

## Модель роста nanoостровков кремния на сапфире

© Н.О. Кривулин<sup>¶</sup>, Д.А. Павлов, П.А. Шиляев

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,  
603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 22 апреля 2013 г. Принята к печати 30 апреля 2013 г.)

Уточняется модель роста nanoостровков кремния на сапфире в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии. Показано, что рост островков кремния происходит за счет диффузии материала из смачивающего слоя, при этом рост за счет прямого попадания атомов вклада практически не дает.

Нанокристаллический кремний на сапфире — это одна из множества структурных модификаций кремния, в которой благодаря квантово-размерным ограничениям могут проявляться свойства, не характерные для этого непрямозонного полупроводника. Существует несколько способов формирования нанокристаллов. Наиболее распространенный метод получения нанокристаллов кремния, в которых проявляются эффекты квантования спектра электронов, заключается в формировании нанокристаллов путем имплантации атомов Si в диэлектрическую матрицу и дальнейшего отжига [1]. Это позволяет создавать эффективную излучательную систему [2,3]. Другой метод заключается в формировании наноразмерных кластеров непосредственно в процессе роста слоя. В основе лежит процесс кристаллизации по механизму роста Странски–Крастанова. В настоящее время хорошо изучена методика получения массива квантовых точек (КТ) в гетеросистеме германий–кремний методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) [4]. Размеры КТ в таких системах сравнительно велики и составляют от 10 нм и выше, тогда как их поверхностная плотность находится на уровне  $10^9$ – $10^{11}$  см<sup>-2</sup> [5].

Ранее нами была показана возможность формирования нанокристаллов кремния на поверхности сапфира методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) [6]. При этом максимальная плотность островков достигает  $10^{11}$  см<sup>-2</sup>, что сравнимо с результатами, полученными в гетеросистеме германий–кремний. В данной работе обсуждается механизм роста островков в гетеросистеме кремний–сапфир. Данные просвечивающей электронной микроскопии поперечного среза nanoостровков кремния на сапфире дают основания предполагать, что рост в гетеросистеме кремний–сапфир происходит по механизму Странски–Крастанова [7]. В работе [8] подробно описывается механизм роста островков при малой степени заполнения с учетом присутствия смачивающего слоя. В этом случае не учитывается прямое попадание атомов в островок из молекулярного пучка. Считается, что рост островков происходит в результате диффузии атомов с поверхности. Тогда возможны две ситуации: рост островков из пересыщенного пара адатомов на поверхности смачивающего слоя; рост островков за счет потребления материала непосредственно из смачивающего слоя.

В первом случае толщина слоя будет оставаться постоянной, а во втором будет уменьшаться в процес-

се роста островков. Данных по структуре кремний–сапфире пока недостаточно, чтобы проследить динамику толщины смачивающего слоя. В настоящее время хорошо исследована гетеросистема кремний–германий. Как было показано, здесь рост островков на начальной стадии МЛЭ идет за счет потребления атомов из смачивающего слоя [8]. То же самое наблюдается и в системе GaAs–InGaAs. В дальнейшем будем предполагать, что и в системе кремний–сапфир рост идет по такому же механизму, а движение атомов по поверхности смачивающего слоя приводит лишь к росту самого смачивающего слоя. В работе [8] рассматривается подобная модель, согласно которой атомы под действием упругих напряжений диффундируют в островок из смачивающего слоя. Для нахождения скорости роста островков критического размера  $di/dt$  ( $i$  — количество атомов в островке,  $t$  — время) в этом случае используется формула

$$\frac{di}{dt} = \frac{D}{l_0^2} \frac{\nabla\mu}{k_B T} P, \quad (1)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии атомов смачивающего слоя, вызванной разностью упругих напряжений в смачивающем слое и в островке,  $\nabla\mu$  — градиент химического потенциала на границе островка,  $P$  — периметр островка,  $1/l_0^2$  — концентрация адсорбционных мест на поверхности,  $T$  — температура,  $k_B$  — постоянная Больцмана.

В случае гетеросистемы кремний–сапфир островки кремния очень близко находятся друг от друга. При размере островков 5–7 нм расстояние между ними лежит в пределах 5–10 нм. В этом случае может быть существенным вклад прямого попадания атомов в рост островков. Мы попытались учесть этот вклад. Скорость роста в таком случае выражается следующим образом:

$$\frac{di}{dt} = SJ, \quad (2)$$

где  $S$  — площадь основания островка,  $J$  — плотность потока атомов осаждаемого вещества. При скорости роста  $2 \text{ \AA/s}$  для кремния (100)  $J \approx 10 \text{ нм}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ .

Удобно рассчитывать не количество атомов в островке, а размер островка, который можно наблюдать в экспериментах с использованием методов атомно-силовой микроскопии (АСМ) или просвечивающей электронной микроскопии. Поэтому заменим в формулах (1) и (2)

<sup>¶</sup> E-mail: krivulin@phys.unn.ru

количество атомов в островке на латеральный размер островка. На рис. 1 приведен АСМ-снимок типичного островка кремния на сапфире (а) и профили сечений в двух перпендикулярных направлениях (b).

Островок хорошо аппроксимируется сегментом сферы радиусом  $R$  (рис. 1, b), выступающей над поверхностью на высоту  $h$ . Исходя из того что один атом кремния занимает объем  $V_s = 0.036 \text{ нм}^3$ , запишем объем островка как  $V = \pi h^2(3R - h)/3 = iV_s$ . Периметр островка  $P = \pi l$ , площадь основания  $S = \pi l^2/4$ , где  $l$  — латеральный размер (диаметр) островка. Далее выразим  $R$  и  $h$  через  $l$ :  $R = h/2 + l^2/8h$ . В процессе роста отношение  $l/h$  изменяется, однако на самых ранних стадиях роста можно считать, что  $l = 3h$  тогда  $R = 0.54l$ . В итоге получаем выражение для объема  $V = 0.047\pi l^3 = iV_s$ , откуда выражаем количество атомов в островке:  $i = 0.047\pi l^3/V_s$ . Подставляем все это в формулы (1), (2) и интегрируем.

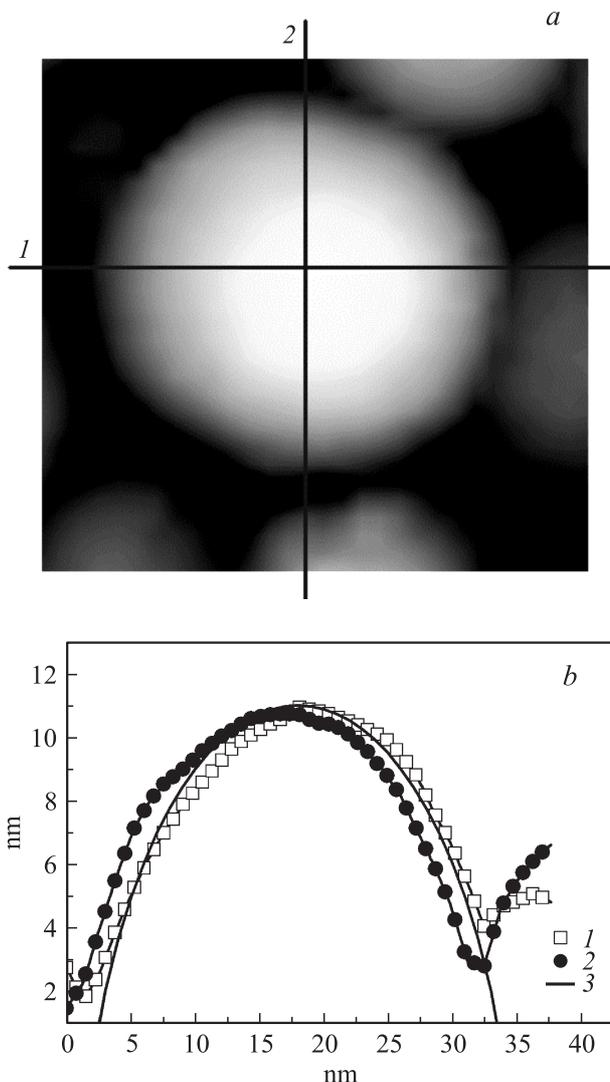


Рис. 1. АСМ-изображение типичного наноструктурированного островка кремния на сапфире (а) и профили сечений данного островка (1, 2) совместно с сечением аппроксимирующей сферы радиусом  $R = 17 \text{ нм}$  (3) (b).

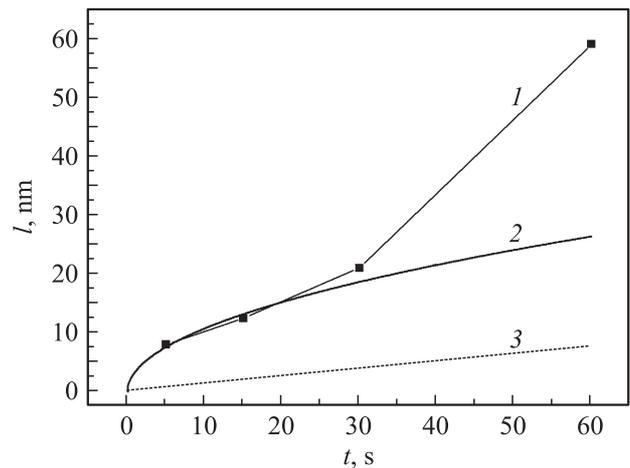


Рис. 2. Зависимость латеральных размеров островков от времени роста при температуре роста  $650^\circ\text{C}$ , скорости роста  $2 \text{ \AA}/\text{с}$ : 1 — эксперимент, 2 — рост за счет смачивающего слоя, 3 — рост за счет прямого попадания атомов.

В итоге получаем зависимость скорости роста латеральных размеров островков от времени:

$$l = \sqrt{5.13V_s \frac{D}{l_0^2} \frac{\nabla\mu}{k_B T} t + L^2} \quad (3)$$

при механизме роста островка за счет поступления материала из смачивающего слоя;

$$l = 0.64JV_s t + L \quad (4)$$

при росте островка за счет прямого попадания атомов. Здесь  $L$  — размер критического зародыша. Так как  $L$  очень мало (как правило, несколько атомов), в данных выражениях им можно пренебречь. Проведем теперь моделирование для температуры роста  $650^\circ\text{C}$ . Для системы кремний–сапфир неизвестны величины  $D$  и  $\nabla\mu$ , однако в конечном счете все неизвестные величины можно свести к одной; в этом случае выражение для латерального размера островка будет вычисляться по следующей формуле:  $l = A\sqrt{t}$ . Коэффициент  $A$  будем подбирать экспериментально. Подставляя в выражение (4) нужные значения, получим выражения для размера островка при росте за счет прямого попадания  $l = 0.128t$ .

На рис. 2 представлены зависимости латеральных размеров  $X, Y$  островков от времени роста. На начальных этапах роста (при времени роста менее 30 с) наблюдается корреляция экспериментальных данных и результатов моделирования. Наилучшее согласие экспериментальных результатов и результатов моделирования наблюдалось при значении коэффициента  $A = 3.8$ . При этом, как видно, рост за счет прямого попадания атомов практически не дает вклада.

При времени осаждения  $> 30 \text{ с}$  начинается сильное расхождение экспериментальных результатов и результатов моделирования. Реальные размеры островков значительно больше расчетных, причем расхождение растет

при увеличении времени осаждения. Данный факт связан с тем, что в представленной модели не учитывается коалесценция островков, в то время как она наблюдается даже на самых ранних стадиях МЛЭ. При коалесценции островки объединяются и суммарный размер резко увеличивается.

В целом использованная модель адекватно описывает рост наноостровков кремния на сапфире в процессе молекулярно-лучевого осаждения и подтверждает предположение о том, что рост в системе кремний–сапфир описывается моделью Странски–Крастанова.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 12-02-31686).

## Список литературы

- [1] P. Bettotti et al. *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**, 8253 (2002).
- [2] S. Yanagiya, M. Ishida. *J. Electron. Mater.*, **28** (5), 496 (1999).
- [3] Y. Zhu, P.P. Ong. *Surf. Rev. Lett.*, **8** (5), 559 (2001).
- [4] О.П. Пчеляков, Ю.Б. Болховитянов, А.В. Двуреченский, Л.В. Соколов, А.И. Никифоров, А.И. Якимов, Б. Фойхтлендер. *ФТП*, **34** (11), 1281 (2000).
- [5] Н.Н. Герасименко, Ю.Н. Пархоменко. *Кремний — материал нанoeлектроники* (М., Техносфера, 2007).
- [6] Д.А. Павлов, П.А. Шилияев, Е.В. Коротков, Н.О. Кривулин. *Письма ЖТФ*, **36** (12), 15 (2010).
- [7] Д.А. Павлов, П.А. Шилияев, Е.В. Коротков, Н.О. Кривулин, А.И. Бобров. *Изв. РАН. Сер. физ.*, **76** (9), 1115 (2012).
- [8] В.Г. Дубровский. *Теоретические основы технологии полупроводниковых наноструктур* (СПб., 2006).

Редактор Л.В. Шаронова

## Growth model of silicon nanoislands on sapphire

*N.O. Krivulin, D.A. Pavlov, P.A. Shilyaev*

Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,  
603950 Nizhny Novgorod, Russia

**Abstract** A model of the molecular beam epitaxy of nanodimensional silicon islands on sapphire has been proposed. It was shown that the growth of silicon islands was determined by diffusion of material from the wetting layer. The growth due to direct hits of atoms was almost negligible.