

## Формирование ступенчатой поверхности Si(100) и ее влияние на рост островков Ge

© М.Ю. Есин<sup>1</sup>, А.И. Никифоров<sup>1,2</sup>, В.А. Тимофеев<sup>1</sup>, А.Р. Туктамышев<sup>1</sup>, В.И. Машанов<sup>1</sup>,  
И.Д. Лошкарев<sup>1</sup>, А.С. Дерябин<sup>1</sup>, О.П. Пчеляков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>2</sup> Национальный исследовательский Томский государственный университет, 634050 Томск, Россия

E-mail: yesinm@isp.nsc.ru

(Получена 25 апреля 2017 г. Принята к печати 2 мая 2017 г.)

Исследован переход от двухдоменной к однодоменной поверхности на подложке Si(100). Показано с использованием дифракции быстрых электронов, что при температуре 600°C и при скорости осаждения 0.652 Å/с предварительно нагретую до 1000°C подложку Si(100), отклоненную к плоскости (111) на угол 0.35°, при неизменном потоке Si происходит полное исчезновение серии рефлексов от сверхструктуры 1 × 2. Исчезновение рефлексов сверхструктуры 1 × 2 обусловлено переходом поверхности от моноатомных к двухатомным ступенькам. При скоростях роста менее 0.652 Å/с также наблюдался переход от двухдоменной к однодоменной поверхности и с уменьшением скорости роста отношение интенсивностей  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  уменьшается, максимум зависимостей сдвигается в сторону меньших температур. Полного исчезновения серии рефлексов от сверхструктуры при предварительном отжиге при температуре 700°C не наблюдалось, но наблюдалось только при предварительном отжиге при температурах 900 и 1000°C. Исследования роста островков Ge проводились на поверхности Si(100), которая предварительно отжигалась при температуре 800°C. Показано, что островки имеют тенденцию зарождаться на краях ступенек. Предложен механизм упорядочения островков Ge на поверхности Si(100).

DOI: 10.21883/FTP.2018.03.45630.8624

### 1. Введение

Проявление самоорганизации в системе Ge–Si позволило получать квантовые точки нанометровых размеров с плотностью  $10^{10}–10^{11} \text{ см}^{-2}$  [1,2]. По причине уникальных оптоэлектронных свойств, которые включают в себя высокую чувствительность в ближней инфракрасной области длин волн, высокую пропускную способность и совместимость с кремниевыми комплементарными схемами металл–оксид–полупроводник, структуры с квантовыми точками имеют большой потенциал в применениях наноэлектроники и фотоники [3]. Приборы, основанные на квантовых точках, могут быть монолитно интегрированы со схемами считывания данных на базе кремния с невысокой стоимостью и низким энергопотреблением [3]. В работе [4] также моделированием показана осуществимость 9-нанометрового канала из квантовых точек полевого транзистора. Характеристики транзистора с квантовыми точками в канале делают возможным проектирование компактной двухбитной многозначной логической микросхемы [4].

В работе [5] было показано, что стороны пирамидального островка Ge (hut-островка) расположены под углом 45° по отношению к направлению димерных рядов; следовательно, поверхностные деформации и анизотропия диффузии не влияют на форму островков. Ступеньки  $\langle 100 \rangle$  (расположенные под углом в 45° по отношению к направлению димерных рядов), формирующиеся на поверхности смачивающего слоя Ge,

действуют как позиции зарождения. В работе [6] были представлены экспериментальные результаты, в которых островки предпочтительно декорируют края ступенек в виде ожерелья, что указывает на возможность создания упорядоченных квантовых точек.

Одной из основных проблем гетероэпитаксии пленок GaAs хорошего качества на подложках Si(100) является генерация антифазных границ вследствие присутствия моноатомных ступенек на поверхности Si(100) [7,8]. Для роста пленок GaAs используют подложки Si(100), отклоненные более чем на 2° от плоскости (100) к плоскости (111), чтобы получить двухатомные ступени. В нашей работе отработана методика контроля формирования двухатомных ступенек методом дифракции быстрых электронов (ДБЭ). Представлены результаты исследования формирования двухатомных ступенек на подложке Si(100), отклоненной от плоскости (100) к плоскости (111) на угол 0.35°. Показаны условия формирования двухатомных ступенек на подложке Si(100) для данной разориентации.

Полученные результаты в широком диапазоне условий роста могут послужить основой для развития моделей элементарных процессов присоединения и отрыва адатомов, миграции адатома вдоль края ступени, формирования изломов и охарактеризовать условия проницаемости ступенек как следствие перехода от моноатомных к двухатомным ступенькам за счет движения с различными скоростями двух типов террас А и В.

## 2. Методика эксперимента

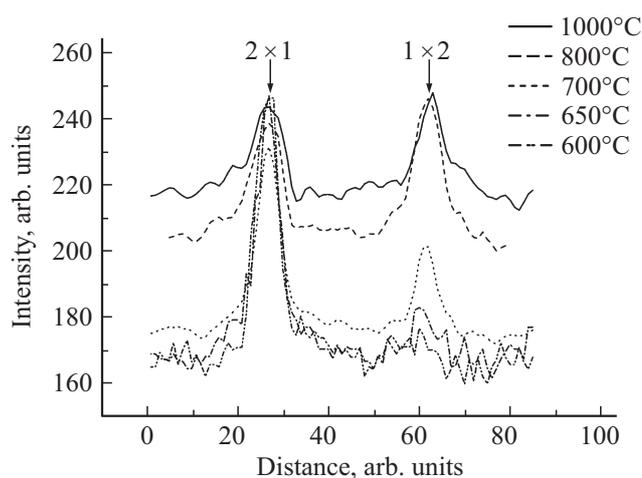
Рост проводился в установке молекулярно-лучевой эпитаксии „Катунь-С“, оснащенной электронно-лучевыми испарителями для Si и Ge. Аналитическая часть камеры состоит из квадрупольного масс-спектрометра, кварцевого измерителя толщины и дифрактометра быстрых электронов с энергией 20 кэВ. Исследования проводились на подложке Si(100), которая предварительно подвергалась очистке для получения чистой и атомарно-гладкой поверхности. По данным рентгеновской дифрактометрии подложка Si(100) была отклонена к плоскости (111) на угол, равный  $0.35^\circ$ . Контроль структуры и морфологии пленок осуществлялся с помощью дифракции быстрых электронов на отражение (ДБЭО) и с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) на сканирующем зондовом микроскопе (СЗМ) Solver P47 в контактном режиме.

После стандартной процедуры подготовки (нанесение химического окисла, отжиг в камере роста, выращивание буферного слоя Si) поверхность имеет двухдоменную структуру  $2 \times 1 + 1 \times 2$ . Одна ступенька имеет домен  $2 \times 1$ , другая  $1 \times 2$ , с периодическим чередованием на моноатомных ступеньках. Когда электронный луч падает под скользящим углом к пластине Si(100), рассеяние электронов происходит в области на поверхности, на которой находится большое количество двух доменов. Интенсивность ДБЭ от двухдоменной поверхности Si(100) является суперпозицией от интенсивности дифракции, в которую вносят вклад два типа доменов —  $2 \times 1$  и  $1 \times 2$ . Если электронный луч расположить поперек ступенек, то в интенсивность ДБЭ будет укладываться максимальное число двух этих доменных систем, что является выгодным и удобным для анализа интенсивности рефлексов [9–11].

При пересечении плоскости, на которой находятся стержни обратного пространства, со сферой Эвальда, на сфере Эвальда образуются кольца Лауэ. Существует классификация зон Лауэ (колец Лауэ). В зависимости от геометрических особенностей установки (например, расстояния от электронной пушки до пластины, расстояния от пластины до фотолюминесцентного экрана, размеров самого фотолюминесцентного экрана и др.) можно наблюдать зоны Лауэ более высокого порядка. Как правило, для анализа берут рефлексы, находящиеся на нулевой зоне Лауэ. Для нашей обратной решетки Si(100), состоящей из двух доменов, зона Лауэ более высокого порядка будет  $1/2$ . В азимутальном направлении [100] на зоне Лауэ  $\sim 1/2$  расположены рефлексы от доменов  $2 \times 1$  и  $1 \times 2$ , и, сравнивая амплитуды интенсивностей рефлексов, можно получать информацию о распределении ширины террас [12–14].

## 3. Результаты и обсуждение

На рис. 1 показаны профили интенсивности поперек рефлексов, расположенных на зоне Лауэ половины целого значения на дифракционной картине с азимутальным



**Рис. 1.** Профили интенсивности поперек рефлексов, расположенных на зоне Лауэ половины целого значения на дифракционной картине с азимутальным направлением электронного луча [100].

направлением электронного луча [100]. В эксперименте использовалась пластина Si(100), отклоненная к плоскости (111) на угол, равный  $0.35^\circ$ . Изначально подложка нагревалась до температуры  $1000^\circ\text{C}$  в потоке атомов Si со скоростью осаждения  $0.652 \text{ \AA}/\text{с}$  и в дальнейшем равномерно температура уменьшалась до комнатной. При этом по картинам дифракции быстрых электронов наблюдалось исчезновение только одной серии рефлексов сверхструктуры  $1 \times 2$ . При  $1000^\circ\text{C}$  интенсивность рефлексов  $1 \times 2$  ( $I_{1 \times 2}$ ) больше интенсивности рефлексов  $2 \times 1$  ( $I_{2 \times 1}$ ) и при уменьшении температуры до  $800^\circ\text{C}$  преобладание  $I_{1 \times 2}$  над  $I_{2 \times 1}$  сохранялось. При дальнейшем уменьшении температуры от  $800^\circ\text{C}$  происходила инверсия интенсивностей, и интенсивность  $I_{1 \times 2}$  становилась меньше интенсивности  $I_{2 \times 1}$ . Зависимость  $I_{1 \times 2}$  от температуры имеет минимум при температуре  $600^\circ\text{C}$ . При этом интенсивность  $I_{2 \times 1}$  при уменьшении температуры до  $600^\circ\text{C}$  растет. При дальнейшем уменьшении температуры от  $600^\circ\text{C}$  до комнатной интенсивность стремится вернуться в исходному значению, но преобладание интенсивности  $I_{2 \times 1}$  над  $I_{1 \times 2}$  сохраняется. Интенсивность  $I_{2 \times 1}$  при уменьшении температуры от  $600^\circ\text{C}$  до комнатной температуры в целом не изменяется.

В работах [15,16] методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) показано, что на двухатомных ступеньках димерные ряды направлены перпендикулярно к краям ступенек. Полученный результат работ [15,16] можно объяснить тем, что при температуре  $600^\circ\text{C}$  происходит изменение механизмов двумерного роста [17]. Если ширина террасы больше средней длины миграции адатомов, то пленка растет за счет зарождения двумерных островков [18]. Если ширина террасы меньше средней длины миграции адатомов, то пленка растет за счет движения ступеней [18]. Ступеньки с перпендикулярным направлением димерных рядов к краям ступенек (тип В террас) двигаются быстрее, чем ступеньки с

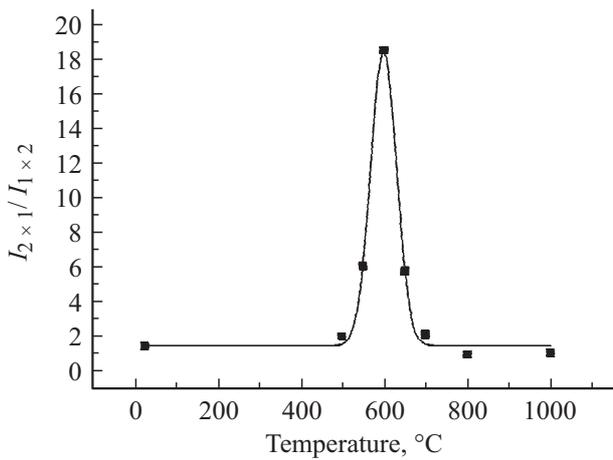


Рис. 2. Зависимость отношения интенсивностей  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  от температуры: точки — эксперимент, сплошная линия — гауссово распределение.

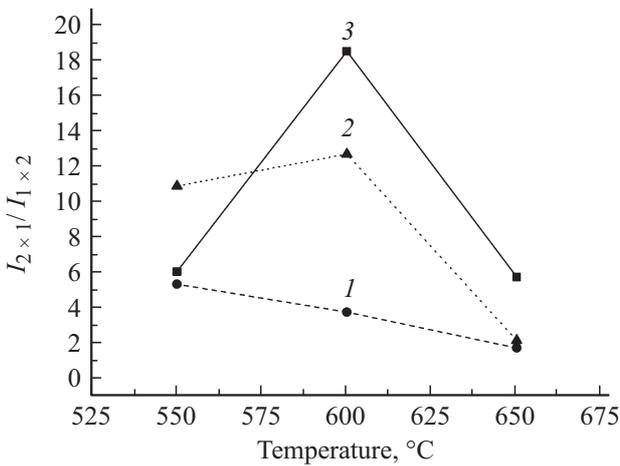


Рис. 3. Зависимости отношения интенсивностей  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  от температуры для скоростей роста 0.205 (1), 0.35 (2) и 0.652 Å/c (3).

димерными рядами, направленными параллельно краям ступенек (тип А террас). Вследствие различных скоростей движения ступенек типа А и В на поверхности формируются двухатомные ступеньки.

На рис. 2 показана зависимость отношения интенсивностей  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  от температуры. В окрестности температуры 600°C зависимость имеет вид параболы. Парабола симметрична относительно температуры 600°C, откуда следует, что энергии активации перехода поверхности из двухдоменной в однодоменную и из однодоменной в двухдоменную имеет равные величины, но разные знаки.

На рис. 3 показаны зависимости отношения интенсивностей  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  от температуры для скоростей роста 0.205, 0.35 и 0.652 Å/c. Видно, что с уменьшением скорости роста отношение интенсивностей  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  уменьшается и максимумы зависимостей сдвигаются в сторону меньших температур. Это может быть связано

с тем, что при более высокой скорости роста переход от двухдоменной в однодоменную поверхность происходит быстрее.

На рис. 4 показаны профили, сделанные поперек по отношению к рефлексам сверхструктуры  $2 \times 1$  и  $1 \times 2$ . Из профилей видно, что полное исчезновение рефлекса  $1 \times 2$  происходит при температуре предварительного отжига 900 и 1000°C, но не происходит при температуре предварительного отжига 700°C. Это можно объяснить тем, что при предварительном отжиге при температуре 1000°C шероховатость краев ступенек уменьшается и, следовательно, распределение ширин террас становится более однородным.

Были исследованы структуры с Ge-островками на ступенчатой поверхности Si(100). По описаниям характеристик пластины угол разориентации к плоскости (111) равен 0.5°. Подложка Si(100) с характеристиками, указанными выше, предварительно отжигалась в камере

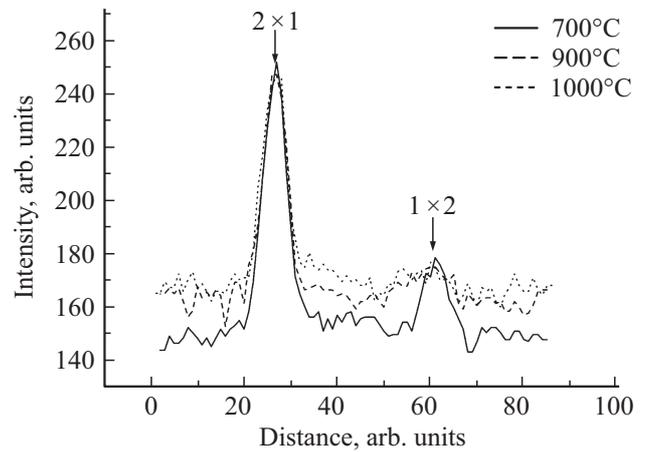


Рис. 4. Профили интенсивности поперек по отношению к рефлексам сверхструктуры  $2 \times 1$  и  $1 \times 2$ , при температурах предварительного отжига 700, 900 и 1000°C.

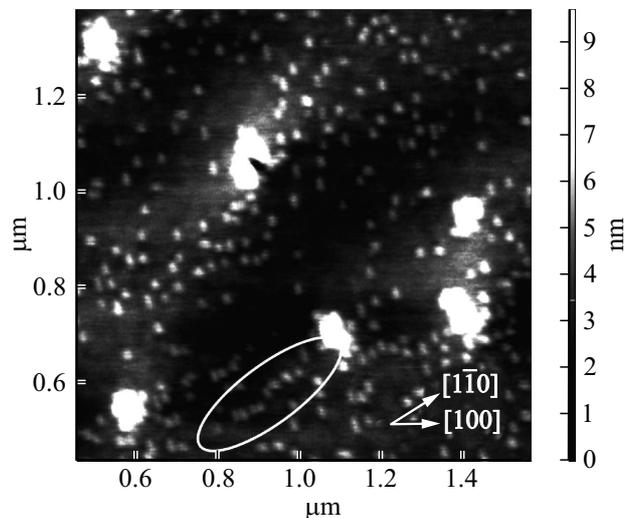
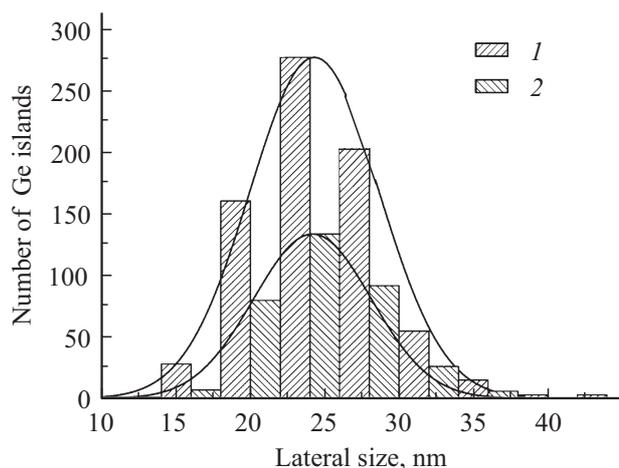


Рис. 5. АСМ-изображение поверхности с островками Ge/Si(100).



**Рис. 6.** Гистограммы распределения по латеральному размеру островков: 1 — все островки, латеральный размер  $(24 \pm 4)$  нм, 2 — зародившиеся на краях ступенек, латеральный размер  $(24 \pm 4)$  нм.

роста: сначала 2 ч при температуре  $600^\circ\text{C}$ , потом 30 мин при  $700^\circ\text{C}$  и при  $800^\circ\text{C}$  в течение 10 мин. По картинкам ДБЭ не наблюдалось исчезновения серии рефлексов сверхструктуры  $1 \times 2$ . По завершении отжига выращивалась пленка Ge с эффективной толщиной  $10 \text{ \AA}$  при температуре  $450^\circ\text{C}$ . Из АСМ-изображения (рис. 5) видно, что часть островков зарождается в направлении  $[110]$  друг за другом. Результаты статистической обработки (рис. 6) показали, что латеральный размер островков, зародившихся как на краях, так и не на краях, ступенек равен  $(24 \pm 4)$  нм, а доля островков, зародившихся на краях ступенек, равна 32%.

Как видно из АСМ-изображений, на поверхности присутствует макрошероховатость. В результате этого появляется неоднородное распределение ширины террас на поверхности. При осаждении Ge на поверхность Si(100) первоначально формируется смачивающий слой Ge, который сохраняет ступенчатую поверхность Si(100). Предполагается, что островки зарождаются на краях ступенек, где ширины террас меньше средней длины миграции адатомов. По данным ДБЭ, при предварительном отжиге происходит переход поверхности от моноатомных к двухатомным ступенькам и, возможно, островки зарождаются на краях двухатомных ступенек.

#### 4. Заключение

Показано, что для пластины Si(100), имеющей отклонение к плоскости (111) с углом разориентации  $0.35^\circ$ , при температуре  $600^\circ\text{C}$  в потоке Si со скоростью осаждения  $0.652 \text{ \AA}/\text{с}$ , происходит переход от двухдоменной к однодоменной поверхности. Исчезновение рефлексов сверхструктуры  $1 \times 2$  обусловлено переходом поверхности от моноатомных к двухатомным ступенькам. При скоростях роста  $< 0.652 \text{ \AA}/\text{с}$  также наблюдалось исчезновение только одной серии рефлексов

сверхструктуры,  $1 \times 2$ . С уменьшением скорости роста отношение интенсивностей  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  уменьшается и максимум зависимостей сдвигается в период меньших температур. Показано, что при предварительном отжиге при  $700^\circ\text{C}$  полного исчезновения серии рефлексов от сверхструктуры не было, это наблюдалось только в случаях предварительного отжига при  $900\text{--}1000^\circ\text{C}$ . Исследования роста островков Ge проводились на поверхности Si(100), которая предварительно отжигалась при температуре  $800^\circ\text{C}$ . Показано, что островки имеют тенденцию зарождаться на краях ступенек. Предложены механизмы упорядочения островков Ge на поверхности Si(100).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-32-60087, 16-29-03292) и РНФ (грант № 16-12-00023).

#### Список литературы

- [1] О.П. Пчеляков, Ю.Б. Болховитянов, А.В. Двуреченский, Л.В. Соколов, А.И. Никифоров, А.И. Якимов, Б. Фойхтлендер. *ФТП*, **34**, 1281 (2000).
- [2] K. Wang, D. Cha, J. Liu, C. Chen. *Proc. IEEE*, **95**, 1866 (2007).
- [3] J. Michel, J. Liu, C. Kimerling. *Nature Photonics*, **4**, 527 (2010).
- [4] F. Jain, M. Lingalugari, J. Kondo, P. Mirdha, E. Suarez, J. Chandy, E. Heller. *J. Electron. Mater.*, **45** (11), 5663 (2016).
- [5] Y.-W. Mo, D.E. Savage, B.S. Swartzentruber, M.G. Lagally. *Phys. Rev. Lett.*, **65** (8), 1020 (1990).
- [6] I. Goldfarb, P.T. Hayden, J.H.G. Owen, G.A.D. Briggs. *Phys. Rev. Lett.*, **78** (20), 3959 (1997).
- [7] H. Yonezu. *Semicond. Sci. Technol.*, **17**, 762 (2002).
- [8] J. Stoemenos, Ph. Komninou, Th. Karakostas, A. Georgakilas, A. Christou. *Mater. Sci. Forum*, **126–128**, 631 (1993).
- [9] T. Sakamoto, H. Kawanami. *Surf. Sci.*, **111**, 177 (1981).
- [10] T. Sakamoto, T. Kawamura, G. Hashiguchi. *Appl. Phys. Lett.*, **48**, 1612 (1986).
- [11] T. Sakamoto, T. Kawamura, S. Nago, G. Hashiguchi, K. Sakamoto, K. Kuniyoshi. *J. Cryst. Growth*, **81**, 59 (1987).
- [12] A. Ichimiya, P.I. Cohen. *Reflection high-energy electron diffraction* (Cambridge University Press, 2004).
- [13] Zh.L. Wang. *Reflection electron microscopy and spectroscopy for surface analysis* (Cambridge University Press, 1996).
- [14] X. Wang, K.M. Chen et al. *Surf. Sci.*, **228**, 334 (1990).
- [15] F. Wu, M.G. Lagally. *Phys. Rev. Lett.*, **75** (13), 2534 (1995).
- [16] F. Wu, X. Chen, Zh. Zhang, M.G. Lagally. *Phys. Rev. Lett.*, **74** (4), 574 (1995).
- [17] J.H. Neave, P.J. Dobson, V.A. Joyce, J. Zhang. *Appl. Phys. Lett.*, **47**, 100 (1985).
- [18] К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин, А.В. Зотов, М. Катама. *Введение в физику поверхности* (М., Наука, 2006) гл. 12, с. 376.

Редактор Л.В. Шаронова

## Formation of step Si(100) surface and its effect on Ge islands growth

*M.Yu. Esin<sup>1</sup>, A.I. Nikiforov<sup>1,2</sup>, V.A. Timofeev<sup>1</sup>,  
A.R. Tuktamyshev<sup>1</sup>, V.I. Mashanov<sup>1</sup>, I.D. Loshkarev<sup>1</sup>,  
A.S. Deryabin<sup>1</sup>, O.P. Pchelyakov<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup> Rzhanov Institute of Semiconductor Physics,  
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

<sup>2</sup> Tomsk State University,  
634050 Tomsk, Russia

**Abstract** The transition from two-domains to one-domain surface of Si(100) substrate was investigated. It is shown by reflection high-energy electron diffraction, that at the temperature 660°C in the Si flow with the deposition rate 0.652 Å/s the complete disappearance of the reflex series from the 1 × 2 superstructure occurs the Si(100) substrate was including of the (III) plane on the angle 0.35° preliminarily heated up to 1000°C and the Si flow was invariable. The disappearance of the 1 × 2 superstructure reflexes is due to the transition of the surface from the monoatomic to the diatomic steps. At the growth rate < 0.652 Å/s also the transition from two-domains to one-domain surface was observed and with the decrease of the growth rate the ratio of the  $I_{2 \times 1}/I_{1 \times 2}$  intensity decreases and the dependence maximum shifts to the less temperature. The complete disappearance of the reflex series from the superstructure at preliminary annealing at the temperature 700°C was not observed, but it was observed only at preliminary annealing at the temperatures 900 and 1000°C. The investigations of the Ge island growth were carried out on the Si(100) surface, which was preliminarily annealed at the temperature 800°C. It was shown that the islands tend to nucleate at the step edges. The mechanisms of the Ge island ordering on Si(100) surface are suggested.