МЕХАНИЗМ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $SI_{1-X}SN_X$ (0≤X≤0.04)

Х.М.Мадаминов, А.Ш.Икромов, Б.Ғуломов

Maqolada suyuq fazali epitaksiya usulida pSi taglikka, chekli hajmli qalayli qorishma-eritmadan o'stirilgan $Si_{1-x}Sn_x$ qattiq eritmalarining strukturaviy xususiyatlarini o'rganish natijalari keltirilgan. Qalay atomlari uyushmalari hosil bo'lishida va o'zaro mos kelmovchi dislokatsiyalarning paydo bo'lishi sababli yuzaga keluvchi mexanik kuchlanishlarning qiymatlari hisoblangan. Olingan natijalarning tahlilidan qalay atomlari uyushmalari hosil bo'lishida yuzaga keluvchi elestik mexanik kuchlanish o'zaro mos kelmovchi dislokatsiyalarning paydo bo'lishiga sabab bo'lishi aniqlandi.

Kalit so'zlar: *qattiq eritma, epitaksial qatlam, mikrostruktura, elastik kuchlanish, uyushma, dislokatsiya.*

Приведены результаты исследования структурних свойств твердых растворов $Si_{1-x}Sn_x$, выращенных методом жидкофазной эпитаксии, из ограниченного объема оловянного раствора-расплава на *pSi* подложках. Вычислены значения упругих напряжений, образующихся за счет скопления олова *и* механических напряжений, с учетом образования дислокаций несоответствия. Сопоставлением полученных значений напряжений определено, что локальные области сжатияобразуются за счет упругих механических напряжений скоплениями олова, вследствие чего образуют дефекты типа дислокация несоответствия.

Ключевые слова: твердый раствор, эпитаксиальная пленка, микроструктура, упругие напряжения, скопления, дислокация.

The results of studying the structural properties of $Si_{1-x}Sn_x$ solid solutions grown by liquid-phase epitaxy from a limited volume of a tin solution-melt on pSi substrates are presented. The values of elastic stresses formed due to tin clusters and mechanical stresses arecalculated, taking into account the formation of misfit dislocations. By comparison of the values obtained, it is determined that the local compression regions formed due to elastic mechanical stresses by tin clusters, as a result of which defects form dislocation disparity.

Key words: *solid solution, epitaxial film, microstructure, elastic stresses, clusters, dislocation.*

Введение. Исследования по изучению новых полупроводниковых соединений таких, как $Si_{1-x}Sn_x$, в последние несколько лет посвящены в основном их получению различными методами [1] и исследованию структурных особенностей [2]. В настоящее время известно, что для практического применения полупроводниковых приборов изучение дефектов в материалах, входящих в их состав, является одним из важных факторов. Поэтому исследования дефектности эпитаксиальных слоев, используемых в полупроводниковом приборостроении, является одним из важных этапов в технологии получения полупроводниковых приборов. Несмотря на многообещающие особенности свойств соединения $Si_{1-x}Sn_x$, полученных методом жидкофазной эпитаксии, с точки зрения их использования как базы элементов оптоэлектроники, которые указаны в работах [1-2], до сих пор отсутствуют исчерпывающие данные,

отражающие механизмы дефектообразования в твердых растворах $Si_{1-x}Sn_x$.

Исходя из вышепоказанного, в данной работе нами изучены некоторые особенности дефектообразования в эпитаксиальных слоях твердых растворов $Si_{1-x}Sn_x$ ($0 \le x \le 0.04$), полученных методом жидкофазной эпитаксии.

Основная часть. Известно, что при образовании скоплений инородных атомов в кристаллах возникают локальные деформационные поля. В нашем случае, наблюдается деформация, обусловленная расширением кристаллической решетки, поскольку размеры примесных атомов олова больше, чем размеры атомов кремния. Для компенсации такого рода деформации вокруг скоплений, возникают напряженные участки значительных размеров.

Кроме вышеизложенного предположения, выдвинутого для объяснения возникновения дефектов в виде скоплений, имеются и другие механизмы образования дефектов в процессе жидкофазной эпитаксии, описанные в [3]. Эти механизмы в основном обусловлены технологическими условиями (подбор соответствующего раствора-расплава, температуры и условий охлаждений) их выращивания, от разности параметров кристаллических решеток полупроводников, составляющих компоненты и примеси, а также, от градиента концентраций состава твердых растворов. Анализ этих факторов является актуальным, как для науки, так и для практических целей.

Поскольку в исследуемых структурах $Si_{1-x}Sn_x$ для нашего случая x=0.04, то несоответствие периодов решетки $f = 2 \cdot (d_0^{Si_{1-x}Sn_x} - d_0^{Si}) / (d_0^{Si_{1-x}Sn_x} + d_0^{Si})$ составляет $\approx 0.02\ \%$. Иными словами, при температурах эпитаксии параметры решеток подложка-пленка почти совпадают. Это означает, что образованием в большом количестве дислокаций, возникающих за счет разности параметров кристаллических решеток подложки и пленки, можно пренебрегать.

В процессе выращивания твердых растворов оптимальных толщин путем изменения расстояния между подложками, которого можно варьировать в интервале 0.25-2.5 мм при помощи специальных графитовых подпорок, можно также исключить роль градиента концентраций состава твердых растворов и коэффициента термического расширения из-за постепенного перехода от Si к Si-Sn в эпитаксиальном слое. Этот факт подтверждается также отсутствием изгибов и трещин в эпитаксиальных пленках, возникающих из-за различия коэффициента термического расширения. Наследование дефектов от подложки, естественно исключаем, поскольку при выращивании пленок мы выбрали кремниевые подложки с низкими плотностями дислокаций. И это позволяет получение слоев с относительно низкими плотностями дислокаций. Таким образом, выбором оптимальных условий выращивания эпитаксиальных пленок можно минимизировать возникновение различных дефектов.

На основе вышесказанных предположений возникновение дефектов в эпитаксиальном слое можно отнести к возникновению механических напряжений, обусловленных скоплениями олова [4].

Для анализа предлагаемого механизма и оценки механических напряжений, обусловленных скоплениями олова, воспользуемся следующими.

Внутренние упругие напряжения, возникающие из-за различия ковалентных радиусов олова (Sn) и кремния (Si), во многом определяют качество выращенных эпитаксиальных слоев. В результате замещения примесных атомов (Sn) основными атомами Si в эпитаксиальных слоях $Si_{1-x}Sn_x$ возникают механические напряжения определяемые, как [5]:

$$\sigma = N_S \beta \frac{E}{1-\nu}. \qquad (1)$$

где N_s - величина концентрации вводимой примеси приповерхностной области; для концентрации N_s приняли концентрацию олова в Si - $6 \cdot 10^{20}$ *0B / A<3*, поскольку она соответсвует максимальной приповерхностной концентрации атомов олова [6]. *E* – модуль Юнга ($E = 1.1 \cdot 10^{11}$ *4=/ A<2* [6], *v* – коэффициент Пуассона ($\nu = 0,278$ [7]).

Сушествуют математические выражения, связывающие величину коэффициента упругой деформации кристаллических структур монокристалла и эпитаксиальной пленки β с размерами примесных атомов [5, 8-9]

$$\beta_1 = \frac{1}{N} \cdot \left[1 - \frac{r_{Sn}}{r_{si}}\right] \qquad (2)$$

$$\beta_2 = \frac{1}{3}\cdot\frac{1}{N}\cdot\left[1-(\frac{r_{Sn}}{r_{Si}})^3\right], \qquad (3)$$

где r_{Sn}, r_{Si} - ковалентные радиусы примеси (олова) и кремния, $N = 5\cdot10^{22}$ *0B / A<*^{3} - концентрация атомов кремния в монокристаллах Si. Вычисления по (1), с учетом (2) и (3) дает для Sn $\sigma_1 \approx -3.5\cdot10^9$ *4=/ A<*^{2} и для $\sigma_2 \approx -4.3\cdot10^9$ *4=/ A<*^{2}. Отрицательный знак "-" означает расширение кристаллической решетки, приводящее к дефектообразованию. В нашем случае этими дефектами могут быть дислокации несоответствия. Их образование может быть объяснено следующим образом.

Эпитаксиальная пленка деформируется вплоть до определенной толщины, ограничиваемой условиями технологии выращивания и свойствами взаимодействующих атомов, так как существует σ_k критическое напряжение, связанное с несовпадением расположения атомов на противоположных сторонах поверхности раздела пленка-подложка из-за больших размеров скоплений атомов олова. При дальнейшем увеличении толщины во время роста эпитаксиальной пленки упругие напряжения в ней релаксируется, и в результате этого образуются узкие полосы несоответствия сопрягающихся решеток. Эти полосы, между которыми находятся области с хорошим соответствием сопрягающихся решеток, называются "дислокациями несоответствия".

В результате замещения атомов Si примесными атомами олова в эпитаксиальных слоях $Si_{1-x}Sn_x$ возникают механические напряжения, определяемые, как [10]:

$$\beta = \frac{C\alpha E + \sigma_k(1-\nu)}{N_S E}\ , \qquad (4)$$

где *C* - общее число дислокации на единицу длины в направлении, параллельном поверхности, *α* – составляющая краевой компоненты вектора Бюргерса дислокации в направлении, параллельном поверхности, σ_k – напряжение, при котором начинается образование дислокаций. Для расчетов по (4) мы приняли следующие значения, полученные из экспериментальных исследований и литературных сведений: $C = 6.0\cdot10^4$ *см*$^{-1}$, $\sigma_k = 10^9$ *дн / см*^{2} [12], $d_0^{Si} = 0.543$ *нм* [6]. В относительно низких плотностях дислокаций обычно наблюдаются 60-градусные дислокации [8]. Тогда из [7] для α получается $\alpha = d_0^{Si}/\sqrt{2} = 3.89\cdot10^{-8}$ *A<*.

Расчеты по формуле (1), с учетом β как в (4), дают величину для $\sigma \approx 4.6\cdot10^9$ *4=/ A<*^{2}. Полученное значение напряжения σ по (4) хорошо совпадает с результатами для σ_1 и σ_2. Когда для $|\sigma_2|$ расхождение дает 6%, то расхождение для $|\sigma_1|$ составляет 22%. Таким образом, расчеты по формуле (3) дают более близкие результаты с экспериментальными данными. Этот факт подтверждает наши вышеприведенные предположения о механизмах возникновения дефектов в эпитаксиальных слоях.

Заключение. Таким образом, в ходе проведенных исследований эпитаксиальных пленок твердых растворов $Si_{1-x}Sn_x$, полученных методом жидкостной эпитаксии, можно показать, что локальные области сжатия, образующиеся за счет упругих механических напряжений скоплениями олова, образуют так называемые дефекты-дислокаций несоответствия, компенсирующие напряжения несоответствия.

Отметим, что подбором соответствующего раствора-расплава, температуры и режима охлаждения, а также созданием необходимых технологических условий и других особенностей технологии выращивания можно получить структурно-совершенные эпитаксиальные пленки твердых растворов $Si_{1-x}Sn_x$ на кремниевых подложках с низкими плотностями дефектов-дислокаций, пригодных для изготовления качественных полупроводниковых приборов на их основе.

Авторы выражают признательность профессору А.С.Саидову и д.ф.-м.н. Ш.Н.Усманову за плодотворные дискуссии и оказанную помощь при выполнении данной работы. Работа выполнена в рамках проекта ОТ-Ф2-68.

Литература:

1. Korolyuk Y.G., Deibuk V.G., Vyklyuk Ya.I. Optical properties of dicordeed diamond-like solid substitutional solutions $Ge_{1-x}Si_x$, $Ge_{1-x}Sn_x$, $Si_{1-x}Sn_x$, $Si_{1-x}C_x$ and their thin films // Journal of physical studies. – 2004. – Vol. 8, №1. – P. 77 – 83.

2. Möck P., Lei Y., Topuria T., Browning N.D., Ragan R., Min K.S., Atwater H.A. Endotaxial growth mechanisms of Sn Quantum Dots in Si matrix // Materials Research Society Symposium Proceedings – 2003. – Vol. 770. – P. I1.7.1 – 1.7.4.

3. Сапаев Б., Саидов М.С., Саидов А.С., Каражанов С.Ж. Твердые растворы $(C_2^{IV})_{1-x}(A^{III}B^{V})_x$, полученные из ограниченного объема оловянного раствора-расплава // **Физика и техника полупроводников**. – 2004. – Том. 36, № 11. – С. 1285 – 1293.

4. Saidov A.S., Usmonov Sh.N., Kalanov M., Madaminov X.M. Structure and photoelectric properties of $Si_{1-x}Sn_x$ epiplayers // Technical physics letters. – 2010. – Vol. 36, No. 9. – P. 827 – 829.

5. Trumbore F.A., Isenberg C.R. and Porbansky E.M. On the temperature-dependence of the distribution coefficient: The solid solubilities of tin in silicon and germanium // Journal of Physics and Chemistry of Solids. – 1959. – Vol. 9. – P. 60.

6. Deibuk V.G., Korolyuk Yu.G. The effect of strain on the thermodynamic properties of Ge-Si, Ge-Sn, Si-Sn, Si-C thin solid films // Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics. – 2002. – Vol. 5, No 3. – P. 247 – 253.

7. Laurence J.E. Diffusion-induced stress and lattice disorders in silicon // Journal of the Electrochemical Society. – 1996. – Vol. 113. – P. 819.

8. Yagi K., Miyamoto N., Nishizawa J. Anomalous diffusion of phosphorus into silicon // Japanese Journal of Applied Physics. – 1970. – Vol. 9. – P. 246.

9. Prussin S.. Generation and distribution of dislocations by solute diffusion // Journal of Applied Physics. – 1961. – Vol. 32. – P. 1876.

Андижон давлат университети,
2019 йил 8 январда қабул қилинган
(Тақризчи: проф. И.Каримов)