低温和高应力条件下观察到的 Si 中未分解的全位错外<sup>[5]</sup>,在常见的异质结生长条件下,螺位错会分解为两个 30° 部分位错,而 60° 位错会分解为一个 30° 和一个 90° 部分位错,中间都会被堆垛层错区隔开<sup>[6]</sup>.因此,异质结结构中位错运动的关键为 30° 部分位错的运动.而 30° 位错的运动是通过弯结对(kink pair)的生成以及弯结沿位错线方向的迁移来

完成的.弯结对包括左弯结(left kink)和右弯结(right kink),如图 1 中 a,c 所示.

重构缺陷(RD)是位错芯的一种特殊缺陷,它是位错芯的悬键两两重组之后剩余的孤立悬键,如图 1 中 b 所示.多个实验和第一原理计算从不同角度均证明了 RD 的存在<sup>[7,8]</sup>.在温度较高时,RD 自身也会通过原子的热涨落发生迁移,寻找其他的 RD 来进行重构消除悬键.但是在 Si 低温缓冲层生长技术中,因为体系温度较低,此时的 RD 迁移能力较弱,与其他 RD 相遇发生重构的概率也低,所以 Si 低温缓冲层中会存在较多的 RD.

在 30° 部分位错的位错芯上,当重构缺陷 RD 与弯结相遇时,能产生一种弯结-RD 组合结构,见图 1 中 d,e,30° 部分位错就会通过弯结-RD 结构的迁移来运动.由于这种结构中存在着一个悬键,从而使得它在迁移过程与纯弯结相比有很大不同,本研究尝试使用分子模拟方法,采用 Si 的紧束缚势,计算得到弯结迁移过程中的能量变化,通过最高迁移势垒高度来比较弯结-RD 和纯弯结的迁移能力.

30° 分位错上的纯弯结、弯结-RD 结构运动时,须经历一系列的稳定状态,这些状态周期性地出现使得弯结发生迁移.从一个状态转换到另外一个状态时需要跨越势垒.如果单纯在分子动力学过程中通过记录每一步总能量的方法得到势垒高度,会因

\* 国家自然科学基金资助项目(批准号:10502018)

† 通信作者,Email:yanglj78@gmail.com

2006-06-18 收到,2006-07-29 定稿

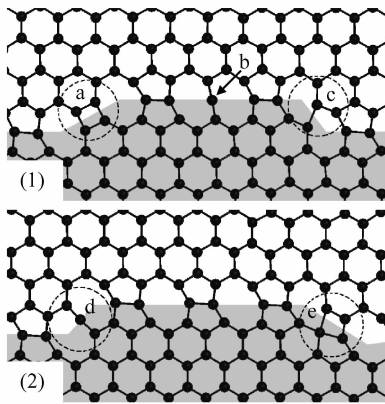


图 1  $30^\circ$  部分位错的位错芯的左弯结(a),右弯结(c),重构缺陷(b),以及弯结与重构缺陷结合生成的左弯结-RD 结构(d),右弯结-RD 结构(e) 图中深色部分表示堆垛层错区域.

Fig.1 Left kink (a), right kink (c), reconstruction defect (b), the left kink-RD (d) and right kink-RD (e) on  $30^\circ$  partial dislocation line The later two are the combinations of kinks and reconstruction defects. The dark parts denote the stacking faults area.

为温度产生的热涨落以及结构受剪应力变形产生的形变能使得最后结果误差超出可接受范围,所以,需要寻找其他可靠方法.

Nudged elastic band (NEB)<sup>[9]</sup>方法是在初始和最终结构之间进行插值得到一系列的“镜像”,这些镜像之间存在弹性相互作用以保持它们在路径上的平均分布.在保持镜像之间弹性作用存在的情况下,在势能面上寻找这些“镜像”的可能的能量最低点.这样,这些镜像连接起来的路径就是结构变化的能量最低路径.路径上的能量最高点称为“鞍点”,路径上相邻的最高与最低点的能量差定义为势垒.

NEB 方法需要输入结构初始与最终时刻的构形,在我们的研究中,就需要输入弯结结构在运动过程中的各稳定形态即能量最低时的构型.对于纯弯结结构,Oyama<sup>[10]</sup>使用第一原理方法计算得到了  $30^\circ$  部分位错纯弯结运动过程中各稳定结构.而对于弯结-RD 结构的在运动中产生的稳定形态,还没有可靠的结果.所以我们采用了分子动力学方法,在高温和外加剪切应力的作用下促使弯结-RD 迁移,通过分析迁移过程中的结构变化情况,找到稳定形态,把经过退火弛豫后的稳定形态作为 NEB 方法输入量.

## 2 建模

### 2.1 位错偶极子模型

模拟中的元胞均按照  $[111]$ ,  $[11\bar{2}]$ ,  $[1\bar{1}0]$  方向

建立,位错线沿  $[1\bar{1}0]$ .为了能够模拟真实晶体环境,需要在三个方向上均采用周期性边界条件,单个位错的引入,会因为边界的晶格不匹配而破坏元胞的周期性.所以采用位错偶极子模型,在元胞中引入两个柏氏矢量相反的  $30^\circ$  位错,使得元胞内总的柏氏矢量之和为零.

采用施加位错位移场的方法来建立位错.由于  $30^\circ$  部分位错可以看作是刃型位错和螺位错的叠加,所以根据 Hirth-Lothe 的连续体模型的位错位移场公式<sup>[11]</sup>,对于元胞内的任意一个原子,分别计算出其与元胞基本偶极子内的两个位错,空间的 8 个镜像偶极子内的 16 个位错之间的距离,带入位移场公式得到 18 个位移矢量,进行迭加后得到了该原子在周期性边界条件下  $30^\circ$  部分位错偶极子体系中的位移,并将原子进行移动.由此遍历所有原子,即得到了  $30^\circ$  部分位错偶极子的初始构型.

### 2.2 弯结-RD 结构的生成

根据上述方法建立  $30^\circ$  部分位错偶极子模型,如图 2(a)所示.其中模型沿位错线方向长度须为此方向晶格周期一半长度的奇数倍,来保证最终结构生成后的周期性边界条件所要求的晶格匹配性.

建立位错偶极子模型之后,改变模拟元胞沿位错线的周期性方向,如图 2(b)所示,模拟元胞成为一个单斜立方体,倾斜的角度按照需要的弯结结构的高度以及位错线的长度来确定.这样就在边界生成了弯结结构,根据模型沿位错线方向的长度不同,可以得到纯弯结结构或者弯结-RD 结构,改变倾斜角度的符号,又可以得到左或者右弯结结构.接着按照新的周期性方向平移整个模型,将生成的弯结结构移动到元胞中心,并按照新的元胞重新规整原子,如图 2(c)所示.

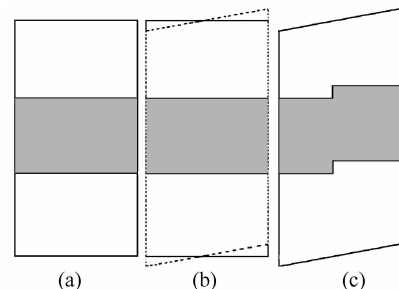


图 2 通过改变周期性元胞形状的方法生成弯结或者弯结-RD 结构过程示意图

Fig.2 Schematic diagram of generation process of kinks or kink-RDs through the way of box shape changing

使用以上方法,我们建立了  $30^\circ$  部分位错上的左右弯结-RD 结构.其中左弯结-RD 模型长度为

$4 \times 12 \times 10.5$  倍晶格周期,  $[1\bar{1}0]$  方向向上倾斜  $4.715^\circ$ , 包含 6048 个 Si 原子. 右弯结-RD 模型长度为  $4 \times 12 \times 11.5$  倍晶格周期,  $[1\bar{1}0]$  方向向下倾斜  $4.3066^\circ$ , 包含 6624 个 Si 原子.

### 2.3 剪应力的施加方法

我们采用沿位错的柏氏矢量方向施加剪应力来使弯结-RD 结构运动. 在以往研究位错运动的分子动力学计算中, 通常使用非全周期性的模拟元胞, 采用将边界原子进行人为相对平行位移来产生剪切应力<sup>[12,13]</sup>, 模拟过程与实际晶体状态相差较大. 本文采用 Parrinello-Rahman<sup>[14]</sup> 方法, 在原子运动过程中耦合元胞受剪切应力的变形运动, 来达到自然地施加剪应力的效果.

### 2.4 势函数的选择

由于紧束缚势是第一原理方法的半经验衍生, 所需计算量较大, 且研究弯结-RD 结构的动力学问题所需时间尺度较大, 又因为位错偶极子构型限制了模型的几何尺寸也不能太小, 所以在确定迁移过程中的稳定构型结构的计算中我们选取经验势函数来描述原子间的相互作用. 通过比较计算 Si 材料常用的 Stillinger-Weber<sup>[15]</sup>, Tersoff<sup>[16]</sup> 以及新近提出来的 EDIP 势函数<sup>[17]</sup>, 发现在描述 Si 缺陷结构的能力上, EDIP 势函数要强于其他方法, 它能比较准确地得到 Si 的  $30^\circ$ ,  $90^\circ$  部分位错的构型, 弯结的形成能与迁移能也与紧束缚计算接近, 所以选用 EDIP 作计算构型的势能函数.

## 3 模拟结果和讨论

### 3.1 弯结-RD 结构运动过程的稳定态

将模型温度设定为 1200K, 沿  $30^\circ$  位错柏氏矢量方向施加 2GPa 剪应力作用, 每运行 10 步产生出一个构型, 通过分析得到了弯结-RD 结构在迁移过程中的所有稳定态. 将得到的构型使用紧束缚势在 10K 下弛豫 1000 步, 产生的弯结-RD 结构如图 3 所示.

从图中可以看到, 左右弯结-RD 结构都是经过 4 步完成了一个运动周期, 堆垛层错的面积随之减小. 在分子动力学模拟过程中可以观察到, 弯结-RD 结构在各稳定态停留的时间有长有短, 这是由于各态之间的能量势垒的差异造成的. 我们计算了各种稳定态之间的势垒高度情况.

### 3.2 迁移过程中的能量变化

EDIP 经验势函数虽然能得到弯结-RD 的正确

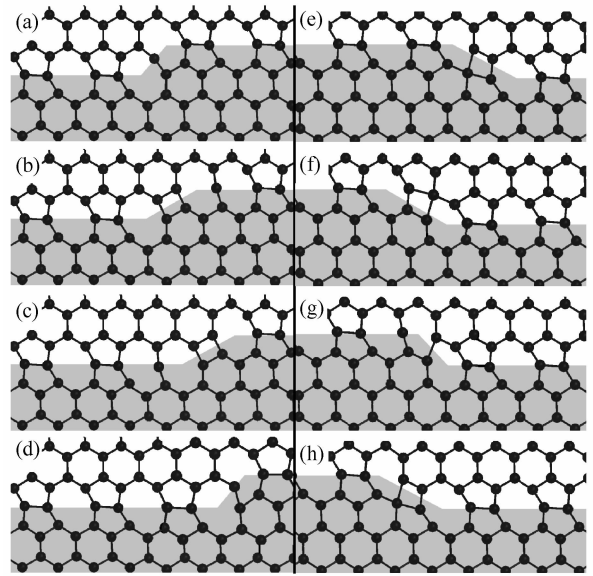


图 3 左弯结-RD(a)~(d)和右弯结-RD(e)~(h)运动一个周期中经历各稳定形态. 深色部分表示堆垛层错区.

Fig.3 Stable configurations of left kink-RD(a)~(d) and right kink-RD(e)~(h) in one migration period. The dark parts represent the stacking faults area.

构型, 但是同作为第一原理方法衍生的紧束缚势相比, 在计算势垒高度时后者能得到更精确的结果. 所以我们将 EDIP 势函数通过分子动力学方法得到的弯结-RD 结构输入基于紧束缚势的 NEB 方法来得到势垒高度. 为了消除两种势函数切换时所带来的误差, 对于每一种弯结-RD 构型, 都先用紧束缚势在 10K 温度下进行 1000 步的分子动力学弛豫, 得到紧束缚势对应的构型. 将此时得到的构型以及 Oyama 提出的弯结运动中的各稳定结构使用基于紧束缚势的 NEB 方法计算, 得到的能量变化如图 4 和图 5 所示.

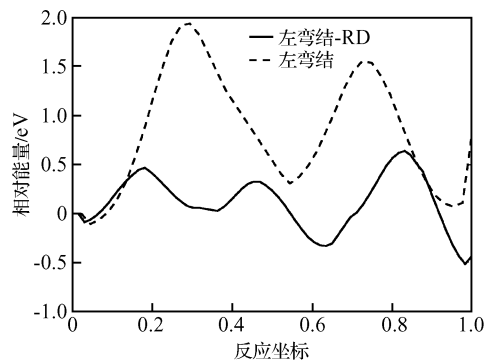


图 4 左弯结和左弯结-RD 在一个周期的迁移过程中的能量变化

Fig.4 Energy profiles of left kink and left kink-RD during one migration period

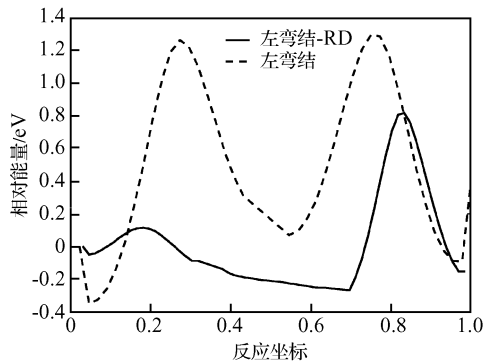


图 5 右弯结和右弯结-RD 在一个周期的迁移过程中的能量变化

Fig.5 Energy profiles of right kink and right kin-RD during one migration period

由图 4 和图 5 可看出,弯结-RD 结构运动中的势垒要低于纯弯结结构.其中左、右弯结迁移中的最高势垒达到了 2.052 和 1.607eV,而左、右弯结-RD 迁移最高势垒分别为 0.968 和 1.227eV,重构缺陷的参与在一定程度上降低了弯结的迁移势垒,增强了弯结的运动能力.还可以看出,重构缺陷对于左弯结的影响最大,左弯结-RD 运动能力要高于右弯结-RD.

## 4 结论

Si 材料中  $30^\circ$  部分位错是通过弯结对的生成以及它们沿着位错线方向迁移来运动的,在迁移过程中遇到位错芯上的重构缺陷(RD)就会生成弯结-RD 结构.通过分子动力学方法,使用 NEB 和紧束缚势分别计算了弯结和弯结-RD 结构的最高迁移势垒,发现重构缺陷在很大程度上降低了弯结的迁移势垒,增强了弯结的迁移能力,从而提高了  $30^\circ$  部分位错的运动能力.

从模拟结果可以得出,在 Si 低温缓冲层生长技术中,由于低温缓冲层生长温度低,降低了位错芯上的重构缺陷运动能力,减小了相遇发生再重构的概率,提高了位错芯上重构缺陷的数量.更多的重构缺陷能与位错芯上的弯结作用生成了弯结-RD 结构从而提高了  $30^\circ$  部分位错的运动能力.因此, Si 低温缓冲层的存在使得异质结结构释放失配应力所需要的位错密度降低,从而最终可以得到低位错密度的异质结结构.

## 参考文献

- [ 1 ] Chen H, Guo L W, Cui Q, et al. Low-temperature buffer layer for growth of a low-dislocation-density SiGe layer on Si by molecular-beam epitaxy. *J Appl Phys*, 1996, 79 (2): 1167
- [ 2 ] Peng C S, Li Y K, Huang Q, et al. The formation of dislocations in the interface of GeSi/low-temperature Si buffer grown on Si (001). *J Cryst Growth*, 2001, 227(1):740
- [ 3 ] Bolkhovityanova Y B, Deryabina A S, Gutakovskii A K, et al. Heterostructures  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  ( $x = 0.18 - 0.62$ ) grown by molecular beam epitaxy at a low (350°C) temperature; specific features of plastic relaxation. *Thin Solid Films*, 2004, 466:69
- [ 4 ] Bolkhovityanov Y B, Pchelyakov O P, Sokolov L V, et al. Artificial GeSi substrates for heteroepitaxy: achievements and problems. *Semiconductors*, 2003, 37(5):493
- [ 5 ] Suzuki T, Yasutomi T, Tokuoka T, et al. Plasticity of III-V compounds at low temperatures. *Phys Status Solidi A*, 1999, 171(1):47
- [ 6 ] Blumenau A T, Jones R, Fraunheim T, et al. dislocations in diamond; dissociation into partials and their glide motion. *Phys Rev B*, 2003, 68:014115
- [ 7 ] Justo F J, Assali L V C. Reconstruction defects on partial dislocations in semiconductors. *Appl Phys Lett*, 2001, 79 (22):3630
- [ 8 ] Mooney P M, Tilly L, Emic C P, et al. Defect states in strain-relaxed  $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$  layers grown at low temperature. *J Appl Phys*, 1997, 82(2):688
- [ 9 ] Mills G, Jonsson H. Quantum and thermal effects in  $\text{H}_2$  dissociative adsorption: Evaluation of free energy barriers in multidimensional quantum systems. *Phys Rev Lett*, 1994, 72: 1124
- [ 10 ] Oyama N, Ohno T. Migration processes of the  $30^\circ$  partial dislocation in silicon. *Phys Rev Lett*, 2004, 93(19):195502
- [ 11 ] Hirth J P, Lothe J. Theory of dislocations. 2nd ed. New York: Wiley, 1982
- [ 12 ] Vescan L L, Wickenhauser S. Relaxation mechanism of low temperature SiGe/Si (001) buffer layers. *Solid-State Electron*, 2004, 48(8):1279
- [ 13 ] Kasper E, Lyutovich K, Bauer M, et al. New virtual substrate concept for vertical MOS transistors. *Thin Solid Films*, 1998, 336(2):319
- [ 14 ] Parrinello M, Rahman A. Polymorphic transitions in single crystals: A new molecular dynamics method. *J Appl Phys*, 1981, 52(12):7182
- [ 15 ] Stillinger F H, Weber T A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys Rev B*, 1985, 31(8): 5262
- [ 16 ] Tersoff J. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. *Phys Rev B*, 1988, 38:9902
- [ 17 ] Justo J F, Bulatov V V, Bazant M Z, et al. Interatomic potential for silicon defects and disordered phases. *Phys Rev B*, 1998, 58(5):2539

## Influence of Reconstruction Defects on Dislocation Motion in Si\*

Yang Lijun<sup>1,†</sup>, Meng Qingyuan<sup>1</sup>, Li Chengxiang<sup>1</sup>, Zhong Kangyou<sup>1</sup>, and Guo Licheng<sup>2</sup>

(1 *Department of Astronautical Science & Mechanics, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China*)

(2 *Center for Composite Materials, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China*)

**Abstract:** We investigate the characteristics of dislocation motion as influenced by defects in a low temperature buffer during the growth of lattice-mismatched heterostructures (SiGe/Si). To do this, we introduce a pair of  $30^\circ$  partial dislocation dipoles into a fully periodic Si crystal. Kinks and their combination with reconstruction defects (kink-RD), which trigger the dislocation motion, are produced in the dislocation line. We employ the Parrinello-Rahman method in a molecular dynamics (MD) simulation and find that shear stress is exerted on the model to evoke the  $30^\circ$  partial dislocation move. Eight stable configurations of left and right kink-RDs in one migration period are derived from the MD simulation, and the energy profile of the kinks and kink-RDs during the migration process are calculated by means of the nudged elastic band method with the Si tight binding potential. We find that the kink-RDs have a lower migration barrier than the kinks. Finally, we conclude that in the low temperature Si buffer technique, the low temperature hampers the motion of reconstruction defects and reduces their annihilation probability. Therefore, more kinks can combine with reconstruction defects to form kink-RD structures to promote the motion of  $30^\circ$  partial dislocation, thereby lowering the dislocation density needed for stress release in the heterostructures.

**Key words:** low temperature buffer;  $30^\circ$  partial dislocation; kink; reconstruction defect; dislocation motion; molecular dynamics

**PACC:** 6185; 6170G; 6170B

**Article ID:** 0253-4177(2006)11-1940-05

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 10502018)

† Corresponding author. Email: yanglj78@gmail.com

Received 18 June 2006, revised manuscript received 29 July 2006