

Влияние эффекта поверхностной сегрегации на резкость гетерограниц в многослойных структурах Si(Ge)/Si_{1-x}Ge_x, выращиваемых из атомарных пучков в вакууме

© Н.Л. Ивина, Л.К. Орлов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603600 Нижний Новгород, Россия
Институт физики микроструктур Российской академии наук,
603600 Нижний Новгород, Россия

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 13 ноября 2000 г.)

Рассмотрены основные причины перемешивания состава в окрестности гетерограниц в гетеросистеме Si(Ge)/Si_{1-x}Ge_x, выращиваемой методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Предложенная модель объясняет все наблюдаемые в эксперименте особенности, в частности хорошо выраженную асимметрию профиля твердого раствора в слоях, и демонстрирует заметное расплывание профиля состава в окрестности границ даже в отсутствие эффекта поверхностной сегрегации. Показано, что в системе Ge/Si_{1-x}Ge_x поверхностная сегрегация может играть положительную роль, приводя к увеличению крутизны фронтов слоя Si_{1-x}Ge_x в окрестности границ.

Работа выполнена при поддержке Российских программ "Университеты России" (грант № 992849) и "Физика твердотельных наноструктур" (грант 7(00)П).

В последние годы в литературе широко обсуждаются свойства двумерных носителей заряда в транспортных каналах гетерокомпозиций, сформированных на базе элементарных полупроводников (Si, Ge) и их твердого раствора. Наблюдение многих уникальных физических явлений в этих системах, однако, часто сопряжено со значительными трудностями, обусловленными низким структурным совершенством как слоев, образующих транспортные каналы, так и границ, формирующих эти слои. Особенно остро данная проблема встает при исследовании композиций с супертонкими (1–3 nm) слоями и сверхрешеток Si–Ge (Si_mGe_n), где совершенство интерфейсов становится определяющим фактором, ограничивающим значения подвижности носителей заряда вдоль плоскости слоев структуры [1] и возможность наблюдения разнообразных тонких физических эффектов, предсказываемых теорией.

Если механизмы, приводящие к отклонению от планарности гетерограниц, поняты уже достаточно хорошо, то причины нарушения резкости интерфейсов и расплывание (перемешивание) состава твердого раствора в направлении, перпендикулярном плоскости слоя, в литературе практически не обсуждались. Причина этого связана прежде всего с трудностями прямого измерения ширины переходных областей в окрестности границ в гетерокомпозициях со слоями нанометровой толщины. В последнее время, однако, начали появляться полученные различными способами экспериментальные данные по ширине переходных областей, определяемой только объективными причинами (т.е. не связанными с несовершенством технологического процесса). При этом экспериментально были зафиксированы следующие особенности в характере распределения состава твердого раствора вблизи границ слоя Si_{1-x}Ge_x, встроенного в

матрицу кремния: 1) величина и характер размытия верхней и нижней границ слоя Si_{1-x}Ge_x неодинаковы [2,3]; 2) появление хвоста в распределении состава твердого раствора в окрестности верхней границы в общем случае может быть обусловлено несколькими причинами, что проявляется в различной скорости спада [3] концентрации одного из сортов атомов в переходном слое. В литературе появление переходной области чаще всего связывают с эффектом поверхностной сегрегации Ge, хотя данный эффект не является характерным для используемого чаще всего при выращивании структур интервала температур ниже 500°C.

В настоящей работе предпринята попытка сопоставить различные причины (в том числе связанные с сегрегацией [4]) расплывания концентрационного профиля атомов Si и Ge в окрестности гетерограниц, объяснить наблюдаемые особенности в распределении состава в тонком слое Si_{1-x}Ge_x путем теоретического анализа переходных процессов на поверхности растущего слоя и оценить связанную с переходными процессами эффективную величину расплывания интерфейсов в гетерокомпозициях Si/Si_{1-x}Ge_x, выращиваемых методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ).

Исследование причин и характера расплывания гетерограниц многослойной структуры Si/Si_{1-x}Ge_x, выращиваемой методом традиционной МЛЭ, проведем, анализируя нестационарные процессы на поверхности роста, описываемые системой кинетических уравнений для θ_i — безразмерных средних поверхностных концентраций атомов Si и Ge

$$d\theta_i/dt = (F_i/n_s)\theta_{fr} - (\nu_i + r_i)\theta_i. \quad (1)$$

Здесь F_i — плотность i -го атомарного потока, $i = 1, 2$ для Ge и Si соответственно, $\nu_{Ge(Si)}$ — частота десорбции, $r_{Ge(Si)}$ — частота кристаллизации атомов Ge(Si),

θ_{fr} — концентрация свободных поверхностных связей, $n_s = 6.78 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ — концентрация адсорбционных центров на поверхности роста.

Для адсорбированных атомов предполагается выполненным следующее условие:

$$\theta_{Si} + \theta_{Ge} + \theta_{fr} = 1. \quad (2)$$

Соотношения (1), (2) формируют общую систему уравнений для определения θ_i . Зная θ_i , легко вычислить скорость роста V_{gr} пленки и содержание Ge в эпитаксиальном слое

$$V_{gr} = (r_{Si}\theta_{Si} + r_{Ge}\theta_{Ge})n_s/n_0, \quad (3)$$

$$x = r_{Ge}\theta_{Ge}/(r_{Si}\theta_{Si} + r_{Ge}\theta_{Ge}). \quad (4)$$

Здесь $n_0 = 5.0 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ — объемная концентрация атомов в кристалле.

Рассмотрим особенности формирования концентрационного профиля слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, выращиваемого в матрице кремния (германия) методом МЛЭ. Кинетику поверхностных концентраций атомов Si и Ge при росте пленок из атомарных пучков кремния и германия будем изучать, анализируя дифференциальные уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами, следующие из системы уравнений (1):

$$(d\theta_{1,2}^2/dt^2) + \alpha(d\theta_{1,2}/dt) + \beta\theta_{1,2} + \gamma_{1,2} = 0, \quad (5)$$

где коэффициенты α , β и $\gamma_{1,2}$ равны

$$\alpha = \sum_{i=1,2} \alpha_i = \sum_{i=1,2} (F_i/n_s + \nu_i + r_i), \quad (5a)$$

$$\beta = \alpha_1\alpha_2 - F_1F_2/n_s^2, \quad (5b)$$

$$\gamma_{1,2} = (F_{1,2}/n_s)(F_{2,1}/n_s - \alpha_{2,1}). \quad (5c)$$

Рассмотрим случай постоянного потока атомов Si(Ge) и накладываемого на него в интервале времени $t = (t_0 - t_1)$ атомарного потока Ge(Si). Общее выражение для безразмерных поверхностных концентраций адатомов кремния и германия в зависимости от времени в этом случае имеет вид

$$\theta_i(t) = \theta'_{0i} + C_i^+ \exp(-k^+(t-t_0)) + C_i^- \exp(-k^-(t-t_0)), \quad (6)$$

где

$$C_1^+ = \{(F_{Ge}/n_s + \nu_{Ge} + r_{Ge} - k^-)\theta'_{01} - (F_{Ge}/n_s)(\theta_{02} - \theta'_{02})\}/(k^+ - k^-),$$

$$C_2^+ = (F_{Ge}/n_s + \nu_{Ge} + r_{Ge} - k^+) \times \{(F_{Ge}/n_s + \nu_{Ge} + r_{Ge} - k^-)\theta'_{01} - (F_{Ge}/n_s)(\theta_{02} - \theta'_{02})\}/(F_{Ge}/n_s)(k^- - k^+),$$

$$C_1^- = -\theta_{01} - C_1^+, \quad C_2^- = \theta_{02} - \theta'_{02} - C_2^+,$$

в окрестности левой (нижней) границы ($t = t_0$) и

$$\theta_i(t) = C_i + C_i^+ \exp(-k^+(t-t_1)) + C_i^- \exp(-k^-(t-t_1)), \quad (7)$$

где

$$C_1 = 0, \quad C_2 = \theta_{02}, \quad C_1^+ = 0, \quad C_1^- = \theta'_{01},$$

$$C_2^+ = \theta'_{02} - \theta_{02} - (F_{Si}/n_s)\theta'_{01}/(k^- - k^+),$$

$$C_2^- = (F_{Si}/n_s)\theta'_{01}/(k^- - k^+), \quad (8)$$

в окрестности правой (верхней) границы ($t = t_1$) импульса потока атомов германия (рис. 1). При вычислениях предполагалось, что времена роста слоев $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (Si) существенно превосходят времена установления релаксационных процессов в системе со стационарными значениями поверхностных концентраций θ_{0i} , равными

$$\theta_{01} = 0, \quad \theta_{02} = (F_{Si}/n_s)/(F_{Si}/n_s + \nu_{Si} + r_{Si})$$

в моменты времени $t < t_0$, $t \gg t_1$ и

$$\theta'_{0i} = (F_i/n_s)(\nu_i + r_i)/\{(F_{Ge}/n_s + \nu_{Ge} + r_{Ge}) \times (F_{Si}/n_s + \nu_{Si} + r_{Si}) - (F_{Ge}/n_s)(F_{Si}/n_s)\}$$

в моменты времени $t_0 \ll t < t_1$. Показатели степени в экспонентах, определяемые детерминантом однородного уравнения (5), для соответствующих интервалов времени ($t_0 < t < t_1$ ($F_1 \neq 0$) и $t > t_1$ ($F_1 = 0$)) равны

$$k^{+(-)} = \alpha/2 \pm (\alpha^2/4 - \beta)^{1/2}.$$

Наиболее простой вид показатель экспоненты имеет в случае равенства плотностей потоков атомов кремния и германия и совпадения частот десорбции и кристаллизации ($F_{Ge} = F_{Si} = F$, $\nu_{Ge} = \nu_{Si} = \nu$, $r_{Ge} = r_{Si} = r$). Выражения для концентрации атомов германия на поверхности пленки в этом случае имеют вид

$$\theta_1(t) = \theta'_{01} + C_1^+ \exp(-(\nu + r)(t - t_0)) \times [\exp(-(2F/n_s)(t - t_0)) + C_1^-/C_1^+],$$

$$C_1^+ = (1/2)\{\theta'_{01} - \theta_{02} - \theta'_{02}\},$$

$$C_1^- = (1/2)\{-3\theta'_{01} + \theta_{02} + \theta'_{02}\},$$

на нижней ($z > z_0$) границе слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ и

$$\theta_1(t) = \theta'_{01} \exp(-(\nu + r)(t - t_1))$$

на верхней ($z > z_1$) границе. Отсюда видно, что даже в отсутствие поверхностной сегрегации, обусловленной разной скоростью встраивания атомов кремния и германия в растущий слой, т. е. при $r_{Ge} = r_{Si}$, ширины областей расплывания состава в окрестности верхней и нижней границ слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ имеют разные значения (рис. 1), обеспечивая тем самым асимметрию профиля состава, а соответственно и потенциала в структуре. Здесь и далее

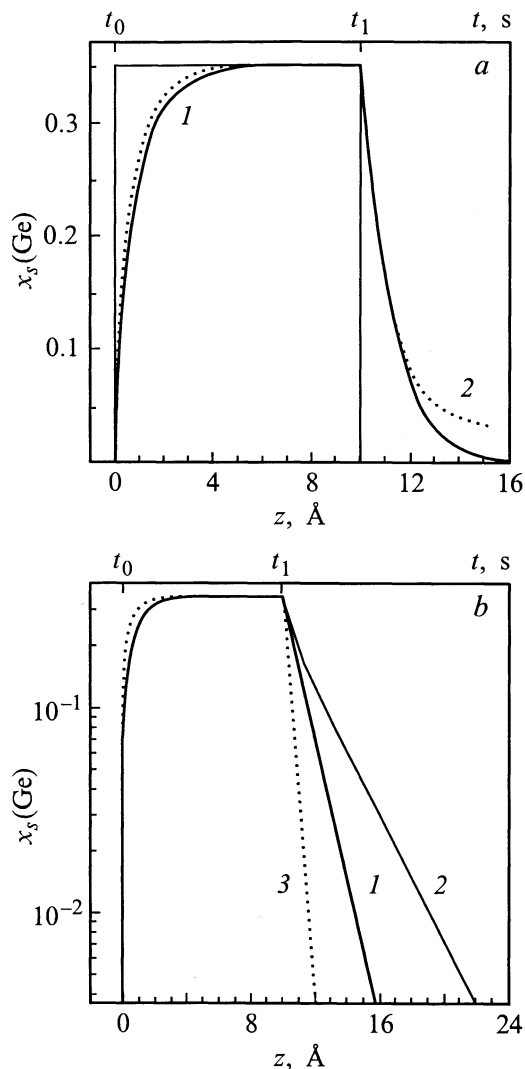


Рис. 1. Профиль распределения германия в слое $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0.35$), рассчитанный для прямоугольного импульса потока атомов Ge при $V_{\text{gr}} \approx 4 \text{ \AA/s}$; $\nu_{\text{Ge}} = \nu_{\text{Si}} = 0.01$, $r_{\text{Si}} = 3.1$ и разных отношениях коэффициентов встраивания атомов кремния и германия в решетку твердого раствора: $r_{\text{Ge}} = r_{\text{Si}}$ (*a, b*, кривые 1), $r_{\text{Ge}} = r_{\text{Si}}f(\theta_{\text{Ge}})$ (*a*, кривая 2), $r_{\text{Ge}} = 0.31r_{\text{Si}}$ (*b*, кривая 2), $3.1r_{\text{Si}}$ (*b*, кривая 3). Часть *b* демонстрирует экспоненциальный характер изменения профиля состава сплава в окрестности границы слоя.

при расчетах мы выбирали значения параметров, максимально приближенные к данным экспериментальной работы [2] и соответствующие росту пленок $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ с $x = 0.35$ со скоростью $\sim 4 \text{ \AA/s}$ при $T = 500^\circ\text{C}$. На начальной стадии нестационарного процесса ($t \geq t_{0,1}$) условия вхождения атомов Ge в растущий слой на верхней и нижней границах слоя не идентичны из-за разницы в плотности их поверхностных концентраций при $t \geq t_0$ и $t \geq t_1$. В первом случае идет накопление атомов за счет включения дополнительного потока атомов Ge (скорость процесса на начальном этапе пропорциональна $\exp[-(2F/n_s)(t - t_0)]$). Во втором случае,

поскольку отсутствует соответствующий поток атомов к подложке, имеет место только их релаксация, связанная с конечным временем встраивания в решетку кристалла адсорбированных атомов, остающихся на поверхности (спад концентрации атомов Ge при $t > (t - t_1)$ пропорционален $\exp[-(\nu + r)(t - t_1)]$). Именно в окрестности этой границы эффект сегрегации атомов Ge проявляется наиболее заметно.

Рассмотрим влияние эффекта сегрегации на размытие границ более подробно. Для системы Ge-Si сегрегационные явления, связанные с неравенством коэффициентов встраивания атомов кремния и германия в решетку кристалла, наиболее эффективно проявляются в интервале температур роста $600 < T < 800^\circ\text{C}$. Здесь отношение $r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}}$ может меняться в пределах от 10 до 100, что следует из рис. 2, где наряду с теоретическими кривыми, рассчитанными по простейшей формуле $x_s = f(x)$, связывающей поверхностную концентрацию атомов германия $x_s = \theta_{\text{Ge}}/(\theta_{\text{Ge}} + \theta_{\text{Si}})$ с их концентрацией в объеме сплава $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ $x = r_{\text{Ge}}\theta_{\text{Ge}}/(r_{\text{Ge}}\theta_{\text{Ge}} + r_{\text{Si}}\theta_{\text{Si}})$, приведены также экспериментальные данные (I), взятые для температуры роста $T_{\text{gr}} = 700^\circ\text{C}$ из работы [4]. Вне указанного интервала температур эффекты поверхностной сегрегации, согласно имеющимся экспериментальным данным, выражены обычно довольно слабо.

Влияние неравенства коэффициентов кристаллизации r_{Ge} и r_{Si} продемонстрировано на рис. 1, *b*, из которого видно, что для системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$ данный эффект ($r_{\text{Ge}} < r_{\text{Si}}$) приводит к увеличению размытия границы (кривая 2). Очевидно, что для менее распространенной системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ (в этом случае индекс 1 будет соответствовать Si, а индекс 2 — Ge) указанное условие ($r_{\text{Ge}} < r_{\text{Si}}$) будет приводить к обратному эффекту, а именно, к увеличению крутизны фронта распределения

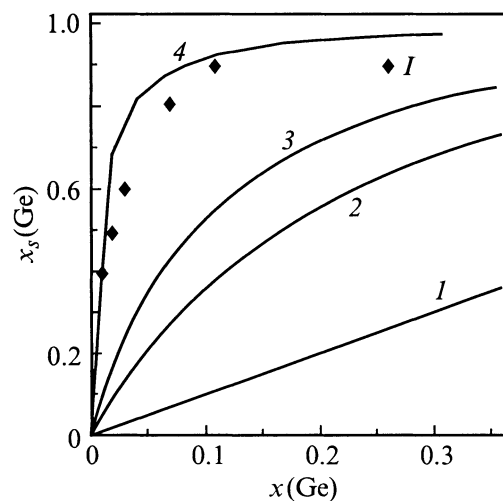


Рис. 2. Зависимость поверхностной концентрации атомов германия $x_s(\text{Ge})$ от их концентрации в объеме $x(\text{Ge})$ слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ при различных значениях $k = r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}}$. k : 1 — 1, 2 — 5, 3 — 10, 4 — 100. I — экспериментальные значения, взятые из работы [4] для $T_{\text{gr}} = 700^\circ\text{C}$.

состава на верхней гетерогранице, что формально соответствует кривой 3 на рис. 1, *b* (см. также рис. 3, *b, c*), вычисленной для интерфейса $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Si}$ при $r_{\text{Ge}}/r_{\text{Si}} > 1$. Для системы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x/\text{Ge}$ разница в коэффициентах кристаллизации оказывает положительный эффект, приводя к более резким профилям состава в окрестности гетерограницы.

На рис. 3, *a* в зависимости от скорости встраивания атомов в растущий слой в отсутствие эффекта поверхностной сегрегации, что соответствует условию $r_{\text{Ge}} = r_{\text{Si}}$, представлена (светлыми символами) эффективная величина расплывания верхней границы пленки, определяемая как расстояние $L1$, на котором концентрация одной из компонент (в рассматриваемом случае германия) спадает по величине на два порядка. Согласно расчетам, проведенным в [5], значение r_{Si} при заданном потоке атомов кремния может варьироваться в пределах нескольких порядков величины в зависимости от температуры роста и степени покрытия поверхности адсорбированными атомами. Величина r_{Si} тем больше, чем больше степень покрытия поверхности атомами Si и чем выше температура роста. Изменение r_{Si} на порядок при небольших значениях потоков атомов Si, согласно рис. 3, *a*, может уменьшить величину размытия границы в несколько раз. Другими словами, рост пленок при более высоких температурах (но в интервале, где эффекты сегрегации выражены слабо) может оказаться более предпочтительным. При высокой степени покрытия поверхности адсорбированными атомами этот эффект выражен гораздо слабее, однако возрастание уровня потоков не будет приводить к сильному увеличению степени размытия границ вследствие обратного эффекта, возникающего из-за одновременного возрастания величин r_{Si} и r_{Ge} .

Анализ кривых, приведенных на рис. 3, *a-c*, показывает, что для использованных в работе [2] условий эксперимента ширина объекта перемешивания состава на верхней границе $\sim 6 \text{ \AA}$ (I на рис. 3, *a-c*) достигается, если предположить отсутствие сегрегации в достаточно узкой области атомарных потоков, соответствующих чрезвычайно высокой степени покрытия поверхности адсорбированными атомами вещества ($\theta_{\text{Si}} \approx (0.7-0.9)n_s$). Для более низких уровней атомарных потоков, традиционно используемых в эксперименте и соответствующих покрытию поверхности на уровне $\theta_{\text{Si}} \approx (0.1-0.2)n_s$, измеренная в [2] ширина границ слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ не может быть объяснена только конечной скоростью встраивания атомов в растущий слой при равенстве коэффициентов r_{Si} и r_{Ge} . В этом случае необходимо предположить, что заметную роль в рассматриваемом интервале температур роста играют эффекты поверхностной сегрегации.

Влияние эффекта сегрегации, проявляющегося при $r_{\text{Ge}} < r_{\text{Si}}$, на ширину расплывания интерфейса продемонстрировано на рис. 3, *b, c*, из которого хорошо видно, что при заданной скорости роста (в данном случае $\sim 4 \text{ \AA/s}$) эффективная величина расплывания гетерограницы меняется в пределах нескольких ангстрем в зависимости от

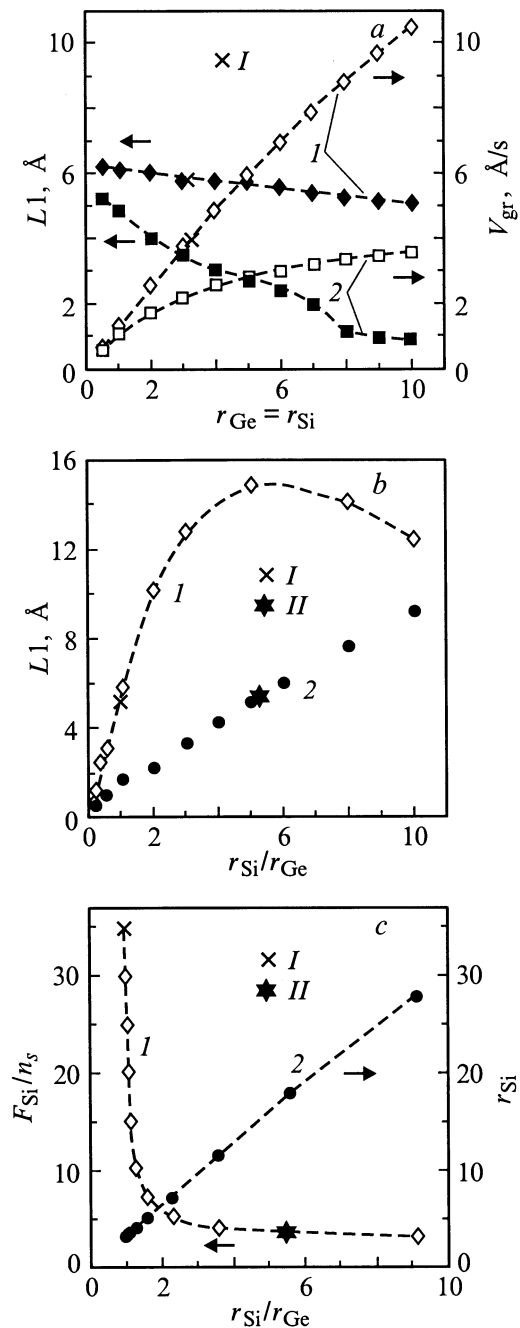


Рис. 3. Эффективная ширина ($L1$) расплывания состава в окрестности верхней границы слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x_{\text{max}} = 0.35$) и соответствующие этой характеристике значения ростовых (V_{gr}, r_{Si}) и технологических (F_{Si}) параметров как функции скорости встраивания атомов Ge в решетку твердого раствора. *a)* $L1(r_{\text{Ge}})$ (темные символы) и $V_{gr}(r_{\text{Ge}})$ (светлые символы) для $r_{\text{Ge}} = r_{\text{Si}}$, $F_{\text{Si}}/n_s = 35$ (I) и 3.5 (2); *b)* $L1(r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}})$ для $V_{gr} \approx 4 \text{ \AA/s}$; $F_{\text{Si}}/n_s = 35$, $r_{\text{Si}} = 3.1$ (I) и $F_{\text{Si}}/n_s = 3.5$, $r_{\text{Si}} = 18$ (2); *c)* кривые, соответствующие заданным значениям $L1 = 5.8 \text{ \AA}$ (I) и $V_{gr} \approx 4 \text{ \AA/s}$ (2) на плоскостях ($F_{\text{Si}}/n_s, r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}}$) и ($r_{\text{Si}}, r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}}$). Символы I ($r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}} = 1$) и II ($r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}} = 5.5$) на кривых соответствуют экспериментальной ситуации, рассмотренной в работе [4]: $V_{gr} \approx 4 \text{ \AA/s}$ и $L1 = 5.8 \text{ \AA}$ при $r_{\text{Si}}/r_{\text{Ge}} = 1$ и 5.5 соответственно.

эффективности встраивания атомов германия в растущий слой. При этом непосредственно эффект поверхностной сегрегации атомов Ge, как видно из приведенных на рис. 1, 3 кривых, при небольшом отношении r_{Si}/r_{Ge} не является доминирующим в формировании профиля гетерограниц. Наряду с сегрегацией в уширение гетерограницы вносят равноправный вклад поверхностные диффузионные процессы, определяющие время встраивания адсорбированных атомов с поверхности в растущий слой. Необходимо заметить, что при заданной скорости роста та же величина размытия границы слоя, соответствующая $L1 = 5.8 \text{ \AA}$ (II на рис. 3, *b, c*), в присутствии сегрегации (при $k = r_{Si}/r_{Ge} = 5.5$) может быть достигнута при более низком (на порядок) уровне потока атомов к подложке, нежели в отсутствие сегрегации (когда $k = 1$). Неопределенность связана с тем, что размытие границы напрямую связано со скоростью роста, в то время как последняя величина зависит, с одной стороны, от интенсивности атомарных потоков вещества к подложке, а с другой — от скорости встраивания атомов в растущий слой. Скорости атомарных потоков легко определяются в каждом конкретном эксперименте, однако их значения не приведены в цитируемых литературных источниках, что обуславливает некоторую неоднозначность при теоретическом анализе экспериментальных результатов, представленных в этих работах. В частности, из рис. 3, *c* видно, что при заданной скорости роста слоя одна и та же ширина границы ($L1 = 5.8 \text{ \AA}$) в зависимости от величины k может быть получена в широком диапазоне значений (кривая 1) потоков атомов Si от источника к подложке. Область значений параметров, лежащая по правую сторону от указанной выше кривой, соответствует значениям $L1 > 5.8 \text{ \AA}$, а по левую сторону — значениям $L1 < 5.8 \text{ \AA}$. Непосредственно величина k , а соответственно и коэффициент сегрегации для конкретной системы могут быть легко определены из данного рисунка, если наряду с информацией о скорости роста пленки в ходе эксперимента получены данные о величинах атомарных потоков в установке.

Выше при анализе профиля распределения состава в окрестности гетерограниц мы не принимали во внимание зависимости коэффициента встраивания атомов германия в решетку кремния от его поверхностной концентрации. В общем случае зависимость $r_{Ge}(\theta_{Ge})$ присутствует и, как показано в работе [5], диапазон изменения величины r_i для разных температур и концентраций атомов на поверхности может быть достаточно велик. Согласно [5], снижение уровня поверхностной концентрации германия при выключении соответствующего атомарного потока будем вести и к уменьшению величины r_{Ge} . В интервале температур роста $500\text{--}600^\circ\text{C}$ снижение поверхностной концентрации германия на порядок ведет к уменьшению r_{Ge} в несколько раз при практически неизменной величине r_{Si} , обуславливая тем самым возрастающую роль сегрегационных эффектов в системе и приводя к увеличению ширины переходной области в окрестности верхней

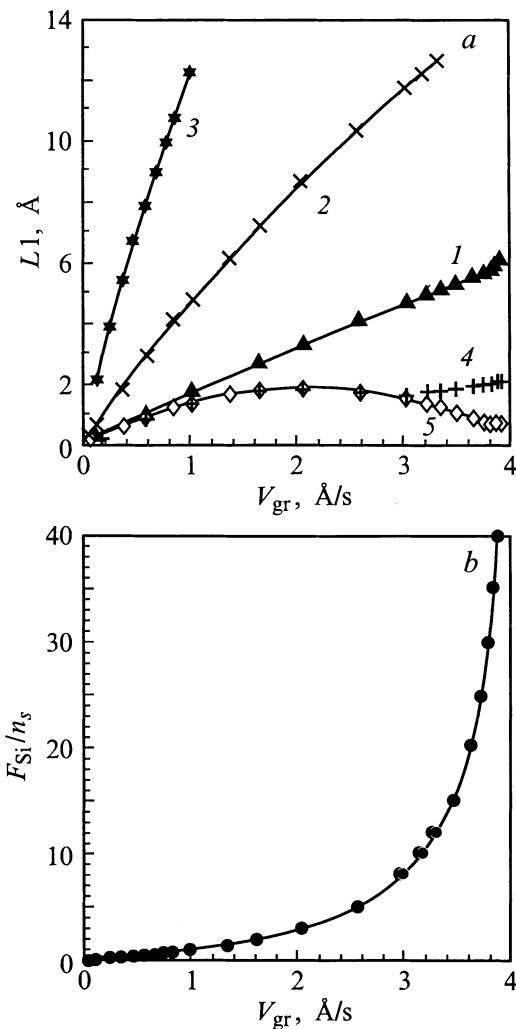


Рис. 4. *a*) Зависимости величины эффективного размытия правой границы слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0.35$) от скорости роста пленок при постоянном значении коэффициента $r_{Si} = 3.1$, $\nu_{Ge} = \nu_{Si} = 0.01$. r_{Ge} : 1 — 3.1, 2 — 1, 3 — 0.31, 4 — 10, 5 — 31. *b*) Соответствующие представленному на части *a* диапазону значений скоростей роста пленок величины атомарного потока кремния в установке при указанных выше значениях параметров r_{Si} , ν_{Ge} , ν_{Si} (вид кривой $F_{Si}(V_{gr})$ не зависит от величины r_{Ge}).

гетерограницы. Соответствующая кривая, рассчитанная для $r_{Ge} = f(\theta_{Ge})r_{Si}$, приведена на рис. 1, *a*, пунктирной линией. При уменьшении θ_{Ge} от максимальной величины, равной безразмерной поверхностной концентрации атомов Ge на поверхности слоев $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($x = 0.35$), до ее минимального значения, соответствующего составу сплава с $x_{\min} = 0.01x$, функция $f(\theta_{Ge})$ меняется по линейному закону от 1 до 0.1.

Исследование зависимости ширины переходных областей от величины атомарного потока кремния (рис. 4) показывает, что резкость гетерограниц может быть существенно улучшена путем использования более низких скоростей роста эпитаксиальных слоев.

В заключение сформулируем основные результаты работы. Используемая при расчетах кинетическая модель роста слоев $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ достаточно хорошо описывает имеющиеся в настоящее время в литературе экспериментальные факты [2,3]. Модель для различных условий роста позволяет рассчитать ширину переходных областей в окрестности верхней и нижней границ эпитаксиального слоя и объясняет ярко выраженную асимметрию распределения состава в слое. Нами показано, что если за формирование верхней границы слоя ответственны в основном релаксационные механизмы, то более высокая резкость нижней гетерограницы слоя $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ в основном обусловлена высокой скоростью доставки вещества к поверхности растущей пленки. Если эффекты сегрегации несущественны (область низких температур роста), то доминирующим фактором расплывания гетерограниц является конечное время встраивания атомов германия в растущий слой, определяемое, вероятнее всего, скоростью диффузии атомов по поверхности. Нами впервые продемонстрировано, что эффекты поверхностной сегрегации, приводящие к дополнительному расплыванию границ в системе $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, могут способствовать повышению крутизны профиля потенциала в системе $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

Авторы благодарят Е.С. Демидова, а также А.В. Потапова и В.И. Вдовина за полезные дискуссии в процессе выполнения работы и ценные замечания.

Список литературы

- [1] P. Waltereit, J.M. Fernandes, S. Kaya, T.J. Thornton. *Appl. Phys. Lett.* **72**, 2262 (1998).
- [2] J.M. Varibeaue, D.J. Loskwood, R.L. Headrick. *J. Electron Mater.* **24**, 341 (1995).
- [3] В.И. Вдовин, К.Д. Щербачев. Матер. Всерос. совещ. "Наноструктуры на основе кремния и германия" ИФМ РАН, Нижний Новгород (1998). С. 168.
- [4] Y.J. Zheng, A.M. Lam, J.R. Engstrom. *Appl. Phys. Lett.* **75**, 817 (1999).
- [5] A.V. Potapov, L.K. Orlov, C.V. Ivin. *Thin Solid Films* **336**, 191 (1999).