

Равновесное распределение компонент сплава SiGe в полупроводниковой пленке на Si подложке

А.А. Бычков

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

Аннотация: Исследованы условия равновесия двухкомпонентного упругого слоя, содержащего дислокации несоответствия. Рассматривается пленка SiGe нанометровой толщины на Si подложке и SiGe островки нанометровых размеров на смачивающем слое. Учитывается неравномерное распределение Ge в объеме образцов. Построены трехмерные модели плоской пленки с дислокацией и островков. Расчет упругих деформаций выполнен с использованием метода конечных элементов. Для расчета распределения Ge в пленке, использованы аппроксимирующие формулы и итерационный алгоритм. Согласно полученным результатам, неравномерное распределение Ge обеспечивает релаксацию упругой энергии в сплаве, а атомы Ge концентрируются на выступах возмущенной поверхности пленки и в вершинах островков. Учет неоднородности распределения Ge в образцах оказывает существенное влияние на рост островков (стабильный рост происходит при меньших размерах островков) и волнистости на свободной поверхности.

Ключевые слова: тонкая пленка, метод конечных элементов, Ge, SiGe, дислокации несоответствия, гетероэпитаксия, плотность упругой энергии.

Введение

Известны следующие механизмы релаксации напряжения в пленке при малой деформации несоответствия: неустойчивость Азаро-Тиллера-Гринфельда (образование волнистости на поверхности) [1]; возникновение на границе пленки и подложки дислокаций несоответствия [2,3]; перераспределение атомов и вблизи волнистой поверхности пленки за счет уменьшения упругой энергии в напыленной на подложку полупроводниковой пленке [4,5]; уменьшение поверхностной энергии пленки при увеличении ее толщины [6]; образование на поверхности пленки наноразмерных изолированных островков (режим роста Странского-Крастанова) [7]; за счет образования двойников несоответствия [8].

В данной работе приведены результаты расчетов, продолжающие исследование [9,10] для полупроводниковой пленки с учетом перечисленных факторов для различных значений параметров пленки и островков.

Постановка задачи

Рассмотрим модели расположенных на смачивающем слое островков *SiGe* (рис.1) и полупроводниковой пленки на подложке *SiGe/Si* (рис.2).

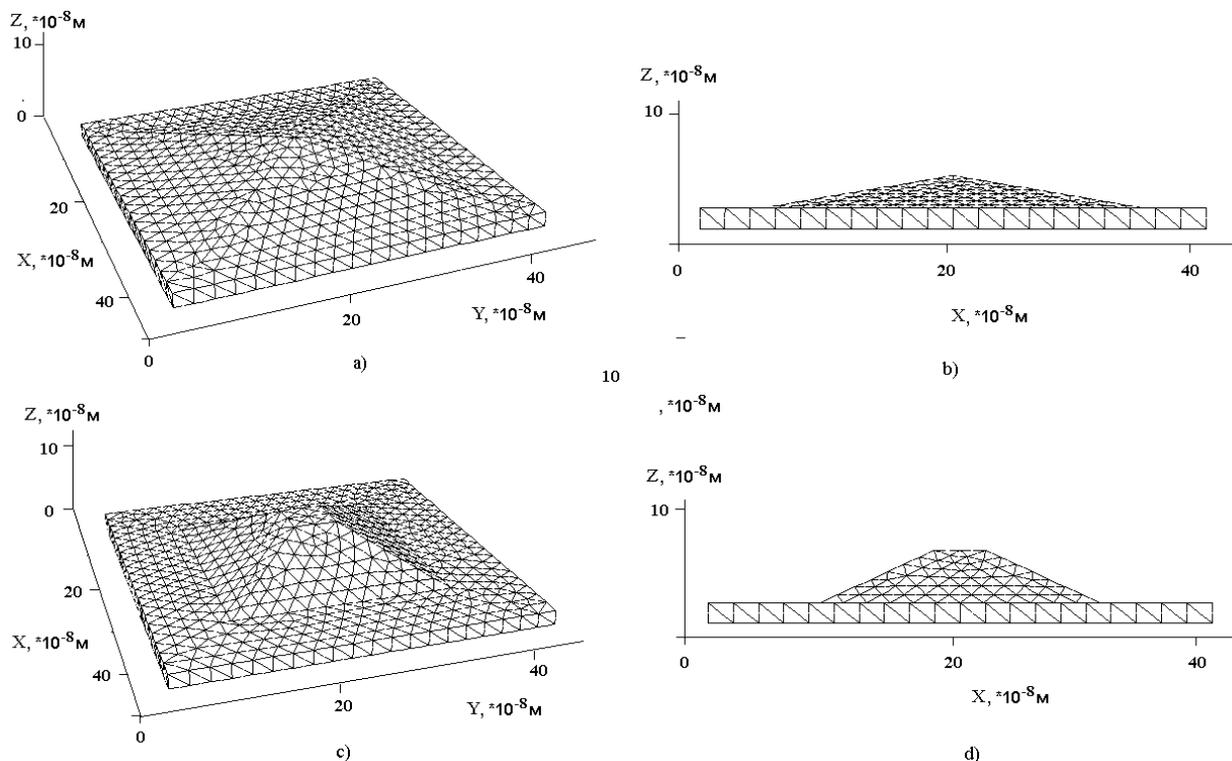


Рис. 1 – Различные формы островков: пирамида (а), (b); усеченная пирамида (с), (d).

Свободная поверхность пленки: $z = h(x, y) = h_0 + h_1(x, y)$ - двумерная циклоида с длиной волны $\lambda = 2\pi a$ вдоль осей Ox и Oy , в параметрической форме (t_1, t_2 - параметры) имеет вид

$$\begin{aligned} x &= at_1 - d \sin t_1, \\ y &= at_2 - d \sin t_2, \\ z &= h_0 - d^2/a - d(\cos t_1 + \cos t_2), \end{aligned} \quad (1)$$

d – ширина пленки ($d=400$ нм). Γ_D - граница пленка-подложка, Γ_N – свободная граница, Ω - область занятая телом. Учитывается постоянство

объёма образца $\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} h_1(t_1, t_2) \frac{\partial x}{\partial t_1} \frac{\partial y}{\partial t_2} dt_1 dt_2 = 0$. Циклоида, аналогично [10],

представлялась рядом Фурье.

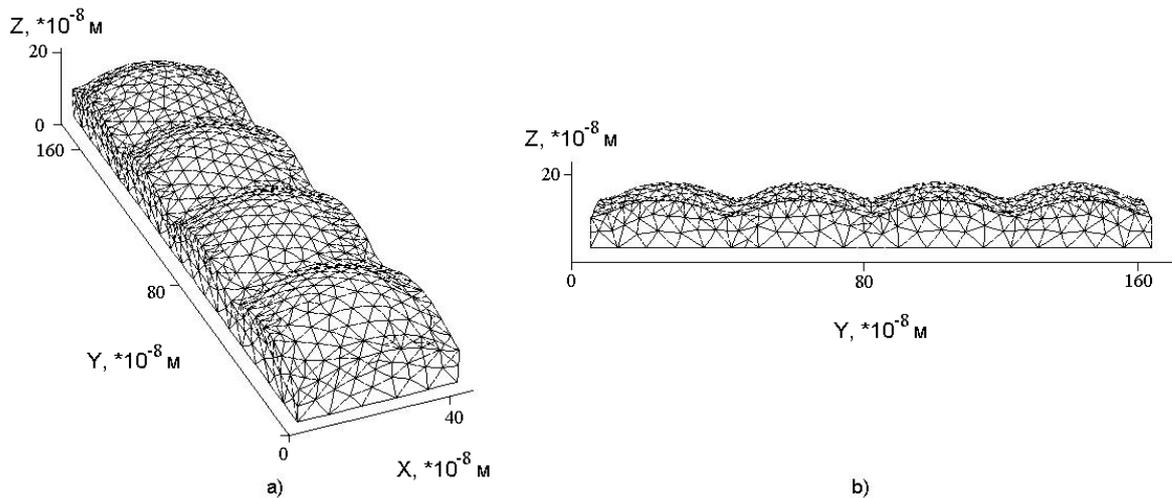


Рис. 2 – Полупроводниковая пленка SiGe с свободной поверхностью в форме двумерной циклоиды

Введем обозначения: $\gamma = c\gamma_{Ge} + (1 - c)\gamma_{Si}$ - удельная поверхностная энергия, γ_{Ge} и γ_{Si} - удельная поверхностная энергия соответственно для Ge и Si, $c = c(x, y, z)$ - доля Ge в сплаве, $w = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij}$ - плотность упругой энергии на поверхности пленки, γ_0 - удельная поверхностная энергия невозмущенной пленки, S_0 - площадь свободной поверхности невозмущенной пленки, W_0 - упругая энергия невозмущенной пленки. Тогда приращение свободной энергии поверхности пленки [1]

$$\Delta F = \int_{\Gamma_N} \gamma dS + \int_{\Omega} w dV - \gamma_0 S_0 - W_0, \quad (2)$$

условие неустойчивости плоской поверхности пленки $\Delta F \leq 0$.

Закон Гука $\sigma_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^*)$, где $\varepsilon_{ij}^* = \varepsilon_m c(x, y, z) \delta_{ij}$ - деформация несоответствия, $\varepsilon_m = 0,04$ [7].

Из решения упругой задачи

$$\begin{aligned}\sigma_{ij,j} &= 0, & \Omega \\ u_i &= 0, & \Gamma_D \\ \sigma_{ij}n_j &= 0, & \Gamma_N\end{aligned}\quad (3)$$

были получены напряжения в пленке.

Неоднородность распределения атомов Ge , согласно [7]:

$$\Delta c = \frac{1}{3\varepsilon_m} (Tr \varepsilon - \overline{Tr \varepsilon}) + (\bar{c} - c), \quad (4)$$

где $\overline{Tr \varepsilon} = \frac{1}{V} \int_{\Omega} Tr \varepsilon dV$ – средняя деформация дилатации, $\bar{c} = c_{cp}$ – средняя

доля атомов Ge , $\frac{1}{V} \int_{\Omega} \Delta c(x, y, z) dV = 0$.

Расчет $c = c(x, y, z)$ соответствующего минимальной упругой энергии W выполнялся по итерационной формуле

$$c_{i+1,j} = c_{i,j} + \Gamma \left[\frac{1}{3\varepsilon_0} (Tr \varepsilon_i - \overline{Tr \varepsilon_i}) - (\bar{c} - c_{i,j}) \right],$$

где $c_{i,0} = c_i$, Γ – параметр ($\Gamma \leq 10^{-2}$), $c_{i,j}$ при $j \rightarrow \infty$ сходится к некоторому $c_{i,\infty} = c_{i+1}$:

$$\frac{1}{3\varepsilon_0} (Tr \varepsilon_i - \overline{Tr \varepsilon_i}) + (\bar{c} - c_{i,\infty}) = 0.$$

Учитывалось условие $0 \leq c(x, y, z) \leq 1$.

Расчет упругих деформаций в образце выполнен методом конечных элементов.

Обсуждение результатов

Результаты расчетов представлены на рис.3-5. На рис.3 показан пример распределения Ge в образце с островком в форме усеченной пирамиды. Как

видно из представленных результатов, атомы Ge концентрируются на выступах возмущенной поверхности пленки и в вершинах островков.

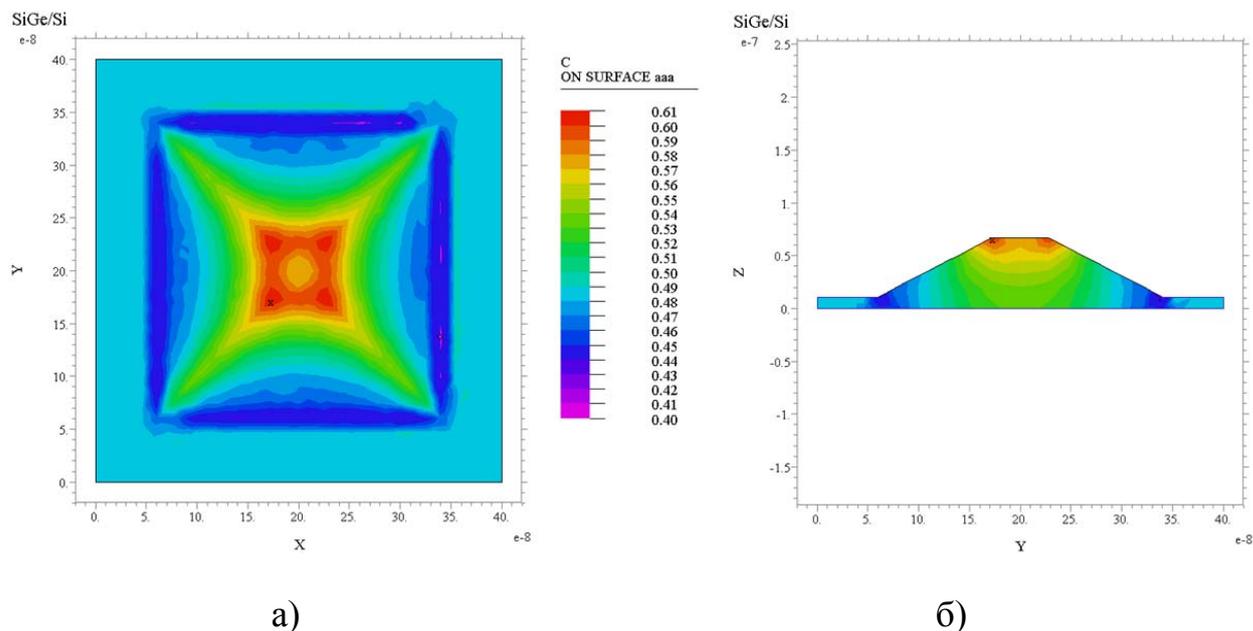


Рис. 3 – Распределение Ge в сплаве SiGe в островке в форме усеченной пирамиды ($c_{cp}=0,5$).

На рисунке 4 показана полученная зависимость поверхностной (а) и упругой (б) энергии от размера островков в форме полной пирамиды. L – длина основания пирамиды, $a=400$ нм – длина всего образца. $c_{cp}=0,5$. Кривая (1) представляет расчет без учета перераспределения Ge, кривая (2) – расчет с учитывающий перераспределения Ge. Как можно видеть из представленных результатов, при включении в модель изменения распределения атомов Si и Ge поверхностная энергия увеличивается, а упругая энергия пленки уменьшается.

На рисунке 5 представлено распределение приращения свободной энергии образца в форме пирамиды в зависимости от размеров островков и средней доли Ge в пленке (35-50%).

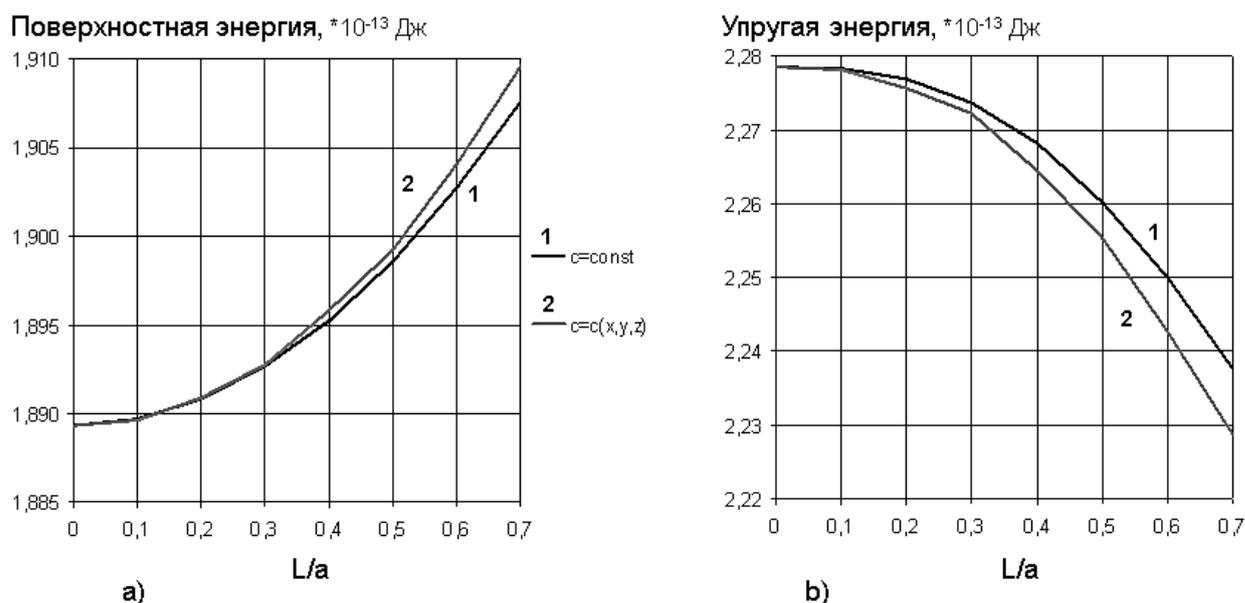


Рис. 4 – Поверхностная (а) и упругая энергия (б) в зависимости от размера островков, с учетом перераспределения Ge ($c=c_{cp}$), и без учета перераспределения Ge ($c=c(c,y,z)$), $c_{cp}=0,5$.

Как можно заметить, учет неоднородного распределения Ge в образцах пленки и островков значительно меняет критический размер островка в меньшую сторону. Этот эффект усиливается при уменьшении доли Ge в сплаве.

Обнаружена зависимость изменения концентрации от амплитуды возмущения пленки. При увеличении амплитуды возмущения неоднородность Δc растет. Аналогичный эффект наблюдается при росте островков. Для более высоких островков, на поздних стадиях роста, значение Δc увеличивается. Сравнение полученных результатов с расчетом, не учитывающим механизм механо диффузии, показывает существенную релаксацию упругой энергии в пленке, что согласуется с результатом [5], полученным для плоской задачи.

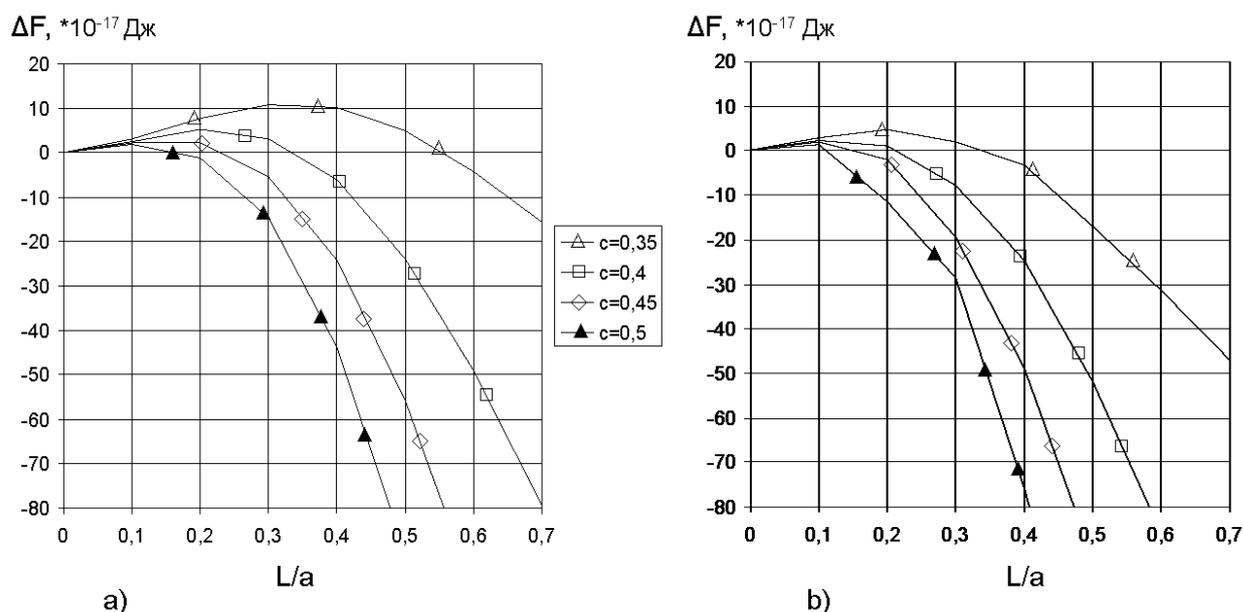


Рис. 5 – Свободная энергия ΔF островка в форме полной пирамиды, для различных средних объемных долей Ge в пленке c_{cp} : (а) без учета перераспределения, $c=c_{cp}$; (б) с учетом перераспределения, $c=c(x,y,z)$.

Отношение высоты островка к длине его основания $h/L=0,1$.

Выводы

Согласно проведенным расчетам, перераспределение Ge обеспечивает релаксацию упругой энергии в сплаве, а атомы Ge концентрируются на выступах возмущенной поверхности пленки и в вершинах островков. Учет неоднородности распределения Ge в образцах оказывает существенное влияние на рост островков (стабильный рост происходит при меньших размерах островков) и волнистости на свободной поверхности.

Литература

1. Paul D.J. Si/SiGe heterostructures: from material and physics to devices and circuits // Semicond. Sci. Technol. 2004. V.19. R75-R108.
2. Ovidko I.A., Sheinerman A.G. Misfit dislocations in nanocomposites with quantum dots, nanowires and their ensembles // Advances in Physics, 2006, V.55. Nos.7-8. pp. 627-689.

3. Berbezier I., Ronda A. SiGe nanostructures // Surface Science Report, 2009, V.54, pp.47-98.
4. Aqua J.N., Berbezier I., Favre L., Frisch T., Ronda A. Growth and self-organization of SiGe nanostructures // Physics Reports, 2013. V.522. pp.59-189.
5. Wu C.-C., Hull R. Composition and stress fields in undulated thin films // J. Appl. Phys., 2006. V.100. 083510.
6. Li X.-L., Yang G.W. Theoretical determination of contact angle in quantum dot self-assembly // Appl. Phys. Lett., 2008. V.92. 171902.
7. Digioni D., Gatti R., Montalenti F. Aspect-ratio-dependent driving force for nonuniform alloying in Stranski-Krastanow islands // Physical review, 2009. V. 80. 155436.
8. Liu L., Zhang Y., Zhang T.-Y. Stress relaxation in heteroepitaxial films by misfit twinning. I. Critical thickness. // J. Appl. Phys., 2007. V.101. 063501.
9. Бычков А.А., Карпинский Д.Н. Влияние процессов релаксации на форму поверхности полупроводниковой пленки на подложке // Актуальные проблемы прочности: сборник трудов XLVIII Международной конференции, посвященной памяти М.А.Криштала. – Тольятти: ТГУ, 2009. – 270 с., с. 220-221.
10. Бычков А.А. Оценка влияния дислокационных петель и дислокаций несоответствия на распределение Ge в пленке SiGe/Si // Инженерный вестник Дона, 2016, № 4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2016/3822.

References

1. Paul D.J. Semicond. Sci. Technol. 2004. V.19. R75-R108.
 2. Ovidko I.A., Sheinerman A.G. Advances in Physics, 2006, V.55. Nos.7-8. pp. 627-689.
 3. Berbezier I., Ronda A. Surface Science Report, 2009, V.54, pp.47-98.
-



4. Aqua J.N., Berbezier I., Favre L., Frisch T., Ronda A. Physics Reports, 2013. V.522. pp.59-189.
5. Wu C.-C., Hull R. J. Appl. Phys., 2006. V.100. 083510.
6. Li X.-L., Yang G.W. Appl. Phys. Lett., 2008. V.92. 171902.
7. Digiuni D., Gatti R., Montalenti F. Physical review, 2009. V. 80. 155436.
8. Liu L., Zhang Y., Zhang T.-Y. J. Appl. Phys., 2007. V.101. 063501.
9. Bychkov A.A., Karpinskij D.N. Aktual'nyye problemy prochnosti: sbornik trudov XLVIII Mezhdunarodnoy konferentsii, posvyashchennoy pamyati M.A.Krishtala. Tol'yatti: TGU, 2009. 270 s., pp. 220-221.
10. Bychkov A.A. Inzenernyj vestnik Dona, 2016, № 4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2016/3822.