

3C-SiC 薄膜小角晶界附近位错核心的原子组态研究

崔彦祥 王玉梅 李方华

Atomic configurations of dislocation cores in a small-angle grain boundary of 3C-SiC film

Cui Yan-Xiang Wang Yu-Mei Li Fang-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 046801 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.046801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.046801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I4>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

斜切蓝宝石衬底 MOCVD 生长 GaN 薄膜的透射电镜研究

TEM study of GaN films on vicinal sapphire (0001) substrates by MOCVD

物理学报.2012, 61(18): 186103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.186103>

目标跟踪中目标模型更新问题的半监督学习算法研究

Research on semi-supervising learning algorithm for target model update in target tracking

物理学报.2015, 64(1): 014205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.014205>

基于深度玻尔兹曼模型的红外与可见光图像融合

Infrared and visible image fusion based on deep Boltzmann model

物理学报.2014, 63(18): 184202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.184202>

米散射激光雷达剖面数据三次样条垂直水平插值法

A method of vertical and horizontal plus cubic spline interpolation for Mie scattering lidar profile data

物理学报.2014, 63(15): 154204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.154204>

复杂背景下目标检测的级联分类器算法研究

Study on the cascade classifier in target detection under complex background

物理学报.2014, 63(9): 094204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.094204>

# 3C-SiC 薄膜小角晶界附近位错核心的原子组态研究\*

崔彦祥 王玉梅 李方华†

(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)

(2014年9月22日收到; 2014年10月16日收到修改稿)

用 LaB<sub>6</sub> 灯丝 200 kV 高分辨透射电镜拍摄了有小角晶界的 3C-SiC/(001)Si 薄膜的 [1 $\bar{1}$ 0] 高分辨电子显微像. 用像解卷技术把本不直接反映晶体结构的实验像转化为结构像. 首先, 从完整区的结构像中分辨开间距仅为 0.109 nm 的 Si 和 C 原子柱; 随后按赝弱相位物体近似像衬理论, 分析像衬随晶体厚度的变化规律, 辨认出 Si 和 C 原子; 进而在原子水平上得出小角晶界附近两个复合位错的核心结构, 构建了结构模型并计算了模拟像. 实验像与模拟像的一致程度验证了结构模型的正确性. 于是, 在已知完整晶体结构的前提下, 仅从一帧实验高分辨像出发, 推演出原子的种类和位错核心的原子组态. 还讨论了 3C-SiC 小角晶界的形成与晶界附近出现复合位错的关系.

**关键词:** 解卷处理, 小角晶界, 位错核心结构, 3C-SiC

**PACS:** 68.37.Og, 61.72.Ff, 42.30.Va

**DOI:** 10.7498/aps.64.046801

## 1 引言

作为一种易生长且易掺杂的宽带隙、高临界击穿电场、高热导率的半导体化合物, SiC 在大功率、高温、高频器件中具有很大的应用价值<sup>[1,2]</sup>. 相比其他 SiC 多型体, 只有 3C-SiC 能够外延生长在工艺成熟的 Si 基底上<sup>[1]</sup>. 但是 3C-SiC 与基底 Si 之间的晶格失配以及热膨胀系数差异较大, 在外延膜中较易产生大量缺陷<sup>[3,4]</sup>. 缺陷对材料器件的性能往往产生消极的影响, 因此很值得对缺陷结构进行深入的研究. 小角晶界是一种常见的面缺陷, 通常认为它的形成源于若干个位错. 但至今还缺少对 3C-SiC 小角晶界附近原子分辨率位错核心结构的资料, 因此研究小角晶界附近原子分辨率的位错结构对 SiC 半导体生长工艺的改善、器件设计和性能提升有重要意义.

高分辨透射电子显微镜(以下简称电镜)是能够在原子水平上研究晶体结构和缺陷的有

力工具<sup>[5-9]</sup>. 然而, 受物镜像差所调制, 电镜的分辨本领受限, 高分辨电子显微像(以下简称高分辨像或像)的衬度随成像参数、特别是离焦量而异, 甚至未必能显示出低分辨率的结构. 目前常用的中等电压(200—300 kV)电镜的分辨本领(约为 0.2—0.16 nm)达不到原子分辨率. 200—300 kV 的场发射电镜有较高的信息极限, 约为 0.13—0.11 nm, 然而介于点分辨本领与信息极限之间的结构信息严重畸变, 即使在 Scherzer 聚焦条件下成像, 也无法直接从像上观察到全部原子. 在 3C-SiC 沿 [1 $\bar{1}$ 0] 方向的结构投影上, Si-C 原子对(俗称“哑铃”)的间距只有 0.109 nm, 原则上 Si, C 原子的像分辨不开, 而且缺陷附近的应力及畸变又使像衬进一步模糊. 只有用超高压电镜<sup>[10]</sup>和球差校正电镜<sup>[11,12]</sup>拍摄的高分辨像能直接分辨开间距小于 0.1 nm 的原子. 对于普通中等电压电镜拍摄的高分辨像, 可以通过后期图像处理消除物镜像差的影响, 获得分辨率达到电镜信息极限

\* 国家自然科学基金(批准号: 11474329)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lifh@aphy.iphy.ac.cn

的结构像,如借助出射波重构<sup>[13-17]</sup>及像解卷处理等<sup>[18-22]</sup>技术.其实早在1982年,文献<sup>[23]</sup>曾经报道由于II-VI和III-V族半导体化合物的投影结构有特殊性,用高分辨像可以辨别出小于电镜点分辨本领的结构信息.当时使用的是像模拟分析技术.1997年,中国科学院物理研究所建立了晶体缺陷的高分辨像解卷处理技术,并应用于这一类有“哑铃”结构特征的晶体中,对原子分辨率晶体缺陷的核心结构进行研究<sup>[20-22]</sup>.如,半导体 $\text{Si}_{0.76}\text{Ge}_{0.24}$ 薄膜中的 $60^\circ$ 位错和Lomer位错<sup>[24-26]</sup>,3C-SiC中的 $30^\circ$ 不全位错和微孪晶的精细结构<sup>[27-29]</sup>,GaN中的 $\text{I}_2$ 层错及AlN中的10和12元环两种不全位错的核心结构<sup>[30,31]</sup>.

本文借助像解卷处理和像衬分析技术<sup>[20,21]</sup>,从一帧用200 kV,LaB<sub>6</sub>灯丝电镜拍摄的高分辨像出发,辨别出3C-SiC薄膜中的Si和C原子,并确定了小角晶界附近两个复合位错核心的原子组态.

本文涉及的像解卷处理原理、方法及应用可参考李方华<sup>[32]</sup>著《电子晶体学与图像处理》中的第十、十一、和十四章.

## 2 实验

(100)Si基底上的3C-SiC薄膜采用大气压化学气相沉积技术制备.用于电镜观察的为对黏截面样品,先经过传统的机械减薄,之后用凹坑仪减薄、最后再用 $\text{Ar}^+$ 离子轰击减薄制成.由于薄膜SiC比基底Si剪强度高,在样品制备过程中,样品薄区部分的基底Si已被 $\text{Ar}^+$ 轰击去除.高分辨像用JEM-2010电镜拍摄,球差系数为0.5 mm,点分辨本领约为0.2 nm.像解卷处理过程使用DEC软件完成.

## 3 高分辨像

3C-SiC的晶体结构属于闪锌矿类型,晶胞参数 $a = 0.436$  nm.图1(a)是3C-SiC晶胞的结构模型,图1(b)是图1(a)沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向的投影结构.图1中Si和C的最近邻原子两两排列成对,在高分辨像中习惯称作“哑铃”.图2是3C-SiC的 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 高分辨像,薄膜沿 $[001]$ 方向生长,(001)Si基底位于图2的正上方,此处Si基底在样品减薄过程中已被 $\text{Ar}^+$ 离子束轰击掉.图2中可见两个晶粒,晶粒间界的走向大致沿铅垂方向,左右两侧的直线段分别显示出两个晶粒(001)面的取向,左侧的处

于水平位置(见图2左侧的三条平行线段),右侧的相对于左侧绕 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 晶轴顺时针旋转一个很小的角度(参考图2右侧的三条平行线段).直接测算出两个晶粒的取向差约为 $4^\circ$ .图2右上插入对应于高分辨像的傅里叶变换图,即像的衍射图(image diffractogram或diffractogram),它由两套衍射斑组成,两者之间的夹角亦约为 $4^\circ$ .图2中小角晶界附近可见两个复合位错,分别框在矩形A和B中.矩形P取自完整晶体区,用于识别Si和C原子柱.图2左下角存在一片层错,终止于小角晶界处.

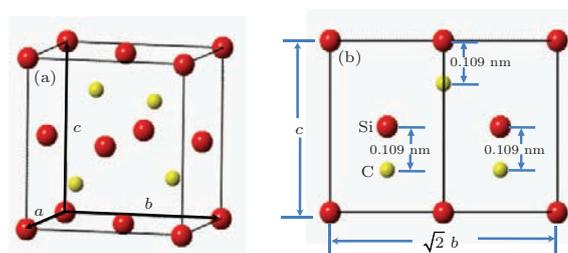


图1 (网刊彩色) (a) 3C-SiC晶胞的结构; (b) 为图(a)沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向的投影, Si和C原子的近邻间距为0.109 nm

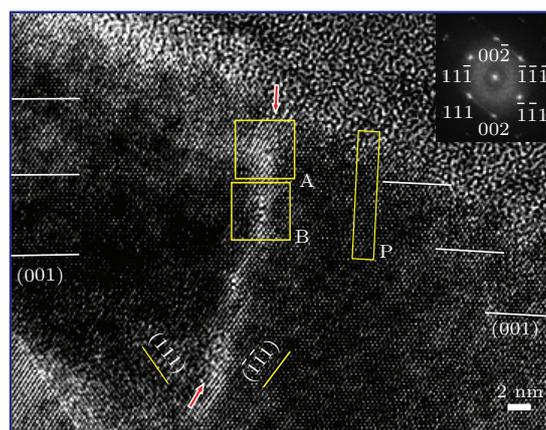


图2 (网刊彩色) 3C-SiC的 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 高分辨电子显微像, 右上角内插图为像的衍射图(左右两个晶粒之间形成一个小角晶界, 跨越晶界的两个矩形A和B各自包含一个复合位错, 矩形P用于分析像衬变化规律)

## 4 Si与C原子柱的识别

为识别Si与C原子, 需要注意以下三点: 一是对待测晶体缺陷附近一个楔状完整区的像做解卷处理, 得到解卷像; 二是提高解卷像的质量; 三是分析解卷像的衬度随晶体厚度的变化规律.

### 4.1 晶体完整区的解卷像

由于受衬度传递函数(CTF)调制, 图2所示的高分辨像中的白点和黑点未必代表原子, 所以像的

衬度未必直接反映晶体结构. 对高分辨像进行解卷处理的目的是消除CTF对高分辨像的调制, 使像复原为晶体结构的投影图, 即结构像, 也是解卷像. CTF和成像的电子光学参数有关, 如球差系数、离焦量、加速电压等, 其中最关键的是离焦量. 与其他参数相比, 离焦量的变化对像衬影响最大, 而且难以在实验过程中精确设置.

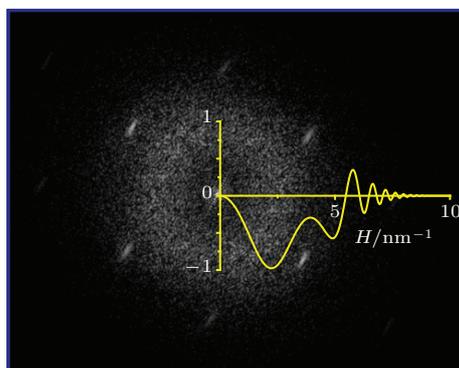


图3 (网刊彩色) Thon 衍射图及与之符合最佳的 CTF 曲线 ( $\Delta f = -47$  nm)

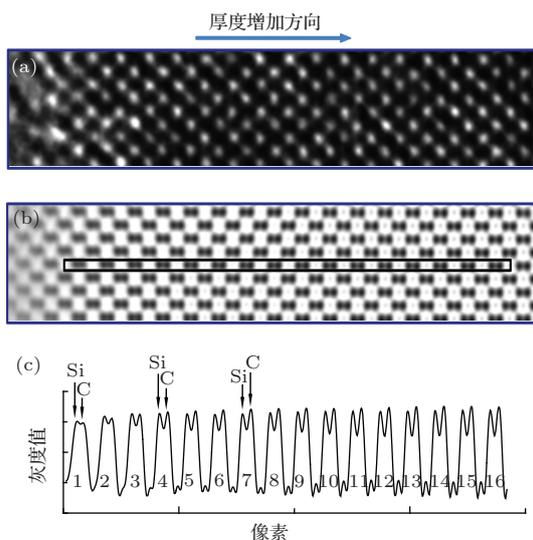


图4 (网刊彩色) (a) 图2中P区的放大像, 相对于图2逆时针旋转了 $90^\circ$ ; (b) 对应于(a)且经过衍射振幅校正的解卷像; (c) 对应于(b)中框内原子的灰度值曲线

本文采用Thon衍射图法<sup>[32,33]</sup>测定高分辨像(图2)的大致离焦量. 选取图2边缘非晶和少量晶体区域, 做傅里叶变换, 得到Thon衍射图(图3), 它由非晶区的弥散环与晶体区的衍射斑所组成. 计算一系列对应不同离焦量的CTF曲线, 并与Thon衍射图进行比较, 得出离焦量 $\Delta f$ 为 $-47$  nm时计算的CTF与Thon衍射图符合得最好(见图3,  $H$ 为倒空间频率). 于是将 $-47$  nm作为图2所示高分辨像的大致离焦量, 其精确值将在后续的像解卷处

理过程中予以修正.

按照文献<sup>[27, 29, 31]</sup>所描述的方法, 判断Si和C最近邻原子的相对位置. 图4(a)是图2中P区逆时针旋转 $90^\circ$ 之后的放大像, 从左到右晶体厚度递增. 把大致离焦量( $-47$  nm)作为中点, 在 $-43$  nm与 $-51$  nm之间, 以 $0.5$  nm的步长选取17个尝试离焦量, 用它们逐一对P区做解卷处理. 在得到的17个尝试解卷像中, 挑选出质量最好的一帧像, 它对应的离焦量为 $-46$  nm. 于是认为 $-46$  nm是精确离焦量, 对应的解卷像应正确反映晶体结构.

## 4.2 提高解卷像质量

为了使较厚晶体的解卷像亦能适用于研究原子分辨率的晶体缺陷, 2000年建立了解卷像的衍射振幅校正方法<sup>[34]</sup>. 其原理是迫使解卷像衍射斑的积分振幅正比于理想晶体的结构因子振幅. 经过衍射振幅校正之后, 动力学效应明显减弱, 于是提高了解卷像的质量. 尽管 $3C$ -SiC中沿 $[1\bar{1}0]$ 方向投影的两个最近邻原子的间距仅为 $0.109$  nm, 但在校正后的解卷像(图4(b))中, “哑铃”结构清晰可见. 这为下一步分析像衬随晶体厚度的变化打下了基础.

## 4.3 分析像衬随晶体厚度的变化

赝弱相位物体近似理论<sup>[35]</sup>是较弱相位物体近似更为实用的像衬理论, 它阐明在某一定的临界厚度以下, 结构像或解卷像的衬度随样品厚度的变化很有规律, 而且此规律又与组成原子的原子序数密切相关. 当样品厚度超出弱相位物体近似时, 最初重原子的像衬比重原子的高, 随着厚度的增加, 轻原子像衬上升的速度比重原子快, 二者的像衬逐渐靠近, 然后轻原子的像衬反比重原子的高. 这种轻、重不同原子像衬随样品厚度的变化特征提供了一种识别原子种类的方法. 2007年首次用这种方法识别出 $3C$ -SiC中Si与C原子<sup>[27]</sup>, 后来曾多次应用于有类似“哑铃”结构的二元半导体化合物中<sup>[27-29,31]</sup>. 沿解卷像图4(b)矩形内的水平中线扫描, 记录下16对“哑铃”的灰度值, 如图4(c)所示, 横坐标表示像素, 纵坐标表示灰度值. 由图4(c)所示的灰度曲线可知, 第1对到第3对“哑铃”左边的灰度值高于右边, 从第4对“哑铃”开始, 灰度值反转, 一直持续到第16对“哑铃”. 因此可以判断, 图4(b)“哑铃”的左边应代表Si原子, 右边为C原子. 分析图2左侧的晶粒得到同样的结果. 考虑到

图4(a)相对于图2的P区逆时针旋转了90°,于是图2晶界两侧晶粒的每一对“哑铃”中均为Si原子在上,C原子在下.

## 5 晶界附近位错的解卷像和核心结构

图2中A区和B区包含的缺陷是不同位错组合而成的复合位错,两个区的外围接近完整,两个复合位错的伯格斯矢量均等于 $\frac{a}{2}[110]$ .尽管从图2能直接分析出位错的一些特征,但如前述,图2不是结构像,白点和黑点未必代表原子,为了解原子分辨率的位错核心结构,需要对A区和B区分别进行解卷处理,并对解卷像进行分析.关于像解卷的细节可参考文献[29],此处不赘述.以下仅对A区的解卷处理描述得稍详细些.

### 5.1 A区复合位错的核心结构

首先,对图2中的A区进行傅里叶滤波,在倒空间采用椭圆形滤波窗口[36],使衍射线伸长及衍射斑弥散的缺陷信息尽量包含在滤波窗口中.图5(a)是A区滤波后的放大像.对A区的滤波像(图5(a))做解卷处理,去除CTF调制.与完整区的解卷(见第4节)类似,在 $-43\text{ nm}$ 与 $-51\text{ nm}$ 之间,以 $0.5\text{ nm}$ 的步长设置了17个尝试离焦量,用它们逐一对A区做解卷处理,得到17个尝试解卷像,其中对应于离焦量 $-46\text{ nm}$ 的解卷像质量最好,示于图5(b).解卷像的衬度与滤波像的差别很大.在滤波像和原始的实验像上,像衬度显示为黑底白点.此处的解卷像显示为白底黑(灰)点,完全符合像解卷的原理,即当球差系数大于零时,原子在解卷像上显示为黑.于是,图5(b)中每一个伸长的黑(灰)色双点,代表一对Si和C原子组成的“哑铃”.再根据第4节对图4的分析结果,可知图5(b)中, Si原子位于伸长黑点的上端, C原子位于下端,于是能够清楚辨认位错核心处的原子位置.据此构建了位错核心结构的模型,并叠加在解卷像上,示于图5(c).从模型中可见两个 $60^\circ$ 全位错,分别标记为1和2.位错1在(111)滑移面上,伯格斯矢量 $\mathbf{b}_1$ 为 $\frac{a}{2}[10\bar{1}]$ ,位错2在( $\bar{1}\bar{1}1$ )滑移面上,伯格斯矢量 $\mathbf{b}_2$ 为 $\frac{a}{2}[011]$ .图5中的箭头指向用椭圆标记的{111}截断原子面终端.

为进一步确认从解卷像(图5(b))所推演出缺陷结构模型的正确性,从图5(c)所示的结构模型

出发,构建一个大单胞,运用多片法[37]计算加速电压为 $200\text{ kV}$ , $C_s$ 为 $0.5\text{ mm}$ 时,不同厚度(片厚 $0.308\text{ mm}$ )、不同离焦量的模拟像,逐一与实验滤波像相比较.当离焦量为 $-45\text{ nm}$ ,厚度为 $4.312\text{ nm}$ 时,模拟像(图5(d))与实验像(图5(a))的符合程度很高.

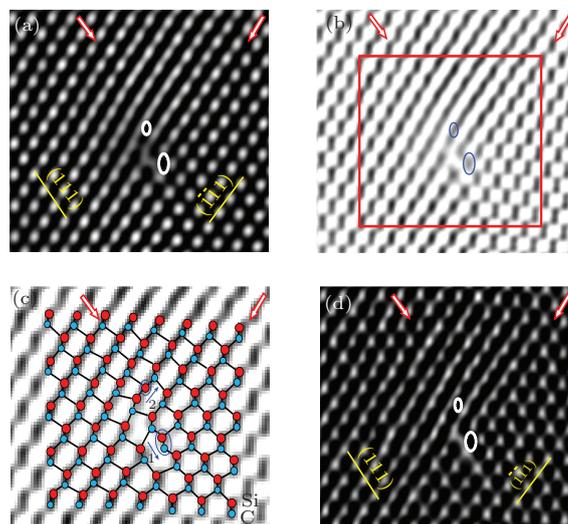


图5 (网刊彩色) (a) A区滤波后的放大像; (b) 对应于(a)的解卷像; (c) (b)中矩形区的放大像与原子结构模型的叠加图; (d) 模拟像; 箭头指向用椭圆标记的{111}截断原子面终端

### 5.2 B区复合位错的核心结构

B区所包含缺陷的图像处理过程与A区完全相同.图6(a)为B区滤波后的放大像.图6(b)为对应于图6(a)的解卷像,对应的离焦量为 $-46\text{ nm}$ .与图5(b)相似,图6(b)亦显示为白底黑(灰)点,每一对Si-C“哑铃”均呈现为伸长的双点,仍是Si原子在上, C原子在下.于是,可直接从像上构造缺陷核心结构的模型.图6(c)是图6(b)中矩形框内的放大像,像上叠加了缺陷核心的结构模型.该缺陷是由两个 $60^\circ$ 全位错组合而成的复合位错,分别标记为1和2.位错1在(111)滑移面上,伯格斯矢量 $\mathbf{b}_1$ 为 $\frac{a}{2}[10\bar{1}]$ ,位错2则在( $\bar{1}\bar{1}1$ )滑移面上,伯格斯矢量 $\mathbf{b}_2$ 为 $\frac{a}{2}[011]$ .箭头指向用椭圆标记的{111}截断原子面终端,均为 $60^\circ$ 全位错核心处的一对Si-C原子.根据解卷像所得缺陷结构模型,搭建大单胞,计算一系列不同厚度、不同离焦量的模拟像.与实验滤波像符合得最好的模拟像示于图6(d),该模拟像的离焦量为 $-45\text{ nm}$ 、厚度为 $5.240\text{ nm}$ .进一步确认了缺陷结构模型的正确性.

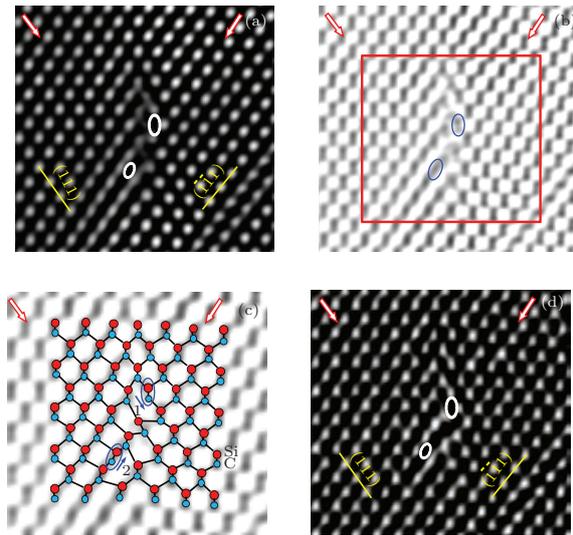


图6 (网刊彩色) (a) B区滤波后的放大像; (b) 对应于(a)的解卷像; (c) (b)中矩形区的放大像与原子结构模型的叠加图; (d)模拟像; 箭头指向用椭圆标记的{111}截断原子面终端

## 6 讨论与结论

在3C-SiC/(001)Si外延生长的初始阶段, 岛屿状的3C-SiC晶核虽然在取向上与Si衬底保持一致, 但因二者晶格失配较大, 分散的晶核与衬底界面处的应力状况不尽相同. 设想图2左侧的晶粒成核时, 平行于衬底的二维3C-SiC晶胞尺寸与Si衬底基本保持一致, 则垂直于衬底方向的周期势必缩短. 若图2右侧的晶粒成核时, 保持其原有晶胞的尺寸, 与Si衬底之间应力通过失配位错予以释放, 当左右两个晶核长大相连时, 二者沿垂直于衬底界面的晶格周期需调整至等值. 图2中A区的两个 $60^\circ$ 全位错各伴随着一个终止生长的{111}原子面, 能使平行于衬底的二维晶格膨胀, 从而缩短沿垂直于衬底方向的周期. 同理B区的两个 $60^\circ$ 全位错亦能起到同样的作用. 与此同时, 远离晶粒间界处的晶格照原样生长. 于是, 图2右侧的(001)晶面不处于水平位置, 与左侧晶粒的(001)晶面相交, 夹角约为 $4^\circ$ , 形成约 $4^\circ$ 的小角晶界. 综上所述, 小角晶界源自3C-SiC与Si之间的晶格失配和岛状生长, 而晶界附近的复合位错则促成了小角晶界的形成.

本文采用分辨本领仅为0.2 nm的200 kV中等电压LaB<sub>6</sub>电镜结合像解卷处理技术及一系列相关的像分析方法, 研究了3C-SiC薄膜小角晶界附近的两个复合位错的核心原子组态. 首先, 通过像解卷处理技术, 将本不直接反映晶体投影结构的高分辨像转换为结构像, 并用振幅校正方法提高像分辨

率. 随后, 按照赝弱相位物体近似像衬理论, 分析完整区高分辨像衬度随样品厚度以及原子序数的变化关系, 辨认出原子间距仅为0.109 nm的Si原子与C原子. 在此基础上, 得出两个复合位错原子分辨率的核心结构. 二者分别由两个 $60^\circ$ 全位错组合而成, 而且每个复合位错均伴随有一对终止生长的原子面((111)面和 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 面), 这些结构对阐明3C-SiC小角晶界的根源和形成过程是必要的, 也是充分的.

## 参考文献

- [1] Nishino S, Powell J A, Will H A 1983 *Appl. Phys. Lett.* **42** 460
- [2] Davis R F, Kelner G, Shur M, Palmour J W, Edmond J A 1991 *Proc. IEEE* **79** 677
- [3] Inamoto S, Yamasaki J, Tamaki H, Tanaka N 2011 *Philos. Mag. Lett.* **91** 632
- [4] Yamasaki J, Inamoto S, Nomura Y, Tamaki H, Tanaka N 2012 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45** 494002
- [5] Cowley J M, Iijima S 1972 *Z. Naturforsch. A* **27** 445
- [6] Uyeda N, Kobayash T, Suito E, Harada Y, Watanabe M 1972 *J. Appl. Phys.* **43** 5181
- [7] Izui K, Furuno S, Nishida T, Otsu H 1978-79 *Chem. Scr.* **14** 99
- [8] Amelinckx S 1978-79 *Chem. Scr.* **14** 197
- [9] Shen X, Cheng D, Zhao H F, Yao Y, Liu X Y, Yu R C 2013 *Chin. Phys. B* **22** 116102
- [10] Ichinose H 2000 *Sci. Technol. Adv. Mat.* **1** 11
- [11] Chen J H, Zandbergen H W, van Dyck D 2004 *Ultramicroscopy* **98** 81
- [12] Heuer A H, Jia C L, Lagerlöf K P D 2010 *Science* **330** 1227
- [13] Schiske P 1968 *Proceedings of the 4th European Regional Conference on Electron Microscopy Rome, Italy, September 1-7, 1968* p145
- [14] Kirkland E J 1984 *Ultramicroscopy* **15** 151
- [15] Saxton W O 1986 *Proceedings of the 11th International Congress on Electron Microscopy Kyoto, Japan, August 31-September 7, 1986* p26
- [16] Thust A, Coene W M J, Op de Beeck M, van Dyck D 1996 *Ultramicroscopy* **64** 211
- [17] Hsieh W K, Chen F R, Kai J J, Kirkland A I 2004 *Ultramicroscopy* **98** 99
- [18] Li F H, Fan H F 1979 *Acta Phys. Sin.* **28** 276 (in Chinese) [李方华, 范海福 1979 物理学报 **28** 276]
- [19] Han F S, Fan H F, Li F H 1986 *Acta Crystallogr. A* **42** 353
- [20] Li F H 2005 *Sci. Technol. Adv. Mat.* **6** 755
- [21] Li F H 2010 *Phys. Stat. Sol. A* **207** 2639
- [22] He W Z, Li F H, Chen H, Kawasaki K, Oikawa T 1997 *Ultramicroscopy* **70** 1
- [23] Shiojiri M, Kaito C, Sekimoto S, Nakamura N 1982 *Philos. Mag. A* **46** 495

- [24] Wang D, Li F H, Zou J 2000 *Ultramicroscopy* **85** 131
- [25] Wang D, Chen H, Li F H, Kawasaki K, Oikawa T 2002 *Ultramicroscopy* **93** 139
- [26] Wang D, Zou J, He W Z, Chen H, Li F H, Kawasaki K, Oikawa T 2004 *Ultramicroscopy* **98** 259
- [27] Tang C Y, Li F H, Wang R, Zou J, Zheng X H, Liang J W 2007 *Phys. Rev. B* **75** 184103
- [28] Wen C, Wang Y M, Wan W, Li F H, Liang J W, Zou J 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 073522
- [29] Wen C, Li F H, Zou J, Chen H 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1928 (in Chinese) [温才, 李方华, 邹进, 陈弘 2010 物理学报 **59** 1928]
- [30] Wan W, Tang C Y, Wang Y M, Li F H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4273 (in Chinese) [万威, 唐春艳, 王玉梅, 李方华 2005 物理学报 **54** 4273]
- [31] Cui Y X, Wang Y M, Wen C, Ge B H, Li F H, Chen Y, Chen H 2013 *Ultramicroscopy* **126** 77
- [32] Li F H 2009 *Electron Crystallography and Image Processing* (Shanghai: Shanghai Scientific and Technical Publishers) pp259–386 (in Chinese) [李方华 2009 电子晶体学与图像处理 (上海: 上海科学技术出版社) 第 259—386 页]
- [33] Thon F 1966 *Z. Naturforsch. A* **21** 476
- [34] Li F H, Wang D, He W Z, Jiang H 2000 *J. Electron Microsc.* **49** 17
- [35] Li F H, Tang D 1985 *Acta Cryst.* **A41** 376
- [36] Tang C Y, Li F H 2005 *J. Electron Microsc.* **54** 445
- [37] Cowley J M, Moodie A F 1957 *Acta Cryst.* **10** 609

## Atomic configurations of dislocation cores in a small-angle grain boundary of 3C-SiC film\*

Cui Yan-Xiang Wang Yu-Mei Li Fang-Hua<sup>†</sup>

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

( Received 22 September 2014; revised manuscript received 16 October 2014 )

### Abstract

[1 $\bar{1}$ 0] images are taken for 3C-SiC/(001)Si hetero epitaxial films containing small-angle grain boundaries by using a 200 kV LaB<sub>6</sub> filament high-resolution transmission electron microscope. Deconvolution processing is performed to transform the experimental images which do not represent intuitively the projected crystal structure into structure images. First, Si and C atomic columns with a distance of 0.109 nm are resolved in a perfect structure image region, and then recognized from each other by analyzing the image contrast change with sample thickness based on the pseudo-weak phase object approximation. Subsequently, two complex dislocation cores located in the vicinity of small-angle grain boundaries are obtained at an atomic level, and the atomic structure models are constructed and confirmed by matching the experimental images with the simulated ones. Hence, the atomic configurations of dislocation cores are derived from only a single experimental image with the average structure of perfect crystal known in advance. The formation of small-angle grain boundaries in 3C-SiC/Si with the occurrence of complex dislocations in their vicinity is discussed.

**Keywords:** image deconvolution, low-angle grain boundary, dislocation core structure, 3C-SiC

**PACS:** 68.37.Og, 61.72.Ff, 42.30.Va

**DOI:** 10.7498/aps.64.046801

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11474329).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: lifh@aphy.iphy.ac.cn