

Косолобов Сергей Сергеевич

**Высокотемпературные атомные процессы на границе раздела кремний-  
вакуум при сублимации, эпитаксии, термическом травлении кислородом  
и осаждении золота**

Специальность 1.3.8

«Физика конденсированного состояния»

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Москва - 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук» и Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий»

Научный консультант:

Латышев Александр Васильевич, академик РАН, доктор физико-математических наук, директор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук»

Официальные оппоненты:

- Вывенко Олег Федорович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

-Новиков Алексей Витальевич, доктор физико-математических наук, директор, Институт физики микроструктур РАН – филиал Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук»

- Плюснин Николай Иннокентьевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Федеральное государственное казенное военное образовательное учреждение высшего образования «Военная орденов Жукова и Ленина Краснознаменная академия связи имени маршала Советского Союза С.М. Буденного» министерства обороны Российской Федерации

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипяна Российской академии наук

Защита состоится «25» апреля 2023 года в 15 часов на заседании диссертационного совета 24.1.134.01 в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук по адресу: 630090, Новосибирск, проспект академика Лаврентьева, 13.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук» и на сайте [http://\\_\\_\\_\\_\\_](http://_____)

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук

Погосов Артур Григорьевич

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы

С развитием физики твердого тела и технологий наноструктурирования твердотельных материалов все более значимым является детальное понимание и контроль атомных процессов, протекающих на поверхностях, границах раздела и в объеме твердотельных структур в различных экспериментальных условиях [1]. Такие процессы как адсорбция и десорбция атомов на границе раздела твердое тело - пар, генерация и рекомбинация точечных дефектов на поверхности, границах раздела и в объеме кристаллов, взаимодействие точечных дефектов с атомными ступенями и другими дефектами поверхности, объемная и поверхностная диффузия, а также химические реакции на поверхности кристаллов определяют закономерности формирования и физические свойства твердотельных наноструктур в современных полупроводниковых технологиях. Понимание физических механизмов, лежащих в основе этих процессов, важно не только с фундаментальной точки зрения, но также необходимо для дальнейшего развития технологий низкоразмерных систем и элементной базы нового поколения полупроводниковой интегральной фотоники, электроники и оптоэлектроники.

Диффузия и атомные реакции на поверхности, границах раздела и в объеме кристаллических материалов являются ключевыми процессами, влияющими на кинетику зародышеобразования, кристаллизации, фазовых трансформаций, взаимного растворения, преципитации, имеют определяющее значение в процессах оксидирования, легирования, металлизации, высокотемпературных отжига и ряда других технологических процессов. Атомные механизмы диффузии в твердом теле тесно связаны с точечными дефектами. Распределение точечных дефектов и примесей замещения в полупроводниках имеет огромное значение для устройств фотовольтаики, фотокатализа, микро- и наноэлектроники. На этапах изготовления этих устройств, сопровождающихся термическими прогревами возможно перераспределение собственных и примесных точечных дефектов, их сегрегация и преципитация, обусловленное возникновением упругих напряжений, дрейфом в электростатических полях, градиентом химического потенциала и другими процессами. Последовательное уменьшение размеров структур и повышение плотности их распределения на поверхности кристаллов также сопровождается возрастанием тепловыделения и увеличением рабочих температур полупроводниковых устройств. Это приводит к ужесточению требований к изготавливаемым структурам и необходимости тщательного контроля качества поверхностей и границ раздела с учетом высокотемпературных обработок. Все эти факторы указывают на необходимость анализа на атомном уровне процессов дефектообразования, диффузии и взаимодействия точечных дефектов с поверхностями и границами раздела полупроводниковых структур и материалов, используемых в современных полупроводниковых технологиях при повышенных температурах.

В основе классических теорий, описывающих атомные процессы, протекающие на кристаллических поверхностях при сублимации, эпитаксиальном росте и осаждении металлов, лежат представления о диффузии и взаимодействии адсорбированных на поверхности кристалла атомов (адатомов) с атомными ступенями [2], [3]. С развитием технологий молекулярно-лучевой эпитаксии, в экспериментальных исследованиях значительное внимание уделялось изучению физических свойств адсорбированных атомов, диффундирующих по поверхности кристалла. В то же время анализу влияния поверхностных вакансий (адвакансий), формирующихся при освобождении атомом узла кристаллической решетки на сингулярной террасе, на процессы формирования морфологии поверхности кристалла, уделялось гораздо меньше внимания. Одним из основных факторов, ограничивающих проведение таких исследований, является технологическая сложность контролируемой генерации адвакансий на поверхности кристаллов.

Тем не менее, для описания некоторых физических процессов таких, как сублимация, плавление и травление кристалла, наличие адвакансий следует учитывать. В ряде научных работ продемонстрировано влияние адвакансий на структуру и морфологию поверхности кремния [4]–[6]. Эффекты влияния поверхности на процессы, протекающие в объеме кристаллов, в частности, на формирование стехиометрического состава и объемной структуры кристалла отмечаются в работе [7]. Авторами, проанализировано в расчетах и показано экспериментально с помощью *in situ* высокоразрешающей электронной микроскопии зависимость положения антифазных границ в подповерхностных слоях кристалла, от положения атомных ступеней на поверхности тонкой кристаллической пленки CuAu. Полученные результаты демонстрируют влияние поверхностных процессов на структуру подповерхностных слоев кристалла.

Влияние собственных точечных дефектов, формирующихся в объеме кристалла, на морфологию поверхности металлических кристаллов подтверждается в работах [8], [9]. В этих исследованиях показано, что изменение температуры кристаллов AlNi и Pt приводит к существенным трансформациям морфологии поверхности благодаря высокой концентрации вакансий в объеме кристалла, их диффузии и взаимодействию с поверхностью кристалла. В то же время атомным механизмам взаимодействия собственных точечных дефектов с поверхностью кристаллов полупроводников уделяется не так много внимания. Это связано, по-видимому, с малыми объемными концентрациями собственных точечных дефектов в полупроводниках, что затрудняет визуализацию изменений морфологии поверхности существующими микроскопическими методами. В связи с этим, необходимо развитие методов и подходов для контролируемой генерации собственных точечных дефектов как на поверхности, так и в объеме кристаллов.

В диссертационной работе развиты методы генерации адвакансий на поверхности кремния (111) с использованием термического травления кремния

молекулярным кислородом, методы высокотемпературного гомоэпитаксиального роста, а также методы формирования междоузельных атомов кремния в подповерхностной области кристалла кремния с помощью субмонослойного осаждения золота при повышенных температурах. Поведение вакансий, собственных и примесных междоузельных атомов в объеме монокристаллического кремния широко исследовано, поскольку имеет важнейшее значение для практических применений [10]. Однако исследованиям диффузионных механизмов и атомных реакций собственных точечных дефектов вблизи поверхности уделяется гораздо меньше внимания. Одним из обстоятельств, которое необходимо учитывать при анализе диффузионных процессов, протекающих в объеме вблизи поверхности кристалла, является способность кристаллических поверхностей не только генерировать точечные дефекты, но так же и поглощать их избыток [11], [12]. Также, в соответствии с расчетами, энергии образования точечных дефектов вблизи поверхности могут отличаться от значений энергий формирования дефектов в объеме кристалла [13], [14].

Несмотря на многолетние исследования точечных дефектов в кремнии, в научной литературе возникают существенные противоречия при интерпретации экспериментальных результатов. Например, в работах [15], [16] авторы представили экспериментальные результаты исследования поведения точечных дефектов кристалле кремния, выращенного методом Чохральского в различных температурных режимах. Показано, что уменьшение скорости вытягивания кристалла из расплава влияет на концентрации точечных дефектов. Интерпретация экспериментальных результатов подразумевает генерацию на границе раздела кристалл-расплав вакансий. В то же время, предполагается, что междоузельные атомы формируются уже в самом кристалле, благодаря наличию термических напряжений. Полученные данные не согласуются с ранее предложенной моделью роста кристалла [17], [18]. Основную трудность для проведения подобного анализа представляет расчёт распределения собственных точечных дефектов вблизи поверхности, а также учет реакций генерации-рекомбинации дефектов на границе кристалла. Поскольку на данный момент нет экспериментальной методики, позволяющей анализировать положение и диффузию отдельных междоузельных атомов и вакансий в кристалле, детали атомных механизмов диффузии и реакций вблизи стоков и истоков остаются неисследованными.

Следует отметить, что несмотря на большой объем экспериментальных и теоретических работ, посвященных исследованию точечных дефектов и примесей в кристаллах, на данный момент нет законченной модели, связывающей диффузионные атомные процессы на поверхности с диффузионными процессами, протекающими в объеме кристалла. Поверхность и объем рассматриваются как две отдельные области, несомненно влияющие друг на друга, но, тем не менее, изолированные. Детали атомных механизмов

реакций взаимодействия точечных дефектов с поверхностью кристалла практически не исследованы.

**Цель данной работы** заключалась в установлении закономерностей и определении атомных механизмов процессов, протекающих на границе раздела монокристаллический кремний - вакуум в высокотемпературных процессах сублимации, термического травления молекулярным кислородом, гомоэпитаксиального роста и осаждения золота с учетом влияния диффузионных процессов, протекающих в объеме кристалла.

Для достижения поставленной цели в настоящей работе решались следующие **основные задачи**:

- Разработка методов генерации адвакансий, осаждения кремния и металлов на поверхность кремния (111) для проведения *in situ* экспериментов методом отражательной электронной микроскопии при высоких температурах;
- Разработка методов формирования и структурирования атомно-гладких высокоориентированных поверхностей монокристаллического кремния с низкой плотностью атомных ступеней для проведения *in situ* экспериментов;
- Установление атомного механизма массопереноса на поверхности кремния (111) в условиях генерации адвакансий, формирующихся в высокотемпературных процессах сублимации и термического травления кремния молекулярным кислородом;
- Определение энергетических параметров, характеризующих кинетику атомных ступеней и процессы двумерного зарождения на поверхности кремния (111) при высоких температурах;
- Определение условий стабильности морфологии поверхности кремния (111) при высокотемпературном осаждении золота;
- Установление атомного механизма массопереноса и определение энергетических параметров, характеризующих кинетику атомных ступеней и процессы двумерного зарождения на поверхности кремния (111), в условиях диффузионного обмена точечными дефектами между поверхностью и объемом кристалла при высоких температурах.
- Разработка обобщённой теоретической модели, описывающей процессы генерации, рекомбинации и диффузии собственных точечных дефектов на границе раздела кристалл-вакуум при сублимации, эпитаксиальном росте и в условиях взаимодействия с газами.

**Научная новизна работы** заключается в создании нового направления в области физики поверхности, открывающего принципиально новые возможности для наноструктурирования поверхности кремния с использованием высокотемпературных процессов самоорганизации и определяющего подходы к установлению механизмов, лежащих в их основе. В диссертационной работе впервые осуществлено следующее:

- Показано, что при температурах подложки выше 1180°C при сублимации и термическом травлении молекулярным кислородом, на поверхности кремния (111) реализуется вакансионный механизм массопереноса, лимитированный взаимодействием адвакансий с атомными ступенями. Определены энергетические параметры, характеризующие процессы зародышеобразования и взаимодействия адвакансий с атомными ступенями.
- Экспериментально установлен нелинейный характер зависимости скорости смещения атомных ступеней по поверхности кремния (111) от размера прилегающих террас в условиях высокотемпературной сублимации. Определен энергетический барьер, характеризующий процесс растворения адвакансии с поверхности в объем кристалла.
- Показано, что атомный механизм массопереноса на поверхности кремния (111) в условиях высокотемпературного гомоэпитаксиального роста при температурах подложки 900-1180°C лимитируется диффузией адатомов кремния. Определены энергетические параметры, характеризующие процесс зародышеобразования при высокотемпературном гомоэпитаксиальном росте.
- Экспериментально обнаружено и теоретически обосновано увеличение концентрации адатомов кремния на поверхности кристалла при субмонослойном осаждении золота на поверхность кремния (111) при повышенных температурах. Установлено, что объемная диффузия золота в приповерхностной области кремния проходит по механизму вытеснения атомов кремния из узлов кристаллической решетки ("kick-out" механизм).
- Предложен и реализован метод наноструктурирования поверхности монокристаллического кремния с использованием высокотемпературного субмонослойного осаждения металлов.
- Предложен новый атомный механизм, описывающий процессы генерации и рекомбинации собственных точечных дефектов на границе раздела кристалл-вакуум, включающий подповерхностный диффузионный слой.
- Разработана теоретическая модель, описывающая взаимосвязь диффузионных процессов на поверхности и в объеме кристалла с учётом «прозрачности» поверхности, обеспечивающей обмен точечными дефектами между поверхностью и объемом кристалла.

**Научная и практическая значимость работы** заключается в развитии нового комплексного подхода к анализу атомных процессов, протекающих на вицинальных и сингулярных поверхностях кристаллов, что открывает принципиально новые возможности для управления процессами формирования морфологии поверхности кристаллов на субмонослойном уровне и создания наноразмерных структур для современной полупроводниковой нано- и оптоэлектроники.

Среди результатов работы, имеющих важное практическое значение, следует отметить следующие принципиально важные пункты:

- Разработан способ формирования наноразмерных островков на поверхности кремния (111), покрытых сверхструктурной реконструкцией Si(111)-(5x2)-Au. Созданные образцы использовались для калибровки астигматизма в методе сканирующей электронной микроскопии.
- Получены данные о формировании антиэшелонов атомных ступеней на поверхности кремния (111) в условиях близких к термодинамическому равновесию, что создает предпосылки к разработке технологии изготовления калибровочных стандартов, содержащих заданное количество хорошо визуализируемых атомных ступеней, для сканирующей зондовой микроскопии.
- Предложен метод наноструктурирования поверхности кристалла кремния в процессах высокотемпературного термического травления кислородом и субмонослойного осаждения золота.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Массоперенос на поверхности кремния (111) в процессах сублимации и термического травления молекулярным кислородом при температурах подложки выше 1180°C лимитирован взаимодействием адвакансий с атомными ступенями. Процесс растворения адвакансий в объем кристалла характеризуется энергией активации  $4,30 \pm 0,05$  эВ, определяющей время жизни адвакансии на сингулярной грани кристалла.
2. Скорость перемещения диффузионно-связанных атомных ступеней на поверхности кремния (111) при сублимации нелинейным образом зависит от размера прилегающих террас.
3. Массоперенос на поверхности кремния (111) при гомоэпитаксиальном росте в интервале температур 900-1180°C лимитирован поверхностной диффузией адсорбированных атомов кремния.
4. Субмонослойное осаждение золота на поверхность кремния (111) при температурах образца выше 900°C приводит к увеличению концентрации адатомов кремния, обусловленному стоком неравновесных междоузельных атомов кремния, формирующихся в процессе диффузии золота с поверхности в объем кристалла. Диффузия золота в приповерхностной области кремния происходит по механизму вытеснения атомов кремния из узлов кристаллической решетки («kick-out» механизм), сопровождающемуся формированием междоузельных атомов кремния.
5. В равновесных условиях разности энергий формирования собственных точечных дефектов (междоузельных атомов или вакансий) в объеме кристалла и точечных дефектов (адатомов или адвакансий) на поверхности кристалла не зависят от температуры и равны разностям энергетических барьеров, ограничивающих поток соответствующих точечных дефектов с поверхности кристалла в объем и лимитирующих выход междоузельных атомов и вакансий на поверхность кристалла.



- б. Скорость перемещения атомных ступеней на поверхности кристалла определяется диффузионными процессами, протекающими как на поверхности, так и в приповерхностных слоях кристалла. Атомные ступени являются источниками и стоками для междоузельных атомов и вакансий в кристалле.

На основе полученных результатов предложено и обосновано новое научное направление: атомные процессы на границе раздела кремний-вакуум при сублимации, эпитаксии, термическом травлении кислородом в условиях генерации точечных дефектов на поверхности и в объеме кристалла на основе *in situ* анализа атомных ступеней и двумерных островков.

**Личный вклад автора** в выполнении настоящей работы заключается в выборе направления исследований, постановке задач и определении путей их решения, в том числе: в разработке методик высокотемпературного осаждения кремния и золота, термического травления образцов молекулярным кислородом, методик препарирования образцов, в анализе и интерпретации полученных данных, а также подготовке публикаций и докладов на международных и отечественных конференциях. Основной объем экспериментальных и теоретических результатов, представленных в данной работе, получен непосредственно автором, либо под его руководством.

**Научная обоснованность и достоверность** полученных результатов подтверждается использованием современных экспериментальных методов, которые соответствуют поставленным в работе целям и задачам, многократным воспроизведением обнаруженных эффектов на различных экспериментальных образцах, а также соответствием полученных данных с результатами, полученными в зарубежных научных группах. Экспериментальные результаты по высокотемпературному субмонослойному осаждению золота на поверхность кремния также воспроизводились автором в научной группе Института лазерной физики и физики плазмы г. Эссен, Германия в 2002 году.

Настоящая работа выполнена в двух организациях:

1. В Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук» в течение 1997-2016 гг.
2. В Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» в течение 2016-2022 гг.

### **Апробация работы**

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих российских и международных научных конференциях:

Третья школа молодых ученых «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем» (АППН-2021), Новосибирск, Россия, 2021;

3<sup>rd</sup> International Conference on Applied Surface Science (ICASS), Pisa, Italy, 2019; 19th European Workshop on Molecular Beam Epitaxy (EuroMBE19), Saint-Petersburg, Russia 2017); XI Конференция и X Школа молодых ученых и специалистов по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе, Кремний-2016, (Новосибирск, 2016); IX, XI, XIX ежегодные симпозиумы “Нанозифика и нанозлектроника”, (Нижний Новгород, 2005, 2007, 2015); 5th European Conference on Crystal Growth ECCG5 9-11, Bologna, Italy 2015; Выездная сессия Научного Совета РАН по проблеме «Радиационная физика твёрдого тела», Новосибирск, 2014 г.; 16-th International Conference «Laser Optics 2014» seminar on “Optoelectronic Information Systems and Laser Technologies”, St.Petersburg, Russia, 2014.; 6-й Российский семинар по волоконным лазерам. Новосибирск, Россия, 2014 г.; 11th International Symposium on Measurement Technology and Intelligent Instruments ISMTI 2013 (Germany, Aachen, 2013); Taiwan-Russia Bilateral Symposium on Material Processing at Micro and Nano Level, Novosibirsk, Russia, 2013; Japan-Russian workshop on advanced materials synthesis process and nanostructure», Sendai, Japan, 2013; Second Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials ASCO-NANOMAT, Vladivostok, Russia 2013 XXII, XXIII, XXIV Российские конференции по электронной микроскопии, Черноголовка, Россия, 2008, 2010, 2012.; IV Всероссийская конференция физические и физико–химические основы ионной имплантации (с участием иностранных учёных) и Международная молодёжная конференция радиационно-термические эффекты и процессы в неорганических материалах, Новосибирск, 2012.; School-conference of young scientists and specialists “Asian Priorities in Material Science” APAM-2012, Novosibirsk, Russia, 2012.; X Российская конференция по физике полупроводников “ПОЛУПРОВОДНИКИ-2011”, г. Нижний Новгород, 2011.; 4-я школа “Метрология и стандартизация в нанотехнологиях и наноиндустрии. Функциональные наноматериалы” Новосибирск, 2011; Международная конференция-семинар по микро/нанотехнологиям и электронным приборам, Эрлагол, Алтай, Россия, 2009; Первая международная школа-семинар по фундаментальным проблемам микро- и наносистемной техники (MNST’ 2008), Новосибирск, 10-13 декабря, 2008; XIII Национальная конференция по росту кристаллов (НКРК-2008), Москва, 17-21 ноября, 2008; V конференция молодых ученых СО РАН, посвященная М.А. Лаврентьеву, Новосибирск, Россия, 20-22 ноября, 2007; 12th, 15-th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”, (St Petersburg, 2004, Novosibirsk, 2007); VIII Российская конференция по физике полупроводников “Полупроводники-2007”, Екатеринбург, 3.09-5.10, 2007; III Российское международное совещание по росту кристаллов и пленок кремния и исследованию их физических свойств и структурного совершенства “Кремний-2006”, (Красноярск, 2006); International Autumn School on “Microscopy of Tomorrow’s Industrial Materials”, (Berlin, 2005); III Российская конференция по материаловедению и физико-химическим основам технологий получения легированных кристаллов кремния и приборных

структур на их основе, “Кремний 2003”, (Москва 2003); XIII Российский симпозиум по растровой электронной микроскопии и аналитическим методам исследования твердых тел, (Черноголовка, 2003); 5th Russia-Japan seminar on semiconductor surfaces, (Vladivostok, 2002); Международное рабочее совещание по росту кристаллов, пленок и дефектам структуры кремния “Кремний-2002”, (Новосибирск, 2002); International Workshop “Scanning Probe Microscopy-2001, 2002, 2003” (Nizhny Novgorod); International Autumn School on Electron Microscopy “Diffusion and Reactions at Solid-Solid interfaces”, (Halle, Germany 2001); V Международной школе-семинаре “Эволюция Дефектных Структур в Конденсированных Средах”, (Барнаул, 2000); IV, V и VI Российские конференции по физике полупроводников, (Новосибирск, 1999, Нижний Новгород, 2001, Санкт-Петербург, 2003).

Основные результаты работы, изложенные в диссертации, докладывались и обсуждались в ряде научных коллективов:

Institute of Laser Physics and Plasma Physics, Essen University (Germany), October, 2002; Сколковский институт науки и технологий, Москва, декабрь, 2015; Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук, июнь, 2016.

### **Публикации**

Основные результаты исследований по теме диссертационной работы изложены в 25 публикациях, список которых приведен в конце диссертации и включает, в том числе, три патента, четыре главы в международных и одну главу в отечественной монографиях. Данный список не включает публикации в трудах отечественных и международных конференций, а также статьи и авторские свидетельства автора, напрямую не связанные с темой диссертации.

### **Структура и объем диссертационной работы**

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав с выводами, заключения с общими выводами и списка литературы из 369 наименований. Общий объем диссертации 315 страниц, включая 50 рисунков и две таблицы.

### **КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулирована цель и задачи исследования, обоснована научная новизна и практическая ценность полученных результатов, изложены основные положения, выносимые на защиту.

В **начале первой главы** приведено описание основных экспериментальных методов, используемых в данной работе. Для решения задач *in situ* анализа высокотемпературных атомных процессов на границе раздела кристалл-вакуум в условиях контролируемой генерации адвакансий, экспериментальный метод сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии (СВВ ОЭМ) был дооснащен системой напуска газов. Это позволило расширить возможности метода для проведения экспериментальных

исследований процессов термического травления поверхности кремния молекулярным кислородом в широком диапазоне температур подложки. Изменение концентрации адатомов на поверхности кремния осуществляется путем контроля потока кислорода в сверхвысоковакуумную камеру отражательного электронного микроскопа.

Для проведения экспериментов по высокотемпературному осаждению кремния существенной проблемой является необходимость регулирования пересыщения адатомов на поверхности исследуемого образца. Необходимо создать поток атомов кремния из внешнего источника, достаточный для компенсации уменьшения поверхностной плотности адатомов вследствие высокой скорости десорбции адатомов кремния за счет сублимации. Задача осложняется необходимостью размещения такого источника в довольно малом объеме сверхвысоковакуумной камеры микроскопа и ограничением тепловыделения источника, поскольку для реализации сверхвысоковакуумных условий в камере используются, в том числе, и азотные ловушки. Для решения обозначенной проблемы был разработано и изготовлено малогабаритное устройство для высокотемпературного эпитаксиального роста, позволяющего проводить *in situ* анализ морфологических трансформаций поверхности образцов при различных скоростях осаждения кремния в широком диапазоне температур от комнатной до температуры плавления кремния. Дооснащение электронного микроскопа этим устройством позволило впервые провести исследования начальных стадий двумерного зарождения при высокотемпературном гомоэпитаксиальном росте.

Отдельное внимание в работе уделялось проблеме контролируемой генерации междоузельных атомов кремния в объеме кристалла кремния при повышенных температурах. Для изменения концентрации точечных дефектов в кремнии было предложено использовать высокотемпературное осаждение золота, которое диффундирует в кремнии по непрямым механизмам, сопровождающимся генерацией или поглощением собственных точечных дефектов [12], [19]. Для этой цели был разработан и изготовлен малогабаритный испаритель, позволяющий проводить осаждение металлов на исследуемый образец при температурах до 1260°C. С использованием устройства для высокотемпературного осаждения металлов впервые были проведены детальные исследования осаждения золота на поверхность кремния, что позволило не только проанализировать атомные механизмы диффузии золота в приповерхностной области кремния, но также использовалось для разработки методов наноструктурирования поверхности кремния. Контроль структуры и морфологии поверхности проводился непосредственно в процессе проведения экспериментов в электронном микроскопе.

Дооснащение метода СВВ-ОЭМ описанными выше устройствами, а также усовершенствование откачной системы микроскопа и системы ввода жидкого азота позволили существенно расширить возможности метода для проведения *in situ* экспериментов при высоких температурах. Это единственный из известных

на данный момент сверхвысоковакуумных электронных микроскопов, оборудованный таким набором устройств, позволяющих подготавливать атомно-чистые поверхности кремния и в реальном времени анализировать процессы высокотемпературной сублимации, гомо- и гетероэпитаксиального роста, осаждения металлов и напуска газов. Приведено детальное описание методов сканирующей атомно-силовой (АСМ) и электронной микроскопии (СЭМ). С помощью этих методов проведены исследования морфологических особенностей формирующихся на поверхности кремния сверхструктурных доменов и двумерных островков после высокотемпературных отжигов, субмонослойного осаждения металлов и быстрого охлаждения (заковки) образцов до комнатной температуры. Использование разработанных при проведении данной работы калибровочных образцов позволило получать воспроизводимые высокоточные измерения вертикальных размеров анализируемых структур. Описаны методики препарирования образцов для формирования на поверхности кремния широких террас - сингулярных участков кремния, ограниченных атомными ступенями. Для исследования кинетики замкнутых атомных ступеней, ограничивающих сингулярные террасы, предварительное структурирование образцов проводилось методами оптической литографии и последующего плазмохимического и ионно-лучевого травления. Часть образцов обрабатывались пучком ускоренных ионов галлия в установке фокусированного ионного пучка, описание которой приведено в данной главе.

**Во второй главе** представлены результаты исследований влияния ансамбля адвакансий на процессы формирования морфологии поверхности кремния (111). Для генерации адвакансий на поверхности кремния была предложена и реализована методика высокотемпературного термического травления поверхности кремния молекулярным кислородом в сверхвысоковакуумной камере электронного микроскопа. В этой методике используется химическая реакция, в результате которой молекулярный кислород взаимодействуя с атомно-чистой поверхностью кремния образует летучее соединение монооксида кремния. При повышенных температурах подложки и малых парциальных давлениях газа десорбция молекулы монооксида кремния с поверхности кристалла приводит к образованию адвакансий на сингулярных террасах [20]. Использование термического травления кремния молекулярным кислородом позволило регулировать концентрацию адвакансий, формирующихся на поверхности кремния.

Показано, что в зависимости от температуры подложки и давления кислорода, термическое травление атомно-чистой поверхности кремния (111) может происходить как по ступенчато-слоевому, так и по двумерно-островковому механизму. Приведены экспериментальные данные, характеризующие процессы ступенчато-слоевого термического травления поверхности, содержащей систему регулярных атомных ступеней. Установлено, что зарождение, диффузия и взаимодействие адвакансий с атомными ступенями приводит к смещению ступеней в направлении вышележащих террас. При этом

скорость смещения атомной ступени в процессе термического травления поверхности кремния (111) прямо пропорциональна ширине прилегающих ступени террас. Исследовано влияние нагревающего кристалл постоянного электрического тока на распределение атомных ступеней на поверхности кремния (111) в диапазоне температур подложки 900-1280°C.

Изучены процессы коалесценции адвакансий в двумерные отрицательные (вакансионные) островки в интервале температур подложки 500-1280°C. Показано, что при двумерно-островковом механизме термического травления на террасах между атомными ступенями происходит формирование двумерных отрицательных островков моноатомной глубины. Согласно теоретическим представлениями, кинетика разрастания островков несет информацию об атомных механизмах массопереноса по поверхности кристалла [27], [28]. Экспериментальный анализ кинетики разрастания островков на vicинальных поверхностях кристалла при повышенных температурах является сложной задачей, поскольку требуется учет влияния соседних атомных ступеней и многочисленных окружающих островков [23]. Это требует построения сложных моделей, решение которых в основном доступно только с помощью численных методов. В тоже время процесс зарождения и разрастания одиночного островка на широкой террасе может быть проанализирован аналитическими методами [2]. В диссертационной работе была разработана методика создания широких (до 220 мкм в диаметре) сингулярных террас на поверхности кремния (111), ограниченных замкнутыми атомными ступенями. Это позволило впервые провести экспериментальные исследования атомных механизмов двумерного зарождения вакансионных островков на поверхности кремния при высоких температурах.

Исследования процессов зарождения и разрастания двумерных отрицательных островков на широких террасах позволили проанализировать атомные механизмы массопереноса по поверхности кристалла в условиях пересыщения по адвакансиям. Получены зависимости критического размера террасы, при котором в центре террасы происходит зарождение от температуры при различных потоках кислорода. Получены данные, характеризующие процессы зародышеобразования и взаимодействия адвакансий с атомными ступенями. Предложена модель, описывающая зарождение и разрастание двумерных вакансионных островков с учетом формирования адвакансий на поверхности кристалла в процессе термического травления. На основании полученных экспериментальных данных и проведенного теоретического анализа оценены энергия взаимодействия адвакансии со ступенью  $E_{ad}=1,50\pm 0,15$  эВ и размер критического зародыша  $i=4$ .

Обнаружено изменение механизма массопереноса по поверхности кремния (111) при температурах выше 1180°C. В высокотемпературной области массоперенос лимитируется энергетическим барьером на взаимодействие адвакансий с атомными ступенями. Показано, что при температурах полужки ниже 1180°C для корректного описания процессов трансформации морфологии

поверхности кремния необходимо учитывать диффузию как адатомов, так и адвакансий.

**Третья глава** посвящена анализу процессов формирования морфологии поверхности кремния при сублимации и после быстрого охлаждения (заковки) от высоких температур. Приведены результаты исследований морфологических трансформаций поверхности кремния, содержащей участки с малой плотностью атомных ступеней и широкие террасы после быстрого охлаждения от высоких температур. Представлены данные, характеризующие последовательные стадии зарождения и разрастания двумерных отрицательных островков в процессе сублимации при температурах подложки 900-1300°C. Существенным является обнаружение увеличения критического размера террасы, при котором происходит зарождение нового островка, вблизи критической температуры 1180°C. Показано, что при быстром охлаждении подложки от температур выше 1200°C на широких террасах формируются двумерные отрицательные островки моноатомной глубины. Заковка кристалла от температур ниже критической не приводит к образованию вакансионных островков. Обнаруженное изменение морфологии поверхности связывается с увеличением поверхностной плотности адвакансий на поверхности кремния (111) при повышенных температурах. Установлен атомный механизм массопереноса на поверхности кремния при сублимации с учетом влияния адвакансий. Полученные результаты согласуются с данными, обнаруженным в экспериментах по высокотемпературному термическому травлению кремния кислородом. Показано, что при температурах ниже критической процессы массопереноса лимитированы диффузией адатомов кремния по поверхности кристалла, в то время как при высоких температурах морфология поверхности определяется взаимодействием адвакансий с атомными ступенями. Проанализирована роль сверхструктурного фазового перехода  $(1 \times 1) \rightarrow (7 \times 7)$ , происходящего при уменьшении температуры образца в процессе быстрого охлаждения.

На основе *in situ* исследований кинетики атомных ступеней на высокоориентированной поверхности кремния (111) при высокотемпературной сублимации установлено, что скорость перемещения атомной ступени нелинейным образом зависит от ширины прилегающих к ступени террас. Проведенные исследования подтверждают тот факт, что атомный механизм процессов массопереноса по поверхности кремния (111) при температурах выше 1200°C лимитирован зарождением и диффузией адвакансий. Для корректного описания процессов изменения морфологии поверхности кремния при повышенных температурах разработана модель и проведены расчеты времен сублимации монослоя кремния с учетом термической генерации и аннигиляции адвакансий. Установлено, что время жизни адвакансий на террасе определяется процессом растворения адвакансии в объем кристалла и характеризуется энергией активации  $4,30 \pm 0,05$  эВ.

**Четвертая глава** посвящена анализу атомных процессов на поверхности кремния (111) в условиях высокотемпературного эпитаксиального роста

и динамического равновесия. Проведен детальный анализ кинетики атомных ступеней на вицинальных и литографически структурированных поверхностях кремния (111) в процессе осаждения кремния при температурах 900-1180°C.

Для анализа высокотемпературных процессов зарождения двумерных островков на поверхности образца кремния с помощью методов оптической литографии и плазмохимического травления изготавливались структуры, на которых после высокотемпературных прогревов в сверхвысоком вакууме формировались участки с низкой плотностью атомных ступеней. При высокотемпературном осаждении кремния, в результате аннигиляции ступеней на краях созданных структур, формировались широкие сингулярные террасы. Создание таких структур позволило исследовать кинетику атомных ступеней и процессы формирования двумерных островков на поверхности кремния в условиях положительного пересыщения при высоких температурах.

Получены данные о зависимости критического размера террасы для зарождения двумерных островков от потока осаждаемого материала при различных температурах. В результате проведенных исследований показано, что критический размер террасы, при котором происходит зарождение нового двумерного островка кремния, уменьшается с увеличением потока осаждаемого кремния на поверхность кристалла. Полученный результат согласуется с теоретическими предсказаниями. Измеренные зависимости критического размера террасы от частоты зарождения двумерных островков свидетельствуют о реализации диффузионно-лимитированного механизма массопереноса по поверхности кремния. На основании полученных данных сделан вывод об атомном механизме массопереноса на поверхности кремния и определен ряд количественных параметров (энергии активации диффузии адатомов, взаимодействия со ступенями, размер критического зародыша и др.), характеризующие атомные процессы массопереноса на поверхности кремния при высоких температурах.

Обнаружено влияние приложенного к образцу внешнего электрического поля на распределение атомных ступеней в условиях плавного изменения пересыщения на поверхности кристалла. Показано, что эффект эшелонирования атомных ступеней наблюдается при одном и том же направлении нагревающего кристалл электрического тока как при сублимации, так и при высокотемпературном эпитаксиальном росте. Исследовано влияние величины пересыщения на пространственное положение антиэшелона. Существенным является обнаружение смещения положения антиэшелона при изменении потока кремния, осаждаемого на поверхность. Установлено, что при прогреве кристалла переменным электрическим током с частотой 50 Гц на поверхности кремния (111) в условиях высокотемпературного гомоэпитаксиального роста стабильной является система эквидистантных атомных ступеней. Показано, что пространственное положение антиэшелона на поверхности кремния определяется концентрацией адатомов на поверхности кристалла.



**В пятой главе** детально исследованы процессы трансформации морфологии поверхности кремния в условиях высокотемпературного осаждения золота. Основное внимание уделяется анализу процессов формирования и диффузии точечных дефектов как на поверхности, так и в приповерхностных слоях кристалла при осаждении золота. Показано, что осаждение атомов золота на поверхность кремния, содержащую сингулярные террасы большого размера, приводит к возникновению потока междоузельных атомов кремния из объема на поверхность кристалла. Обнаружено формирование двумерных островков кремния на широких атомно-гладких террасах в процессе осаждения золота при температурах подложки выше  $900^{\circ}\text{C}$ . Исследована кинетика атомных ступеней при субмонослойном осаждении золота в интервале температур  $900-1260^{\circ}\text{C}$ . Анализ смещений атомных ступеней на поверхности кремния при осаждении золота указывает на эффективный сток на поверхность кристалла собственных точечных дефектов, генерируемых в процессе интердиффузии золота в объем кремния. Исследовано влияние адсорбции золота на стабильность системы атомных ступеней в условиях резистивного нагрева кристалла постоянным электрическим током при температурах подложки  $850-1260^{\circ}\text{C}$ .

Предложена модель, описывающая процесс диффузии атомов золота с поверхности в объем кристалла с учетом собственных точечных дефектов-междоузельных атомов и вакансий, формирующихся и диффундирующих в объеме кристалла. На основе проведенных расчетов получены данные о потоках вакансий и междоузельных атомов из объема к поверхности кристалла. В рамках модели рассчитывается кинетика разрастания положительных островков с учетом потока междоузельных атомов, индуцированного интердиффузией золота. Сравнение расчетных зависимостей площади островков от времени осаждения с экспериментальными данными показывает качественное и количественное совпадение. Полученные результаты также свидетельствуют о том, что диффузия золота в приповерхностной области кремния проходит по механизму вытеснения атомов кремния из узлов кристаллической решетки ("kick-out" механизм), сопровождающемуся формированием междоузельных атомов кремния, даже в присутствии источников и стоков для точечных дефектов.

Из полученных экспериментальных данных о кинетике разрастания двумерных островков, формирующихся на поверхности кремния при осаждении золота следует, что процесс массопереноса на поверхности кристалла лимитирован атомными реакциями на границе островков. Приведены оценки энергетического барьера для проникновения атомов золота с поверхности в объем кристалла и для взаимодействия междоузельных атомов кремния с поверхностью кристалла. Полученные результаты свидетельствуют о том, что формирование морфологии поверхности кремния при осаждении металлов определяется не только поверхностными диффузионными процессами, но также и атомными реакциями на границе раздела поверхность-объем, детальный анализ которых приведен в следующей главе.

**Шестая глава** содержит результаты теоретического исследования атомных реакций и диффузионных процессов, протекающих как на поверхности, так и в приповерхностных областях кристалла. Рассмотрены основные механизмы формирования и диффузии собственных точечных дефектов в приповерхностной области объема кристалла при различных пересыщениях в паровой фазе с учетом диффузионного обмена точечными дефектами между поверхностью и объемом кристалла. Для описания механизмов генерации и аннигиляции точечных дефектов вблизи поверхности кристалла предложена теоретическая модель, расширяющая теорию Бартона-Кабреры-Франка. Модель включает адатомы и адвакансии диффундирующие в адсорбционном поверхностном слое (S-слой), а также вакансии и междоузельные атомы в состоянии адсорбции непосредственно под поверхностью кристалла (SS-слой). В рамках разработанной модели проанализировано смещение атомных ступеней по поверхности кристалла с учётом влияния междоузельных атомов и вакансий в объеме кристалла.

Предложена и решена система уравнений, описывающих потоки точечных дефектов на поверхности кристалла и в объеме вблизи границы раздела кристалл-вакуум. Получены аналитические выражения для скорости перемещения как одиночной ступени, так и системы эквидистантно расположенных атомных ступеней. Важно отметить, что в предложенной модели проанализированы скорости движения ступени как при сублимации, так и для случая гомоэпитаксиального роста. Изучено влияние обмена собственными точечными дефектами между поверхностным слоем и объемом кристалла (эффект прозрачности поверхности) на скорость смещения ступеней на поверхности кристалла. Установлено, что скорость смещения ступеней в условиях сублимации, при термическом травлении и эпитаксиальном росте зависит от среднего расстояния между ступенями, пересыщений для точечных дефектов в паровой и объемной фазах, а также диффузионной длины атомов и адвакансий на поверхности и в подповерхностном слое, соответственно. Следует отметить, что в приближении полной непрозрачности поверхности, когда процессы проникновения точечных дефектов с поверхности в объем кристалла и обратно полностью подавлены, полученные выражения для скорости смещения атомных ступеней упрощаются до вида, аналогичного уравнениям классической теории Бартона-Кабреры-Франка.

В рамках предложенной модели проанализирована связь объемных и поверхностных диффузионных процессов с учётом генерации-рекомбинации пар собственных точечных дефектов (френкелевских пар) в объёме кристалла. Получена система дифференциальных уравнений второго порядка, описывающая формирование, диффузию и аннигиляцию собственных точечных дефектов в объеме кристалла (вакансии и междоузельные атомы), и на его поверхности (адатомы и адвакансии). Результаты демонстрируют, что равновесные концентрации и энергии формирования собственных точечных дефектов (междоузельных атомов и вакансий) в объеме кристалла и точечных

дефектов (адатомов и адвакансий) на поверхности связаны фундаментальным соотношением и определяются энергетическими барьерами, ограничивающими поток точечных дефектов с поверхности кристалла в объем и лимитирующими выход междоузельных атомов и вакансий из объема на поверхность кристалла. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными и оценены энергетические барьеры, препятствующие диффузионному обмену точечными дефектами между поверхностью и объемом кремния. На основе полученных результатов предложен новый атомный механизм, описывающий процессы генерации и рекомбинации междоузельных атомов и вакансий на границе раздела кристалл-вакуум. Показано, что атомные ступени являются источниками и стоками не только для адатомов и адвакансий, но также и для междоузельных атомов и вакансий.

В **заключении** представлены основные выводы, обобщены результаты работы, приведены данные об оценке полученных результатов, а также представлены данные о личном вкладе соискателя.

#### **Основные результаты и выводы:**

1. Развита методика формирования адвакансий, осаждения кремния и металлов на поверхность кремния (111) для проведения *in situ* экспериментов методом отражательной электронной микроскопии при высоких температурах.
2. Развита методика контролируемого изменения морфологии границы раздела кремний-вакуум, заключающаяся в управлении распределением прямолинейных и замкнутых атомных ступеней на поверхности кремния (111) посредством высокотемпературных процессов термического травления молекулярным кислородом, субмонослойного осаждения золота, сублимации и гомоэпитаксиального роста.
3. Установлено, что атомный механизм массопереноса по поверхности кремния (111) при температурах подложки выше 1180°C в условиях сублимации и термического травления молекулярным кислородом лимитирован взаимодействием адвакансий с атомными ступенями.
4. Обнаружена нелинейная зависимость скорости перемещения диффузионно-связанных атомных ступеней на поверхности кремния (111) от размера прилегающих к ступени террас при сублимации. Показано, что для описания процессов трансформации морфологии границы раздела кремний-вакуум при повышенных температурах необходим учет процессов зарождения, диффузии и растворения в объеме адвакансий. Оценена энергия активации растворения адвакансии с поверхности в объеме кремния  $4,3 \pm 0,05$  эВ.
5. Установлено, что массоперенос на поверхности кремния (111) в процессе гомоэпитаксиального роста в интервале температур 900-1180°C лимитирован процессом диффузии адатомов кремния по поверхности кристалла. Оценена энергия активации двумерного зародышеобразования

$E_i=1,5 \pm 0,1$  эВ. Оценен минимальный размер критического зародыша  $i^*=25 \pm 12$  атомов.

6. Обнаружено, что субмонослойное осаждение золота при температурах подложки 860-1000°C приводит к увеличению концентрации адатомов на поверхности кремния. Увеличение концентрации адатомов обусловлено стоком неравновесных собственных точечных дефектов (междоузельных атомов), формирующихся в процессе диффузии золота в объем кристалла.
7. Определён энергетический барьер, лимитирующий проникновение междоузельных атомов кремния из объема на поверхность кристалла, который составил  $1,5 \pm 0,2$  эВ. Установлено, что процесс растворения золота с поверхности в объем кристалла кремния характеризуется энергией активации  $2,7 \pm 0,2$  эВ. Установлено, что массоперенос на поверхности кремния (111) при высокотемпературном осаждении золота лимитирован взаимодействием атомов кремния с атомными ступенями. Размер критического зародыша островков кремния составляет 19-22 атомов.
8. Установлено, что объемная диффузия золота в приповерхностных областях кремния происходит по "kick-out" механизму.
9. Разработана обобщённая теоретическая модель, учитывающая взаимосвязь диффузионных процессов на поверхности и в объеме кристалла при сублимации, эпитаксиальном росте и в условиях взаимодействия с газами.
10. Предложен и теоретически обоснован механизм генерации и поглощения собственных междоузельных атомов и вакансий поверхностью кристалла, содержащий следующие стадии: формирование междоузельного атома или вакансии атомной ступенью, выход дефекта в подповерхностный адсорбционный слой, диффузия вдоль поверхности и растворение в объем кристалла. Процесс поглощения точечных дефектов происходит в обратной последовательности - диффузия дефектов из объема к поверхности кристалла, переход в положение адсорбции в подповерхностном адсорбционном слое, диффузия к ступени и встраивание дефекта в край ступени.
11. Обнаружено влияние прозрачности поверхности для собственных точечных дефектов на движение атомных ступеней на поверхности кристалла. Установлено, что скорость смещения ступеней в условиях сублимации, при термическом травлении и эпитаксиальном росте зависит от среднего расстояния между ступенями, пересыщений для точечных дефектов в паровой и объемной фазе, а также диффузионных длин атомов и вакансий на поверхности кристалла и в подповерхностном слое.
12. Показано, что в равновесных условиях разность энергий формирования собственных междоузельных атомов (вакансий) в объеме и адатомов (адвакансий) на поверхности кристалла не зависит от температуры и равна разности энергетических барьеров, ограничивающих поток соответствующих точечных дефектов с поверхности кристалла в объем и

лимитирующих выход собственных междоузельных атомов (вакансий) из объема на поверхность кристалла.

**Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:**

[A1] Sergey Kosolobov. Coupled surface and bulk diffusion in crystals. // AIP Advances. – 2022. – Т. 12. – №. 5. – С. 055127

[A2] Kosolobov S. Subsurface diffusion in crystals and effect of surface permeability on the atomic step motion // Scientific reports. – 2019. – Т. 9. – С. 13428.

[A3] S.S. Kosolobov, G.I. Nazarikov, S.V. Sitnikov, I.A. Pshenichnyuk, L.I. Fedina and A.V. Latyshev. Real-time observation of self-interstitial reactions on an atomically smooth silicon surface // Surface Science. – 2019. – Т. 687. – С. 25-33.

[A4] Sitnikov S.V., Latyshev A.V., Kosolobov S.S. Advacancy-mediated atomic steps kinetics and two-dimensional negative island nucleation on ultra-flat Si (111) surface // Journal of Crystal Growth. – 2017. – Т. 457. – С. 196-201.

[A5] Ситников С.В., Косолюбов С.С., Латышев А.В. Формирование двумерных отрицательных островков при быстром охлаждении ультра-плоской поверхности Si (111) // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Физика. – 2016. – Т. 11. – №. 1. – С. 94-99.

[A6] Ситников С.В., Латышев А.В., Косолюбов С.С. Атомные ступени на ультраплоской поверхности Si (111) при сублимации // Физика и техника полупроводников. – 2016. – Т. 50. – №. 5. – С. 607-611.

[A7] Sitnikov S., Kosolobov S., Latyshev A. Attachment–detachment limited kinetics on ultra-flat Si (111) surface under etching with molecular oxygen at elevated temperatures // Surface Science. – 2015. – Т. 633. – С. L1-L5.

[A8] Косолюбов С.С., Латышев А.В. Атомные ступени на поверхности кремния (111) при субмонослойной адсорбции золота //Изв. РАН. Серия физическая. – 2008. – Т. 72. – С. 193-197.

[A9] Косолюбов С.С., Латышев А.В. Влияние вакансий на распределение атомных ступеней на поверхности кремния (111) // Вестник Новосибирского государственного университета. Серия: Физика. – 2007. – Т. 2. – №. 2. – С. 40-50.

[A10] Kosolobov S.S., Song S.A., Rodyakina E.E., Latyshev A.V. Initial stages of gold adsorption on silicon stepped surface at elevated temperatures // Semiconductors. – 2007. – Т. 41. – №. 4. – С. 448-452.

[A11] Косолюбов С.С. Цонг С.А., Федина Л.И., Гутаковский А.К., Латышев А.В. Нестабильность распределения атомных ступеней на Si (111) при субмонослойной адсорбции золота при высоких температурах // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2005. – Т. 81. – №. 3. – С. 149-153.

- [A12] A.L. Aseev, S.S. Kosolobov, A.V. Latyshev, Se Ahn Song, A.A. Saranin, A.V. Zotov, V.G. Lifshits. In situ REM and ex situ SPM studies of silicon (111) surface // *Physica Status Solidi (a)*. – 2005. – Т. 202. – №. 12. – С. 2344-2354.
- [A13] A.V. Latyshev, S.S. Kosolobov, D.A. Nasimov, A.L. Aseev. Characterization of stepped silicon surface by reflection electron microscopy // *Journal of Electron Microscopy*. – (2002). – V.15. – P. 561.
- [A14] A.V. Latyshev, S.S. Kosolobov, D.A. Nasimov, V.N. Savenko, A.L. Aseev: Atomic steps on the single crystal surface during epitaxy, sublimation and gas reaction. // *Journal of the Japanese Association of Crystal Growth*. – (2002). – V.29.- P. 39.
- [A15] S.S. Kosolobov, D.A. Nasimov, D.V. Sheglov, E.E. Rodyakina, and A.V. Latyshev. Atomic force microscopy of silicon stepped surface // *Physics of Low-Dimensional Structures*. – 2002. – Т. 5. – С. 231.
- [A16] Косолюбов С.С., Асеев А.Л., Латышев А.В. In situ исследование взаимодействия кислорода с поверхностью кремния (111) методом сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии // *Физика и техника полупроводников*. – 2001. – Т. 35. – №. 9. – С. 1084.
- [A17] С.С. Косолюбов, А.В. Прозоров, С.В. Белкин, А.В. Латышев. Эволюция морфологии поверхности кремния при термическом травлении кислородом. // *Известия Высших Учебных Заведений, Физика*. – (2000). – №11. – с. 110.
- [A18] A.V. Latyshev, L.I. Fedina, S.S. Kosolobov, S.V. Sitnikov, D.I. Rogilo, E.E. Rodyakina, D.A. Nasimov, D.V. Sheglov, and A.L. Aseev, Atomic Processes on the Silicon Surface // *Advances in Semiconductor Nanostructures*. – Elsevier, 2017. – С. 189-221.
- [A19] А.В. Латышев, С.С. Косолюбов, Д.А. Насимов, С.В. Ситников, Д.И. Рогило, Е.Е. Родякина, Л.И. Федина, А.Б. Красильников, А.Л. Асеев. Атомные процессы на поверхности кремния. // Юбилейный сборник избранных трудов Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (1964-2014) – Новосибирск: Параллель. – 2014. – С. 176–197. – ISBN978-5-98901-144-5.
- [A20] Kosolobov S.S., Latyshev A.V. Step bunching on silicon surface under electromigration // *Nanophenomena at Surfaces*. – Springer Berlin Heidelberg, 2011. – С. 239-258.
- [A21] A.V. Latyshev, S.S. Kosolobov, D.A. Nasimov, V.N. Savenko, A.L. Aseev. Atomic Steps on a Single-Crystal Surface Studied With in Situ UHV Reflection-Electron Microscopy // *Atomistic Aspects of Epitaxial Growth*. – 2002. – С. 281-299.
- [A22] A.V. Latyshev, D.A. Nasimov, V.N. Savenko, S.S. Kosolobov and A.L. Aseev. In situ REM studies of a Si(111) stepped surface during gold adsorption and oxygen treatments. // *Inst. Phys. Conf. Ser.*- (2002).- V. 169.- pp. 153-162.
- [A23] Se-ahn Song, A.V. Latyshev, S.S. Kosolobov, A.K. Gutakovskii, L.I. Fedina, Method of controlling crystal surface morphology using metal adsorption. Patent № US 2006/0033047, 2006.

[A24] Se-ahn Song, A.V. Latyshev, L.I. Fedina, A.K. Gutakovskii, S.S. Kosolobov, Two Dimensional Nanostructure Fabrication Method and Two Dimensional Nanostructure Fabricated Therefrom. Patent №US 2007/0161259, 2007.

[A25] С.В. Ситников, С.С. Косолюбов, А.В. Латышев. Способ формирования плоской гладкой поверхности твердотельного материала, Патент на изобретение № RU 2453874, 2011.

### Список цитируемой литературы

1. Latyshev A. V., Dvurechenskii A. V., Aseev A.L. Eds. *Advances in Semiconductor Nanostructures: Growth, Characterization, Properties and Applications*. Elsevier, 2016. . ISBN:978-0-12-810512-2.
2. Markov I. V. *Crystal Growth for Beginners. Fundamentals of Nucleation, Crystal Growth and Epitaxy*. 3rd ed. World Scientific Publishing, 2017.
3. Uwaha M. Introduction to the BCF theory // *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*. 2016. № 2(62). С. 58–68.
4. Misbah C., Pierre-Louis O., Pimpinelli A. Advacancy-induced step bunching on vicinal surfaces. // *Phys. Rev. B*. 1995. № 23(51). С. 17283–17286.
5. Kahata H., Yagi K. The effect of surface anisotropy of Si (001)  $2 \times 1$  on hollow formation in the initial stage of oxidation as studied by reflection electron microscopy // *Surface Science*. 1989. № 1(220). С. 131–136.
6. Shimuzu N., Tanishiro Y., Takayanagi K. On the vacancy formation and diffusion on the silicon (111)  $7 \times 7$  surfaces under exposures of low oxygen pressure studied by in situ reflection electron microscopy. // *Surface Science*. 1987. (191). С. 28.
7. Liu K., Zhang S., Wu D., Luo L., Sun X., Chen X., Zakharov D., Cheng S., Zhu Y., Yang J.C., Wang G., Zhou G. Effect of surface steps on chemical ordering in the subsurface of Cu (Au) solid solutions. // *Phys. Rev. B*. 2021. (103). С. 035401.
8. McCarty K.F., Nobel J.A., Bartelt N.C. Vacancies in solids and the stability of surface morphology // *Nature*. 2001. № 6847(412). С. 622–625.
9. Poelsema B., Hannon J.B., Bartelt N.C., Kellogg G.L. Bulk-surface vacancy exchange on Pt (111) // *Applied physics letters*. 2004. № 14(84). С. 2551–2553.
10. Pichler P. Intrinsic Point Defects // *Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon*. 2004. С. 77–227.
11. Френкель Я.И. Тепловое движение в твердых и жидких телах и теория плавления // *УФН*. 1936. № 7(XVI). С. 955.
12. Fahey P.M., Griffin P.B., Plummer J.D. Point defects and dopant diffusion in silicon // *Reviews of modern physics*. 1989. № 2(61). С. 289.
13. Sueoka K., Kamiyama E., Spiewak P., Vanhellefont J. Review—Properties of

- Intrinsic Point Defects in Si and Ge Assessed by Density Functional Theory // ECS Journal of Solid State Science and Technology. 2016. № 4(5). C. 3176–3195.
14. Kamiyama E., Sueoka K. First principles analysis on interaction between vacancy near surface and dimer structure of silicon crystal // Journal of Applied Physics. 2012. № 1(111).
  15. Abe T., Takahashi T., Shirai K. Observations of secondary defects and vacancies in CZ silicon crystals detached from melt using four different types of characterization technique // Journal of Crystal Growth. 2016. (436). C. 23–33.
  16. Abe T., Takahashi T., Shirai K., Zhang X.W. Investigations of interstitial generations near growth interface depending on crystal pulling rates during CZ silicon growth by detaching from the melt // Journal of Crystal Growth. 2016. (434). C. 128–137.
  17. Voronkov V. V. The mechanism of swirl defects formation in silicon // Journal of Crystal Growth. 1982. № 3(59). C. 625–643.
  18. Voronkov V. V., Falster R. Vacancy and self-interstitial concentration incorporated into growing silicon crystals // Journal of Applied Physics. 1999. № 11(86). C. 5975–5982.
  19. Bracht H. Diffusion mechanisms and intrinsic point-defect properties in silicon // MRS bulletin. 2000. № 6(25). C. 22–27.
  20. Wurm K., Kliese R., Hong Y., Röttger B., Wei Y., Neddermeyer H., Tsong I.S.T. Evolution of surface morphology of Si(100)-(2x1) during oxygen adsorption at elevated temperatures // Phys. Rev. B. 1994. № 3(50). C. 1567–1574.
  21. Markov I. V. Crystal Growth for Beginners. Fundamentals of Nucleation, Crystal Growth and Epitaxy World Scientific Publishing, 2017. .
  22. Bales G.S., Zangwill A. Self-consistent rate theory of submonolayer homoepitaxy with attachment/detachment kinetics // Phys. Rev. B. 1997. № 4(55). C. R1973--R1976.
  23. Bartelt M.C., Hannon J.B., Schmid A.K., Stoldt C.R., Evans J.W. Island formation during deposition or etching // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 2000. № 1–3(165). C. 373–403.