

## Аннотация

Возможность применения структур на основе твёрдых растворов Si–Ge–Sn в области микро- и фотоэлектроники определяет повышенный интерес к этим материалам. Для формирования структурно совершенных границ раздела в данной эпитаксиальной системе требуется глубокое понимание фундаментальных процессов, определяющих зарождение и рост слоёв твёрдого раствора. При изготовлении структур пониженной размерности методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) определяющим значением является понимание таких фундаментальных процессов как адсорбция атомов осаждаемого материала, их диффузия, встраивание в край атомной ступени, взаимодействие между собой с последующим формированием нового эпитаксиального слоя в виде двумерного (2D) ростового островка или взаимодействие с поверхностью с образованием новой примесно-индуцированной реконструкции. Исходя из того, что большинство технологических процедур, связанных с методом МЛЭ, производятся с реконструированными поверхностями, характеристика процессов, протекающих на таких поверхностях, приобретает первостепенное значение. Актуальными являются вопросы, связанные с изменениями в кинетике 2D-островкового зарождения в процессе осаждения Ge и Si на поверхность Si(111)-(7×7) при повышенных температурах, в также с формированием металлических покрытий Sn на поверхности Si(111), которые могут выступать в качестве сурфактанта для последующего эпитаксиального роста Ge и Si.

**Исполнитель (Ф.И.О):** Петров Алексей Сергеевич

**Наименование выпускной научно-квалификационной работы:** Атомные процессы на поверхности Si(111) в условиях осаждения кремния, германия и олова

**Объект исследования:** кинетика 2D-островкового зарождения при росте Ge и Si на поверхности Si(111)-(7×7), структура поверхности Si(111) в условиях адсорбции Sn

**Цель:** определить количественные параметры, контролирующие начальные стадии эпитаксиального роста Ge и Si, а так же выявить физические закономерности формирования смачивающих металлических покрытий Sn на поверхности Si(111).

**Методы исследования:** *in situ* сверхвысоковакуумная отражательная электронная микроскопия (СВВ ОЭМ), *ex situ* атомно-силовая микроскопия (АСМ).

### **Научная новизна:**

1. На основе анализа ширины области обеднения по 2D островкам вблизи атомных ступеней подтверждена доминирующая роль кремниевых нанокластеров на начальных стадиях гомоэпитаксии на поверхности Si(111)-(7×7) при  $T > 600^\circ\text{C}$ .
2. Показано, что скачок эффективной энергии активации 2D островкового зарождения  $E_{2D}$  от ~0.5 эВ до ~1.5 эВ при  $T \sim 500^\circ\text{C}$  на начальных стадиях осаждения Ge на поверхность Si(111)-(7×7) так же определяется доминирующим вкладом нанокластерной динамики в массоперенос, а энергия активации диффузии германиевых нанокластеров составляет 1.3–1.4 эВ.
3. Установлено, что лимитированная поверхностной диффузией (DL) кинетика зарождения 2D островка вблизи атомных ступеней и большой размер критического зародыша ( $i \gg 1$ ) для зарождения этого островка на начальных стадиях осаждения Ge и Si являются следствием высокой концентрации изомолов на ступенях.

4. Обнаружено, что рост Ge в центре широких террас поверхности Si(111)-(7×7) продолжает лимитироваться DL кинетикой, обеспечиваемой низкими барьерами на встраивание в край 2D островка.
5. Впервые методом *in situ* СВВ ОЭМ визуализированы структурные и морфологические изменения на поверхности Si(111) непосредственно в процессе адсорбции, электромиграции и десорбции покрытий Sn при температурах до 860°C.
6. Продемонстрирован механизм формирования мозаичной фазы ( $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ )-Sn при  $T > 650^\circ\text{C}$ , согласно которому на начальных стадиях адсорбции Sn происходит сдвиг атомных ступеней, а вышедшие в результате на террасу атомы Si учувствуют в формировании структуры ( $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ ).
7. Экспериментально обнаружено влияние электромиграции на структурные переходы ( $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ )-Sn  $\Leftrightarrow$  "1×1"-Sn в процессе адсорбции Sn на поверхность Si(111).
8. Обнаружено, что структурные изменения, индуцированные осаждением и десорбцией Sn, приводят к повышенному массопереносу на поверхности Si(111), что выражается в кластерировании атомных ступеней.
9. Экспериментально определены эффективный заряд и энергия активации десорбции адатома Sn на поверхности Si(111)-( $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ )-Sn.

#### **Теоретическая и практическая значимость:**

Полученные качественные и количественные данные о характере массопереноса и 2D островкового зарождения на начальных стадиях осаждения Ge представляют интерес как для построения достоверной модели гетероэпитаксиального роста на реконструированной поверхности Si(111)-(7×7) и повышенных температур, так и для оптимизации процесса роста смачивающих слоёв Ge, используемых в качестве буферных слоёв при изготовлении многослойных гетероструктур с большим рассогласованием параметров решётки. Влияние повышенной концентрации изломов на зарождение и массоперенос вблизи ступеней определяет необходимость специфической подготовки кристаллических поверхностей перед началом основных стадий эпитаксиального роста с целью минимизации данного фактора.

Визуализация процессов адсорбции Sn на поверхности Si(111) переводит на более качественный уровень представление о фундаментальных взаимодействиях атомов металлов с полупроводниковой кристаллической поверхностью и друг с другом. Вскрытые механизмы формирования и эволюции покрытий Sn в условиях электромиграции и повышенных температур, а также их количественные характеристики могут быть использованы для целого ряда практических применений. *In situ* контроль подготовки слоя Sn в качестве сурфактанта для модификации эпитаксиального роста на поверхности Si(111) позволяет выработать методику получения ростовой поверхности с минимальным количеством дефектов. Возможность изменять локальную концентрацию полученного покрытия Sn может помочь в предотвращении сегрегации Sn при последующих процедурах изготовления на поверхности Si(111) растворов Sn с другими материалами (например с Ge).

**Область применения:** изготовление наноструктур для микро- и фотоэлектроники, фундаментальные исследования

**Список ключевых слов:** поверхность Si(111), молекулярно-лучевая эпитаксия, Ge, Si, нанокластеры, 2D-островковое зарождение, моноатомные ступени, поверхностная диффузия, осаждение металлов, Sn, электромиграция, десорбция, сверхструктурные переходы, морфология поверхности, сверхвысоковакуумная отражательная электронная микроскопия, атомно-силовая микроскопия

### **Апробация работы:**

Основные результаты, полученные в рамках данной работы, представлялись и обсуждались на семинарах и конкурсах молодых учёных ИФП СО РАН, а также докладывались на следующих российских и международных конференциях: 6th European Conference on Crystal Growth (Varna, Bulgaria, 2018), 12-я Международная конференция КРЕМНИЙ-2018 (Черноголовка, 2018), 20-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 2018), Mechanisms and non-linear problems of nucleation and growth of crystals and thin films (Saint Petersburg, 2019), 14-я Российская конференция по физике полупроводников "Полупроводники-2019" (Новосибирск, 2019), Школа молодых ученых «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем» АППН-2019 (Новосибирск, 2019), 5th Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Vladivostok, 2020), 13-я Международная конференция КРЕМНИЙ-2020 (Ялта, 2020), Школа молодых ученых «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем» АППН-2020 (Новосибирск, 2020).

### **Публикации:**

#### **Статьи:**

1. А.С. Петров, С.В. Ситников, С.С. Косолюбов, А.В. Латышев, Эволюция микролунок на широких террасах поверхности Si(111) в процессе высокотемпературного отжига, Физика и техника полупроводников, 2019, том 53, вып. 4. DOI: 10.21883/ftp.2019.04.47438.9008
2. A.S. Petrov, D.I. Rogilo, D.V. Sheglov, A.V. Latyshev, 2D island nucleation controlled by nanocluster diffusion during Si and Ge epitaxy on Si(111)-(7×7) surface at elevated temperatures, Journal of Crystal Growth, № 531, 2020, pp. 1–6. DOI: org/10.1016/j.jcrysgr.2019.125347
3. Д.И. Рогило, С.В. Ситников, Е.Е. Родякина, А.С. Петров, С.А. Пономарев, Д.В. Щеглов, Л.И. Федина, А.В. Латышев, In situ отражательная электронная микроскопия для анализа процессов на поверхности кремния: сублимации, электромиграции, адсорбции примесных атомов, КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2021, том 66, № 4, с. 530–541. DOI: 10.31857/S0023476121040196

#### **Тезисы и труды конференций:**

4. A. Petrov, D. Rogilo, D. Sheglov, A. Latyshev, 2D island nucleation controlled by nanocluster diffusion during Si and Ge epitaxy on Si(111)-(7×7) surface at elevated temperatures // Mechanisms and non-linear problems of nucleation and growth of crystals and thin films. — Санкт-Петербург, 2019.
5. А.С. Петров, Д.И. Рогило, Д.В. Щеглов, А.В. Латышев, Кинетика двумерно-островкового зарождения при субмонослойном осаждении Si и Ge на атомно-чистую поверхность Si(111) и с поверхностными фазами, индуцированными оловом // XIV Российская конференция по физике полупроводников "Полупроводники-2019". — Новосибирск, я 2019.
6. Петров А.С., Рогило Д.И., Сверхструктурные переходы и морфологические трансформации на поверхности Si(111), индуцированные осаждением Sn // Школа молодых ученых «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем» АППН-2019. — Новосибирск, 2019.
7. Alexey Petrov, Dmitry Rogilo, Dmitry Sheglov, Alexander Latyshev, Effect of adatom sink to atomic steps on the kinetics of Ge and Si two-dimensional island nucleation on Si(111)-(7×7) surface // Sixth European Conference on Crystal Growth. — Bulgaria, Varna, 2018.

8. Петров А.С., Рогило Д.И., Щеглов Д.В., Латышев А.В., Влияние стока адатомов в ступени на двумерно-островковое зарождение на поверхности Si(111)-(7×7) при осаждении Si и Ge // XII Международная конференция КРЕМНИЙ-2018. — Черноголовка, 2018.
9. Петров А.С., Рогило Д.И., Латышев А.В., Влияние стока адатомов в ступени на двумерно-островковое зарождение Si и Ge на поверхности Si(111) // XX Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. — Санкт-Петербург, 2018.
10. А. С. Петров, Д. И. Рогило, Структурные изменения на поверхности Si(111) при адсорбции Sn в условиях повышенных температур и электромиграции // XIII Международная конференция «Кремний-2020». — Ялта, 2020.
11. Петров А.С., Рогило Д.И., Перераспределение атомных ступеней на поверхности Si(111) при структурных переходах, индуцированных адсорбцией и десорбцией Sn // Школа молодых ученых «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем» АППН-2020. — Новосибирск, 2020.
12. A.S. Petrov, D.I. Rogilo, D.V. Sheglov, A.V. Latyshev, Structural transformations on the Si(111) surface observed during Sn adsorption, desorption, and electromigration // Fifth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials. — Vladivostok, 2020.