

УДК 621.31:535.215

А.В. ВОЙЦЕХОВСКИЙ, А.П. КОХАНЕНКО, К.А. ЛОЗОВОЙ, А.М. ТУРАПИН, В.Г. САТДАРОВ, А.А. ПИЩАГИН

УПРАВЛЕНИЕ ПАРАМЕТРАМИ МАССИВА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ge НА ПОВЕРХНОСТИ Si В ПРОЦЕССЕ РОСТА

Проведен анализ методов получения наногетероструктур с квантовыми точками Ge на Si и способов управления свойствами самоорганизующихся массивов квантовых точек. Представлены результаты моделирования зависимости параметров массивов Ge на кристаллической поверхности Si(001) от условий роста. Кроме того, приведены изображения экспериментально полученных образцов.

Ключевые слова: наногетероструктуры, квантовые точки, молекулярно-лучевая эпитаксия, самоорганизация.

В настоящее время наиболее перспективный метод формирования квантовых точек (КТ) основан на эффектах самоорганизации полупроводниковых наноструктур в гетероэпитаксиальных системах. Эпитаксия происходит в неравновесных условиях, и формирующаяся структура определяется кинетикой стадий роста и самоорганизации. Упругие деформации в эпитаксиальной пленке и островках на ее поверхности являются ключевым фактором как в морфологическом переходе от плоской пленки к островковой (механизм Странского – Крастанова), так и в последующих изменениях размеров, формы и пространственного распределения островков. В последовательности происходящих в таких системах кинетических переходов важной является стадия формирования однородных по размеру, когерентных (не содержащих дефектов) трёхмерных островков. Эффекты самоорганизации (упорядочения) заключаются в появлении в системе островков с предпочтительными значениями их параметров: размеров, формы, расстояний между нанокластерами и их взаимного расположения. Происходящие процессы упорядочения связаны с минимизацией суммарной свободной энергии системы. Распределению островков по размерам уделяется особое внимание, так как этот параметр чрезвычайно важен в системах, содержащих массив квантовых точек как искусственных атомов одного сорта.

Одним из методов получения гетероструктур Si:Ge является молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ), к основным достоинствам которой можно отнести получение и сохранение атомно-чистой поверхности кристалла, используемого в качестве подложки; проведение эпитаксиального роста при низкой температуре подложки и малых скоростях, что существенно увеличивает резкость границ гетеропереходов; контроль эпитаксиальных процессов на подложке поверхностно-чувствительными методиками и методами масс-спектропии непосредственно в ходе роста; полную автоматизацию процессов роста. Существуют разработанные режимы роста структур, обеспечивающие получение достаточно однородных по размеру островков нанометрового масштаба, которые обеспечивают возможность функционирования приборов на структурах с квантовыми точками при комнатной температуре, а также реализации приборных характеристик, нечувствительных к изменению температуры в широких пределах.

В работе проводился расчёт зависимости параметров самоорганизующегося массива КТ Ge на поверхности Si(100) от условий роста. Поскольку в процессе роста островки образуются самопроизвольно, то управлять их морфологией можно, только изменяя условия синтеза: температуру подложки, скорость напыления, количество напылённого материала. Из анализа литературных данных по проблеме роста квантовых точек германия на кремнии методом МЛЭ был сделан вывод о том, что наиболее подходящей для описания различных стадий ростового процесса является кинетическая модель, предложенная в работе [1].

Для расчета кинетики формирования КТ прежде всего определяется свободная энергия образования островка как функция его размера $\Delta F(i)$, которая зависит от параметров системы материалов и геометрических параметров островка. Затем по формуле Зельдовича рассчитывается скорость зарождения островков I , зависящая скорости поступления атомов к островку W , которая, в свою очередь, определяется коэффициентом диффузии атомов из смачивающего слоя в островок D . Функция плотности распределения $f(L, t)$ островков по размерам L в различные моменты времени t ищется как решение классической задачи кинетики фазовых переходов первого рода при независимой от размера скорости роста островков. При известных параметрах гетероэпи-

таксиальной системы, которые частично могут выбираться из сопоставления с экспериментом, эта модель позволяет рассчитывать функцию распределения КТ по размерам и поверхностную плотность КТ. Она также позволяет объяснить наблюдаемые в эксперименте зависимости среднего латерального размера и плотности КТ от температуры роста, скорости осаждения и толщины осаждения.

В ходе работы была изучена динамика процессов на начальных стадиях роста КТ, составлена программа для расчета характеристик ансамбля КТ, проведено компьютерное моделирование и вычислительные эксперименты по определению зависимости параметров гетероэпитаксиальной системы от условий роста. При этом была учтена температурная зависимость коэффициента диффузии Ge на поверхности Si и наличие двух выделенных форм островков на начальной стадии роста квантовых точек, а именно островков пирамидальной формы с квадратным или прямоугольным основанием, так называемых пирамидальных и клиновидных hut-кластеров.

Результаты расчетов показывают, что поверхностная плотность островков N обоих видов монотонно убывает с уменьшением скорости осаждения германия V или с ростом температуры напыления T . Средний размер островков, напротив, увеличивается при увеличении температуры T или уменьшении скорости роста V , что видно из зависимости функции плотности распределения $f(L, t)$ квантовых точек по латеральным размерам L от температуры поверхности T и скорости осаждения V .

Это объясняется тем, что понижение температуры роста, так же как и увеличение потока Ge, ведет к уменьшению диффузионной длины адатомов на подложке. Соответственно область сбора адатомов для одного островка уменьшается, снижаются и его размеры, а поверхностная плотность возрастает.

При этом может быть выведено общее правило, что при одинаковых условиях роста ширина основания удлинённых (клиновидных) hut-кластеров меньше, чем у пирамидальных с квадратным основанием.

На базе проведённых оценок экспериментально определялись условия синтеза для получения массива КТ Ge с заданными параметрами. Синтез структур проводился на установке МЛЭ «КА-ТУНЬ-100». В результате проведения ростовых экспериментов достигнута плотность островков Ge $>10^{11}$ см⁻². Исследование поверхности полученных образцов осуществлялось с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) NT-MDT SOLVER. Получены АСМ-изображения образцов, выращенных при температуре 350 °С и скоростях осаждения 0,3 и 0,45 МС/с (монослоев в секунду). Толщина напыленного Ge составила 6 МС. Средний размер германиевых квантовых точек для этих двух образцов равен 35 и 30 нм соответственно. Полученные результаты синтеза хорошо согласуются с используемым методом расчета параметров самоорганизующихся КТ Ge.

Для различных применений необходимо создавать гетероструктуры с КТ с различными свойствами, которые задаются такими параметрами КТ, определяющими энергетический спектр электронов, как их форма и латеральный размер. Поэтому важной задачей является расчет оптимальных условий роста для создания тех или иных гетероструктур. Зная морфологию нанокластеров, то есть функцию плотности их распределения по размерам, поверхностную плотность островков можно рассчитать энергетический спектр электрона, его волновые функции в квантовой точке, а также коэффициент поглощения материала. Возможно решение и обратной задачи создания структур, обладающих максимумом поглощения в заданном диапазоне. Для этого рассчитывается необходимый средний размер квантовых точек и определяются оптимальные для получения подобных структур условия роста методом МЛЭ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дубровский В. Г. // ФТП. – 2006. – Т. 40. – № 10. – С. 1153–1160.

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
г. Томск, Россия
E-mail: lka@sibmail.com

Поступила в редакцию 15.06.12.

Войцеховский Александр Васильевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой;
Коханенко Андрей Павлович, д.ф.-м.н., профессор;
Лозовой Кирилл Александрович, студент;
Турапин Алексей Михайлович, аспирант;
Сатдаров Вадим Газизович, студент;
Пищагин Антон Александрович, студент.