

# AlSb/GaAs(001) 失配位错的高分辨 电子显微学研究\*

温 才<sup>1)</sup> 李方华<sup>1)†</sup> 邹 进<sup>2)</sup> 陈 弘<sup>1)</sup>

1) (中国科学院物理研究所北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100190)

2) (Centre for Microscopy and Microanalysis and Materials Engineering, The University of Queensland,  
St. Lucia Queensland 4072, Australia)

(2009 年 12 月 21 日收到; 2009 年 12 月 29 日收到修改稿)

用 200 kV 六硼化镧光源的高分辨透射电子显微镜观察了 AlSb/GaAs(001) 外延薄膜的失配位错, 结合解卷处理方法把 [110] 高分辨电子显微像转换为试样的结构投影图, 其分辨率接近电子显微镜的信息极限. 根据赝弱相位物体近似像衬理论, 通过分析 AlSb 薄膜完整区解卷像的衬度随试样厚度的变化, 确定了哑铃原子对中 Al 和 Sb 原子的位置. 在此基础上构建出失配位错的结构模型, 再结合模拟像与实验像的匹配, 确定了 AlAs 型界面以及 Lomer 和 60° 两类失配全位错的核心结构.

**关键词:** 高分辨电子显微像, 解卷处理, 界面, 失配位错

**PACC:** 6116D, 6170J

的核心结构.

## 1. 引 言

InAs, GaSb 和 AlSb 三种半导体二元化合物的点阵常数均接近 6.1 Å. 在这三种化合物的基础上又进一步形成了多元化合物, 组成了所谓的 6.1 Å 半导体家族. 6.1 Å 家族成员能隙分布范围较宽, 在新型电子和光电子器件上有广阔的应用前景<sup>[1]</sup>. 用分子束外延 (MBE) 方法在常用的 GaAs(001) 衬底上生长上述化合物薄膜时, 首先生长一层薄的 AlSb 成核层, 有助于提高薄膜质量<sup>[1-3]</sup>. 对于晶格失配较大的面心立方异质结构, 界面上形成的 90° 失配全位错 (即 Lomer 位错: 位错线沿  $\langle 110 \rangle$  方向, 与其垂直的伯格斯矢量  $\mathbf{b}$  为  $a/2\langle 110 \rangle$  类型<sup>[4-6]</sup>) 是释放应力和减少穿透位错的最有效方式<sup>[7,8]</sup>. 然而, 面心立方晶体的  $\{111\}$  面为易滑移面, 在界面上不可避免地还形成 60° 失配全位错和失配不全位错及其所伴随的层错<sup>[3,9]</sup>. 为了优化 AlSb 成核层, 理解薄膜生长过程中应变弛豫和失配位错对薄膜性能的影响, 有必要研究 AlSb/GaAs(001) 界面中各种失配位错

AlSb, GaAs 皆为闪锌矿结构, 点阵常数分别为 0.613 和 0.565 nm, 之间的失配度约为 8.5%. 两种晶体 [110] 投影结构中的 Al-Sb 和 Ga-As 原子对 (习惯上形象地称为“哑铃”) 间距分别为 0.153 nm 和 0.141 nm. 显然, 常用的中等电压 (比如 200 kV) 高分辨透射电子显微镜 (以下简称电镜) 的点分辨本领不够高, 不能分辨间距如此小的原子. 实践证明, 用不同的图像处理技术有助于提高像的分辨率, 以得到原子分辨率的晶体结构. 例如, 在 NiSi<sub>2</sub>/Si 异质结构中 NiSi<sub>2</sub> 的晶体结构为 CaF<sub>2</sub> 类型, Si 为金刚石类型, 两者失配度为 0.4%. 对 JEOL4000EX 电镜拍摄的高分辨电子显微像 (以下简称高分辨像) 结合衍射强度数据用最大熵线性像重构方法处理之后, 得到了界面的原子结构<sup>[10]</sup>. 又如, Si<sub>0.76</sub>Ge<sub>0.24</sub> 的晶体结构为金刚石类型, Si 和 Ge 原子呈无序分布, 对 200 kV 场发射电镜拍摄的 [110] Si<sub>0.76</sub>Ge<sub>0.24</sub> 高分辨像进行解卷处理后, 分辨开了哑铃中间距为 0.14 nm 的一对 Si(Ge) 原子<sup>[11-13]</sup>.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 50672124) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: lifh@aphy.iphys.ac.cn

众所周知,高分辨像总要受到物镜衬度传递函数(CTF)的调制,只有在 Scherzer 聚焦条件下<sup>[14]</sup> CTF 的调制微不足道,像才能直观地反映晶体的结构投影. 远离 Scherzer 条件时,CTF 的调制可使高分辨像严重畸变,以致不能反映晶体的结构. 对高分辨像进行解卷处理可以消除高分辨像的畸变,使解卷处理后的像(称为解卷像)反映晶体的投影结构,同时将像的分辨率提高至电镜的信息极限. 解卷处理最初着眼于测定完整晶体的结构<sup>[15,16]</sup>,后来扩展到测定晶体缺陷核心的原子位置<sup>[11-13,17,18]</sup>. 对 200 kV 场发射电镜的实验像进行解卷处理之后,得到了  $\text{Si}_{0.76}\text{Ge}_{0.24}$  薄膜中的  $60^\circ$  位错<sup>[11,12]</sup> 和 Lomer 位错<sup>[13]</sup> 的核心结构. 此外,在 3C-SiC 的 [110] 投影结构中,哑铃中 Si-C 原子间距为 0.109 nm,虽然此间距远小于 200 kV LaB<sub>6</sub> 灯丝电镜的点分辨本领,但是通过对像进行解卷处理,像的质量和分辨率均明显提高,再结合赝弱相位物体近似<sup>[19]</sup> 分析像衬度随晶体厚度的变化,仍可分辨出 Si 和 C 原子,得到了 3C-SiC 薄膜中的  $30^\circ$  不全位错和微孪晶的结构细节<sup>[18]</sup>.

本文用 200 kV LaB<sub>6</sub> 灯丝电镜,借助解卷处理和像衬度分析鉴别了 AlSb 显微像中的 Al 和 Sb 原子,进一步研究了 MBE 方法生长的 AlSb/GaAs (001) 界面失配位错的结构.

## 2. 实验方法

采用 VG V80H 型 MBE 系统在 GaAs(001) 衬底上生长 AlSb 薄膜,该系统由阀控 As 裂解炉和传统的 Sb 束源炉分别提供 As<sub>2</sub> 和 Sb<sub>4</sub> 分子. Al 和 Ga 分子则分别由传统的 Al 炉和 Ga 炉提供. 首先, GaAs 衬底在 As 气氛保护下升温至约 580 °C 脱表面氧化膜,然后降至 570 °C 生长约 300 nm 厚的纯 GaAs 膜,以获得一个较平整的 GaAs 表面. 结束同质外延后,衬底的温度在 As 气氛保护下降至 510 °C,关闭 As 源 2 s 随即生长一层 30 nm 厚的 AlSb 成核层,然后生长 1.1 μm 厚的 GaSb 层,后者是作为随后生长超晶格的缓冲层. 生长过程中,较高的生长温度与合适的 V/III 比有利于薄膜保持较好的化学计量比.

依次用机械研磨、抛光和 Ar 离子束减薄技术制备 <110> 截面的电镜样品. 在 40 万倍下用 JEM-2010 LaB<sub>6</sub> 灯丝透射电镜拍摄高分辨像,电镜的球差系数为 0.5 mm,点分辨本领为 0.194 nm. 用 Epson4870 型

扫描仪对拍摄于电子感光片上的像进行数字化.

## 3. 结果和讨论

### 3.1. [110] 高分辨像

用 AlSb/GaAs 外延膜 <110> 截面样品拍摄了一系列不同离焦条件的高分辨像. 图 1 是从中挑选出的一幅像,箭头指向界面区,图的右上角是对应于界面区显微像的傅里叶变换图,称衍射图 (diffractogram). 衍射图中有两套衍射斑点,外侧的一套对应于 GaAs,内侧的对应于 AlSb. 两套  $\bar{1}11$ ,  $002$ ,  $\bar{2}20$ ,  $\bar{1}13$ ,  $\bar{2}22$ ,  $004$  衍射斑均出现齐全,其中  $004$  衍射斑的晶面间距恰等于 Al 与 Sb 原子(或 Ga 与 As 原子)的最近邻间距. 说明这些衍射束未落在 CTF 的零截点附近,像中携带了恢复原子分辨率晶体结构的必要信息. 因此,所挑选的高分辨像(见图 1)适于解卷处理. 在像的界面区箭头所指处可见一系列失配位错,其中标记为 D1—D6 的六个矩形放大示于图 2,可见它们各含有一个位错. 显然此像未能直接反映原子分辨率的晶体结构. 像中的黑点或白点未必代表原子,只反映出晶体的点阵. 以下将对六个矩形像区逐一进行解卷处理,以求得原子分辨率的结构投影图.

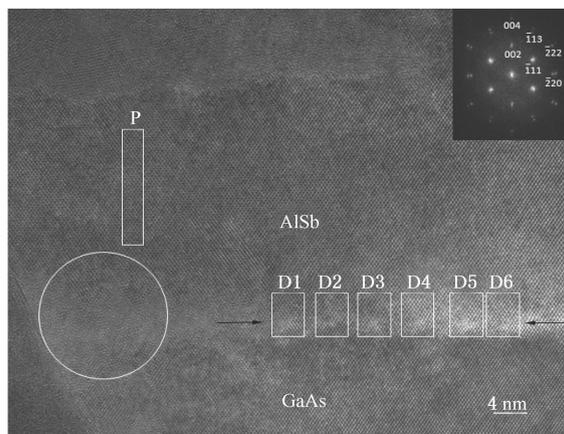


图 1 AlSb/GaAs(001)的 [110] 高分辨像(矩形 P 选自晶格完整区,矩形 D1 至 D6 选自界面区,箭头指向界面,右上角是对应于界面区显微像的傅里叶变换图,左下方包含非晶的圆形区用于测定离焦量)

### 3.2. 像的解卷处理

#### 3.2.1. 原理

关于高分辨像解卷处理的原理和方法,已有详

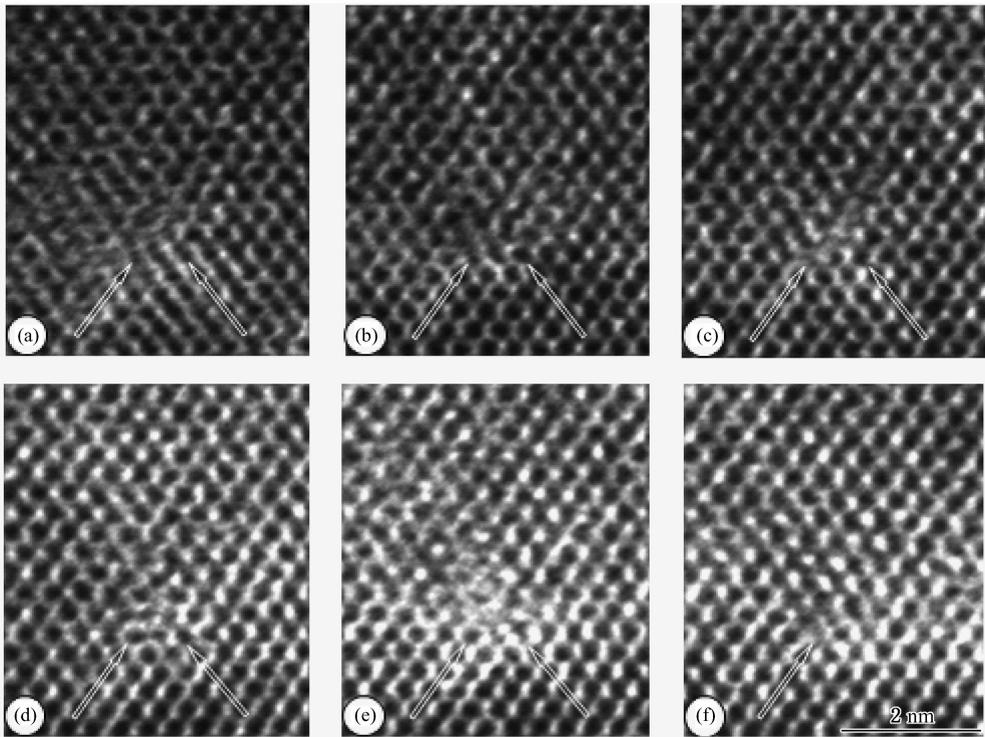


图2 对应图1中D1—D6六个矩形区显微像的放大像(  $\{111\}$  截断半原子面用箭头标示) (a) D1区; (b) D2区; (c) D3区; (d) D4区; (e) D5区; (f) D6区

细报道<sup>[15-17]</sup>, 此处仅作简要介绍. 按照赝弱相位物体近似像衬理论<sup>[19]</sup>, 当晶体试样的厚度小于某一定临界值(通常小于 10 nm, 随晶体原子序数增大而减小和随电子加速电压升高而增加)时, 像强度公式写作

$$I(\mathbf{r}) = 1 + 2\sigma\varphi'(\mathbf{r}) * \mathcal{F}^{-1}[T(\mathbf{H})], \quad (1)$$

其中  $\sigma = \pi/\lambda U$  为相互作用常数,  $\lambda$  表示电子波长,  $U$  表示电子加速电压,  $\varphi'(\mathbf{r})$  为晶体的赝电势投影,  $\mathcal{F}^{-1}$  和  $*$  分别为反傅里叶变换和卷积符号,  $T(\mathbf{H})$  为相位物体的 CTF,  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{H}$  分别为正空间和倒易空间的二维坐标.  $\varphi'(\mathbf{r})$  的峰位置与电势投影一致, 但较重原子的峰相对地下降, 轻原子的峰高上升. 于是,  $\varphi'(\mathbf{r})$  代表晶体投影结构的函数. 对(1)式作傅里叶变换得

$$i(\mathbf{H}) = \delta(\mathbf{H}) + 2\sigma F(\mathbf{H})T(\mathbf{H}), \quad (2)$$

式中  $i(\mathbf{H})$  为像的衍射图,  $\delta(\mathbf{H})$  表示狄拉克  $\delta$  函数, 代表透射电子束,  $F(\mathbf{H})$  是  $\varphi'(\mathbf{r})$  的傅里叶变换. 忽略透射电子束后, (2)式可写为

$$F(\mathbf{H}) = \frac{i(\mathbf{H})}{2\sigma T(\mathbf{H})}. \quad (3)$$

(3)式说明, 若已知 CTF, 则从像的傅里叶变换  $i(\mathbf{H})$  可求得  $F(\mathbf{H})$ . 再对  $F(\mathbf{H})$  作反傅里叶变换, 即得赝电势投影图  $\varphi'(\mathbf{r})$ , 又称解卷像.  $T(\mathbf{H})$  取决

于成像时的各种电子光学参数, 通常除离焦量外, 其他参数大都已知, 因此, 对像作解卷处理的关键步骤是测定离焦量.

### 3.2.2. 测定离焦量

取图1左下方以非晶为主, 包含少量 AlSb 晶体的圆形区, 作傅里叶变换, 得到与晶体像的衍射图相叠的 Thon 衍射图<sup>[20]</sup>, 示于图3. 用晶体的衍射斑作为傅里叶空间的长度标尺. Thon 衍射图中的亮环对应于 CTF 的极大或极小处, 细的暗环对应于零值. 在离焦量为 +10 — -24 nm 之间, 取步长 1 nm, 计算一系列 CTF 曲线, 与图3 Thon 衍射图的亮环和暗环的空间频率相匹配, 测得离焦量为 -9 nm. 因为待测界面位错区 D1—D6 与此圆形区有一定距离且厚度大于圆形区, 所以 -9 nm 只是 D1—D6 区的大致离焦量, 准确的离焦量将在解卷过程中予以修正.

### 3.2.3. 解卷像

分别以 D1—D6 区为中心, 选取待处理的圆形像区, 直径约为 24 nm. 在每幅圆形像之外画一个正方形, 其边长等于或略大于圆直径, 在圆与正方形之间赋予圆形像的平均灰度值, 做成六幅含 (1024 × 1024) 像素的正方形像. 圆形像之外的平均灰度

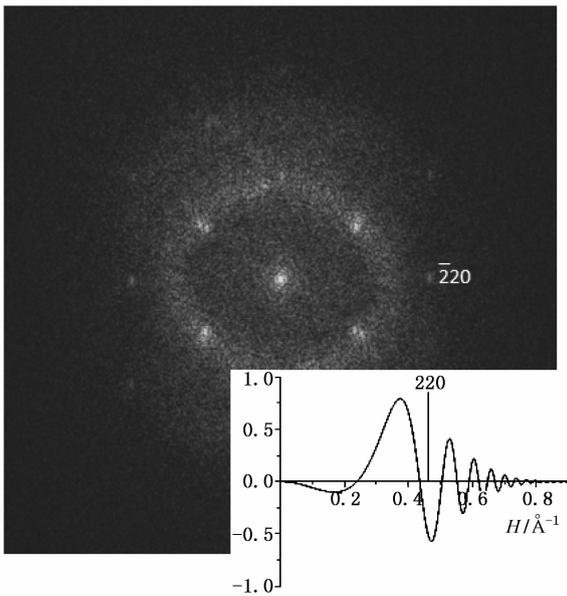


图3 AlSb 晶体像的衍射图与 Thon 衍射图相叠(右下角为匹配的 CTF 曲线,  $\Delta f = -9 \text{ nm}$ , 用  $\bar{2}20$  衍射斑作为傅里叶空间的长度标尺)

值起平滑作用,以减弱进行傅里叶变换时的断尾效应.对正方形像做傅里叶滤波,滤波窗口为椭圆形,

椭圆的长轴垂直于 AlSb 与 GaAs 的界面,窗口的尺寸以尽量保留位错结构的信息,而相邻窗口又不相互重叠为准.依据 Thon 衍射图测定的离焦量,在  $-10 \sim -19 \text{ nm}$  之间令步长  $0.2 \text{ nm}$  设置尝试离焦量,得 46 个离焦量,分别用这些离焦量对六个像区作解卷处理,得到分别对应于 D1—D6 的 46 个尝试电势分布图.从中选出原子分辨得最清楚的,示于图 4.相应地得出 D1 的离焦量为  $-15.2 \text{ nm}$ , D2 的离焦量为  $-16.4 \text{ nm}$ , D3, D4, D5 和 D6 的离焦量均为  $-17.4 \text{ nm}$ .在解卷像上通过伯格回路分析,得知其中 D1—D5 区的位错为 Lomer 位错, D6 区的是  $60^\circ$  位错,解卷像上的箭头标示出  $\{111\}$  截断半原子面.对更大范围的界面进行观察,在约  $90 \text{ nm}$  长的 AlSb/GaAs(001) 界面上找到 3 个  $60^\circ$  位错和 16 个 Lomer 位错,可见界面上的失配位错中,以 Lomer 位错为主( $>80\%$ ).值得指出,界面没有观察到失配不全位错.这是由于失配不全位错弛豫应变的能力低于失配全位错,因此失配不全位错的产生不是弛豫系统应变的有效方式,特别是对于应变较大的系统(例如本文中失配约为  $8.5\%$  的 AlSb/GaAs 系统).

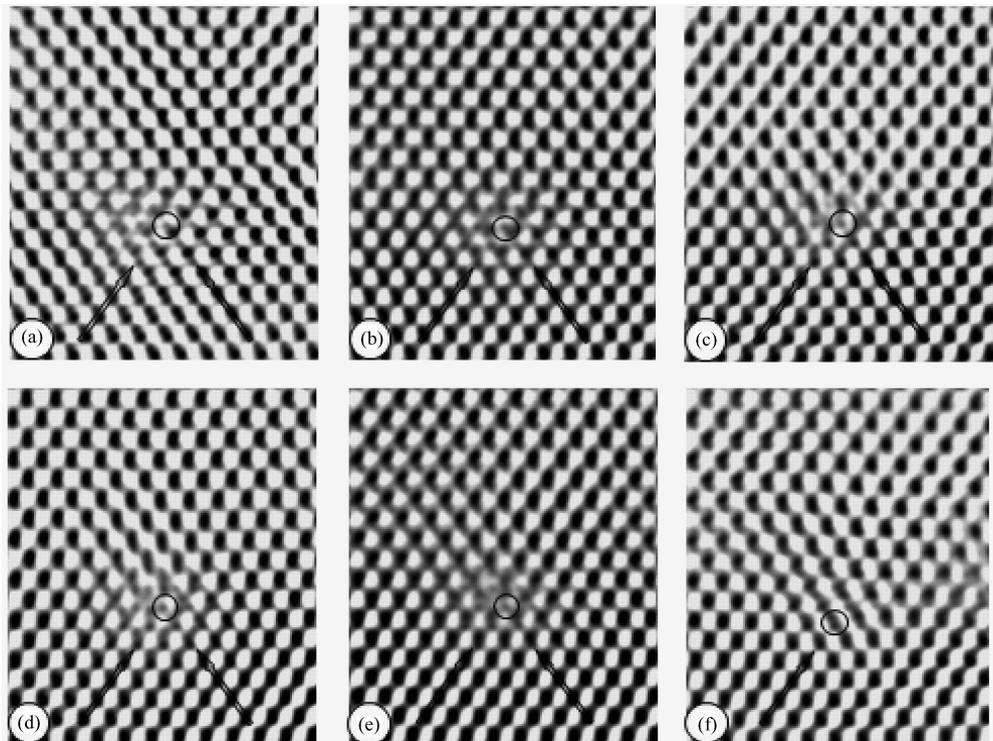


图4 对应图1六个矩形区 D1—D6 显微像的解卷像( $\{111\}$  截断半原子面用箭头标示, Lomer 位错核心中心的原子与  $60^\circ$  位错截断半原子面终端均用圆圈标记) (a) D1 区; (b) D2 区; (c) D3 区; (d) D4 区; (e) D5 区; (f) D6 区

### 3.3. 判断 Al 和 Sb 原子的位置

尽管解卷像图 4 比原始像图 2 的质量明显提高,一部分最近邻 Al-Sb(或 Ga-As)原子对显示为两个分开的黑点,但仍不能辨认出原子的种类. 赝弱相位物体近似像衬理论<sup>[19]</sup>指出,对于传统的正球差系数的电镜,最初,所有组成原子的像衬度随着晶体厚度的增加而增大,但较轻的原子的像衬度增加得比较重的原子快. 当晶体厚度进一步增加时,重原子的像衬度开始降低,轻原子衬度继续上升. 当晶体的厚度达到或超过临界值时,重原子的像衬度反转为负值,即重原子在像上显示为白点而轻原子仍保持为黑. 以下将借助像衬度随晶体厚度的变化规律区分不同的原子.

取图 1 中完整区 P,其放大像如图 5(a)所示. 以 P 区为中心,选取直径等于 32 nm 的圆形像区,从 -5 nm 到 -30 nm 设置一系列尝试离焦量,步长 0.1 nm,分别用每个离焦量对像作解卷处理,并结合衍

射振幅校正<sup>[17]</sup>,在得到的一系列尝试赝电势分布图中,质量最好的应是正确的解卷像,如图 5(b)所示,对应的离焦量为 -15.9 nm. 解卷像中可以清晰地看到 Al-Sb 哑铃结构. 为了判断这两种原子的相对位置,从左端薄区至右端厚区(分别对应图 1 中 P 区的上部和下部)测量图 5(b)中线段标记的 Al-Sb 原子对的灰度值,得到相应的灰度值曲线,如图 5(c)~(e)所示. 像衬度越黑,灰度值越高,像衬度为白时的灰度值为零. 根据该 Al, Sb 原子衬度的灰度值变化曲线,利用像衬规律判断出图 5(b)中原子对的左端为 Al 原子,右端为 Sb 原子. 相应地在图 1 中 Al 原子在 Al-Sb 原子对的上端, Sb 原子在下端. 由于图 1 中未见 AlSb 像区有平行于水平方向的面缺陷,故上述 Al 和 Sb 原子的相对位置应一直延伸到像下端的界面上. 于是,根据阴阳离子间的成键关系,进一步确定出图 1 中 GaAs 衬底的 Ga 和 As 原子分别位于 Ga-As 哑铃原子对的上端和

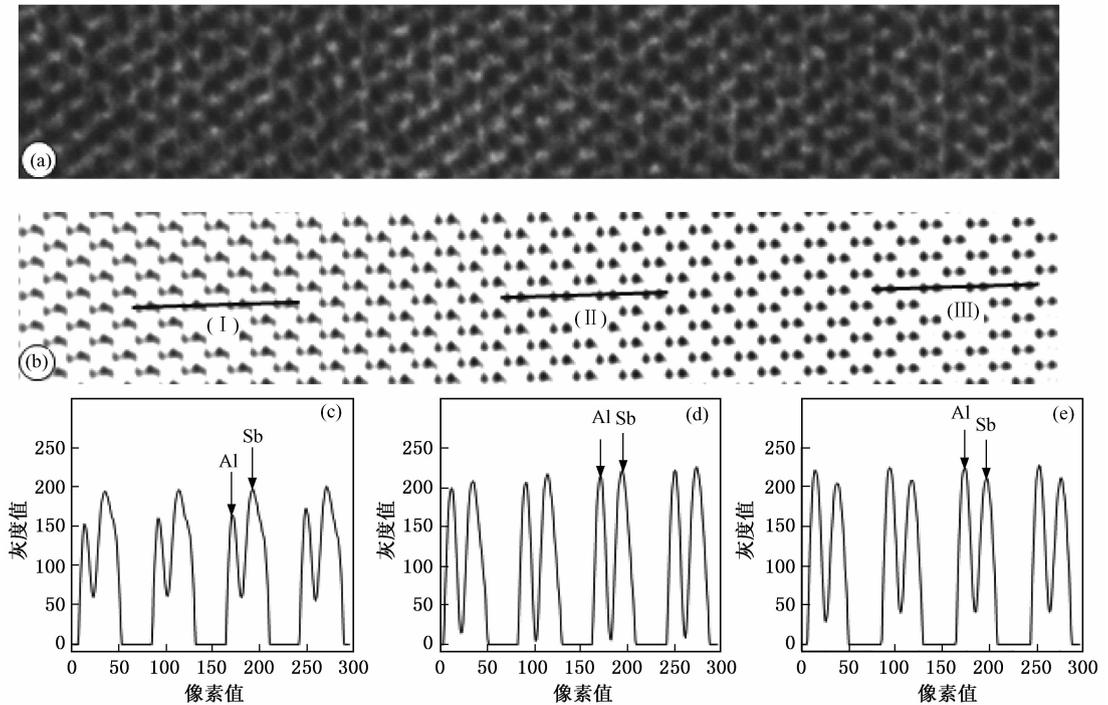


图 5 辨认 Al 和 Sb 原子的过程 (a) 图 1 中完整区 P 显微像的放大像(从左至右晶体厚度逐渐增加);(b) 对应于 (a) 的解卷像 ( $\Delta f = -15.9$  nm);(c), (d), (e) 分别对应 (b) 中三条线段 (I), (II), (III) 标记的原子对像衬度的灰度值曲线图

### 3.4. 界面位错核心结构分析

#### 3.4.1. Lomer 位错

下面选用 D1 区为例,对解卷像进行分析,以确

定 Lomer 位错的核心结构. D1 的放大像示于图 6(a) (也是图 2(a) 的放大像), 像的衬度虽不清晰,但仍可见箭头所指的  $\{111\}$  截断半原子面. 图 6(b) 是对应于图 6(a) 的解卷像, 原子显示为黑, 衬度明

显改善,且能看见两个截断半原子面终止于位错核心的同一个原子(用圆圈标记). 图 6(c) 中用线段

连接该原子的邻近原子,形成了由一个 6 原子环和一个 8 原子环构成的 6-8 环 Lomer 位错核心结构.

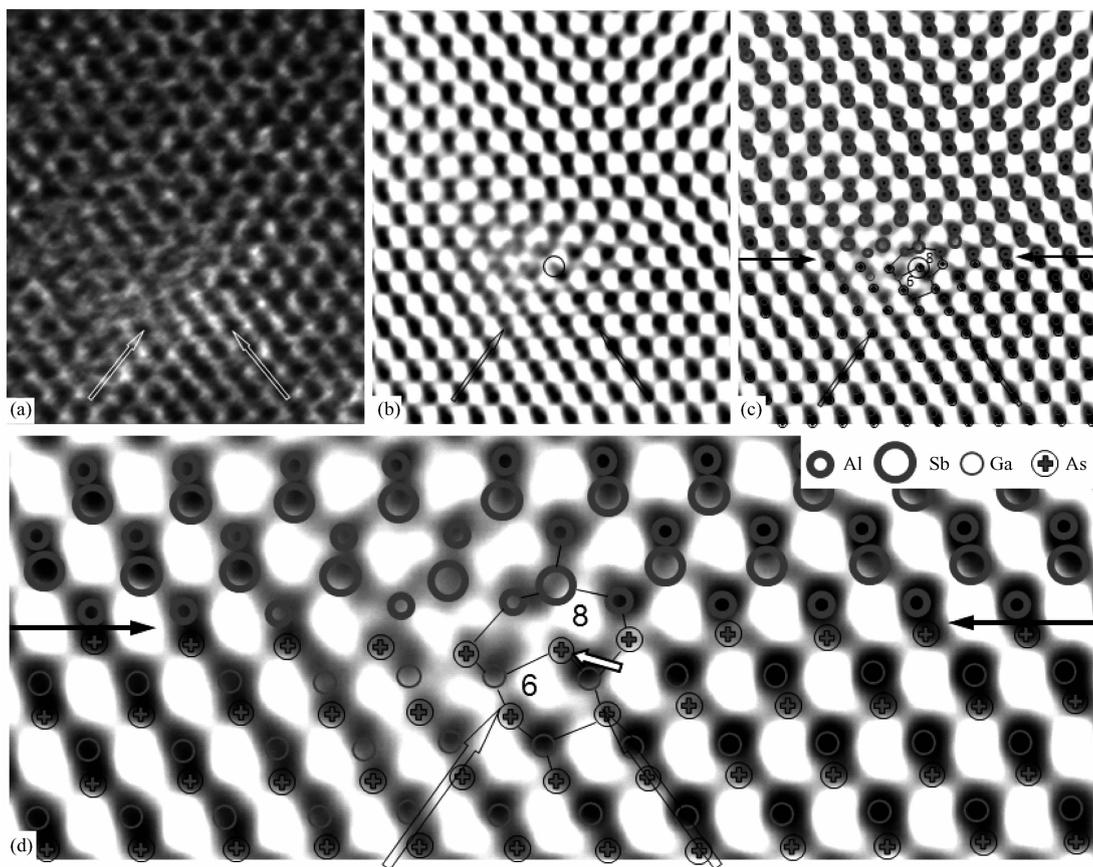


图 6 Lomer 位错核心结构的分析 (a) 图 1 矩形区 D1 显微像的放大像; (b) (a) 的解卷像 ( $\Delta f = -15.2 \text{ nm}$ , Lomer 位错核心中心的原子用圆圈标记); (c) 解卷像与 6-8 环位错核心模型重叠; (d) (c) 中心部分的放大像(空心箭头指向悬键原子 As, 水平箭头指向界面)

关于 6-8 环和类似的 Lomer 位错结构已有一些报道<sup>[6,13,21-23]</sup>. 1958 年 Hornstra<sup>[21]</sup> 从理论上讨论了 Lomer 位错核心的可能结构, 提出了两类结构模型, 一类由一个 5 原子环和一个 7 原子环构成的 5-7 环结构, 如图 7(a) 所示; 另一类是上述的 6-8 环结构, 如图 7(b) 所示, 它的特点是位错核心的中心有一个悬键原子(空心箭头所指), 而 5-7 环结构中则无悬键原子. 后来, 两类 Hornstra 位错结构均为实验所证实. 在  $\text{Si}_{0.76}\text{Ge}_{0.24}/\text{Si}(100)$ <sup>[13]</sup> 和  $\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}(110)$ <sup>[6]</sup> 中曾分别观察到 5-7 环结构和 6-8 环结构, 在  $\text{GaAs}/\text{Si}(001)$  中则两类 Hornstra 位错结构都曾观察到<sup>[22,23]</sup>. 本工作从解卷像上确定的 Lomer 位错核心结构为 6-8 环, 属于第二类 Hornstra 位错结构, 但因界面有应力而使 6-8 环结构偏离图 7(b) 的理想情况, 左右不再呈镜面对称.

为了构建对应于 AlSb/GaAs 界面 6-8 环 Lomer 位错核心的结构模型, 还需要确定解卷像中每个黑

点代表的原子种类. 为此将图 6(c) 的中心部分放大, 示于图 6(d), 图中清楚可见 6-8 环中心有悬键原子(空心箭头所指), 以下首先分析此原子. 3.3 节曾得出, 解卷像中 Al-Sb 哑铃(即原子对)的上端为 Al 原子, 下端为 Sb 原子; Ga-As 哑铃的上端为 Ga 原子, 下端为 As 原子. 在晶格失配约 8.5% 的 AlSb/GaAs(001) 界面上, AlSb 与 GaAs 的晶格匹配约为 12:13. 即在  $[110]$  投影结构中, 大体上沿水平方向排列的 12 个 Al-Sb 哑铃对应于 13 个 Ga-As 哑铃, 多余的一个 Ga-As 哑铃是导致界面附近形成一个 Lomer 位错的原因. 于是, 图 6(d) 的悬键原子必然是 As 原子, 它的出现说明在 MBE 外延生长过程中, GaAs 衬底的上表面是 As 原子面. 根据阴阳离子间的成键关系, 随后在 As 原子面外延生长的只能是 AlSb 中的 Al 原子面. 这样, 可以确定解卷像中每个黑点所代表的原子种类, 得出核心结构的模型(见图 6(d)). 因 AlSb 中的 Al 原子与 GaAs 中的 As 原

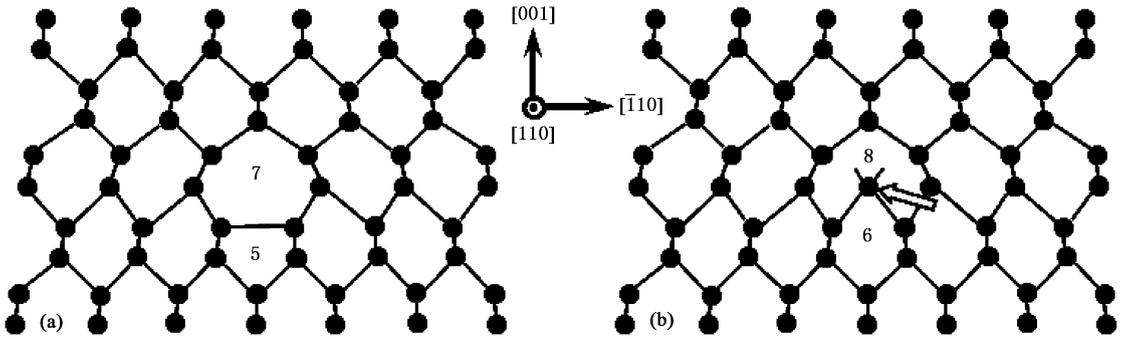


图7 Hornstra从理论上提出的两类 Lomer 位错结构 (a)5-7 环结构;(b)6-8 环结构(位错核心中心的一个悬键原子用空心箭头标示)

子键合,形成的界面(水平箭头所指)类型为  $AlAs$  型.

仔细分析图 4 中的解卷像,发现在 D1—D5 区的五个 Lomer 位错核心结构都与 6-8 环结构吻合.图 4(b)—(e)的解卷像上用圆圈标出了 D2—D5 区 Lomer 位错核心中心的 As 原子.综上所述,本文研究的  $AlSb/GaAs$  界面属于  $AlAs$  型,观察到的 Lomer 位错结构均为 6-8 环,属于上述第二类 Hornstra 位错结构.

### 3.4.2. $60^\circ$ 位错

对于  $60^\circ$  位错,也存在两种类型,glide 型和 shuffle 型,两类  $60^\circ$  位错具有不同的核心结构,其  $\{111\}$  截断半原子面终端分别为一个原子和一对原子,如图 8 所示<sup>[24]</sup>.图 9(a)是 D6 区位错的放大像,

其解卷像示于图 9(b).在解卷像上,位错所导致的  $\{111\}$  截断半原子面终端显示为未能完全分辨开的两个黑点.图 9(b)右上角插入这两个相连黑点的灰度值曲线,两个峰各对应于一个原子,于是 D6 区的位错为 shuffle 型  $60^\circ$  位错.进一步通过上述图 6(c)可知,解卷像上远离  $AlAs$  型界面的一对  $Al-Sb$  哑铃的间距显著大于一对  $Ga-As$  哑铃间距,界面附近的  $Al-Sb$  哑铃对间距稍缩小但仍大于  $Ga-As$  哑铃对间距,  $Al-As$  哑铃对的间距与  $Ga-As$  哑铃对间距近似相等.图 9(c)所示为模型与解卷像相叠,图 9(d)是单独的模型.事实上,glide 型  $60^\circ$  位错在半导体中常常沿着它的滑移面分解为两个不全位错以降低整个系统的能量<sup>[25,26]</sup>,而 shuffle 型  $60^\circ$  位错需要较高的能量才能分解.

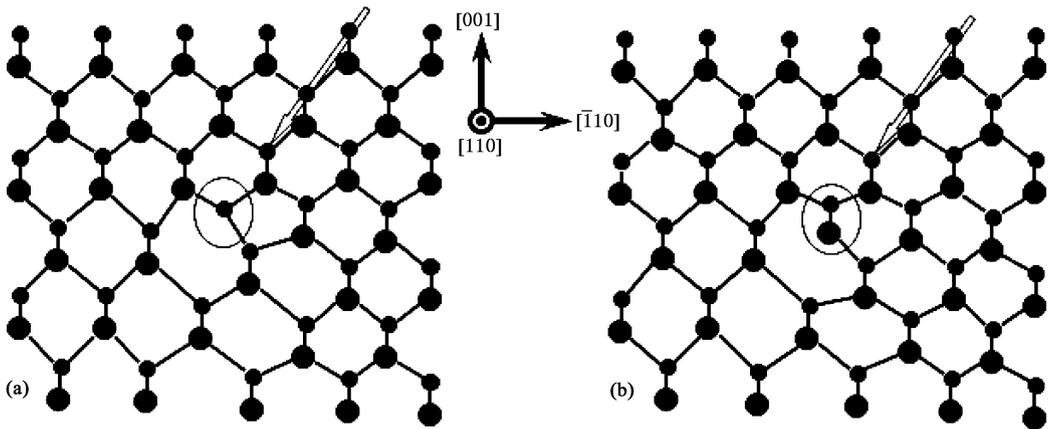


图8 两类  $60^\circ$  位错的  $[110]$  投影结构模型(箭头指向的  $\{111\}$  截断半原子面的终端用椭圆标记) (a) glide 型;(b) shuffle 型

### 3.5. 模拟像

为进一步验证 Lomer 和  $60^\circ$  两个位错结构模型,用多片法<sup>[27]</sup>计算了模拟像.先从解卷像上读取

原子位置(见图 6(c)和图 9(c)中的黑点)的坐标,分别做两个虚构的二维晶胞,其面积等于解卷像区.再做两个  $AlSb/GaAs$  完整晶体的大晶胞,面积约为二维晶胞的  $3 \times 3$  倍.把两个含位错的二维晶胞

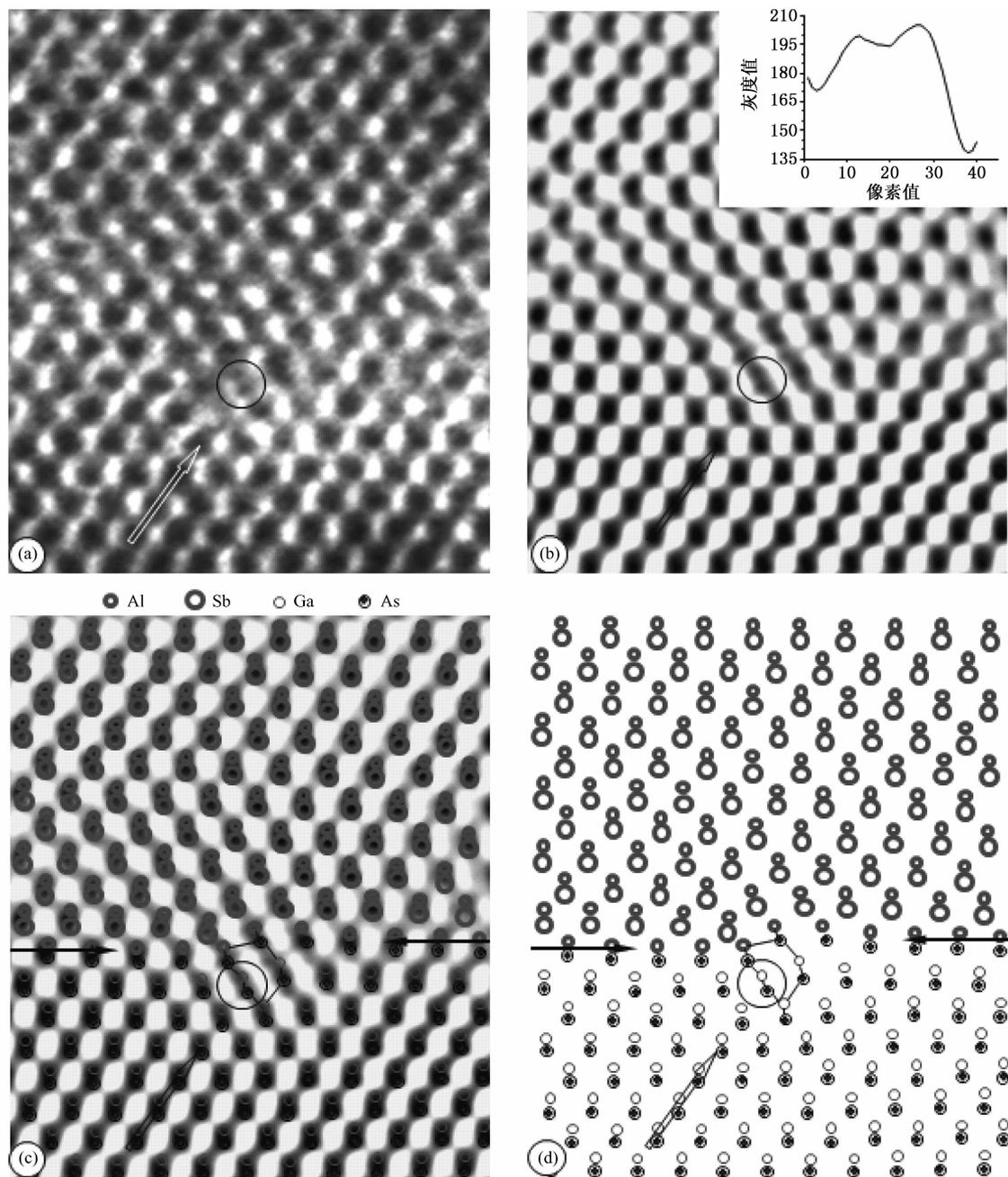


图9 确定 $60^\circ$ 位错核心结构 (a)图1矩形区D6显微像的放大像;(b)(a)的解卷像( $\Delta f = -17.4 \text{ nm}$ ,  $\{111\}$ 截断半原子面终端用圆圈标记,右上角为此终端(两个相连黑点)的灰度值曲线);(c)解卷像与结构模型重叠(水平箭头指向界面位置);(d)结构模型

分别居中置换完整大晶胞的相应内容,分别得到含Lomer和 $60^\circ$ 界面失配位错的两个大晶胞,用于计算模拟像。

模拟像计算中令片厚等于GaAs沿 $[110]$ 方向的重复周期,即 $a_{\text{GaAs}}/\sqrt{2} = 0.4 \text{ nm}$ ,它又等于AlSb沿此方向重复周期的92.1%(等于GaAs与AlSb晶胞参数之比),于是将每片AlSb的占位率降低至92.1%。计算出射波函数的衍射束数目约等于参与

成像衍射束数目的两倍。改变晶体厚度(从5—25片,间隔1片)和晶体倾角(0,5,9.5和19 mrad),针对两个大晶胞各计算一系列不同离焦量(-12至-25 nm,间隔1 nm,含位错的解卷离焦量)的像,取其中心,即位错区的系列模拟像,分别与实验像(图6(a)和图9(a))匹配。与实验像符合较好的模拟像示于图10(a)和(b)中。前者对应于含Lomer位错的解卷像(图6(c)),离焦量为-15.2 nm,厚度为4.8

nm;后者对应于含  $60^\circ$  位错的解卷像(图 9(c)), 离焦量为  $-17.4$  nm, 厚度为  $5.2$  nm. 晶体倾角均为  $9.5$  mrad.

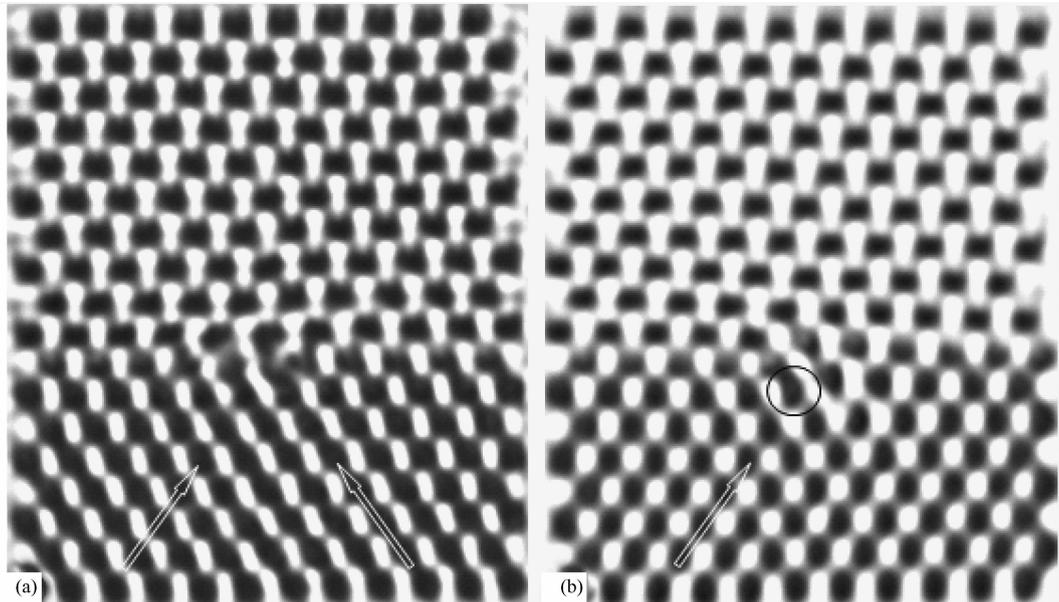
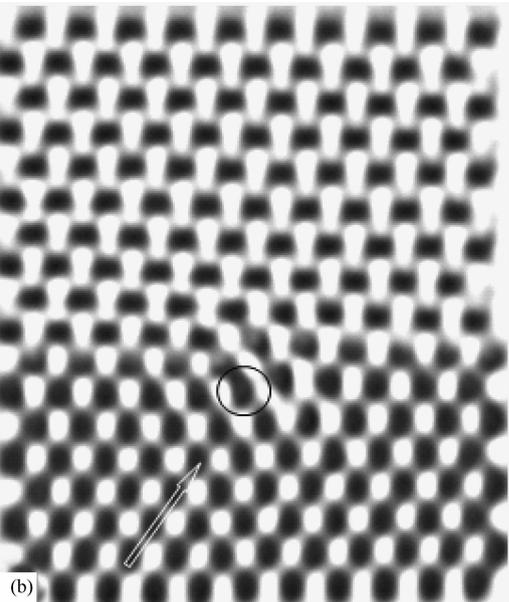


图 10 多片法计算的模拟像( $\{111\}$ 截断半原子面用箭头标示) (a)D1 区 Lomer 位错模拟像( $\Delta f = -15.2$  nm, 厚度  $4.8$  nm, 晶体倾角  $9.5$  mrad); (b)D6 区  $60^\circ$  位错模拟像( $\Delta f = -17.4$  nm, 厚度  $5.2$  nm, 晶体倾角  $9.5$  mrad)

## 4. 结 论

本文用  $200$  kV LaB<sub>6</sub> 灯丝高分辨电镜结合高分辨像的解卷处理, 研究了生长在 GaAs(001) 衬底上, 作为成核层的 AlSb 薄膜的结构. 首先获得了直接反映 AlSb/GaAs  $[110]$  投影结构的解卷像, 且提高了像分辨率. 其次, 借助赝弱相位物体近似像衬理论, 分析了完整晶体解卷像上 Al 和 Sb 原子像衬度随样品厚度的变化, 确定了 Al-Sb 哑铃原子对中 Al 和 Sb

原子的相对位置. 在此基础上, 从解卷像的衬度上初步得出 Lomer 和  $60^\circ$  两类界面失配位错的核心结构, Lomer 位错结构为 6-8 环,  $60^\circ$  位错为 shuffle 型. 据此构建了这两类位错核心的结构模型, 计算了模拟像, 对比实验像和模拟像进一步验证了上述结论, 并确定 AlSb/GaAs 界面类型为 AlAs 型.



原子. 在此基础上, 从解卷像的衬度上初步得出 Lomer 和  $60^\circ$  两类界面失配位错的核心结构, Lomer 位错结构为 6-8 环,  $60^\circ$  位错为 shuffle 型. 据此构建了这两类位错核心的结构模型, 计算了模拟像, 对比实验像和模拟像进一步验证了上述结论, 并确定 AlSb/GaAs 界面类型为 AlAs 型.

本工作说明, 对高分辨电子显微像进行解卷处理并借助赝弱相位物体近似像衬理论分析解卷像的衬度, 可以得到同样实验条件下用常规分析方法所得不到的结果.

- [1] Kroemer H 2004 *Physica E* **20** 196
- [2] Subbanna S, Gaines J, Tuttle G, Kroemer H, Chalmers S, English J H 1989 *J. Vac. Sci. Technol.* B **7** 289
- [3] Kim H S, Noh Y K, Kim M D, Kwon Y J, Oh J E, Kim Y H, Lee J Y, Kim S G, Chung K S 2007 *J. Cryst. Growth* **301-302** 230
- [4] Lomer W M 1951 *Philos. Mag.* **42** 1327
- [5] Marshall A F, Aubertine D B, Nix W D, McIntyre P C 2005 *J. Mater. Res.* **20** 447
- [6] Tillmann K, Houben L, Thust A 2006 *Philos. Mag.* **86** 4589
- [7] Qian W, Skowronski M, Kaspi R, de Graef M, Dravid V P 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 7268
- [8] Jallipalli A, Balakrishnan G, Huang S H, Khoshakhlagh A, Dawson L R, Huffaker D L 2007 *J. Cryst. Growth* **303** 449
- [9] Trampert A, Tournier E, Ploog K H 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 2265
- [10] Chen F R, Kai J J, Chang L, Wang J Y, Chen W J 1999 *J. Electron Microsc.* **48** 827
- [11] He W Z, Li F H, Chen H, Kawasaki K, Oikawa T 1997 *Ultramicroscopy* **70** 1
- [12] Wang D, Zou J, He W Z, Chen H, Li F H, Kawasaki K, Oikawa T 2004 *Ultramicroscopy* **98** 259
- [13] Wang D, Chen H, Li F H, Kawasaki K, Oikawa T 2002 *Ultramicroscopy* **93** 139
- [14] Scherzer O 1949 *J. Appl. Phys.* **20** 20

- [15] Han F S, Fan H F, Li F H 1986 *Acta Crystallogr. A* **42** 353
- [16] Hu J J, Li F H 1991 *Ultramicroscopy* **35** 339
- [17] Li F H, Wang D, He W Z, Jiang H 2000 *J. Electron Microsc.* **49** 17
- [18] Tang C Y, Li F H, Wang R, Zou J, Zheng X H, Liang J W 2007 *Phys. Rev. B* **75** 184103
- [19] Li F H, Tang D 1985 *Acta Crystallogr. A* **41** 376
- [20] Thon F 1966 *Z. Naturforsch.* **210** 476
- [21] Hornstra J 1958 *J. Phys. Chem. Solids* **5** 129
- [22] Vila A, Cornet A, Morante J R, Ruterana P, Loubradou M, Bonnet R, Gonzalez Y, Gonzalez L 1995 *Philos. Mag. A* **71** 85
- [23] Lopatin S, Pennycook S J, Narayan J, Duscher G 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 2728
- [24] Hull D, Bacon D J 2001 *Introduction to Dislocations* (Oxford: Butterworth – Heinemann) p123
- [25] Zou J, Cockayne D J H 1993 *J. Appl. Phys.* **74** 925
- [26] Zou J, Cockayne D J H 1993 *Appl. Phys. Lett.* **63** 2222
- [27] Cowley J M, Moodie A F 1957 *Acta Crystallogr.* **10** 609

## High-resolution electron microscopy of misfit dislocations in AlSb/GaAs(001) system\*

Wen Cai<sup>1)</sup> Li Fang-Hua<sup>1)†</sup> Zou Jin<sup>2)</sup> Chen Hong<sup>1)</sup>

1) (Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

2) (Centre for Microscopy and Microanalysis and Materials Engineering, The University of Queensland, St. Lucia Queensland 4072, Australia)

(Received 21 December 2009; revised manuscript received 29 December 2009)

### Abstract

The detailed core structures of misfit dislocations in the AlSb/GaAs(001) heterostructure system were studied by 200 kV LaB<sub>6</sub> filament high-resolution electron microscope. In combination with image deconvolution, the [110] images were transformed into the projected structure maps, and the image resolution was enhanced up to the information limit of the microscope. To distinguish Al and Sb atoms in the AlSb film, the image contrast change with the sample thickness was analyzed for the perfect region in deconvoluted image, and the positions of Al and Sb atoms in the dumbbells were determined based on the image contrast theory of the pseudo-weak-phase object approximation. Then the structure models of two types of misfit dislocations were constructed. As the simulated images are in good agreement with the experimental images, the AlAs type interface and the core structures of obtained Lomer and 60° misfit dislocations were determined.

**Keywords:** high-resolution electron microscopic image, image deconvolution, interface, misfit dislocation

**PACC:** 6116D, 6170J

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50672124).

† Corresponding author. E-mail: lifh@aphy.iphy.ac.cn