

Моделирование процессов эпитаксии, сублимации и отжига в трехмерном приповерхностном слое кремния

© А.В. Зверев, И.Г. Неизвестный, Н.Л. Шварц[¶], Э.Ш. Яновицкая

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

(Получена 14 февраля 2001 г. Принята к печати 15 февраля 2001 г.)

Разработана модель Монте-Карло эпитаксии, сублимации и отжига на поверхности (111) алмазоподобного кристалла. Модель допускает существование нависающих структур и позволяет рассматривать поведение трехмерного приповерхностного слоя сложной конфигурации объемом до 10^7 атомных мест. С помощью разработанной модели проведены исследования начальной стадии эпитаксиального роста на гладкой и пористой поверхностях, отжига ступенчатых и пористых поверхностей, а также рассмотрено влияние барьеров Швобеля на формирование компактных трехмерных островков при эпитаксии в качестве одного из возможных кинетических механизмов образования квантовых точек. Исследовано поведение моноатомных ступеней на поверхностях (111) алмазоподобных кристаллов в процессе сублимации.

1. Введение

Одним из широко используемых методов формирования твердотельных структур на атомарном уровне [1,2] является молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ). Идеальной подложкой для МЛЭ была бы абсолютно чистая, атомарно-гладкая кристаллическая поверхность. Реальные поверхности в лучшем случае обладают некоторыми участками атомарно-гладких террас, разделенных моно- и многоатомными ступенями. Электронные свойства нанoeлектронных приборов сильно зависят от исходного поверхностного рельефа и его преобразования в процессе роста, поэтому в настоящее время исследования морфологии поверхности на атомарном уровне проводятся многими авторами с помощью разнообразных методик с атомарным разрешением [3–5]. Поскольку трудно совместить наблюдение за атомной структурой поверхности с технологическим процессом роста, широкое распространение получило имитационное моделирование. На сегодняшний день наряду с молекулярно-динамическими методами широко используются численные статические методы Монте-Карло (МК) [6], позволяющие наблюдать за модельными атомными процессами в реальном масштабе времени.

Трудности, возникающие при составлении трехмерных моделей из-за высоких требований к быстродействию, и недостаточно детальные представления о поверхностных атомных процессах на решетке типа алмаза вынуждают исследователей ограничиваться результатами, полученными с помощью упрощенных моделей. В подавляющем большинстве модельных экспериментов используется поверхность (001) кубического кристалла и применяется принцип SOS (*solid-on-solid*), запрещающий существование нависающих структур в моделируемом поверхностном слое. В настоящее время работ по моделированию процессов в трехмерных поверхностных слоях алмазоподобных кристаллов немного. Публикации [7–11] почти исчерпывают этот список. Создание компьютерных

моделей, адекватно отражающих свойства поверхностей полупроводниковых кристаллов, существенно отстает от потребностей времени. Для исследования свойств поверхностей со сложным исходным рельефом, например, меза-структур, фасетированных поверхностей или пористых поверхностных слоев оказываются необходимыми трехмерные модели с реальной структурой кристалла.

В данной работе представлена трехмерная решеточная модель Монте-Карло эпитаксиального роста на поверхности (111) кристалла с алмазоподобной решеткой, не использующая принцип SOS [7]. Учет положения каждого атома в трехмерном приповерхностном слое допускает существование объемных пор и любых других структур с нависанием. Оригинальный быстродействующий алгоритм позволяет наряду с эпитаксией моделировать такие высокотемпературные процессы, как сублимация и отжиг.

При сопоставлении результатов реального и вычисленного экспериментов в ряде случаев необходимо учитывать те особенности реальной поверхности, физическую природу которых сложно заложить в модель. Построение кристалла в виде жестко заданных решеточных мест не позволяет получать структурные перестройки, характерные для большинства полупроводниковых поверхностей. В частности, структура (7×7) неизменно присутствует на атомарно-гладкой поверхности Si (111) при температурах ниже 830°C [12]. В связи с этим результаты модельных вычислений наиболее сопоставимы с экспериментальными данными для кремния, полученными при высоких температурах. При низких температурах не перестроенной является поверхность Si (111), стабилизированная бором [13]. Пористая поверхность кремния из-за сильной шероховатости также не обнаруживает признаков структурных перестроек [14]. Ростовые процессы, проходящие на перестроенной поверхности, наша модель может описывать с помощью эффективных коэффициентов поверхностной диффузии. Для исследования явлений, связанных с особенностями диффузии атомов при пересечении поверхностных ступеней,

[¶] E-mail: natasha@spy.isp.nsc.ru

пеней, в модель были введены дополнительные энергетические барьеры, физическая природа которых может быть различной в разных экспериментальных ситуациях: поверхностные дефекты и посторонние атомы, структурные перестройки, наличие зарядов на атомах или ступенях, рассогласование решеток при гетероэпитаксии и ряд других. С помощью разработанной модели рассматривалось поведение гладкой, ступенчатой и пористой поверхности в процессах роста, сублимации и отжига.

2. Описание физико-математической модели

Основным событием в модели является диффузионный шаг, при этом атом может переместиться на свободное место в 1-й, 2-й или в 3-й координационных сферах. Разрешено задавать различные для разных координационных сфер вероятности встраивания атома на выбранное место. Атом, разорвавший связи, может либо встроиться с соответствующей вероятностью на случайно выбранное соседнее место, либо преодолеть десорбционный барьер и десорбироваться. Процесс адсорбции рассматривался как посадка атомов через равные промежутки времени на случайно выбранные места поверхности.

Моделируемый приповерхностный слой (ПС) задается в виде набора монослоев (МС) в плоскости (111). Монослоем мы считаем атомы, расположенные в одной геометрической плоскости. 2 наиболее близких монослоя составляют бислою (БС). В верхнем монослое бислоя атомы имеют одну свободную связь, направленную перпендикулярно к поверхности. В модели ПС могла быть задана произвольная конфигурация каждого монослоя, тем самым мог быть сформирован требуемый исходный рельеф. При вычислениях на компьютерах типа Pentium III можно использовать поверхностные слои объемом порядка 10^7 атомов (поверхность до 10^6 атомных мест, толщина приповерхностного слоя до 200 атомных слоев). Для поверхности Si (111) это означает площади до $1.3 \cdot 10^5 \text{ nm}^2$ и толщина ПС до 63 нм.

Свободными атомами или адатомами будем называть атомы, соединенные одной связью с ближайшим соседом на гладкой поверхности (111). Такие атомы имеют одного 1-го и трех 2-х соседей, т.е. 1/4 от связей в объеме. Для атома, имеющего n 1-х и k 2-х соседей ($0 < n < 4$ и $0 < k < 12$) энергия отрыва от соседей E_{hop} определялась как $E_{\text{hop}} = nE_1 + kE_2$, где E_1 , E_2 — энергии взаимодействия с 1-ми и 2-ми соседями. Задаваемыми параметрами кристалла являются величины E_1 , E_2 , а также E_{1n} , E_{2n} , E_{3n} — энергии барьеров встраивания на места в 1-й, 2-й и 3-й координационных сферах соответственно. Независимо задавалась величина E_d — энергия десорбции адатома с гладкой террасы.

Условия роста при эпитаксии определялись температурой подложки T (К) и скоростью осаждения V (БС/с). В работе [15] показано, что температура и скорость осаждения не являются независимыми параметрами,

определяющими процесс эпитаксии. Оба эти параметра определяют скорость возникновения двумерных зародышей, причем уменьшение скорости осаждения эквивалентно увеличению температуры подложки. Это является основанием для введения модельного параметра n_{dif} , равного числу диффузионных скачков каждого адатома, приходящегося на 1 акт адсорбции.

С точки зрения преодоления диффузионного барьера число диффузионных шагов за время между двумя последовательными актами посадки равно

$$\nu_{\text{dif}} = \nu \exp(-E_{\text{dif}}/k_B T)/V, \quad (1)$$

где E_{dif} — энергия активации поверхностной диффузии (эВ), V — скорость осаждения (БС/с), ν — частота тепловых колебаний атома (1/с), k_B — постоянная Больцмана, T — температура подложки (К).

Действительно, в молекулярном потоке с интенсивностью F покрытие θ изменяется со временем t по закону $\theta = Ft$. Минимальное изменение покрытия на модельной поверхности размером S происходит при добавлении одного атома, $\Delta\theta_{\text{min}} = 1/S$. Интервал времени, за который происходит минимальное изменение θ , равен произведению времени одного диффузионного шага

$$\tau_{\text{dif}} = [\nu \exp(-E_{\text{dif}}/k_B T)]^{-1}$$

на заданное число диффузионных шагов n_{dif} , которое совершает в среднем каждый поверхностный атом, $\Delta t = \tau_{\text{dif}} n_{\text{dif}}$. Произведение интенсивности потока на площадь поверхности равно скорости осаждения $FS = V$. Таким образом, можно записать

$$\frac{d\theta}{dt} = F = \frac{V}{S}, \quad (2a)$$

$$\frac{\Delta\theta_{\text{min}}}{\Delta t} = \frac{1}{S n_{\text{dif}} \tau_{\text{dif}}}. \quad (2б)$$

Приравнявая правые части приведенных соотношений, получим выражение (1).

Эпитаксиальный рост заканчивается после осаждения заданного количества монослоев, а при моделировании процессов сублимации и отжига длительность процесса определяется числом десорбированных атомов.

Конфигурации трехмерного приповерхностного слоя записываются через заданное количество актов адсорбции или десорбции. Сервисные программы позволяют визуализировать преобразования поверхностного рельефа в виде компьютерного фильма и анализировать особенности рельефа после окончания вычислительного эксперимента. В результате анализа на любой стадии роста определяются необходимые характеристики поверхности: число свободных связей на поверхности в качестве характеристики ее шероховатости, распределение по размерам атомных или вакансионных островков, толщина сплошного слоя, образовавшегося над порами и т.д. На сечениях ПС двумя перпендикулярными плоскостями с заданными координатами можно наблюдать за преобразованиями захороненных структур.

Математически описанная выше модель реализовывалась следующим образом. Характеристикой (или классом выхода) каждого решеточного места являлось количество 1-х и 2-х атомных соседей. В алмазоподобной решетке имеется 65 таких классов. Для заданной начальной конфигурации ПС насчитывался массив, содержащий эффективные вероятности выхода каждого атома со своего места в решетке. Эффективная вероятность учитывает вероятность элементарного выхода, определяемую классом выхода, и число атомов, имеющих данный класс. Случайно выбирался один из элементов насчитанного массива эффективных вероятностей, затем случайно определялся монослой, в котором найдется атом данного класса, при этом выбор определенного монослоя тем вероятнее, чем больше атомов данного класса содержится в нем. В выбранном монослое с помощью скоростного процессорного поиска случайно выбирался один из атомов для совершения перемещения. В соответствии с вероятностями встраивания выбиралось свободное соседнее место кристаллической решетки в 1-й, 2-й и 3-й координационных сферах. Выбранный атом перемещался на новое место и пересчитывалась таблица эффективных вероятностей. Схема расчетов основана на алгоритме [16], исключающем "пустые" события, которые не приводят к изменению положения атомов.

3. Результаты моделирования

С помощью разработанных программ было проведено моделирование эпитаксиального роста и высокотемпературного отжига, сопровождающегося сублимацией, на гладкой, вицинальной и пористой поверхностях Si (111).

3.1. Эпитаксия на гладких и ступенчатых поверхностях

Исследовалось зарождение двумерных островков на гладкой поверхности Si (111). К настоящему времени опубликовано большое число экспериментальных работ по наблюдению СТМ изображений двумерных островков на поверхности Si (111) в процессе эпитаксии [17–21], полученных по методу сканирующей (растровой) туннельной микроскопии (СТМ). Однако модельных исследований начальных стадий зарождения островков на Si (111) практически нет. Это в значительной степени определяется отсутствием моделей, учитывающих перестройку (7×7) , характерную для температур роста. В экспериментальной работе [13] двумерное зарождение наблюдалось на неперестроенной поверхности. В этой работе найдено, что энергия активации поверхностной диффузии кремния на поверхности (1×1) всего на 0.3 эВ выше, чем на (7×7) . Причем зародившиеся островки на неперестроенной поверхности имеют треугольную форму, характерную и для поверхности (7×7) .

При заданной температуре и скорости роста плотность островков определяется энергией активации диффузионного скачка E_{dif} [22] (без учета перестроек можно говорить только об эффективных значениях E_{dif}). Если температура и скорость роста известна из эксперимента, то значение E_{dif} можно определить из сопоставления экспериментальных и модельных значений плотности двумерных зародышей. По нашим оценкам, из сравнения модельной плотности с экспериментальными данными [17] на поверхности Si (111) эффективное значение составляет $E_{\text{dif}} = (1.75 \pm 0.15)$ эВ [7], что укладывается в интервал значений, полученных другими авторами [23,24].

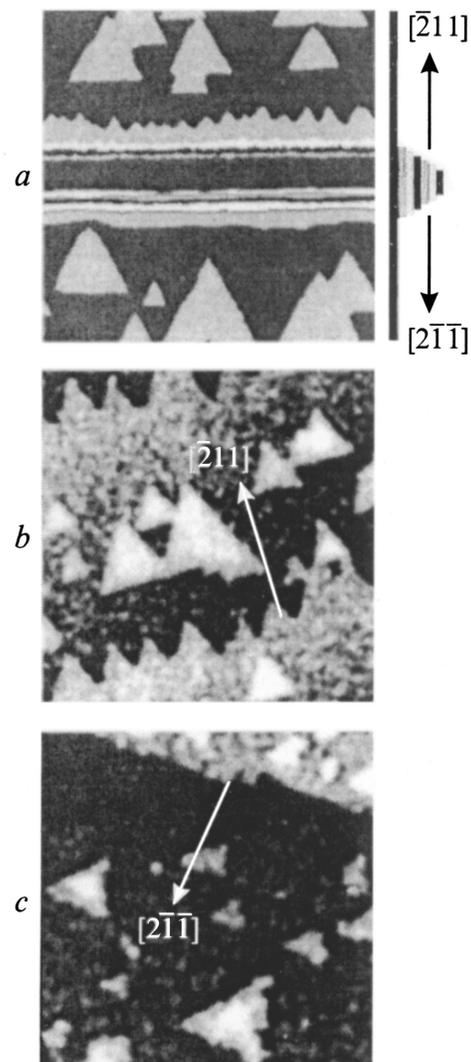


Рис. 1. Вид поверхности Si(111) на начальной стадии роста 1-го бислоя. Размер всех изображений равен 300×300 атомных мест (а.м.), $T = 690$ К. *a* — модельная поверхность после осаждения 0.25 бислоя (БС); справа исходный профиль эшелонированной поверхности; *b* — СТМ изображение поверхности Si(111) со ступенью типа $(\bar{2}11)$ после осаждения 0.25 БС (данные работы [25]); *c* — СТМ изображение поверхности Si(111) со ступенью типа $(2\bar{1}\bar{1})$ после осаждения 0.18 БС [25].

Используя найденное значение E_{dif} , удалось получить близкую к экспериментальной модельную картину поведения островков и ступеней, движущихся в направлениях $[\bar{2}11]$ и $[2\bar{1}\bar{1}]$, при росте на vicинальных поверхностях Si(111). Ступень, движущаяся в направлении $[2\bar{1}\bar{1}]$, оставалась гладкой, а на ступени, движущейся в противоположном направлении $[\bar{2}11]$, появлялись "зубы", которые не являлись остатками островков, примкнувших к ступени, как это и наблюдалось экспериментально в [25] (рис. 1). Островки высотой в 1 бислой имели форму и размеры, близкие к экспериментальным при одинаковых покрытиях. Разрастаясь, островки заполняли всю поверхность, образуя сплошной слой. Число свободных связей по мере роста периодически изменялось с периодом, равным времени заполнения одного бислоя. Осцилляции числа свободных связей вели себя аналогично осцилляциям интенсивности электронного луча в методе дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО) [26]. Амплитуда осцилляций зависела от температуры и скорости роста, наблюдалось затухание осцилляций со временем по мере увеличения шероховатости поверхности.

3.2. Эпитаксиальный рост трехмерных компактных островков

Нами рассматривался процесс эпитаксии при наличии дополнительных энергетических барьеров (барьеров Швобеля) при пересечении атомом поверхностной ступени. В ряде работ предполагается, что такие барьеры могут быть причиной формирования при гетероэпитаксии трехмерных компактных островков, называемых квантовыми точками (КТ) [27,28]. При эпитаксиальном соединении двух материалов с рассогласованием по параметру решетки в них возникают упругие напряжения. Эти напряжения могут привести к повышению вероятности выхода атома из края островка на верхнюю террасу, так как этот процесс, уменьшая размеры островка, приводит к понижению упругих напряжений. Повышенная скорость зарождения островков 2-го слоя объяснялась в [29] асимметрией барьеров Швобеля в системе SiGe.

Для исследования влияния барьеров Швобеля на формирование поверхностного рельефа в процессе эпитаксии были введены дополнительные энергетические барьеры E_{st} для атомов, пересекающих моноатомные ступени. Вероятность диффузионного скачка при пересечении ступени изменялась в $P = \exp(-E_{\text{st}}/kT)$ раз по сравнению с вероятностью скачка без изменения атомного уровня. Множитель P_{up} изменял вероятность перемещения атома в вышележащие слои, а множитель P_{down} — в нижележащие. Была получена фазовая диаграмма в координатах $P_{\text{up}}-P_{\text{down}}$, на которой область значений, соответствующая росту по механизму Странского-Крастанова, отделяет область

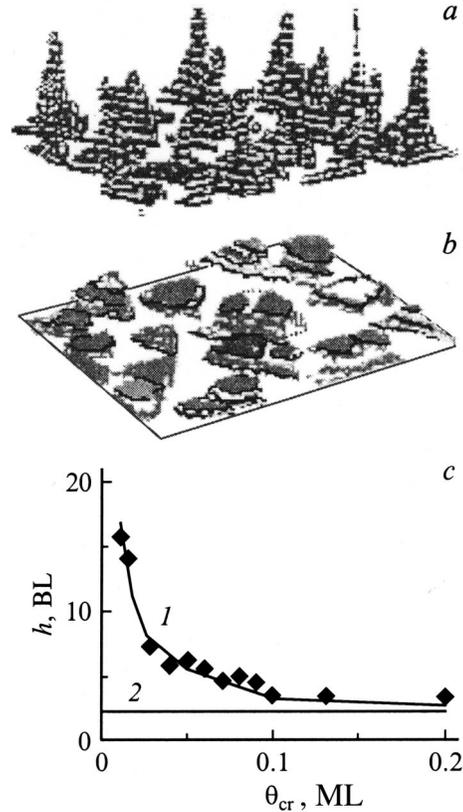


Рис. 2. Модельная поверхность после осаждения 2 МС вещества при $T = 725$ К, $P_{\text{up}} = 3$, $P_{\text{down}} = 0.3$; критическое покрытие θ_{cr} , МС: *a* — 0.01, *b* — 0.1; *c* — зависимость средней высоты 3D островков от θ_{cr} (1) и средняя толщина осажденного слоя (2). BL — бислоем.

послойного двумерного (2D) роста от области зарождения трехмерных островков (3D рост) [30]. Для формирования компактных трехмерных островков без смачивающего слоя требуется выполнение условия $P_{\text{up}}/P_{\text{down}} > 2-5$.

На рис. 2 показан вид модельной поверхности после осаждения 2 МС для значений P_{up} и P_{down} , соответствующих 3D росту. Была введена зависимость этих параметров от среднего размера островка, что позволило в некоторой степени учесть изменение величины барьера Швобеля по мере увеличения осаждаемой дозы. Результаты, представленные на рис. 2 получены при следующей зависимости барьера Швобеля от осаждаемой дозы:

$$P(\theta_i) = 1 + (P_0 - 1)\theta_i/\theta_{\text{cr}} \quad \text{при } \theta_i < \theta_{\text{cr}}, \quad (3a)$$

$$P(\theta_i) = P_0 \quad \text{для } \theta_i > \theta_{\text{cr}}, \quad (3b)$$

где $P_0 = \exp(-E_{\text{st}}/kT)$, θ_i — покрытие в i -м бислое, θ_{cr} — критическое покрытие, измеряемое в долях монослоя. Зависимость средней высоты островка от критического покрытия θ_{cr} представлена на рис. 2, *c*.

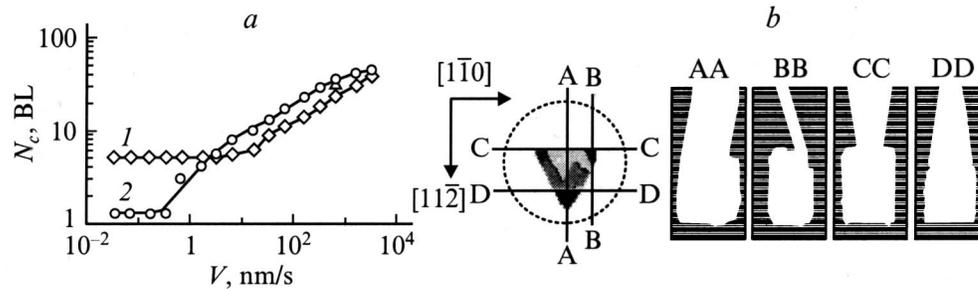


Рис. 3. *a* — зависимость критической дозы N_c (в единицах бислоев (БС)) от скорости осаждения V при $T = 1073$ К; диаметр пор $d = 14$ нм; пористость P_s , %: 1 — 13, 2 — 50. *b* — зарастание пор глубиной $h_0 = 100$ БС: вид сверху на отверстие поры (слева) и сечения поры (справа) плоскостями перпендикулярными поверхности (111); пунктирная окружность — относительный размер отверстия поры до начала эпитаксии, внутренний треугольник — после осаждения 7.8 БС с $V = 0.1$ БС/с.

3.3. Эпитаксия на пористой поверхности

Исследование особенностей эпитаксии на поверхностях пористого кремния (ПК) приобретает в настоящее время большое значение, так как использование ПК в качестве податливых подложек при гетероэпитаксиальном росте [31–33] открывает новые возможности для снижения уровня механических напряжений при выращивании структур с размерными несоответствиями решеток. Кроме того, ПК является перспективным материалом для создания новой технологии структур кремний-на-изоляторе (КНИ) [34].

Важными параметрами для начала гетероэпитаксиального роста являются величины осажденной дозы кремния, необходимой для полного перекрытия пор, и дозы, требуемой для выглаживания поверхности. Практически единственным методом контроля *in situ* качества растущей поверхности является метод ДБЭО. Появление рефлексов от поверхностных сверхструктур связывают с образованием сплошной пленки на пористой подложке [14], однако такие рефлексы свидетельствуют лишь о появлении структурно-совершенных фрагментов поверхности, которые вполне могут сосуществовать с участками, содержащими открытые поры. Моделирование может оказать существенную помощь при оценке минимально необходимой дозы для затягивания пор и выглаживания поверхности в зависимости от условий роста и характеристик пористой поверхности.

Далее приведены результаты моделирования процесса зарастания пор при эпитаксии Si/Si (111). Определялась критическая доза N_c , т.е. минимальное число осажденных бислоев (БС), необходимое для создания сплошного слоя на поверхности. Цилиндрические поры одинакового размера, перпендикулярные плоскости (111), равномерно располагались на исходной поверхности, поток осаждаемых атомов также предполагался перпендикулярным поверхности. Температура подложки в большинстве расчетов равнялась 800°C . Параметры пористой подложки варьировались в соответствии с экспериментальными данными из работ [14,32] в следующих пределах: пористость $13\% \leq P_s \leq 64\%$, диаметр пор $d = 3.5\text{--}15$ нм.

Зависимость критической дозы N_c от скорости осаждения вещества представлена на рис. 3, *a*. При малых скоростях осаждения N_c не зависит от потока, так как все упавшие на поверхность атомы поглощаются порами, и N_c лимитируется осажденной дозой. При этом N_c растет с увеличением пористости из-за уменьшения площади сбора адатомов и увеличения заполняемого объема пор. С уменьшением длины диффузии адатомов при росте скорости осаждения уменьшается область питания каждой поры, что приводит к увеличению N_c .

Было обнаружено уменьшение критической дозы N_c с ростом пористости для больших скоростей осаждения. Это связано с увеличением суммарной площади зон питания пор с одновременным уменьшением плотности зарождающихся островков между порами. Пористость поверхности и диаметр пор влияют на плотность потока частиц, попадающих на боковые стенки пор с поверхности. Внутри пор с глубиной больше, чем диффузионный пробег адатомов по стенкам, вблизи поверхности образуется "горлышко", и затягивание их идет несколько медленнее, чем мелких пор того же диаметра, где вещество с поверхности доходит до дна. На рис. 3, *b* показана огранка горлышка глубокой поры. Оно оказывается ограненным тремя парами параллельных плоскостей типа (015).

4. Результаты моделирования отжига и сублимации

4.1. Пористая поверхность

Высокотемпературные отжиги являются одним из этапов подготовки практически любой поверхности к эпитаксиальному росту. Пористая поверхность не является исключением. Моделирование процесса отжига пористой поверхности Si(111) при $T = 1400$ К показало, что мелкие поры в начале отжига растравливаются и приобретают характерную для поверхности (111) треугольную форму, а позднее поверхность выглаживается за счет диффузии и сублимации. Отжиг глубоких пор при той же температуре ведет к их перекрытию

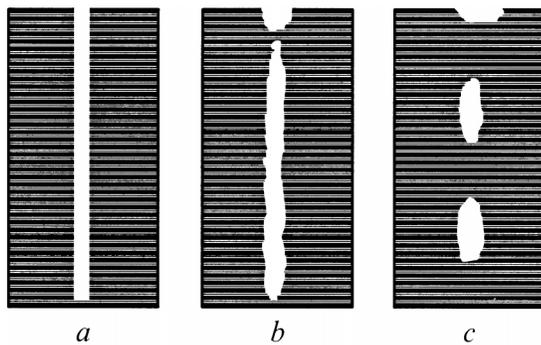


Рис. 4. Кинетика отжига глубокой поры при $T = 1573$ К, $d = 3$ нм, $h_0 = 105$ БС: *a* — исходная пора; *b, c* — отжиг в течение времени, в единицах t_d : *b* — 1300, *c* — 7000 (t_d — время между актами десорбции с модельной поверхностью).

сплошным слоем за счет диффузии атомов верхних слоев по боковым стенкам. Затем поверхность достаточно быстро выглаживается, а в объеме остаются захороненные поры [35]. При длительном отжиге глубокие поры разбиваются на изолированные фрагменты, стремящиеся к равновесной форме (рис. 4). Такая фрагментация пор наблюдалась экспериментально [36].

Приведенные результаты показывают, что моделирование открывает широкие возможности для исследования пористого поверхностного слоя в процессах эпитаксии и отжига.

4.2. Вициальная поверхность

Поведение ступеней в процессе сублимации и роль вакансий при высокотемпературных отжигах поверхности кремния является объектом исследований последних лет [37–44]. По сравнению с большим числом экспериментальных статей, посвященных этому вопросу, работ по моделированию поведения поверхности при сублимации не много. Далее представлены результаты вычислительного эксперимента по высокотемпературному отжигу вициальной поверхности Si(111).

Вициальные поверхности Si(111) чаще всего содержат ступени двух типов, перпендикулярные направлениям $\langle 112 \rangle$. На ступенях 1-го типа каждый краевой атом имеет одну оборванную связь, а на встречных ступенях 2-го типа — краевые атомы имеют две оборванные связи. Строение ступеней определяет асимметрию атомных потоков на верхнюю и нижнюю террасы и, как следствие, различие в поведении поверхностей со ступенями разных типов.

Результаты моделирования поведения ступеней разного типа в процессе сублимации сравнивались с теорией Швобеля [45]. Хотя Швобель рассматривал влияние асимметрии атомных потоков в ступень со стороны верхней и нижней террас на движение ступеней при эпитаксии, полученные в [45] аналитические выражения пригодны и для сублимации.

Пусть начальное распределение террас по ширине задается выражением

$$S_k(t = 0) = L(1 + A \cos Kk), \quad (4)$$

где S_k — ширина террасы, примыкающей к ступени k снизу; L — средняя ширина террас; $A = \Delta L/L$ — максимальное относительное отклонение ширины террасы от среднего значения; $K = 2\pi/n$ определяется числом ступеней в периоде n . В этом случае ширины террас $S_k(t)$ изменяются со временем следующим образом:

$$S_k(t) = L \{ 1 + A \exp[Ct(\gamma_- - \gamma_+)(1 - \cos K)] \times \cos[Kk + Ct(\gamma_+ + \gamma_-) \sin K] \}, \quad (5)$$

где γ_+ , γ_- — вероятности переходов атомов на верхнюю и нижнюю террасы, $C\gamma_+$, $C\gamma_-$ — потоки атомов соответственно на верхнюю и нижнюю террасы.

Согласно (5), размер террас колеблется во времени с периодом, зависящим от суммарного потока атомов из ступени. Амплитуда этих колебаний возрастает, если преобладает выход атомов на нижнюю террасу, и убывает при преимущественном выходе атомов на верхнюю террасу.

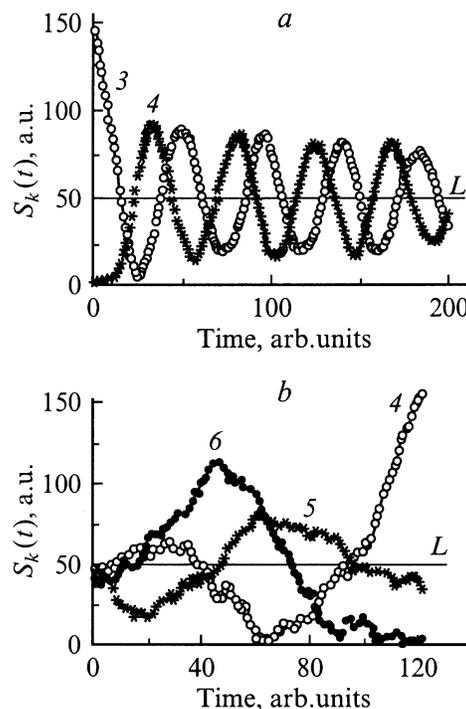


Рис. 5. Поведение террас при сублимации (номера кривых соответствуют номерам террас k); температура подложки $T = 1400$ К, параметры модельного кристалла $E_1 = 1.3$ эВ, $E_2 = 0$ эВ, $E_d = 1.1$ эВ, $E_{1n} = E_{2n} = E_{3n} = 0$; *a* — ступени 2-го типа: периодическое изменение размеров террас $S_k(t)$, $A = 0.96$; *b* — ступени 1-го типа: непериодическое изменение размеров террас $S_k(t)$, $A = 0.2$; S_k — в атомных единицах (a. u.), $L = 50$ a. m. (atomic sites).

На рис. 5, *a* представлены результаты моделирования сублимации на поверхности со ступенями 2-го типа. Исходный профиль поверхности содержит два эшелона по 3 ступени, циклические границы условия делают такое распределение периодическим. Зависимость от времени размеров $S_3(t)$ и $S_4(t)$ полностью описывается формулой (5). По периоду осцилляций размеров террас можно определить сумму атомных потоков из ступени на обе прилегающие террасы, а убывание амплитуды колебаний однозначно свидетельствует о преимущественном выходе атомов на верхнюю террасу. Логарифмический декремент затухания позволяет определить разность потоков $C(\gamma_+ - \gamma_-)$ на верхнюю и нижнюю террасу. В модельных расчетах для данного примера получились значения

$$C(\gamma_+ + \gamma_-) = 4 \cdot 10^{-2} t_d, \quad C(\gamma_+ - \gamma_-) = 1.5 \cdot 10^{-3} t_d,$$

где t_d — время между двумя актами десорбции.

На рис. 5, *b* для поверхностей со ступенями 1-го типа представлено увеличение максимального отклонения значения ширины одной из террас от среднего значения. Наблюдается сильное разрастание 4-й террасы при уменьшении ширины 6-й террасы до нуля. Такое поведение размеров террас указывает на возрастающий характер экспоненты в формуле (5) и, следовательно, на преимущественный выход атома ступени на нижнюю террасу. Оценки суммарного потока на террасы по величине периода осцилляций для ступеней 1-го типа дали значения $C(\gamma_+ + \gamma_-) = 2 \cdot 10^{-2} t_d$, что вдвое меньше, чем для ступеней 2-го типа. Близкие значения суммарного потока атомов на террасы были получены нами при измерениях относительных скоростей смещения ступеней обоих типов в процессе сублимации [46].

Таким образом, модельные эксперименты показали, что строение алмазоподобной решетки приводит к асимметрии атомных потоков из ступени на соседние террасы.

Заключение

Создана трехмерная (3D) модель алмазоподобного кристалла, которая была успешно использована для изучения процессов эпитаксии и отжига на поверхности (111) монокристаллического кремния со сложным рельефом. Из сравнения модельной и экспериментальной плотности островков была оценена эффективная энергия активации диффузионного скачка уединенного атома на гладкой поверхности Si (111) $E_{\text{dif}} = 1.75 \pm 0.15$ эВ.

Проведены исследования влияния барьеров Швобеля на формирование компактных островков. Найдено, что такие островки формируются при существенном превышении вероятности выхода атома из ступени в верхний слой по сравнению с вероятностью перехода вниз. Такое соотношение между барьерами является причиной уменьшения латеральных размеров островка, что на реальной поверхности может привести к релаксации

упругих напряжений при формировании 3D островков в процессе гетероэпитаксии.

Проведено систематическое исследование процесса зарастания пор на поверхности Si (111) в зависимости от режимов гомоэпитаксиального роста и от исходных параметров пористой подложки. Обнаружена слабая зависимость критической дозы N_c , необходимой для создания сплошного слоя, от пористости поверхности в диапазоне скоростей осаждения и температур, характерном для реальных экспериментов. Исследована форма захороненных пор в зависимости от характеристик пористой поверхности и условий роста. При низких скоростях осаждения наблюдалась огранка стенок пор плоскостями типа (015).

Моделирование процесса отжига пористой поверхности продемонстрировало, что мелкие и глубокие поры ведут себя по-разному: мелкие поры растравливаются, а глубокие спекаются у поверхности. При длительном высокотемпературном отжиге наблюдалась фрагментация глубоких захороненных пор.

Исследовано поведение моноатомных ступеней на поверхностях Si (111) в процессе сублимации. Обнаружены различия потока атомов из ступени на верхнюю и нижнюю террасы, связанные с геометрией алмазоподобной решетки.

Данная работа проведена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 99-02-16742), программы ФЦНТ "Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития науки и технологии гражданского направления", подпрограммы "Перспективные технологии и устройства микро- и нанoeлектроники" и "Поверхностные атомные структуры".

Список литературы

- [1] N.D. Zakharov, P. Werner, U. Gosele, R. Heitz, D. Bimberg, N.N. Ledentsov, V.M. Ustinov, B.V. Volovik et al. Appl. Phys. Lett., **76**, 2677 (2000).
- [2] K. Zhang, Ch. Heyn, W. Hansen, Th. Schmidt, J. Falta. Appl. Phys. Lett. **76**, 2229 (2000).
- [3] T.T. Tsong. Progr. Surf. Sci., **64**, 199 (2000).
- [4] A.V. Latyshev, A.B. Krasilnikov, A.L. Aseev. Thin Sol. Films, **306**, 205 (1997).
- [5] A.A. Shklyayev, M. Shibata, M. Ichikawa. J. Appl. Phys., **88**, 1397 (2000).
- [6] *Методы Монте-Карло в статистической физике*, под ред. Биндера (М., Наука, 1981).
- [7] А.В. Зверев, И.Г. Неизвестный, Н.Л. Шварц, З.Ш. Яновицкая. Микроэлектроника, **28**, 377 (1999).
- [8] J. Dalla Torre, M.D. Rouhani. J. Appl. Phys., **84**, 5487 (1998).
- [9] П.Л. Новиков, Л.Н. Александров, А.В. Двуреченский, В.А. Зиновьев. Письма ЖЭТФ, **67**, 512 (1998).
- [10] D.L. Woodraska, J.A. Jaszczak. Surf. Sci., **374**, 319 (1997).
- [11] S. Kersulis, V. Mitin. Semicond. Sci. Technol., **10**, 653 (1995).
- [12] A.V. Latyshev, A.B. Krasilnikov, A.L. Aseev. Appl. Surf. Sci., **60/61**, 397 (1992).
- [13] H. Grube, J.J. Boland. Surf. Sci., **407**, 152 (1998).

- [14] Y. Yasumatsu, T. Ito, H. Nishizawa, A. Hiraki. *Appl. Surf. Sci.*, **48/49**, 414 (1991).
- [15] C. Heyn, T. Franke, R. Anton, M. Harsdorff. *Phys. Rev. B*, **56**, 13 483 (1997).
- [16] P.A. Maksym. *Semicond. Sci. Technol.*, **3**, 594 (1988).
- [17] B. Voigtlander, A. Zinner, T. Weber, H.P. Bonzel. *Phys. Rev. B*, **51**, 7583 (1995).
- [18] B. Voigtlander, M. Kastner, P. Smilauer. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 858 (1998).
- [19] J. Myslivecek, T. Jarolimek, P. Smilauer, B. Voigtlander, M. Kastner. *Phys. Rev. B*, **60**, 13 869 (1999).
- [20] T. Sato, S. Kitamura, M. Iwatsuki. *Surf. Sci.*, **445**, 130 (2000).
- [21] I.-S. Hwang, Mon-Su Ho, T.T. Tsong. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 120 (1999).
- [22] J.A. Venables, G.D.T. Spiller, M. Hanbucken. *Rep. Progr. Phys.*, **47**, 399 (1984).
- [23] M.I. Larsson, G.V. Hansson. *Surf. Sci. Lett.*, **321**, 1261 (1994).
- [24] A.V. Latyshev, A.B. Krasilnikov, A.L. Aseev. *Thin Sol. Films*, **281–282**, 20 (1996).
- [25] M. Fehrenbacher, H. Rauscher, U. Memmert, R.J. Behm. *Surf. Sci.*, **398**, 123 (1997).
- [26] T. Shitara, D.D. Vedensky, M.R. Wilby, J. Zhang, J.H. Neave, B.A. Joyce. *Phys. Rev. B*, **46**, 6815 (1992).
- [27] V.A. Shchukin, D. Bimberg. *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 1125 (1999).
- [28] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Щукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д. Бимберг. *ФТП*, **32**, 385 (1998).
- [29] M. Kummer, B. Vogeli, T. Meyer, H. Kanel. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 107 (2000).
- [30] I.G. Neizvestny, L.N. Safronov, N.L. Schwartz, Z.Sh. Yanovitskaya, A.V. Zverev. *Proc. 8th Int. Symp. Nanosrtuctures: Physics and Technology* (St. Petersburg, Russia, June 19–23, 2000) p. 129.
- [31] Y. Hayashi, Y. Agata, T. Soga, T. Jimbo, M. Umeno, N. Sato, T. Yonehara. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **37**, L1354 (1998).
- [32] S.I. Romanov, V.I. Mashanov, L.V. Sokolov, A. Gutakovskii, O.P. Pchelyakov. *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 4118 (1999).
- [33] S. Jin, H. Bender, L. Stalmans, R. Bilyalov, J. Poormans, R. Loo, M. Caymax. *J. Cryst. Growth*, **212**, 119 (2000).
- [34] S.I. Romanov, A.V. Dvurechenskii, V.V. Kirienko, R. Grotzshel, A. Gutakovskii, L.V. Sokolov, M.A. Lamin. *Proc. of NATO Advanced Research Workshop. Perspectives, Science and Technologies for Novel Silicon on Insulator Devices*, ed by P.L.F. Hemment et al. (Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 2000) p. 29.
- [35] А.В. Зверев, И.Г. Неизвестный, Н.Л. Шварц, З.Ш. Яновицкая. *Изв. РАН. Сер. физ.*, **64**, 337 (2000).
- [36] T. Sato, K. Mitsutake, I. Mizushima, Y. Tsunashima. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **39**, Part 1, 5033 (2000).
- [37] P. Finnie, Y. Homma. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 2737 (1999).
- [38] K. Thurmer, D.-J. Liu, E.D. Williams, J.D. Weeks. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 5531 (1999).
- [39] C. Alfonso, J.C. Heyraud, J.J. Metois. *Surf. Sci. Lett.*, **291**, 745 (1993).
- [40] Y. Homma, H. Hibino, T. Ogino. *Phys. Rev. B*, **58**, 13 146 (1998).
- [41] J.M. Bermond, J.J. Metois, J.C. Heyraud, C. Alfonso. *Surf. Sci.*, **331–333**, 855 (1995).
- [42] Y. Homma, H. Hibino, Y. Kunii, T. Ogino. *Surf. Sci.*, **445**, 327 (2000).
- [43] A. Pimpinelli, J. Villain. *Physica A*, **204**, 521 (1994).
- [44] A.V. Latyshev, A.B. Krasilnikov, A.L. Aseev. *Surf. Sci.*, **311**, 395 (1994).
- [45] R.L. Schwoebel, E.J. Shipsey. *J. Appl. Phys.*, **37**, 3682 (1966).
- [46] I.G. Neizvestny, N.L. Schwartz, Z.Sh. Yanovitskaya, A.V. Zverev. *Thin Sol. Films* (принята к печати).

Редактор Т.А. Полянская

Simulation of epitaxy, sublimation and annealing processes in a 3D silicon surface layer

A.V. Zverev, I.G. Neizvestny, N.L. Schwartz, Z.Sh. Yanovitskaja

Institute of Semiconductor Physics,
Suberian Branch of Russian Academy of Sciences,
630090 Novosibirsk, Russia

Abstract Monte-Karlo model of epitaxy, sublimation and annealing upon (111) surface of a diamond-like crystal has been developed. Overhanging structures are allowed by the model. A 3D surface layer as big as 10^7 atomic sites with a complex configuration can be considered. Simulation of early stages of epitaxial growth both on smooth and porous Si surfaces as well as annealing of stepwise and porous surfaces were carried out. The Schwoebel barrier influence on the 3D-island generation during epitaxial growth was considered as an alternative mechanism of the quantum dot formation. Investigation of monoatomic steps on (111) surfaces of a diamond type crystalline lattice during sublimation was carried out.