

GeSi/Si 应变异质结构应变和应力分布的模型研究

李炳辉 韩汝琦 王阳元

(北京大学微电子研究所 北京 100871)

摘要 本文给出了分析 GeSi/Si 应变异质结中应变分布和弯曲的力学模型。该模型将外延层和衬底中的应变分为失配应变和弯曲应变，在假设整个异质结构均匀弯曲的情况下，根据力学平衡条件得到了计算应变异质结构应变分布和弯曲半径的有关公式。这些模型结果结合 X 射线双晶衍射测量和模拟可以得到外延层的生长参数和整个异质结构的应变分布及弯曲半径。

PACC: 6220F, 6865, 7340L

1 引言

GeSi/Si 是近年来备受重视的新材料，从能带工程出发可根据需要剪裁其电学和光学性质，发展与现有 Si 工艺基本兼容的新型微电子和光电子器件^[1]。GeSi/Si 是应变系统，晶格失配导致的应变对于材料生长和性质都有重要影响。尽管采用 X 射线双晶衍射技术可以实际测量 GeSi 应变层的应变和应力以及晶格完整性^[2]，但对异质外延层和衬底间的晶格失配、各自的厚度以及界面处的失配位错如何影响异质结构中的应变、应力和弯曲还缺乏系统的了解。

早期有关异质结构中热失配导致的应变和应力分布的理论工作都基于 Timoshenko 针对双金属条所发展的梁平衡理论^[3~5]。计算晶格失配应变异质结构中应变和应力分布的另一种模型由 Chu^[6]等提出。在该模型中计算弯矩(文中(5)和(6)式)时采用 Davidenkov^[7]的表示式，此表达式基于整个异质结构均匀弯曲。但 Chu 等在考虑异质外延层和衬底在界面处的晶格匹配(文中(13)式)时，分别将各自的中面作为弯曲的中性面。这和均匀弯曲假设是矛盾的。本文从均匀弯曲假设出发，将异质外延层和衬底中的应变和应力分为失配和弯曲两部分，详细分析两者之间的关系，在此基础上给出可用于 GeSi/Si 异质结构应变和应力分布计算的模型。本文只讨论单个外延层和衬底所组成的系统，但其处理方法很容易推广到衬底上有多个异质外延层(部分层可和衬底相同)时的情况。

李炳辉 男，1963 年生，讲师，主要从事半导体器件物理和新结构器件的研究

韩汝琦 男，1938 年生，教授，博士生导师，主要从事固体物理、半导体物理和新结构器件的研究

王阳元 男，1935 年生，教授，博士生导师，主要从事 VLSI 新工艺、新器件和新结构的研究

1994 年 8 月 29 日收到初稿，1995 年 4 月 11 日收到修改稿

2 理论模型

2.1 GeSi/Si 应变异质结构的应变和应力

GeSi 和 Si 之间存在晶格失配, 当在(001)Si 衬底上生长 GeSi 外延层时, 两者将发生形变。当界面相干且整个异质结构无弯曲时, 外延层和衬底在[100]和[010]两个向上的晶格常数应该相等, 即

$$(1 - \epsilon_{mx1})a_1 = (1 + \epsilon_{mx0})a_0, (1 - \epsilon_{my1})a_1 = (1 + \epsilon_{my0})a_0 \quad (1)$$

其中 a_1, a_0 分别为外延层和衬底的晶格常数, ϵ_{mx} 和 ϵ_{my} 分别为 $x=[100]$ 和 $y=[010]$ 方向上的失配应变, 下标 1 和 0 分别代表外延层和衬底。考虑到 GeSi 的晶格常数较 Si 的大 ($a_1 > a_0$), (1) 式中的应变项已都取为正值。由于 x 和 y 两个方向完全等价, 晶体的对称性要求外延层及衬底在这两个方向上的应变应该相等。由此有

$$\epsilon_{mx1} = \epsilon_{my1} = \epsilon_{m1}, \epsilon_{mx0} = \epsilon_{my0} = \epsilon_{m0} \quad (2)$$

另外, 考虑到沿外延层生长方向 ($z=[001]$) 外延层和衬底可以自由伸张, 有

$$\sigma_{mx1} = \sigma_{mx0} = 0 \quad (3)$$

(2) 和 (3) 两式说明外延层和衬底都受对称双轴失配应力的作用。在对称应力作用下应变和应力满足如下关系^[8]

$$\sigma_x = \sigma_y = \sigma, \epsilon_x = \epsilon_y = \frac{1 - \nu}{E} \sigma, \epsilon_z = -\frac{2\nu}{E} \sigma \quad (4)$$

其中 E 和 ν 分别为外延层或衬底沿(100)方向的杨氏模量和泊松比。

利用(4)式的结果可以将对称双轴失配应力作用下 GeSi/Si 异质结构的平衡问题简化为组合杆的平衡问题。为此可以设想从 GeSi/Si 异质外延结构中沿 x 方向截取一单位宽度的窄条(图 1a)。设外延层和衬底的厚度分别为 t_1, t_0 , 为产生压应变 ϵ_{m1} 和张应变 ϵ_{m0} , 在杆的 ABCD 和 CDEF 截面应该存在压失配力 F_{m1} 和张失配力 F_{m0} , 且有

$$F_{m1} = \frac{E_1 t_1}{1 - \nu} \epsilon_{m1} \quad (5)$$

$$F_{m0} = \frac{E_0 t_0}{1 - \nu} \epsilon_{m0} \quad (6)$$

其中 E_1 和 E_0 分别为外延层和衬底的杨氏模量, 且假设两者的泊松比相等。

显然, 当外延层和衬底的失配力相等, 即

$$F_{m1} = F_{m0} = F_m \quad (7)$$

时, 组合杆在 x 方向上的平衡就能得到

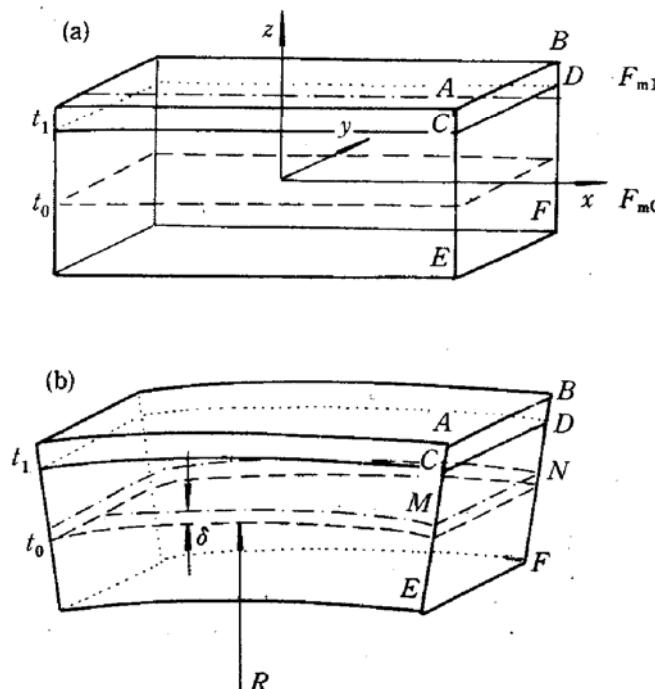


图 1 GeSi/Si 应变异质结构示意图
(a) 弯曲前, (b) 弯曲后。

满足。但是,由于 ϵ_{m1} 和 ϵ_{m0} 都是均匀分布的,所以 F_{m1} 和 F_{m0} 的等效作用点分别位于ABCD和CDEF的中心。显然这一对力偶会产生一个绕逆时针方向的力矩 $F_m(t_1+t_0)/2$ 。为抵消这一力矩,系统应该朝衬底一侧弯曲(图1b),产生弯曲应变。当和弯曲应变对应的弯曲力 F_{b1} 、 F_{b0} 及力矩 M_1 、 M_0 满足

$$F_{b1} + F_{b0} = 0 \quad (8)$$

$$M_1 + M_0 = F_m \frac{t_1 + t_0}{2} \quad (9)$$

这两个条件时,系统达到真正的平衡。

以上分析表明,当分析异质外延层和衬底所组成的系统的应变和应力时,为了处理问题方便,可以将它们分为失配和弯曲两部分,实际应变和应力是这两部分的和,(7)~(9)是系统平衡时力和力矩所必需满足的条件。

2.2 弯曲应力和弯曲力矩

从上面的分析可知,为了抵消失配力矩 $F_m(t_1+t_0)/2$,整个异质结构将发生弯曲。由于 F_{m1} 和 F_{m0} 是对称双轴应力,弯曲应力也应该是对称双轴应力,因此(4)式给出的应变和应力的关系对于弯曲应变和应力仍成立。在假设整个异质结构均匀弯曲的情况下,将有一个中性面。设中性面到衬底中面的距离为 δ ,其弯曲的曲率半径为 R ,则弯曲力可写成

$$F_{b1} = \frac{E_1}{1-\nu} \int_{t_0/2}^{t_0/2+t_1} \frac{z - \delta}{R} dz \quad (10)$$

$$F_{b0} = \frac{E_0}{1-\nu} \int_{-t_0/2}^{t_0/2} \frac{z - \delta}{R} dz \quad (11)$$

将以上式代入(8)可得

$$\delta = \frac{E_1}{E_0} \frac{t_1}{2} \frac{1 + t_1/t_0}{1 + E_1 t_1 / E_0 t_0} \quad (12)$$

外延层和衬底对于中性面内平行于 y 轴的对称轴的力矩为:

$$M_1 = \frac{E_1}{1-\nu} \frac{1}{R} \int_{t_0/2}^{t_0/2+t_1} (z - \delta)^2 dz \quad (13)$$

$$M_0 = \frac{E_0}{1-\nu} \frac{1}{R} \int_{-t_0/2}^{t_0/2} (z - \delta)^2 dz \quad (14)$$

应该说明的是,这里定义的中性面只是弯曲力为零的面,该面的实际应力等于其所在处的失配应力。

3 应变、应力和弯曲半径的计算

3.1 计算公式

外延层和衬底中的应变和应力都包括失配和弯曲两部分,根据上面的方程可得到如下计算公式

$$\epsilon_1 = \frac{(\Delta a/a)_r}{1 + (\Delta a/a)_r + E_1 t_1 / E_0 t_0} - \frac{t_0/2 + r_1 - \delta}{R} \quad (0 < r_1 < t_1) \quad (15)$$

$$\epsilon_0 = \frac{(\Delta a/a)_r}{1 + [1 + (\Delta a/a)_r] E_0 t_0 / E_1 t_1} + \frac{-t_0/2 + r_0 - \delta}{R} \quad (0 < r_0 < t_0) \quad (16)$$

其中 r_1, r_0 分别为以界面和衬底下底面为零点计及的外延层和衬底沿厚度方向的坐标, $(a_1 - a_0)/a_0 = (\Delta a/a)_r$, 弯曲半径 R 可通过(9)式得到, 式中失配力 F_m 等于(25)式右边第一项同时乘上外延层的厚度 t_1 和 $E_1/(1-\nu)$.

以上两式只适用于界面相干时的情况. 实际上, 外延层和衬底所组成的系统在界面处可能会有失配位错存在. 设由于失配位错的影响外延层和衬底间有大小为 $\epsilon_{\parallel} = (a_{x1} - a_{x0})/a_{x0}$ 的水平失配, 则界面晶格匹配条件可以写成

$$(1 + \epsilon_{xx1})a_1 = (1 + \epsilon_{\parallel})(1 + \epsilon_{xx0})a_0 \quad (17)$$

这时应变分布的计算公式为

$$\epsilon_1 = \frac{(\Delta a/a)_r - \epsilon_{\parallel}}{1 + (\Delta a/a)_r + (1 + \epsilon_{\parallel})E_1 t_1 / E_0 t_0} - \frac{t_0/2 + r_1 - \delta}{R} \quad (0 < r_1 < t_1) \quad (18)$$

$$\epsilon_0 = \frac{(\Delta a/a)_r - \epsilon_{\parallel}}{(1 + \epsilon_{\parallel}) + [1 + (\Delta a/a)_r] E_0 t_0 / E_1 t_1} + \frac{-t_0/2 + r_0 - \delta}{R} \quad (0 < r_0 < t_0) \quad (19)$$

对于实际的应变异质结构, 外延层的厚度总是远小于衬底的厚度, 这时外延层中的应变主要是失配应变, 弯曲的影响很小; 衬底中失配应变和弯曲应变都起作用, 但总和远小于外延层中的应变. 衬底中靠近界面处的应变最大. 这时外延层中的应变, 界面附近衬底中的应变和弯曲半径的计算公式可以简化为

$$\epsilon_1 = \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_r - \epsilon_{\parallel} \quad (20)$$

$$\epsilon_0(r_0 = t_0/2) = \frac{4E_1 t_1}{E_0 t_0} \left[\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_r - \epsilon_{\parallel} \right] \quad (21)$$

$$\frac{1}{R} = \frac{6E_1 t_1}{E_0 t_0} \left[\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_r - \epsilon_{\parallel} \right] \quad (22)$$

从(20)和(21)可以发现, 界面附近衬底中的应变和外延层中应变的比为 $4E_1 t_1 / E_0 t_0$. 即当 $E_1 t_1$ 与 $E_0 t_0$ 的比为 $1/40$ 时, 界面附近衬底中的应变可达外延层中应变的约 $1/10$, 相应地不考虑弯曲对外延层应变所引入的误差约为 10% . $1/10$ (或 10%) 这一比值之所以近似, 是因为在得到以上式子的过程中实际上略去了弯曲对外延层和衬底间失配的弛豫作用. 考虑到实际上 E_1 和 E_0 最大差别仅可能为数倍, 以上结果表明在分析实际结构的应变时可以将外延层和衬底的厚度比小于 $1/40$ 的数倍作为在分析应变或应力分布时能否将衬底作为厚衬底进行处理的标准. 当厚度比小于该值数倍时, 衬底可以作为厚衬底看待, 这时可利用(20)~(22)这些简化的公式计算应变、应力和弯曲半径; 当外延层和衬底的厚度比大于该值时, 则必须利用前面未经简化的计算公式, 但这些公式可用的条件是外延层和衬底的杨氏模量必须接近, 因为只有这样, 均匀弯曲这个假设还能近似成立.

由以上式子还可得到计算应力的相应公式

$$\sigma_1 = \frac{E_0 t_0^2}{6(1-\nu)R t_1} \quad (23)$$

$$\sigma_0(r_0 = t_0/2) = \frac{2E_0 t_0^2}{3(1-\nu)R} \quad (24)$$

(23)式和通常用于计算厚衬底上薄膜中应力的公式完全相同^[9]. 当弯曲半径已知时, (24)式同样可以被用来计算薄膜在靠近界面的衬底中引入的应力.

3.2 参数的实验确定方法

对于厚衬底上薄外延层的情况,外延层中的应变可以看成是均匀分布的,为了计算 ϵ_1 ,这时只需要知道 $(\Delta a/a)_r, \epsilon_{\parallel}$ 。为了得到 $(\Delta a/a)_r$ 和 ϵ_{\parallel} , X 射线双晶衍射是一种有效的方法。X 射线双晶衍射可以高精度测量界面附近的垂直失配 $(\Delta a/a)_{\perp}$ 和水平失配 $(\Delta a/a)_{\parallel}$ 。根据 ϵ_{\parallel} 定义,它等于界面有失配存在时在失配应力作用下外延层和衬底间的水平失配。考虑到均匀弯曲并不使界面附近的外延层和衬底产生失配,在均匀弯曲假设成立的条件下有

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel} = \epsilon_{\parallel} \quad (25)$$

对于厚衬底上薄应变外延层(外延层和衬底的厚度比小于 1/40 的数倍)的情况,考虑到泊松效应和界面附近衬底中的应变和外延层中的应变相比较可忽略,可以得到

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} = \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_r - \frac{2\nu}{1 - \nu} \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel} \quad (26)$$

这一关系式将界面附近水平失配,垂直失配这两个可直接测量的量与弛豫状态下外延层和衬底间的失配联系了起来。当界面相干时, $(\Delta a/a)_{\parallel} = 0$, 对于 Si 衬底上的 GeSi 应变层($\nu = 0.28$), 利用上式可算得垂直失配是弛豫状态下失配的 1.78 倍。对于完全非相干的情况 ($(\Delta a/a)_{\perp} = (\Delta a/a)_{\parallel}$), 上式将给出 $(\Delta a/a)_{\perp} = (\Delta a/a)_{\parallel} = (\Delta a/a)_r$ 。对于 Si 衬底上的 GeSi 应变外延层,不管界面是相干还是部分相干,只要精确测量 $(\Delta a/a)_{\perp}$ 和 $(\Delta a/a)_{\parallel}$ 这两个量,利用上式就能得到 $(\Delta a/a)_r$, 再由(20)式计算外延层中的应变,利用 $(\Delta a/a)_r$ 与 Ge 组分的关系 $(\Delta a/a)_r = 0.042x$ 也可求得外延层中的 Ge 含量。

Bean 等^[10]为研究 Si 衬底 GeSi 上外延层的弛豫利用 X 射线双晶衍射测量了不同厚度 GeSi($x=0.5$)外延层和 Si 衬底间的垂直和水平失配(图 2)。对于厚度大于 100nm 的情况,利用图中的 $(b_{\perp}-a)/a = (\Delta a/a)_{\perp}$ 和 $(b_{\parallel}-a)/a = (\Delta a/a)_{\parallel}$ 计算得到的组分约为 $x=0.53$ 。这和文中给出的 $x=0.5$ 符合得很好。厚度约为 50nm 时利用图中数据算得的 Ge 组分为 0.46,该值也和实际值接近。但是,对于厚度约为 10nm 的情况,计算得到的组分仅为 0.39,明显低于实际值。这种情况的出现可能与外延层很薄时由于外延层和衬底散射的 X 光间的干涉所导致的衍射峰间的角间距减小有关^[11,12]。

为了计算衬底中的应变或应力,首先需要知道弯曲半径。对于厚衬底的情况,弯曲半径一方面也可以通过直接测量得到(如改进的 X 射线 Lang 照象技术^[13]),另一方面也可以通过下面的式子计算得到

$$\frac{1}{R} = \frac{6E_1t_1}{E_0t_0^2} \frac{1-\nu}{1+\nu} \left[\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} - \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel} \right] \quad (27)$$

这时,最不容易精确确定的量是外延层的杨氏模量 E_1 。一般可以用体材料的值代替,但当外延层处于大应变状态时,由于非线性效应,实际值将和体材料的值有所不同。外延层的厚度可通过直接测量得到,当外延层很薄,精确直接测量变得困难时,其值也可以通过对测得的 X 射线双晶衍射回摆曲线进行模拟而得到^[14]。

因此将以上理论模型和 X 射线双晶衍射测量及模拟结合起来就可以同时得到外延层

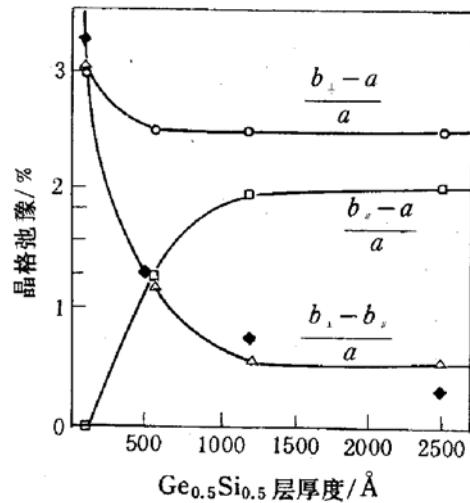


图 2 不同厚度 Ge_{0.5}Si_{0.5} 层晶格弛豫 X 射线测量结果(Bean^[10])

的生长参数(组分、厚度、失配)以及外延层和衬底中的应变分布.这对于材料生长和应用来说都将是非常有用的.

4 讨论

在上面的推导中一直假设整个异质结构均匀弯曲,可是又允许外延层和衬底可以有不同的杨氏模量.严格说来,只有当外延层和衬底有相同的杨氏模量且应变和应力的关系总是为线性时均匀弯曲假设才能成立.GaAlAs/GaAs这种小失配异质结系统,可以近似满足这一条件.这时以上模型对于任意的外延层和衬底厚度都是可用的.对于GeSi/Si和InGaAs/GaAs这种大失配系统,外延层和衬底所处的应变状态视外延层弛豫的情况可以相差很大.没有弛豫时应变和应力间关系的非线性会使得外延层和衬底的杨氏模量有较大的差别,部分弛豫后差别变小.无论弛豫与否,只要外延层的厚度远小于衬底的厚度,决定弯曲的将是衬底的弯曲力矩,且弯曲对外延层应变的影响很小.因此假设整个异质结构均匀弯曲实际上就相当于要求衬底均匀弯曲,这个条件显然是得到满足的.总之,在分析异质结构的应力分布和弯曲半径时,只要外延层的厚度远小于衬底的厚度,即外延层和衬底厚度的比小于1/40的数倍(大多数实际情况都满足这一条件),则无论外延层的杨氏模量和衬底的是否相同,均匀弯曲假设总能得到很好满足;当外延层和衬底的杨氏模量不同,厚度又差别不大时,均匀弯曲假设并不成立.

5 结论

本文发展了严格处理异质结构中应变和应力分布的方法.该方法的核心是将外延层和衬底中的应变和应力分为失配和弯曲两部分,并假设整个异质结构是均匀弯曲的.在此基础上得到了计算弯曲半径和应变分布的有关公式.对于界面有失配位错存在的异质结构,通过引入水平失配($\Delta a/a$)_{//}可以将界面相干和部分相干这两种情况作统一处理.以上处理方法可以很容易推广到衬底上有多个外延层且组分不均匀等更为一般的情况.

参 考 文 献

- [1] R. People, IEEE J. Quantum Electronics, 1986, **22**: 1696.
- [2] J. Matsui, K. Onabe, T. Kamejima *et al.*, J. Electronchem. Soc., 1979, **126**: 664.
- [3] R. H. Saul, J. Appl. Phys., 1969, **40**: 3273.
- [4] F. K. Reinhart and R. A. Lorgan, J. Appl. Phys., 1973, **44**: 3171.
- [5] G. H. Olsen and M. Ettenberg, J. Appl. Phys., 1977, **48**: 2543.
- [6] S. N. G. Chu, A. T. Macrander, K. E. Streege *et al.*, J. Appl. Phys., 1985, **57**: 249.
- [7] N. N. Davidenkov, Sov. Phys. Solid State, 1961, **2**: 2595.
- [8] 陈纲, 廖理凡, “晶体物理学基础”, 北京: 科学出版社, 1992, 第五章.
- [9] R. W. Hoffman, Phys. Thin Film, 1966, **3**: 211.
- [10] J. C. Bean, L. C. Feldman, A. T. Fiory *et al.*, J. Vac. Sci. & Technol., 1984, **A-2**: 436.
- [11] P. F. Fewster and C. J. Curling, J. Appl. Phys., 1987, **62**: 4154.

- [12] C. R. Wie and H. M. Kim, J. Appl. Phys., 1991, **69**: 6406.
- [13] G. A. Rozgonyi and T. T. Ciesielka, Rev. Sci. Instrum., 1973, **44**: 1053.
- [14] 朱南昌, 李润身, 陈京一, 等, 半导体学报, 1992, **13**: 690.

A Study of Strain Distribution in GeSi/Si Strained Heterostructure

Li Binghui, Han Ruqi and Wang Yangyuan

(Institute of Microelectronics, Peking University, Beijing 100871)

Received 29 August 1994, revised manuscript received 11 April 1995

Abstract A mechanical model is given for the strain distribution and curvature radius in GeSi/Si heterostructure. In this model, the strain in the heterostructure is supposed to be the sum of misfit strain and bending strain. For heterostructure with a coherent or incoherent interface, formulas for strain and curvature are obtained by considering the mechanical balance requirements under the assumption of uniform bending. The model combined with X ray double crystal diffraction measurement and simulation can give all the information about epilayer grown parameters and strain distribution in the heterostructure. The validity of uniform bending is discussed.

PACC: 6220F, 6865, 7340L