

06

## Критерий перехода когерентных нанокластеров Ge на Si от пирамидальной к куполообразной форме

© К.Л. Сафонов, Ю.В. Трушин

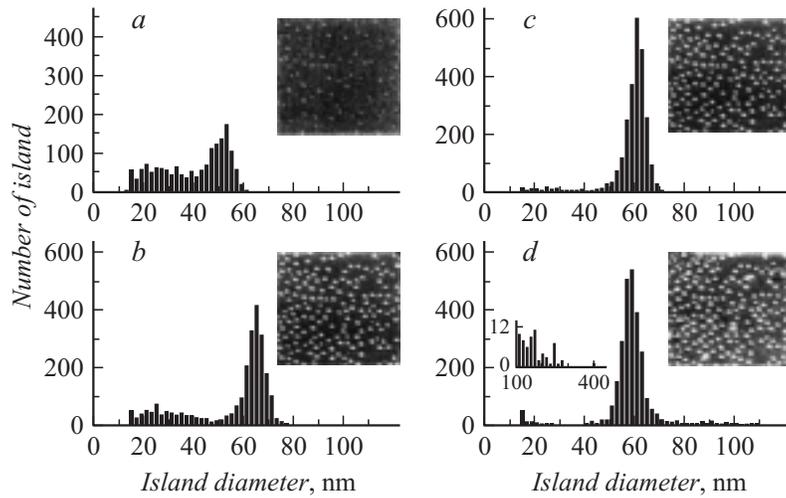
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет  
Санкт-Петербургский физико-технологический научно-образовательный  
центр РАН  
E-mail: trushin@edu.ioffe.ru

Поступило в Редакцию 24 апреля 2007 г.

Предложен физический критерий изменения равновесной формы упругонапряженных нанокластеров Ge, растущих на поверхности подложки кремния в условиях молекулярно-пучковой эпитаксии. Сделана оценка критического размера пирамидальных кластеров, проведено сравнение с доступными в литературе экспериментальными данными.

PACS: 81.07.-b, 81.07.Ta, 81.10.Aj, 81.15.Ni, 82.20.Wt

Полупроводниковые гетероструктуры на основе квантовых точек широко применяются в современной опто- и микроэлектронике [1]. В качестве квантовых точек часто используются выращенные методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) когерентные нанокластеры. Для создания устройств с оптимальными рабочими характеристиками необходима технология получения однородных по размеру упорядоченных массивов нанокластеров, а также возможность управлять структурными параметрами (размером и плотностью) выращенных кластеров за счет надлежащего выбора условий роста: потока и длительности осаждения вещества, температуры подложки и др. Экспериментальные исследования [2–4] свидетельствуют о том, что при определенных условиях роста происходит изменение равновесной формы нанокластеров: переход от пирамидальной формы (pyramids, huts) к куполообразной (domes). При этом распределение нанокластеров по размерам принимает существенно неоднородный, бимодальный вид (рис. 1), что значительно снижает пригодность структуры для создания приборов с нужными характеристиками. К настоящему времени условия роста,



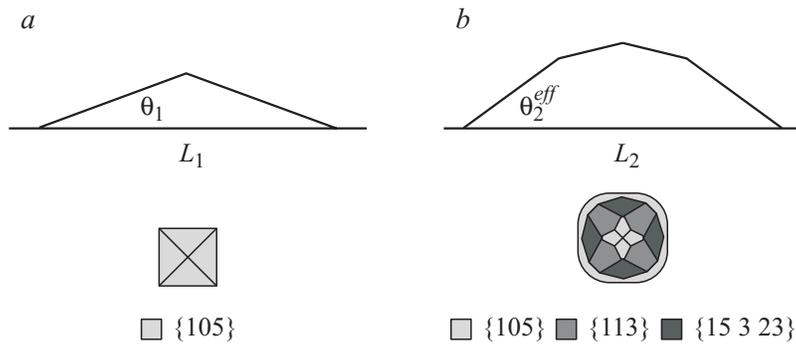
**Рис. 1.** Экспериментальные данные о распределении нанокластеров Ge на Si по размеру основания [4].

определяющие нежелательное изменение равновесной формы нанокластеров, не определены. Установив физический критерий изменения формы, возможно будет выработать рекомендации по выбору технологических условий роста, при которых переход не будет происходить.

На рис. 2 схематично представлены кластеры пирамидальной и куполообразной формы соответственно. Пирамидальный кластер имеет 4 грани типа  $\{105\}$ , тогда как куполообразный — 8 граней типа  $\{15\ 3\ 23\}$ , 4 грани типа  $\{113\}$  и 4 грани типа  $\{105\}$  [5]. Как видно из рис. 2, куполообразный кластер имеет большую высоту и угол наклона граней, чем пирамидальный кластер, состоящий из такого же числа частиц, а также меньшую площадь основания и латеральный размер.

Энергию кластера, состоящего из  $n$  частиц, имеющего пирамидальную ( $k = 1$ ) или куполообразную ( $k = 2$ ) форму, можно представить в виде суммы поверхностной и объемной составляющих:

$$E_k(n) = E_k^{surf}(n) + E_k^{vol}(n). \quad (1)$$



**Рис. 2.** Схематичное изображение кластеров пирамидальной (а) и куполообразной (b) формы [5].

Поверхностная составляющая энергии кластера может быть записана в виде

$$E_k^{surf}(n) = \sum_i \gamma_i S_i(n), \quad (2)$$

где  $\gamma_i$  и  $S_i(n)$  — плотность поверхностной энергии и площадь  $i$ -той грани соответственно, а суммирование ведется по всем граням  $i$ -той или иной формы кластера.

Поверхностная энергия пирамидального кластера ( $k = 1$ ) из (2) имеет вид

$$E_1^{surf}(n) \approx 4\gamma_{\{105\}} S_{\{105\}}(n). \quad (3)$$

Исходя из геометрических соотношений, имеем

$$S_{\{105\}}(n) = \frac{1}{4} \frac{L_1^2(n)}{4 \cos \theta_1}, \quad (4)$$

где

$$L_1(n) = \left( \frac{6\Omega}{\text{tg } \theta_1} n \right)^{1/3} \quad (5)$$

— длина ребра основания пирамидального кластера,  $\theta_1$  — угол наклона боковой грани кластера к плоскости его основания (см. рис. 2, а),  $\Omega$  — атомный объем Ge.

Поверхностную энергию куполообразного кластера ( $k = 2$ ) из (2) можно записать как

$$E_2^{surf}(n) = 8\gamma_{\{15323\}}S_{\{15323\}}(n) + 4\gamma_{\{113\}}S_{\{113\}}(n) + 4\gamma_{\{105\}}S_{\{105\}}(n). \quad (6)$$

В настоящее время значение плотности поверхностной энергии определено только для граней типа  $\{105\}$ :  $\gamma_{\{105\}} = 8 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$  [6]. Поэтому оценим значение (6) по аналогии с (3) как

$$E_2^{surf}(n) \approx \gamma^{eff} S_{\Sigma}(n), \quad (7)$$

где  $\gamma^{eff}$  — варьируемое значение эффективной плотности поверхностной энергии,  $S_{\Sigma}(n)$  — полная площадь поверхности кластера. Ввиду высокой сложности структуры поверхности куполообразной формы точное выражение для полной площади такого кластера записать затруднительно. Поэтому воспользуемся оценкой для  $S_{\Sigma}(n)$  по аналогии с (4):

$$S_{\Sigma}(n) \approx \frac{L_2^2(n)}{\cos \theta_2^{eff}}, \quad (8)$$

где

$$L_2(n) = \left( \frac{6\Omega}{\text{tg} \theta_2^{eff}} n \right)^{1/3} \quad (9)$$

— эффективная длина ребра основания куполообразного кластера, а  $\theta_2^{eff}$  — варьируемый эффективный угол наклона его боковой грани.

Под объемной составляющей энергии кластера будем понимать упругую энергию, связанную с возникающими из-за несоответствия постоянных решетки Ge и Si внутренними напряжениями (см., например, [7]). Вследствие неоднородного распределения напряжений в кластерах точное выражение для внутренней упругой энергии к настоящему времени не определено. Для получения оценки обозначим отношение упругой энергии кластера размером  $n$  с углом наклона боковой грани  $\theta_k$  к упругой энергии такого же числа частиц в смачивающем слое как

$$\Psi(\theta_k, n) \equiv \frac{E_k^{vol}(n)}{E_{wl}(n)}. \quad (10)$$

Согласно [8]:

$$E_{wl}(n) = \Omega \lambda \varepsilon_0^2 n, \quad (11)$$

где  $\lambda$  — модуль упругости Ge,  $\varepsilon_0 = (a_{\text{Ge}} - a_{\text{Si}})/a_{\text{Si}}$  — относительное рассогласование решеток Ge и Si.

Подставляя (3)–(5), (7)–(11) в (1), получим

$$E_k(n) = A_k n^{2/3} + B_k n, \quad (12)$$

где

$$A_1 = \frac{\gamma_{\{105\}}}{\cos \theta_1} \left( \frac{6\Omega}{\operatorname{tg} \theta_1} \right)^{2/3}, \quad A_2 = \frac{\gamma^{eff}}{\cos \theta_2^{eff}} \left( \frac{6\Omega}{\operatorname{tg} \theta_2^{eff}} \right)^{2/3},$$

$$B_k = \Omega \lambda \varepsilon_0^2 \Psi(\theta_k).$$

В работах [9,10] показано, что отношение (10) не зависит от  $n$  и падает с ростом  $\theta_k$  ( $k = 1, 2$ ), что соответствует более полной релаксации напряжений в кластере с увеличением его высоты при постоянном размере основания. При этом поскольку  $\theta_1 < \theta_2^{eff}$ , то  $B_1 > B_2$ . Учитывая более высокую сложность структуры поверхности куполообразных кластеров по сравнению с пирамидальными, предположим, что  $A_1 < A_2$ . Тогда появляется критический размер кластера  $n_{CR}$ , такой что энергии кластеров типа  $k = 1$  и  $k = 2$  оказываются одинаковыми:

$$E_1(n_{CR}) = E_2(n_{CR}). \quad (13)$$

В диапазоне  $n < n_{CR}$  энергетически более выгодной является пирамидальная, а при  $n > n_{CR}$  — куполообразная форма кластеров. По достижении растущим пирамидальным кластером размера  $n_{CR}$  происходит изменение его формы. Подставляя в (13) выражение (12), получим

$$n_{CR} = \left( \frac{A_2 - A_1}{B_1 - B_2} \right)^3. \quad (14)$$

Поскольку в работах [2–4] получены распределения кластеров по латеральным размерам, то, используя (5), запишем выражение для длины ребра основания пирамидального кластера критического размера:

$$L_{CR} = \left( \frac{6\Omega}{\operatorname{tg} \theta_1} n_{CR} \right)^{1/3}. \quad (15)$$

Анализ экспериментальных данных работ [2–4] свидетельствует о том, что значение  $L_{CR}$  расположено в диапазоне 40–60 nm. Используя известные из работ [2,5,8–10] значения входящих физических параметров:  $\varepsilon_0 = 4.8\%$ ,  $\theta_1 = 11.3^\circ$ ,  $\gamma_{\{105\}} = 8 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$ ,

$\Psi(\theta_1) = 0.72$ ,  $\Omega = 2.26 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3$ ,  $\lambda = 1.27 \cdot 10^7 \text{ N/cm}^2$ ,  $\Psi(\theta_2^{eff}) = 0.6$ , можно по (13)–(15) получить оценку для  $L_{CR} = 50 \text{ nm}$  при  $\gamma^{eff} = 1.2 \cdot 10^{-4} \text{ J/cm}^2$  и  $\theta_2^{eff} = 20^\circ$ .

Согласие полученной теоретической оценки для  $L_{CR}$  с экспериментальными данными из [2–4] подтверждает применимость предложенного критерия изменения равновесной формы кластеров, а также свидетельствует о том, что значения неизвестных физических параметров, использованных в расчетах, выбраны адекватно. Поэтому предложенный критерий может быть использован для более глубокого анализа экспериментальных данных и определения условий роста кластеров, исключающих нежелательное изменение их формы.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ № РИ-112.0/001/061, № 05-02-16658, № 05-02-16679 и № 07-02-01052-а, а также проекта СПбНЦ РАН 2007 г.

## Список литературы

- [1] Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А., Копьев П.С., Алфёров Ж.И., Бимберг Д. // ФТП. 1998. Т. 32. С. 385.
- [2] Medeiros-Ribeiro G., Bratkovski A.M., Kamins T.I., Ohlberg D.A.A., Williams R.S. // Science. 1998. V. 279. P. 353.
- [3] Rudd R.E., Briggs G.A.D., Sutton A.P., Medeiros-Ribeiro G., Williams R.S. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 90. P. 146 101.
- [4] Ross F.M., Tersoff J., Tromp R.M. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80. P. 984.
- [5] Costantini G., Rastelli A., Manzano C. et al. // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 85. P. 5673.
- [6] Migas D.B., Cereda S., Montalenti F., Miglio L. // Surf. Sci. 2004. V. 556. P. 121.
- [7] Трушин Ю.В. Радиационные процессы в многокомпонентных материалах. СПб.: ФТИ им. А.Ф. Иоффе, 2002. 384 с.
- [8] Osipov A.V., Schmitt F., Kukushkin S.A., Hess P. // Appl. Surf. Sci. 2002. V. 188. P. 156.
- [9] Ratsch C., Zangwill A. // Surf. Sci. 1993. V. 293. P. 123.
- [10] Johnson H.T., Freund L.B. // J. Appl. Phys. 1997. V. 81. P. 6081.