

# 带有非应变盖层的应变外延层的稳定性\*

金 智 杨树人 安海岩 马春生 王本忠 刘式墉

(集成光电子国家重点联合实验室 吉林大学实验区 吉林大学电子工程系 130023)

**摘要** 本文利用连续介质模型讨论了有盖层的应变外延层的稳定性. 针对目前的单扭结和双扭结模型中净作用力和净应力相互独立、不能统一的缺点, 本文提出了一种混合扭结模型, 即在盖层小于某值时, 应变外延层中的应变由在上下界面的位错对和处于下界面上的单位错共同释放. 从我们的公式出发, 也可以导出单扭结和双扭结模型的净作用力和净应力的公式, 从而使单双扭结模型统一起来. 而且我们的公式可以用于描述盖层为任意厚度时的状况, 这对于描述外延层的生长过程中的应力应变变化都有重要的意义. 本文还从此模型出发计算了盖层为任意厚度时应变层的临界厚度.

PACC: 6170D, 4630C, 6220D

## 1 引言

Dodson 等人<sup>[1]</sup>提出的位错动力学模型, 已成功地用于解释 SiGe/Si<sup>[1-3]</sup>、InGaAs/GaAs<sup>[4,5]</sup>等系统的应变外延层的应变弛豫行为. 在这个理论中, 净应力  $\tau_{\text{ext}}$  是描述位错在应变外延层中运动和增殖的驱动力. 当净应力为 0 时, 对应的应变外延层厚度为临界厚度. 任意结构的应变外延层的稳定性可以用净应力来估计. Tsao 等人<sup>[6,7]</sup>和 Houghton 等人<sup>[8]</sup>曾先后给出净应力的表达式. 在这些表达式中, 对于不同的应变外延层结构, 有两种位错机制. 第一种: 对于没有盖层的情况, 应变状态和净应力由单扭结模型来描述. 在这个模型中, 应变层中的应变能是由在外延层和衬底的界面上产生的失配位错来释放. 第二种: 对于存在盖层的情况, 应变状态和净应力由双扭结模型描述. 这个模型中, 应变层中的应变能是由在上下界面同时产生的失配位错对来释放的. 在 Tsao 等人<sup>[6,7]</sup>的双扭结模型的表达式中, 线位错的线张力简单地单扭结模型中线张力的 2 倍, 这是忽略了自由表面的影响. Houghton 等人考虑了这一影响, 对其表达式进行了修正. 其机制仍然是单扭结和双扭结模型. 这些理论中一个明显的不足是: 只研究了单扭结和双扭结两种极端情况, 而没有考虑随盖层厚度的变化, 由单扭结向双扭结的转变过程. 从物理上讲, 这是不可能的. 在生长一个有盖层的应变外

\* 本工作得到了国家自然科学基金(69896260 和 69676021)的资助

金 智 男, 1970 年出生, 博士研究生, 从事半导体光电子材料与器件研究

杨树人 男, 1939 年出生, 教授, 从事半导体光电子材料与器件研究

刘式墉 男, 1935 年出生, 教授, 博士生导师, 从事半导体光电子学研究

1998-04-30 收到, 1998-07-30 定稿

延层结构的过程中, 当应变层生长完后, 如果有应变弛豫发生是由产生在下界面的失配位错来释放应变 继续生长盖层, 在初期, 上界面上的失配位错应为 0, 随盖层的增加, 上界面上的失配位错数目逐渐增大, 直到与下界面的失配位错数目相等, 从而过渡到双扭结机制 实验上观察到, 在有盖层的应变外延层结构中, 当盖层厚度小于某一数值时, 应变弛豫是由产生在下界面上的单一位错和位错对共同释放应变<sup>[9]</sup>. 而现有的模型对此都未进行描述

本文在净作用力的公式中引入由于上界面失配位错数目与下界面位错数目的不同的影响, 从而推导出盖层为任意厚度都适用的净作用力的表达式 表达式对于单扭结到双扭结的过渡过程给予了描述 基于这一表达式, 我们给出了净应力的表达式 用我们的公式也可以得到 T sao 等人和 Houghton 的单扭结和双扭结表达式

## 2 线位错上的净作用力和净应力

在连续弹性介质模型中, 叠加原理是成立的 在这个原理中, 由作用在一个体系上的一系列的力引起的应力和位移与各个分力的合力引起的相同 对于一个有限系统必须满足在表面上的边界条件 例如, 对于一个由衬底-应变

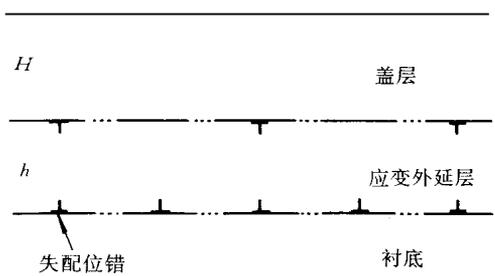


图 1 有盖层的应变外延层的应变释放示意图

外延层构成的有限体系, 要求作用在自由表面的应力为 0 镜像力方法是解决此类问题一种很有效的方法<sup>[10]</sup>. 如图 1 所示, 对于一个由衬底、应变外延层、非应变盖层组成的结构, 如果产生应变弛豫, 将有两种失配位错产生: 一种处于衬底和应变外延层间的下界面, 一种处于应变外延层和盖层间的上界面 这两种位错的伯格斯矢量的方向相反而大小相等组成位错对 对于处于上界面的失配位错, 如果放置一个与其伯

格斯矢量大小相等方向相反距离为  $2H$  的像位错则两位错在自由表面产生的应力为 0, 从而使边界条件得到满足 而对于处于下界面上的位错, 则需要一组位置和伯格斯矢量满足一定条件的位错才能满足边界条件<sup>[11, 12]</sup>. 如果假设应变层和盖层的剪切模量相同, 则只需一个与下界面失配位错的伯格斯矢量方向相反, 大小相等, 距离为  $2(h + H)$  的像位错即可

在线性近似下, 在距表面为  $z$  处, 由于产生失配位错而要克服的线张力为<sup>[10]</sup>

$$F_s = \frac{\mu b^2 (1 - \nu \cos^2 \theta)}{4\pi(1 - \nu)} \ln \left[ \frac{4z}{b} \right] \tag{1}$$

这里  $\mu$  是材料的剪切模量;  $\nu$  是 Poisson 比;  $b$  是伯格斯矢量的长度;  $\theta$  是位错线与伯格斯矢量方向的夹角 这样, 在上界面产生失配位错所要克服的线张力为

$$F_s^u = \frac{\mu b^2 (1 - \nu \cos^2 \theta)}{4\pi(1 - \nu)} \ln \left[ \frac{4H}{b} \right] \tag{2}$$

在下界面为

$$F_s^L = \frac{\mu b^2 (1 - \nu \cos^2 \theta)}{4\pi(1 - \nu)} \ln \left[ \frac{4(h + H)}{b} \right] \tag{3}$$

应变外延层作用在线位错上的作用力为<sup>[6]</sup>

$$F_s = b\mu \left( \frac{1+\nu}{1-\nu} \right) \int_0^z [e(z) - b\cos\lambda/p] dz \quad (4)$$

其中  $e(z)$  为在  $z$  点的晶格失配;  $p$  是相邻位错间的距离;  $\lambda$  是失配位错的伯格矢量与界面上垂直于位错线的方向夹角

当上下界面同时存在位错时,即产生位错对,应考虑位错对中各位错的相互作用.他们间的相互作用是将下界面的位错固定,在下界面位错产生的应力场中使一个位错从自由表面移动到上界面时所做的功.则位于上下界面上位错间的相互力可以写为<sup>[8]</sup>

$$F_{\text{inter}} = \frac{\mu b^2 (1 - \nu \cos^2 \theta)}{2\pi(1 - \nu)} \ln \frac{h}{h + H} \quad (5)$$

实验研究发现<sup>[9]</sup>:在有非应变盖层的应变外延层材料中,如果盖层不是很厚,应变弛豫不能单纯用单扭结或双扭结模型来描述<sup>[9,13]</sup>.实验中发现,单一位错和位错对对应变的弛豫同时起作用.在有应变盖层的结构中,在下界面的失配位错产生长程作用,在盖层中产生应变,这部分应变会由于上界面失配位错的引入而得以消除,但位错的数目增加.这两个能量之间的竞争导致了在盖层不很厚时单一位错和位错对共存的情况.对于盖层非常薄的结构,由单位错产生的长程作用产生的能量要小于上界面的位错能,这时应变弛豫机制以单扭结为主.对于盖层非常厚的情况,盖层中的长程能量要远远大于上界面处的位错能,因此应变弛豫以双扭结为主.在这两种情况之间,单位错和位错对同时存在以使系统能量达到最低.实验发现<sup>[9]</sup>:在应变层厚度为 100nm 部分弛豫的 Si/Ge<sub>0.2</sub>Si<sub>0.8</sub>/Si 材料中,当外延层厚度为 300nm 时,大约有 10% 的失配位错以单位错形式存在.为描述这个现象,我们引入一个参数  $\eta$ .它表示上界面和下界面失配位错数目的比.当盖层的厚度趋于 0 时,  $\eta$  也应当趋于 0,因为这时没有盖层存在,自然在上界面也不应当有位错存在.当盖层厚度超过某一值时,  $\eta$  等于 1<sup>[9]</sup>.在这里我们选择  $\eta$  与盖层厚度成线性关系,并具有如下形式:

$$\begin{aligned} \eta &= 0 && (\text{当 } H > H_{\text{cor}}) \\ \eta &= H/H_c && (\text{当 } H_{\text{cor}} < H < H_c) \\ \eta &= 1 && (\text{当 } H > H_c) \end{aligned} \quad (6)$$

这里  $H_c$  是临界盖层厚度.表示当盖层的厚度大于  $H_c$  时,应变弛豫完全由位错对释放.  $H_{\text{cor}} = b/\alpha$  是位错芯的半径,其中  $\alpha$  是位错芯常数.对于 III-V 族化合物  $H_{\text{cor}}$  约为 0.1nm.第一个条件是当盖层的厚度小于位错的芯半径时,在应变层和盖层的界面上不存在位错.对于  $H_{\text{cor}} < H < H_c$  时,上界面的位错数目随盖层的厚度线性增加.对于 Si/SiGe/Si 系,我们取  $H_c$  等于 300nm<sup>[9]</sup>.

力学模型认为:失配位错是线位错的延伸.当位错的线张力大于应变对线位错产生的应变力,则不产生失配位错;反之,则线位错在界面上延伸产生失配位错.净作用力可以衡量两者的大小.净作用力是应变力与线张力的差.综合这些项,我们得到作用在一条线位错上的平均净作用力为

$$\begin{aligned} F_{\text{exc}} &= \left| b\mu \left( \frac{1+\nu}{1-\nu} \right) \int_0^z [e(z) - b\cos\lambda/p] dz \right| - \frac{\mu b^2 (1 - \nu \cos^2 \theta)}{4\pi(1 - \nu)} \\ &\quad \times \left[ \ln \left( \frac{4(H+h)}{b} \right) + \eta \ln \left( \frac{4H}{b} \right) + 2\eta \ln \left( \frac{h}{h+H} \right) \right] \end{aligned} \quad (7)$$

采用 Tsaio 等人<sup>[6]</sup>得到净应力的方法,我们对平均净作用力归一化,以求得净应力的表达式.对于单节点模型,外延层中的应变由在下界面上的失配位错来释放,即  $\eta = 0$ .此时,应

将净作用力对这个外延层包括盖层进行归一化, 而得到单扭结净应力的表达式如下:

$$\begin{aligned} \tau_{exc}^{SK} &= \cos \phi F_{exc} / z b \\ &= \cos \phi \left\{ \frac{2\mu(1+\nu)}{z(1-\nu)} \int_0^z [e(z) - b \cos \lambda / p] dz - \frac{\mu b(1-\nu \cos^2 \theta)}{2\pi z(1-\nu)} \ln \left( \frac{4z}{b} \right) \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

这里  $\phi$  是滑移面与界面法线方向的分量

对于应变由单位错和位错对共同释放的情况, 此时  $\eta = 0$ , 将净作用力对应变外延层与伯格矢量的乘积归一化, 得到净应力表达式如下:

$$\begin{aligned} \tau_{exc}^K &= \cos \phi F_{exc} / h b \\ &= \cos \phi \left\{ \frac{2\mu(1+\nu)}{h(1-\nu)} \int_0^z [e(z) - b \cos \lambda / p] dz - \frac{\mu b(1-\nu \cos^2 \theta)}{2\pi h(1-\nu)} \right. \\ &\quad \left. \times \left[ \ln \left( \frac{4(h+H)}{b} \right) + \eta_{ln} \left( \frac{4H}{b} \right) + \eta_{ln} \left( \frac{h}{h+H} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (9)$$

### 3 结果与讨论

从(7)、(9)式可以看到: 当  $H$  趋于 0 时,  $\eta_{ln}(4H/b)$  趋于 0 而在 Houghton 所给的双扭结公式中, 净应力则趋于无穷 这在物理上是不对的 对于盖层厚度趋于 0 的情况, 净作用力和净应力的公式应为单扭结模型对应的公式 我们给出的公式确实是这样的 如果我们设  $\eta = 0$ , 即在上界面上没有失配位错产生, 应变由位于下界面的失配位错释放, 我们的公式与 T sao 等人给出的单扭结公式一致 当  $H \gg h$  且  $\eta = 1$  时, 此时表面效应可以忽略, 应变全由位错对释放, 公式趋近于 T sao 等人给出的双扭结公式<sup>[3]</sup>. 如果  $H$  为任意厚度,  $\eta = 1$ , 应变同样也由位错对释放, 并考虑了自由表面的影响, 公式与 Houghton 所给的双扭结模型一致<sup>[8]</sup>. 因为 Houghton 的公式是双扭结机制, 所以它不能反映由单扭结向双扭结机制的转变过程 在我们的公式中引入  $\eta$  后, 对于任意厚度的盖层都能描述其应力、应变状态, 且可以由单扭结自然过渡到双扭结模型 图 2 表示了对不同的  $H_c$  净应力随盖层的变化 由图可见, 随着  $H_c$  的增加, 我们得到的曲线逐渐与单扭结模型曲线接近 这说明  $H_c$  的大小实际上反映了随盖层的变化位错对产生的难易程度

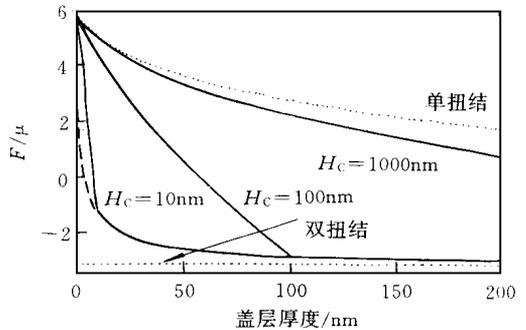


图 2 对不同的  $H_c$  时规一化的净作用力随盖层厚度的变化曲线  
 实线为本理论得到的结果, 虚线为 Houghton 的结果, 点线为 T sao 等人的结果

当  $F_{exc} = 0$  或  $\tau_{exc} = 0$  且  $p$  时, 对应的应变外延层的厚度为力学平衡模型对应的临界厚度 ( $h_c$ ). 由(7)或(9)式出发可得到临界厚度的表达式如下:

$$\int_0^{h_c} e(z) dz = \frac{b(1-\nu/\cos \theta)}{4\pi(1+\nu)} \left[ \ln \left( \frac{4(h_c+H)}{b} \right) + \eta_{ln} \left( \frac{4H}{b} \right) + \eta_{ln} \left( \frac{h_c}{h_c+H} \right) \right] \quad (10)$$

上式表明: 应变外延层的临界厚度不仅与外延层的应变有关, 而且与盖层的厚度和上下界面位错数目的比有关 图 3 给出了当应变层失配为 2.5% 时, 临界厚度和盖层厚度的关系曲线 图中点线对应 T sao 等人的单扭结和双扭结机制, 虚线对应 Houghton 的结果, 实线为从

(10)式出发得到的结果 如图所示,在盖层厚度很薄时,我们得到的曲线与单扭结模型得到的曲线接近 当盖层厚度增加时,逐渐与双扭结模型曲线接近 而由于在盖层很薄时,过高地估计了位错对的影响,Houghton 等人得到的曲线随盖层厚度的增加与双扭结模型接近很快 但对于盖层厚度很小时,从Houghton 的公式出发得到的临界厚度要小于没有盖层时的临界厚度 事实上,这是不可能的 图4为当盖层为不同厚度时,应变层临界厚度随应变层中的失配的变化曲线 其中各线的含义与图3相同 从图中可以看到,当盖层厚度逐渐增加时,临界厚度从T<sub>sao</sub>等人的单扭结向双扭结接近 而Houghton 的曲线随盖层厚度很快接近双扭结对应的值 这是由于他们的结果忽略了应变弛豫机制的转变而造成的

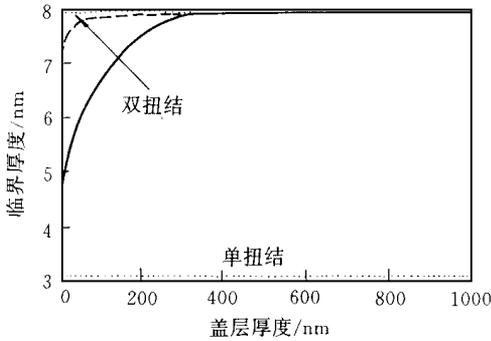


图3 当外延层失配为 2.5% 时,临界厚度随盖层厚度的变化曲线  
实线为本理论得到的结果,虚线为 Houghton 得到的结果,点线为 T<sub>sao</sub> 等人的结果

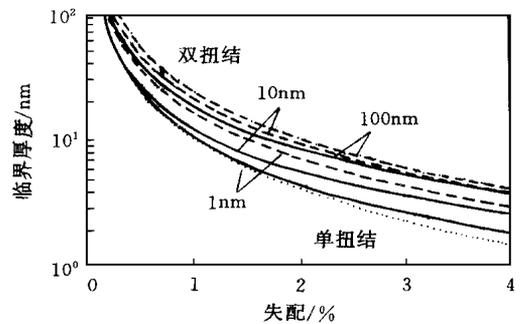


图4 应变外延层失配为 2.5% 时,临界厚度随应变层中应变的变化曲线  
实线为本理论得到的结果,虚线为 Houghton 的结果,点线为 T<sub>sao</sub> 等人的结果

### 4 结论

本文利用连续弹性介质模型讨论了带有非应变盖层的应变层结构中的应变弛豫机制提出了:在盖层不是很厚时,应变的弛豫由单位错和位错对共同作用 并对已有的净作用力和净应力公式进行了修正,从而得到了一个新的表达式 这个表达式能完整地描述随盖层厚度的增加,从单扭结向双扭结过渡过程中的应力状态 在此基础上,推导出了带有盖层的应变结构的临界厚度的表达式 表达式中的临界厚度不仅与应变层中的应变有关,而且与盖层的厚度和上下界面位错数目的比有关 这对于有盖层的应变结构的器件设计有重要的意义

### 参 考 文 献

[ 1 ] Dodson B. W. and Tsao J. Y. , Appl Phys Lett , 1987, **51**: 1325  
 [ 2 ] Dodson B. W. and Tsao J. Y. , Annu Mater Sci , 1989, **19**: 419.  
 [ 3 ] Dodson B. W. and Tsao J. Y. , Phys Rev. ,B, 1987, **51**: 1325  
 [ 4 ] Wie C. R. , J Appl Phys , 1989, **65**: 2267.  
 [ 5 ] Drigo A. V. ,Aydinli A. et al , J Appl Phys , 1989, **66**: 1975  
 [ 6 ] Tsao J. Y. and Dodson B. W. , Appl Phys Lett , 1988, **53**: 848  
 [ 7 ] Dodson B. W. and Tsao J. Y. , Annu Rev Sci , 1989, **19**: 419

- [ 8 ] Houghton D. C. , J. Appl Phys , 1991, **70**: 2136  
[ 9 ] Hull R. and Bean J. C. Appl Phys Lett , 1989, **55**: 1900  
[10] Hirth J. P. and Lothe J. , Theory of Dislocations, 2nd ed (Wiley-Interscience, New York, 1982)  
[11] Head A. K. , Phil Mag , 1953, **44**: 92  
[12] Head A. K. , Proc Phys Soc B, 1953, **66**: 793

## Stability of Strained Layer With Capping Layer

Jin Zhi, Yang Shuren, An Haiyan, Ma Chunsheng, Wang Benzhong, Liu Shiyong

*(State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Jilin University Region,  
Department of Electrical Engineering, Jilin University, Changchun 130023)*

Received 30 April 1998, revised manuscript received 30 July 1998

**Abstract** The stability of strained layer with capping layer is discussed by using continuous elastic model. In order to unify the existing single-kink model and double kink model, a mixture model, in which the strain is relaxed by the mixture of the dislocation pairs and single dislocations, is proposed. The excess forces and stresses of the single and double kink models can be derived from the proposed model. The present formulae can be used to describe the state of strained layer with arbitrary capping-layer thickness. This is important to the description of the variations of strain and stress in the epitaxial growth process. Based on the mixture model, the critical thickness of the strained layer with arbitrary thickness is calculated.

**PACC:** 6170D, 4630C, 6220D