

应变异质结外延材料的缓冲层厚度 与 Frank-Read 源的关系研究

邹吕凡 王占国 范缇文

(中国科学院半导体研究所 半导体材料科学实验室 北京 100083)

摘要 基于能量最小近似模型, 研究了应变异质结外延材料中, 产生 Frank-Read 源以释放失配应力所需 GeSi 合金缓冲层的厚度。对 Ge_xSi_{1-x}/Si 进行了具体计算, 其结果表明: 产生 Frank-Read 源时缓冲层厚度要比临界厚度大得多, $L_{min}=1300 \text{ \AA}$ 是钉扎点间的最小距离。计算结果与 LeGoues 等的实验结果相符。就作者所知, 计算产生 Frank-Read 源时 GeSi 合金缓冲层厚度的工作, 以前未见报道。

PACC: 6855, 4630J, 6170G

1 引言

对于应变异质结外延材料(如 Ge_xSi_{1-x}/Si , $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ 等), 应变和应变释放对薄膜和超晶格性质起着关键作用。例如, 对于 Ge_xSi_{1-x} 材料, 要在 Si 衬底上生长厚的, 弛豫的 Ge_xSi_{1-x} 合金。然而弛豫机制又包含有穿透位错的运动。因此, 希望通过设计缓冲层结构而对外延层中的应变进行调整。目前有文献报道^[1~3], 通过设计组分渐变的缓冲层, 可将位错网络定域在该缓冲层的下半部, 甚至深入到衬底, 使外延层中的应变得以弛豫, 而缓冲层顶层则是无应变, 无位错的。LeGoues 等^[1,2]指出, 衬底中出现大量位错是由于局域在渐变层内似 Frank-Read 源的结果, 并对其应变弛豫机制进行了定性分析。

当组分一定的 GeSi 合金缓冲层厚度比临界厚度大得多时, 将引入失配位错^[1]。位错交叉形成的钉扎点开始起着如同 Frank-Read 源的作用^[4]。因此, 为了控制穿透位错的运动, 形成 Frank-Read 源, 确定形成 Frank-Read 源时 GeSi 合金缓冲层的厚度是有必要的。本文基于能量最小近似模型^[5], 计算了形成 Frank-Read 源时对应的 GeSi 合金缓冲层厚度。

2 缓冲层厚度 h 的计算

通过设计缓冲层结构, 形成 Frank-Read 源而对外延层中的应变进行调整的结构形式

邹吕凡 男, 博士生, 主要从事半导体材料及物理的研究
1994 年 10 月 13 日收到初稿, 1995 年 6 月 16 日收到修改稿

有两种(如图 1).

图 1(b)中, 缓冲层中的 Ge 浓度 x 从 0 渐变到 30%. 图 1(a)中缓冲层由层 I 和层 II 组成. 层 I 中的 Ge 浓度 y 是一确定值 x_0 , 该层的厚度 h 比临界厚度 h_c 大得多, 层 II 中的 Ge 浓度 x 从 x_0 渐变至 30%. 两种结构形式中 Ge 浓度可以以线性的方式渐变, 也可以以梯度的方式渐变. 实验结果显示^[1~3], 这两种结构形式均能形成 Frank-Read 源, 位错网络限制在缓冲层的较下部分, 甚至进入衬底, 而外延层顶部无缺陷.

假设衬底和生长表面是完整的, 没有其他低能成核位置存在. 为了形成 Frank-Read 源有必要引入少量失配位错. 因此, 只要 Ge 组分 y 一定时的缓冲层 I 的厚度 h 大于临界厚度 h_c , 就会有少量失配位错产生, 其位错能为^[6]:

$$E_d = \frac{G b^2}{4 \pi} (\frac{\sin^2 \theta}{1 - \nu} + \cos^2 \theta) \ln \frac{h}{b} \quad (1)$$

式中 G 为外延层切变模量; ν 为外延层泊松比; b 为柏格斯矢量的大小; θ 为柏格斯矢量与位错线方向的夹角. 当 $x \leq 0.35$ (或 $f \leq 0.015$), 对于 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$, 失配位错是 60° 位错^[7].

随着位错的引入, 应力将释放一部分. 剩余应力 σ 是位错密度 ρ 的函数^[5]

$$\sigma = 2 G (1 + \nu) / (1 - \nu) (f - \rho b \sin \theta \cos \varphi) \quad (2)$$

式中 φ 为位错滑移面法向与界面法向的夹角; f 为晶格失配率.

运动着的穿透位错和与其正交的位错间的排斥力足以钉扎穿透部分^[8,9]. 考虑钉扎在

两个节点 A、B 间的位错部分(图 2a). 在滑移面内的切应力 τ 的作用下, 位错线 AB 将弯向衬底(图 2b). 在一级近似下, 其行为如同 Frank-Read 源. 要使位错以这样的弯曲状态平衡存在, 必须满足^[10]:

$$\tau = (2T) / (Lb) \quad (3)$$

其中 $\tau = \sigma \cos \varphi \cos \lambda$; 量 $\cos \varphi \cos \lambda$ 称为 Schmid 因子; λ 为柏格斯矢量 b 与界面法向的夹角. 弯曲位错具有线张力, 它将对位错线作用一个力而使之变直, 从而降低位错线的总能量. 它等于:

$$T = \frac{G b^2}{4 \pi (1 - \nu)} (1 + \nu \cos^2 \theta - 2\nu \sin^2 \theta) \ln \frac{h}{b} \quad (4)$$

经过推算, 可以得到:

$$h = \frac{(1 + \nu)}{(1 + \nu \cos^2 \theta - 2\nu \sin^2 \theta)} \frac{4 \pi L f h_c}{b \ln(h/b)} \cos \varphi \cos \lambda \quad (5)$$

对于生长在(100)Si 衬底上的 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 材料, 泊松比 $\nu = 0.3$, 位错滑移面为 $(1\bar{1}\bar{1})$ 面, 柏格斯矢量 $\vec{b} = a/2[10\bar{1}]$, $a = 5.54 \text{ \AA}$ ^[11], $\cos \varphi = 1/\sqrt{3}$, $\cos \lambda = 1/\sqrt{2}$, $b = 3.92 \text{ \AA}$, $L = 1300 \text{ \AA}$ ^[2], 则式(5)可化为:

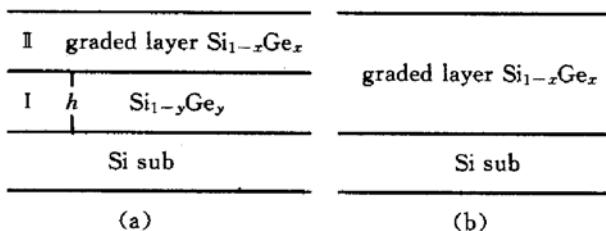


图 1 缓冲层结构

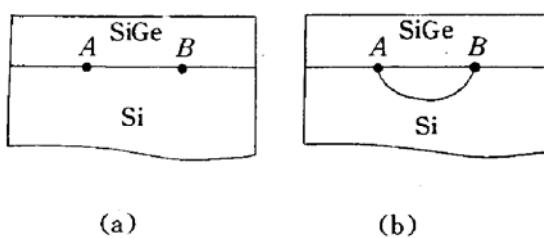


图 2 (a) 位错交叉形成钉扎点

(b) 在 τ 的作用下, 位错线 AB 弯向衬底

$$h = (3.54 \times 10^3) \frac{fh_c}{\ln(h/3.92 \text{ \AA})} \quad (6)$$

式(6)示于图 3, 其中 f , h_c 由 People-Bean 给出的公式得到^[1].

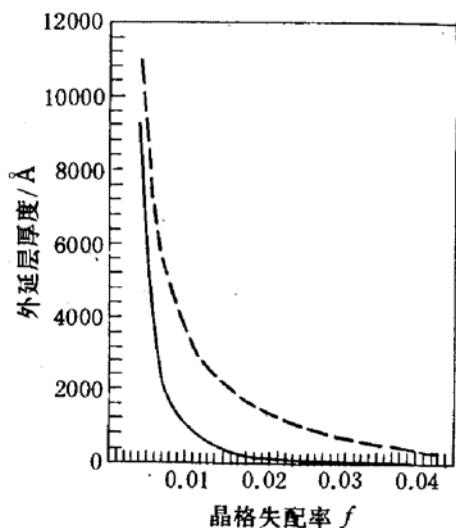


图 3 缓冲层厚度 h 与晶格失配率 f 的关系
虚线: 缓冲层厚度 h ; 实线: 临界厚度 h_c

这表明, 当钉扎点距离 $L \leq 1300 \text{ \AA}$ 时, 将难以形成 Frank-Read 源以释放失配应力. L 变小, 位错增多, 钉扎点彼此靠得很近, 此时, 作用于位错上的驱动力远远大于薄膜内的压应力和位错间的相互作用力, 使得穿透位错越过钉扎点向外延层顶部运动, 结果留下缺陷很多的薄膜, 这与 LeGoues 等^[1]的结果一致. 完整的生长表面并不足以避免穿透位错, 这时需考虑临界厚度的影响, 以避免产生失配位错. 根据我们的计算, 进一步证实了, 当 $x=0.15$ 时, $L=1300 \text{ \AA}$ 是形成 Frank-Read 源的两钉扎点间的最小距离, 这与 LeGoues 等报道的结果一致^[2]. 此外, 根据式(3)还可以估算难以测量的滑移面内的切应力 τ .

3.3 Frank-Read 源被拉伸至晶片边缘

当按式(5)确定的 h 值生长出组分确定的 $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ 合金缓冲层后, 将引入失配位错, 而释放部分应力. 位错交叉形成钉扎点, 剩余应力作用于两钉扎点间的位错部分, 而使位错弯曲, 其行为如同 Frank-Read 源. 此时, 位错以这样的弯曲状态存在是平衡的, 剩余应力不足以推动 Frank-Read 深入衬底. 然而, 若继续生长渐变层, 则会有更多的应力作用于这些 Frank-

3 讨论

3.1 形成 Frank-Read 源的 h 比 h_c 大得多

由图 3 可见, 产生 Frank-read 源时, 缓冲层 I 的厚度 h 比临界厚度 h_c 大得多, 这与实验结果相符^[1]. 为了控制穿透位错, 形成 Frank-Read 源以释放失配应力, 生长出任意组分的无缺陷的外延层, 而将释放应变的缺陷埋在缓冲层, 且深入到衬底里, 即可按图 1(b)的结构形式将渐变层从 $x=0$ 开始; 也可按图 1(a)的结构形式, 由式(5)(或式(6))决定缓冲层 I 的厚度.

3.2 形成 Frank-Read 源的两钉扎点间的最小距离

图 4 同时示出了 $L=130 \text{ \AA}$, $L=500 \text{ \AA}$, $L=1000 \text{ \AA}$, $L=1300 \text{ \AA}$ 时, 缓冲层厚度 h 的变化. 前三条曲线与临界厚度曲线都有一些交迭, 尤其是 $L=130 \text{ \AA}$ 时交迭更多.

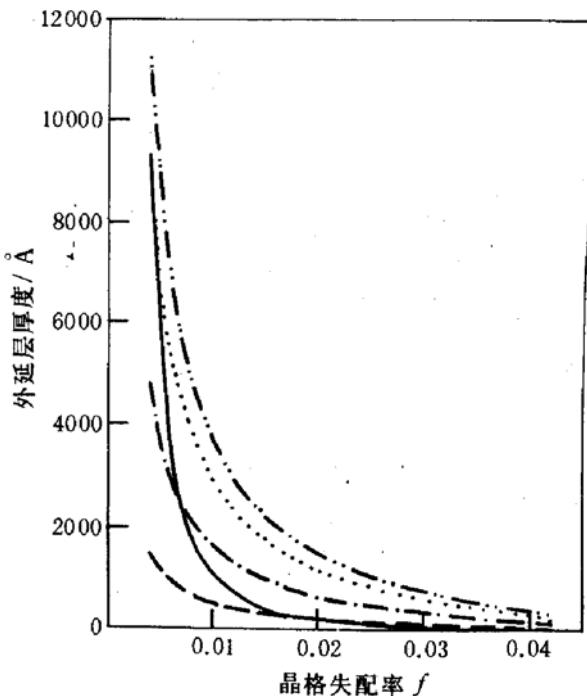


图 4 不同钉扎点距离 L 对应的
缓冲层厚度 h 的变化
实线: 临界厚度 h_c ; 虚线: $L=130 \text{ \AA}$; 点划线: $L=500 \text{ \AA}$
点线: $L=1000 \text{ \AA}$; 点点划线: $L=1300 \text{ \AA}$.

Read 源，使它们向衬底运动。同时，随着组分的增加，“新”的界面就会产生，每一原子层为了减少能量，需满足自身的晶格常数，原有一层就会受到新的一层平行于界面的拉伸应力作用。在这部分应力的作用下，这些 Frank-Read 源被拉伸至晶片边缘，而获得无应变，无位错的顶层(如图 5)。

3.4 本文着重研究了 Ge_xSi_{1-x}/Si 应变异质结外延材料的缓冲层厚度与 Frank-Read 源的关系。同样地，式(5)也适用于各类应变异质结外延材料。

4 结论

本文研究了 Frank-Read 源的产生与 Ge_xSi_{1-x} 合金缓冲层厚度的关系。计算结果表明，当产生 Frank-Read 源时，合金缓冲层的厚度比临界厚度大得多，并且，两钉扎点间的最小距离大约为 1300 \AA ，这与 LeGoues 等^[1,2]报道的结果一致。就作者所知，计算产生 Frank-Read 源时 GeSi 合金缓冲层厚度的工作，以前未见报道。

致谢 在本文的完成过程中，作者得到了任光宝助理研究员，王玲女士的很多帮助，在此向他们表示感谢。

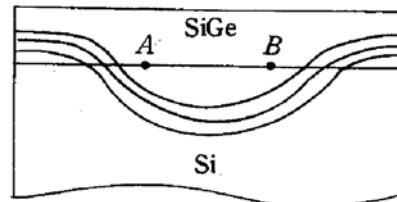


图 5 Frank-Read 源被拉伸至
晶片边缘示意图

参 考 文 献

- [1] F. K. LeGoues, B. S. Meyerson and J. F. Morar, Phys. Rev. Lett., 1991, **66**:2903.
- [2] F. K. LeGoues, B. S. Meyerson, J. F. Morar et al., J. Appl. Phys., 1992, **71**:4230.
- [3] F. Schaffler, D. Tobben, H. J. Herzog et al., Semicond. Sci. Technol., 1992, **7**:260.
- [4] J. P. Hirth and J. Lothe, Theory of Dislocations, 2nd ed., New York: Wiley, 1982, Chap. 20.
- [5] S. M. Hu, J. Appl. Phys., 1991, **69**:7901.
- [6] D. Hull and D. J. Bacon, Introduction to Dislocations, 3rd ed., Pergamon Press, 1984, p. 80.
- [7] E. P. Kvam, D. M. Maher and C. J. Humphreys, J. Mater. Res., 1990, **5**:1900.
- [8] R. Hull, J. C. Bean and C. Buescher, J. Appl. Phys., 1989, **66**:5837.
- [9] L. B. Freund, J. Appl. Phys., 1990, **68**:2073.
- [10] J. Friedel, Dislocations, Pergamon Press, 1964, p. 218.
- [11] R. People and J. C. Bean, Appl. Phys. Lett., 1986, **49**:229.

Frank-Read Sources and Buffer Layer Thickness for Strained-Layer Heterostructures

Zou Lufan, Wang Zhanguo and Fan Tiwen

(*Laboratory of Semiconductor Materials Science, Institute of Semiconductors,
The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083*)

Received 13 October 1994, revised manuscript received 16 June 1995

Abstract An expression is derived for the necessary buffer layer thickness of heteroepitaxial films when Frank-Read sources are generated to relieve the misfit stress by taking the energy minimization approach. The numerical results show that the necessary buffer layer thickness is significantly greater than the equilibrium critical thickness and L_{\min} , the minimum length between pinning points for which Frank-Read sources will operate, is equal to 1300 Å. These results are in good agreement with experimental results reported by LeGoues *et al.* To our knowledge, this study constitutes the first successful description of alloy buffer layer thickness versus Frank-Read sources for strained-layer heterostructures growth on high-quality substrates.

PACC: 6855, 4630J, 6170G