

УДК 541.132

МОДЕЛЬ ПЕРЕХОДА ОТ ДВУХМЕРНО-СЛОЕВОГО К ТРЕХМЕРНОМУ РОСТУ ПРИ ГЕТЕРОЭПИТАКСИИ Ge/Si

© 2002 г. В. А. Зиновьев, А. В. Двуреченский, П. Л. Новиков

Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 25.05.2001 г.

В данной работе предлагается модель перехода от послойного роста пленки к формированию трехмерных островков в процессе гетероэпитаксии при наличии рассогласования по постоянной решетки между пленкой и подложкой. В основе модели лежит представление о том, что упругая деформация в объеме слоя влияет на зарождение островков и поверхностную диффузию адатомов через реконструкцию поверхности. Особенностью данного перехода является отличие сверхструктуры на гранях трехмерных островков от сверхструктуры плоской поверхности при двухмерно-слоевом росте. Указанный переход реализуется в рамках вычислительного эксперимента, учитывающего вероятностный характер процессов диффузии и зарождения.

ВВЕДЕНИЕ

В гетероэпитаксиальной системе при наличии рассогласования по постоянной кристаллической решетки между осаждаемым материалом и подложкой первоначальный рост может происходить послойно. Однако при критической толщине пленки на поверхности сплошного слоя образуются трехмерные (3D) островки [1–3]. В этом случае говорят, что реализуется режим роста Странско-Крастанова. Традиционное объяснение этого эффекта сводится к тому, что по мере роста сплошного слоя энергия упругой деформации возрастает и 2D–3D-переход сопровождается релаксацией упругих деформаций системы. Однако это объяснение не вскрывает микроскопического механизма перехода. Формирование островков происходит в результате процессов поверхностной диффузии адатомов. Поэтому для осуществления 2D–3D-перехода необходимо, чтобы определенным образом изменялся потенциальный рельеф на поверхности растущего слоя. Между тем, вопрос о влиянии упругих деформаций, возникающих в объеме, на состояние поверхности гетероэпитаксиального слоя, изучен недостаточно. В настоящей работе сделан расчет упругих деформаций в системе Ge/Si(111) на различных стадиях гетероэпитаксии и на основе результатов расчета предложена микроскопическая модель 2D–3D-перехода.

МОДЕЛЬ

В рамках атомистической модели Китинга [4] была решена задача о распределении упругих деформаций в гетеросистеме Ge/Si(111) с различной толщиной смачивающего слоя. Сначала был рассмотрен случай кристаллической поверхности

(111), не содержащей сверхструктуры. На рис. 1 показана расчетная зависимость энергии упругой деформации (E_d), приходящейся на один атом поверхности, от толщины смачивающего слоя Ge. При толщине более 1 бислоя (бс) E_d практически не меняется. Это означает, что с увеличением толщины слоя Ge основные деформации в системе возникают вблизи границы раздела Si/Ge, влияние которой на поверхность ослабляется. Таким образом, в первом приближении состояние поверхности по мере роста не меняется и предпосылок для 2D–3D-перехода не возникает. Поэтому в рамках традиционного подхода не находится удовлетворительного объяснения изменению характера поверхностных процессов и образованию 3D-островков при критической толщине пленки. Это об-

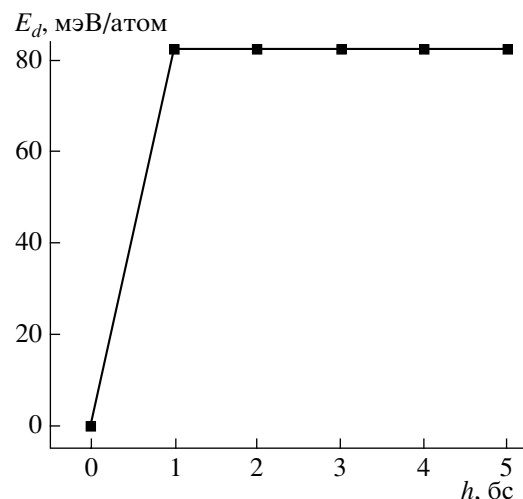


Рис. 1. Зависимость удельной энергии упругой деформации E_d для поверхностных атомов от толщины h слоя Ge.

стоятельность делает актуальной задачу построения оригинальной модели 2D–3D-перехода, включающей в себя дополнительные предположения.

Предлагаемая нами модель 2D–3D-перехода исходит из представления о том, что упругая деформация в объеме слоя влияет на зарождение островков и поверхностную диффузию адатомов через реконструкцию поверхности. Согласно данным теоретических *ab initio* [5] и экспериментальных [6] исследований, тип сверхструктуры зависит от поверхностной энергии кристалла. С другой стороны тип сверхструктуры существенно влияет на характер поверхностной атомной диффузии и процессы зарождения островков.

МЕТОД РАСЧЕТА,
РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

С целью установить качественную зависимость поверхностной энергии смачивающего слоя с реконструированной поверхностью от толщины h слоя мы произвели расчет функции:

$$\Delta E_S(h) = E_S(h) - E_0(h),$$

где $E_S(h)$ – вклад упругих деформаций в энергию системы Si/Ge(111) со сверхструктурой $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ поверхности, $E_0(h)$ – аналогичная величина для той же системы, не содержащей сверхструктуры. Сверхструктура $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ по величине поверхностной энергии сопоставима со сверхструктурами 7×7 и 5×5 [7] и в то же время хорошо адаптирована для построения вычислительного алгоритма. Вклад упругих деформаций $E_S(h)$ рассчитывался на основе модифицированной атомистической модели Киттинга [8], учитывающей вклад реконструкции в энергию упругих деформаций:

$$E_S = \sum_i \left(\sum_{j=1}^4 \frac{\alpha_{ij}}{a_{ij}^2} (x_{ij}^2 - a_{ij}^2)^2 + \sum_{j,k>j}^4 \frac{2\beta_i}{a_{ij}a_{ik}} (x_{ij}x_{ik} - a_{ij}a_{ik} \cos \theta_i)^2 \right),$$

где x_{ij} – вектор, соединяющий i -тый и j -тый атомы, a_{ij} – равновесная длина связи между i -тым и j -тым атомами, θ_i – равновесный валентный угол. Для поверхностных атомов положение и значение валентного угла учитывали особенности сверхструктуры $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ [7]. На рис. 2 представлена полученная зависимость ΔE_S от толщины смачивающего слоя. Видно, что поверхностная энергия монотонно возрастает при увеличении толщины слоя. Этот результат качественно согласуется с представлением о том, что с ростом толщины пленки возможна смена поверхностной реконструкции.

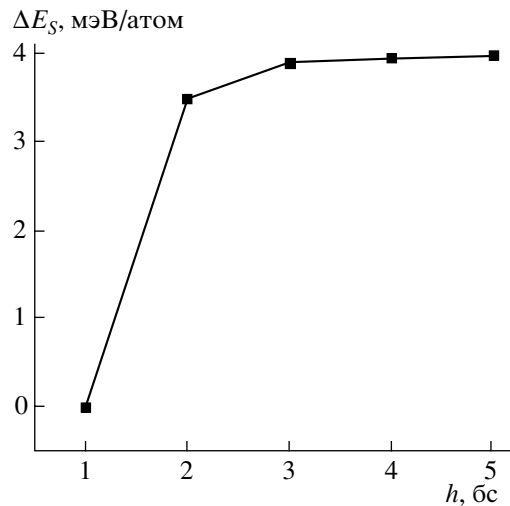


Рис. 2. Зависимость вклада упругих деформаций в удельную поверхностную энергию ΔE_S от толщины h слоя Ge.

Существующие экспериментальные данные по осаждению Ge на Si(111) подложку также демонстрируют изменение сверхструктуры поверхности в процессе роста [2, 9]. На начальных стадиях роста псевдоморфная пленка Ge(111) повторяет сверхструктуру 7×7 исходной поверхности Si(111). По мере осаждения Ge происходит постепенная реконструкция поверхности от сверхструктуры 7×7 к 5×5 . При критической толщине пленки 2–3 бс поверхность характеризуется одной сверхструктурой 5×5 . С этого момента зарождение двумерных островков высотой в 1 бс резко подавляется [3], и начинают формироваться изолированные 3D-островки на поверхности смачивающего слоя Ge(111).

Отметим, что для устойчивого роста 3D-островков необходимо, чтобы диффузионная подвижность адатомов на верхних гранях была меньше, чем на поверхности смачивающего слоя. Для системы островок–смачивающий слой было рассчитано распределение удельной энергии упругой деформации U в островке (рис. 3). В рамках предложенной модели различие в величинах U на верхней грани островка и на поверхности смачивающего слоя Ge, соответственно, приводит к тому, что их сверхструктуры отличаются. Согласно экспериментальным данным вершина 3D-островка характеризуется сверхструктурами 7×7 или 2×8 , в то время как поверхность смачивающего слоя – 5×5 [2].

Поскольку диффузия и зарождение являются случайными процессами, то для их описания необходим учет как микроскопического механизма, так и вероятностного характера его проявления. Поэтому на основе предложенной модели методом статистического моделирования процессов

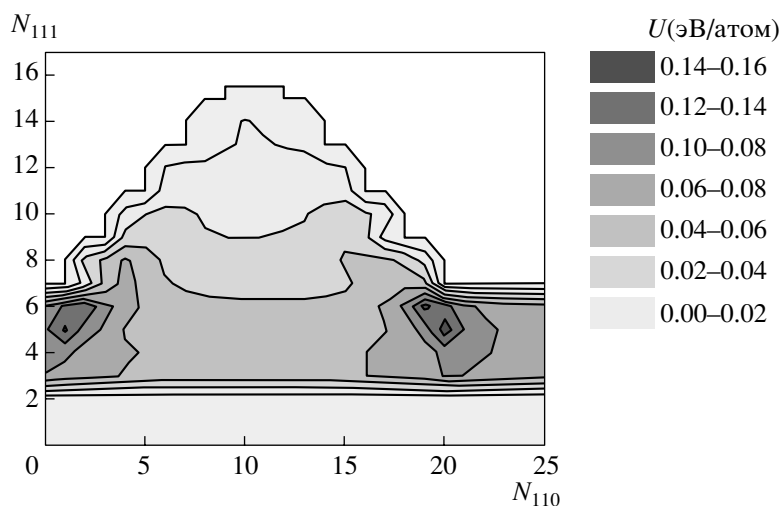


Рис. 3. Расчетное распределение плотности энергии упругой деформации U внутри 3D-островка высотой 5 бс, расположенного на поверхности смачивающего слоя Ge толщиной 2 бс. N_{111} , N_{110} – число атомных плоскостей в направлениях [111] и [110] соответственно. Отношение высоты островка к ширине основания составляет 0.12, рассогласование постоянных решеток Ge и Si – 4%.

роста [10, 11] был проведен вычислительный эксперимент по осаждению Ge на Si(111) подложку. По достижении толщины пленки критической величины, положенной равной 2 бс, коэффициент диффузии адатомов на поверхности смачивающего слоя понижался.

Для характеристики процесса роста использовалась расчетная поверхностная шероховатость (S), которая пропорциональна числу атомов на вертикальных участках поверхности [10]:

$$S = \frac{1}{4M} \sum_{i=1}^{\sqrt{M}} \sum_{j=1}^{\sqrt{M}} [|h_{i,j} - h_{i+1,j}| + |h_{i,j} - h_{i,j+1}|],$$

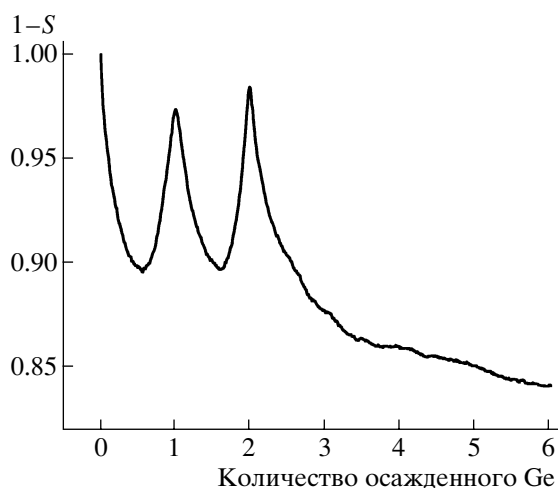


Рис. 4. Расчетное изменение поверхностной шероховатости (в единицах $1-S$) в процессе гетероэпитаксии Ge/Si(111) из молекулярного пучка. Температура подложки 450°C, скорость осаждения 0.1 бс/с.

где M – число мест на поверхности, в которых может находиться атом, $h_{i,j}$ – высота атома над исходной поверхностью.

Моделирование показало, что при осаждении Ge наблюдаются периодические изменения расчетной величины $(1-S)$, что соответствует двухмерно-слоевому механизму роста. Период изменения был равен времени осаждения 1 бс. При толщине пленки 2 бс происходил “срыв” осцилляций и при дальнейшем осаждении величина $(1-S)$ монотонно убывала (рис. 4). Такое изменение морфологии поверхности соответствовало переходу от послойного роста пленки к зарождению и росту 3D-островков Ge высотой больше 1 бс. Подобное поведение осцилляций интенсивности зеркального рефлекса при дифракции быстрых электронов наблюдалось в эксперименте в процессе роста пленки Ge на Si(111) и связывалось с переходом к трехмерному росту при достижении пленкой критической толщины [1].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе предложена модель 2D–3D-перехода при гетероэпитаксии Ge/Si(111). Согласно модели, микроскопический механизм 2D–3D-перехода заключается в изменении сверхструктуры поверхности, вызванном вкладом упругих деформаций в поверхностную энергию пленки и сопровождающемся увеличением

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 99-02-17196 и программ по направлению “Поверхностные атомные структуры”, проект № 4.2.99 и “Физика твердотельных наноструктур” (грант № 99-1131). Авторы благодарят

О.П. Пчелякова и Ю.Б. Болховитянова за полезное обсуждение результатов работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Pchelyakov O.P., Markov V.A., Nikiforov A.I., Sokolov L.V.* // Thin Solid Films. 1997. V. 306. P. 299.
2. *Motta N., Sgarlata A., Calarco R. et al.* // Surf. Sci. 1998. V. 406. P. 254.
3. *Voigtlander B., Zinner A.* // Appl. Phys. Lett. 1993. V. 63. P. 3055.
4. *Keating P.N.* // Phys. Rev. 1966. V. 145. P. 637.
5. *Mercer J.L., Jr. Chou M.Y.* // Phys. Rev. B. 1993. V. 48. № 8. P. 5374.
6. *Goosmann H.J., Bean J.C., Feldman L.C. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1985. V. 55. P. 1106.
7. *Mead R.D., Vanderbilt D.* // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. № 6. P. 3905.
8. *Tersoff J.* // Phys. Rev. 1991. V. 43. № 11. P. 9377.
9. *Lamin M.A., Pchelyakov O.P., Sokolov L.V. et al.* // Surf. Sci. 1989. V. 207. P. 418.
10. *Vvedensky D.D., Clarke S.* // Surf. Sci. 1990. V. 225. P. 373.
11. *Двуреченский А.В., Зиновьев В.А., Марков В.А.* // ЖЭТФ. 1998. V. 114. P. 2055.

The Model of Transition from Two-dimensional Layer to Three-dimensional Growth at Heteroepitaxy of Ge/Si

V. A. Zinov'ev, A. V. Dvurechenskii, P. L. Novikov

The model of transition from the layer-by-layer film growth to the formation of 3D islands during the heteroepitaxy of thin crystalline film on the substrate with lattice mismatch is suggested. The main approach of the model is that the elastic deformations arising inside the film influence the nucleation of islands and surface adatom diffusion via the surface reconstruction. The specific feature of this transition is the difference of the superstructure on island facets from that on wetting layer surface. The 2D–3D transition is simulated by computational modeling taking the account of random nature of diffusion and nucleation processes.