

УДК 584.4

А. И. ФЕДОРЕНКО, Л. П. ШПАКОВСКАЯ, С. М. КОСМАЧЕВ, А. Ю. СИПАТОВ  
и Б. А. САВИЦКИЙЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ ВЫЯВЛЕНИЕ  
СТУПЕНЕЙ РОСТА НА ГРАНИЦАХ РАЗДЕЛА БИКРИСТАЛЛОВ  
ХАЛЬКОГЕНИДОВ СВИНЦА

Эпитаксиальные бикристаллы и многослойные системы являются базовым материалом для полупроводниковых приборов и элементов микроэлектроники. Качество приборов определяется во многом структурным состоянием и химической чистотой межфазных поверхностей раздела бикристаллов. Известно [1], что дислокации несоответствия и примеси, присутствующие на межфазных поверхностях бикристаллов, являются источником поверхностных состояний для носителей заряда и оказывают существенное влияние на работу полупроводниковых приборов. В этом отношении представляют интерес ступени роста, которые практически всегда возникают на поверхности монокристаллов-подложек и включаются в строение границ раздела бикристаллов после нанесения эпитаксиального слоя на подложку. Ступени на границах раздела создают поля упругих искажений в окружающем их объеме бикристалла, могут быть заряженными и вызывают перераспределение примесей.

Принципиальная возможность электронно-микроскопического наблюдения ступеней роста на межфазных поверхностях при съемке «на просвет» показана в работе [2], авторы которой исследовали структуру когерентных пластинчатых выделений  $\Theta'$ -фазы в Al — Si-сплаве. Используя предложенную в [2] методику аппроксимации поля упругих смещений, создаваемых ступенькой роста на границе раздела бикристалла, полем упругих смещений прямолинейного отрезка призматической дислокации с дробным «эффективным» вектором Бюргерса  $\mathbf{b}_{\text{эф}}$ , в данной работе проведено сравнение расчетных и экспериментально наблюдаемых электронно-микроскопических изображений ступеней роста на (001)-границах раздела эпитаксиальных бикристаллов халькогенидов свинца.

Эпитаксиальные бикристаллы PbSe|PbS и PbTe|PbS в ориентации (001) были приготовлены по методике [3]. Толщины слоев в бикристаллах обоих типов были одинаковыми и равными  $\sim 300$  Å. Величина несоответствия  $F$  решеток пленки и подложки равнялась  $-0,0306$  в бикристаллах PbSe|PbS и  $-0,0831$  в PbTe|PbS. Строение бикристаллов показано схематически на рис. 1, а.

Электронно-микроскопическое исследование бикристаллов показало, что на их границах раздела присутствует квадратная сетка краевых дислокаций несоответствия (ДН) с вектором Бюргерса типа  $a/2$  [110]. Кроме муаровых полос и дислокаций несоответствия на изображениях бикристаллов наблюдались три типа широких линий: белые (I), черные (II) и черно-белые (III), вытянутые вдоль [100]- и [010]-направлений решетки халькогенидов свинца (рис. 1, б, в). Исходя из ориентации и особенностей изображения широких линий I—III, было естественно связать их со сту-

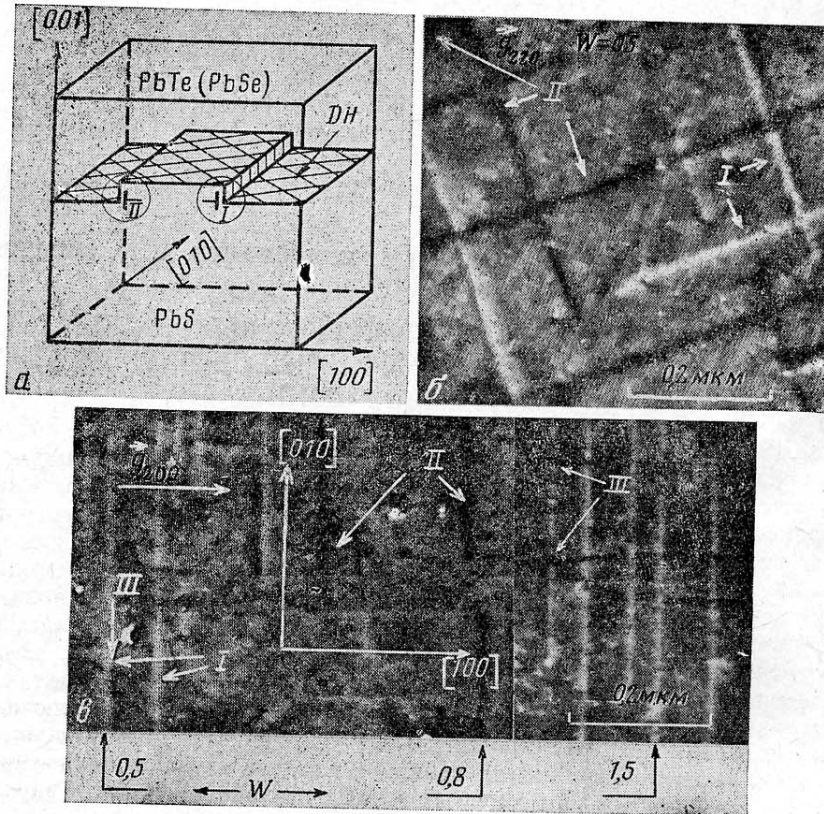


Рис. 1. Схема (а) и темнопольное изображение в рефлексах (220) (б) и (200) (в) эпитаксиального бикристалла PbTe|PbS ( $w$  — отклонение решетки от брэгговского положения)

пнями на границе раздела двух халькогенидов свинца. Для проверки этого предположения были проведены расчеты электронно-микроскопического изображения ступенек на межфазных поверхностях эпитаксиальных бикристаллов с использованием двухлучевой динамической теории Хови — Уэлана [4].

Упругие смещения, создаваемые ступенькой высотой  $h$  в окружающем ее объеме бикристалла, подобны смещениям от прямолинейного отрезка призматической дислокации с вектором Бюргерса  $b_{\text{эф}} = hF$  [5]. При малых величинах высоты ступени и несоответствия  $F$  вектор Бюргерса  $b_{\text{эф}}$  имеет дробное значение. Полный вектор Бюргерса  $b_{\text{эф}} = a[001]$  соответствует ступеньке высотой  $h = 194 \text{ \AA}$  в PbSe|PbS и ступеньке с  $h = 71 \text{ \AA}$  в PbTe|PbS бикристалле. Следует различать два типа ступеней — I и II на рис. 1, а, которые характеризуются противоположным направлением вектора Бюргерса: вверх ( $b_{\text{эф}} > 0$ ) и вниз ( $b_{\text{эф}} < 0$ ) соответственно.

Поле упругих смещений  $u$  модельной дислокации с  $b_{\text{эф}}$  рассчитывалось в изотропном приближении. Контраст на межфазных ступенях был рассмотрен в темном и светлом полях в зависимости от величины и знака  $b_{\text{эф}}$ , отражающего вектора  $g$  и отклонения  $w$  бикристалла от точного брэгговского положения. Так как в случае вертикальных ступенек произведение  $g \cdot b_{\text{эф}} = 0$ , то контраст определялся полностью значением параметра  $m = g[b_{\text{эф}} \times u]$ .

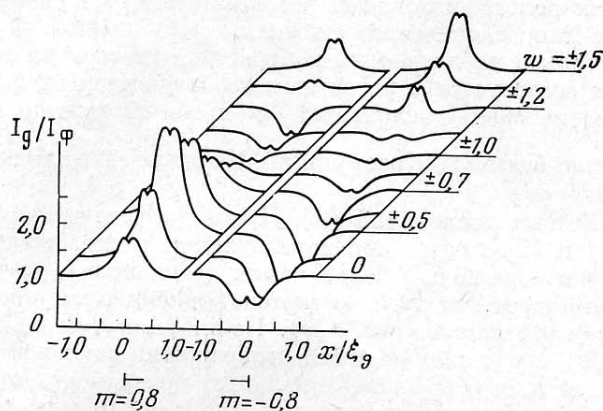


Рис. 2. Распределение интенсивности на темнопольных изображениях межфазных ступенек с  $m = -0,8$  и  $+0,8$  при различных значениях  $w$ . ( $I_\phi$  — интенсивность фона). Толщина слоев бикристалла  $t = \xi_g$ ;  $\xi_g / \xi_g' = \xi_g / \xi_g' = 0,1$ ;  $(g \cdot b) = 0$ ;  $m = g[b \times u] = \pm 0,8$

Анализ результатов расчета показал, что контрастность изображения межфазных ступенек значительно выше в темном поле. Так, если в темном поле ощутимый контраст на ступеньке возникает при  $|m| \geq 0,2$ , то в светлом поле она становится заметной только при  $|m| \geq 0,5$ . Следовательно, при темнопольной съемке «на просвет» можно выявлять межфазные ступени высотой более 7 Å в PbTe|PbS-бикристаллах, характеризуемых сравнительно большим несоответствием  $F = 0,0831$ . С уменьшением  $F$  растет минимальная высота ступени, которую еще можно обнаружить на изображении бикристалла. Например, на изображениях PbSe|PbS ( $F = 0,0306$ ) могут быть замечены только ступени с  $h \geq 20$  Å. Ширина расчетных изображений межфазных ступеней достигает  $\sim 300$  Å и практически не зависит от знака  $w$ .

На рис. 2 приведены профили темнопольного изображения ступени роста в рефлексе (200) в зависимости от знака  $m$  и величины  $w$ . При  $w = 0$  ступень с  $m > 0$  видна как светлая линия, а ступень с  $m < 0$  — как темная. Увеличение  $|w|$  до 0,5 сопровождается возрастанием контрастности изображения ступени. Дальнейшее увеличение  $w$  приводит сначала к уменьшению контрастности ступени, а затем к изменению контраста на противоположный при  $w = 0,8$  для ступеней с  $m < 0$  и при  $w = 1,1$  для ступеней с  $m > 0$ . В случае  $w \geq 1,5$  ступени как с  $m > 0$ , так и с  $m < 0$  имеют одинаковые светлые изображения.

Поведение белых и черных линий (I и II на рис. 1, б, в) на экспериментальных изображениях PbTe|PbS и PbSe|PbS бикристаллов с изменением отражающего вектора  $g$  и величины  $w$  (рис. 1, в) хорошо согласуется с расчетными изображениями ступенек на границах раздела бикристаллов (рис. 2). Это дает основание считать, что белые (I) и черные (II) линии на рис. 1, б, в обусловлены межфазными ступеньками с противоположными направлениями  $b_{\text{эф}}$ , обозначенными I и II на рис. 1, а. С другой стороны, хорошее качественное соответствие между расчетом и экспериментом свидетельствует о правильности модели, выбранной для описания поля упругих смещений от ступеньки на межфазной границе бикристалла. Количественное сопоставление расчетных и экспериментальных профилей межфазных ступеней осложняется суперпозицией изобра-

жений муаровых полос, дислокаций несоответствия и ступенек на реальных электронно-микроскопических снимках.

Экспериментально наблюдаемый контраст на третьем типе линий (III на рис. 1, *в*) не согласуется с расчетным изображением ступенек моделируемых призматической дислокацией с дробным вектором Бюргера  $\pm \frac{a}{n} [001]$ . Черно-белый контраст линий III подобен изображению горизонтальных винтовых дислокаций [4].

Кроме того, если контраст на широких линиях I и II исчезает при параллельном расположении отражающего вектора  $g$  и черной или белой линии (ступеньки), то условием невидимости линий третьего типа является перпендикулярное расположение  $g$  и черно-белой линии (рис. 1, *в*). По-видимому, черно-белые линии (III на рис. 1, *в*) представляют собой изображения ступенек с достаточно большой высотой  $h$ , чтобы на вертикальную поверхность ступени могла быть введена дислокация несоответствия с наклонным вектором Бюргера  $a/2 [101]$  или  $a/2 [011]$ . Винтовая составляющая такой дислокации несоответствия обеспечивает черно-белый контраст III на изображениях ступенек, ориентированных не под прямым углом к вектору  $g$  (рис. 1, *в*). Введение дислокаций несоответствия на вертикальную плоскость ступени может произойти при  $h \geq 40 \text{ \AA}$  в PbTe|PbS- и при  $h \geq 100 \text{ \AA}$  в PbSe|PbS-бикристаллах. То обстоятельство, что черно-белые линии наблюдались на изображениях только PbTe|PbS-бикристаллов, подкрепляет высказанное выше объяснение полос третьего типа, так как образование ступеней роста с  $h \geq 100 \text{ \AA}$  на пленках PbS толщиной  $\sim 300 \text{ \AA}$  маловероятно.

Таким образом, в работе показана возможность исследования рельефа внутренних границ раздела эпитаксиальных бикристаллов с помощью электронной микроскопии «на просвет». Разрешающая способность метода декорирования поверхностного рельефа эпитаксиальными сплошными пленками возрастает с увеличением несоответствия решеток декорируемого вещества и пленки.

Харьковский политехнический институт  
им. В. И. Ленина

#### Литература

1. Милнс А., Фойхт Д., Гетеропереходы и переходы металл – полупроводник, «Мир», М., 1975.
2. Weatherly G. C., Sargent C. M., Phil. Mag., 22, 1049 (1970).
3. Палагник Л. С., Федоренко А. И., Савицкий Б. А., Шпаковская Л. П., Докл. АН СССР, 236, 87 (1977).
4. Хирш, Хови А., Николсон Р., Пэшли Д., Уэлан М., Электронная микроскопия тонких кристаллов, «Мир», М., 1968.
5. Ashby M. F., Brown L. M., Phil. Mag., 8, 1649 (1963).