

На правах рукописи

ЭРВЬЕ Юрий Юрьевич

Элементарные процессы на ступенях
в кинетике эпитаксиального роста и легирования при
сильных отклонениях от равновесия

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Томск – 2012 г.

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном
учреждении высшего профессионального образования
“Национальный исследовательский Томский государственный университет”

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Ивонин Иван Варфоломеевич

Официальные оппоненты: Дубровский Владимир Германович,
доктор физико-математических наук, профессор,
Учреждение Российской академии наук
Санкт-Петербургский Академический университет РАН,
заведующий кафедрой теоретической физики

Кулькова Светлана Евгеньевна,
доктор физико-математических наук, профессор,
Учреждение Российской академии наук
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
главный научный сотрудник лаборатории физики
нелинейных сред

Поплавной Анатолий Степанович,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВПО Кемеровский государственный университет,
заведующий кафедрой теоретической физики

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова
СО РАН

Защита состоится 18 октября 2012 г. в 14 час. 30 мин. на заседании диссертационного
совета Д 212.267.07 в ФГБОУ ВПО “Национальный исследовательский Томский госу-
дарственный университет” по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке ФГБОУ ВПО “Националь-
ный исследовательский Томский государственный университет” по адресу г. Томск, пр.
Ленина, 34 а.

Автореферат разослан

2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ивонин
Иван Варфоломеевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) в настоящее время является основным методом получения эпитаксиальных наноразмерных структур, перспективных для использования в современных устройствах нано- и оптоэлектроники. Это обусловлено реализуемыми при МЛЭ уникальными возможностями варьирования условий роста и легирования, контроля *in situ* скорости роста и состава кристаллических слоев, а также возможностями экспериментального исследования состояния поверхности на атомном уровне. Однако для управляемого получения полупроводниковых и металлических наноструктур с заданными свойствами необходимо детальное понимание кинетики роста и легирования в широком диапазоне пространственных и временных масштабов — от элементарных (атомных) процессов до формирования кристаллических пленок толщиной в сотни микрон.

Характерными особенностями МЛЭ являются сильные отклонения от равновесия и разнообразие элементарных процессов с существенно различными энергиями активации. Это делает прямое применение методов статистической физики и термодинамической теории фазовых переходов для описания процессов МЛЭ проблематичным, особенно в технологически важном диапазоне низких температур роста. Поэтому большинство теорий роста изначально исходит из представлений о структуре поверхности, характерной для данных условий кристаллизации, и о моноатомных (элементарных) ступенях, как о стоках для адсорбированных атомов (адатомов). Данный подход, предложенный более 60 лет назад Бартоном, Кабрерой и Франком [1], оказывается чрезвычайно плодотворным, поскольку позволяет сформулировать краевую задачу поверхностной диффузии адатомов и описать развитие рельефа поверхности как движение ступеней. Однако предсказательная способность теорий роста применительно к конкретным системам остается ограниченной, во многом ввиду отсутствия связи между фигурирующими в теории феноменологическими кинетическими коэффициентами и константами скоростей элементарных процессов. Для установления такой связи необходима соответствующая формулировка краевых условий для уравнения поверхностной диффузии.

В общем случае, краевые условия отражают баланс потоков адатомов, поступающих к ступени за счет поверхностной диффузии, и адатомов, присоединяющихся к ступени и отрывающихся от нее. Обычно полагается, что потоки адатомов в ступень с примыкающих нижней и верхней террас пропорциональны пересыщению вблизи ступени. Коэффициенты пропорциональности (кинетические коэффициенты ступени) рассматриваются либо как феноменологические параметры, либо как аррениусовские константы скоростей присоединения адатомов к ступени. Такой подход неявно предполагает, что присоединение адатома к краю ступени означает переход адатома в кристаллическую фазу, а ступень представляет собой бесструктурную границу раздела фаз между адслоем и кристаллом. Но окончательный переход адатома в кристалл возможен лишь при достижении положения в изломе на ступени [1,2]. Поэтому, в общем случае, встраивание адатомов в ступень представляет собой сложный процесс, включающий элементарные акты присоединения и отрыва адатомов, миграции адатома вдоль края ступени, а также процессы формирования изломов.

Таким образом, корректная формулировка краевых условий требует детального рас-

смотрения атомных процессов на ступени с учетом наличия изломов, как мест окончательного перехода атомов из адсорбционного слоя в кристалл. Упрощенное феноменологическое описание кинетики атомных процессов на вицинальных ступенях и краях двумерных островков представляется явно недостаточным, в частности, при решении следующих проблем:

1) Экспериментальные исследования показывают, что поверхностный транспорт адатомов может иметь нелокальный характер, т.е. адатомы могут переходить на соседние террасы без предварительного встраивания в изломы на ступенях. Ступени, допускающие такой переход адатомов, называются проницаемыми [3]. Влияние проницаемости ступеней на развитие рельефа поверхности до сих пор мало изучено. Наиболее широко представление о проницаемых ступенях используется в моделях динамики вицинальных ступеней при сублимации и росте. Проницаемость ступени учитывается введением в краевые условия для уравнения поверхностной диффузии, наряду с потоком адатомов, встраивающихся в ступень, потока адатомов, перескакивающих через ступень на соседнюю террасу. Последний полагается пропорциональным разности концентраций адатомов на верхней и нижней террасах. Соответствующий коэффициент пропорциональности (коэффициент проницаемости ступени) рассматривается как дополнительный феноменологический параметр. Заметим, что данный подход ограничен слабыми отклонениями от равновесия вблизи ступени и не учитывает взаимосвязи процессов встраивания адатомов в ступень и перескоков через нее. Кроме того, при отсутствии явных выражений для кинетических коэффициентов остаются неясными условия проницаемости ступени и причины перехода от проницаемой ступени к непроницаемой при изменении условий кристаллизации.

2) Кинетика начальной (субмонослойной) стадии роста по механизму образования двумерных (2D) островков представляет большой интерес, поскольку во многом определяет развитие рельефа поверхности при гомоэпитаксии и влияет на переход к трехмерному росту при гетероэпитаксии. Для роста на реконструированной поверхности характерно присутствие магических чисел в распределении 2D островков по размерам. Островок магического размера, например, 2D островок кремния на поверхности Si(111)-7x7 [4], имеет правильную геометрическую форму (отличную от равновесной) и растет путем последовательного отложения кристаллических рядов вдоль края островка (механизм роста “ряд-за-рядом”). Встраивание адатомов в магические 2D островки связано с нелинейным по концентрации адатомов процессом образования зародыша нового кристаллического ряда (пары изломов) на крае островка.

Другая особенность роста на реконструированной поверхности состоит в том, что образование эпитаксиальных 2D островков может быть связано с многостадийным процессом, включающим формирование метастабильных неэпитаксиальных кластеров и превращение неэпитаксиальных кластеров в эпитаксиальные островки (“эпинуклеация” [5]). Атомы неэпитаксиальных кластеров, как и адатомы на крае ступени, не достигшие изломов, не могут считаться принадлежащими кристаллической фазе до момента превращения. Учет указанных особенностей требует существенной модификации стандартных моделей субмонослойного роста [6], не учитывающих влияния структуры и текущей конфигурации островков на процессы присоединения и отрыва адатомов.

3) Известно, что легирование полупроводников при МЛЭ сопровождается сильной

поверхностной сегрегацией примеси, препятствующей получению резких концентрационных профилей легирования и δ -легированных слоев. Разумное объяснение данного явления дано в работах [7,8], согласно которым, накопление (поверхностная сегрегация) примеси происходит в адсорбционном слое, а механизмом накопления являются перескоки атомов примеси, плохо встраивающихся в кристалл, через движущиеся ступени. Однако предложенные в [7,8] модели не позволяют корректно воспроизвести экспериментальные зависимости ширины переходной концентрационной области легирования от температуры и скорости роста. Это может быть связано с упрощенным феноменологическим описанием кинетики захвата примеси движущейся ступенью, не учитывающим кооперативные эффекты при встраивании в ступень атомов примеси и атомов основного вещества, в частности, известный эффект “замуровывания” примеси в изломах атомами основного вещества [9].

Приведенные примеры показывают, что развитие теории роста и легирования в системах молекулярно-лучевой эпитаксии требует разработки моделей элементарных процессов на ступенях (на краях 2D островков), не ограниченных слабыми отклонениями от равновесия, учитывающих наличие различных положений атома на ступени и достаточно детально описывающих кинетику переходов атомов между данными положениями. Это определяет **актуальность** темы данной диссертационной работы.

Целью диссертационной работы является развитие теоретического подхода к описанию кинетики элементарных процессов на ступенях и разработка моделей эпитаксиального роста и легирования при сильных отклонениях от равновесия. В соответствии с целью работы решались следующие **основные задачи**:

- Построение кинетической модели элементарных процессов на проницаемой вицинальной ступени. Установление связи феноменологических коэффициентов встраивания адатомов и проницаемости ступени с константами скоростей элементарных процессов и концентрацией изломов на ступени.
- Построение кинетической модели элементарных процессов на проницаемой ступени малой длины (прямолинейном сегменте ступени), перемещающейся по механизму образования и разрастания одномерного островка вдоль края ступени.
- Исследование влияния проницаемости ступени (края 2D островка) на переход от 2D к 3D росту и на образование многослойных островков.
- Построение моделей образования и роста магических 2D островков на реконструированной поверхности. Исследование влияния реконструкции поверхности на зависимости концентрации островков и распределения островков по размерам от температуры и скорости роста.
- Построение моделей захвата и поверхностной сегрегации примеси при легировании в условиях молекулярно-лучевой эпитаксии. Исследование влияния температуры и скорости роста на величину размытия концентрационного профиля легирования.

Научная новизна работы заключается в том, что в ней:

- С помощью оригинальной модели получены явные выражения для кинетических коэффициентов встраивания адатомов в вицинальную ступень и кинетических коэффициентов проницаемости ступени через константы скоростей элементарных процессов и концентрацию изломов на ступени. Впервые теоретически исследовано влияние температуры и скорости роста на проницаемость вицинальной ступени.

Показано, что проницаемость ступени уменьшается с увеличением потока осаждаемого вещества и может немонотонно зависеть от температуры роста.

- Предложена модель встраивания адатомов в прямолинейный сегмент ступени (край 2D островка), перемещающийся по механизму “ряд-за-рядом”, с учетом миграции адатомов вдоль края сегмента и перехода на соседние сегменты ступени.
- В рамках модели образования и роста двухуровневых пирамид, состоящих из 2D островков, проведено исследование влияния проницаемости краев 2D островков на начальную стадию перехода от 2D к 3D росту. Показано, что характерное время перехода к 3D росту может немонотонно зависеть от температуры.
- Предложена модель переноса вещества при формировании многослойных островков Si и Ge на поверхности Si(111)-7x7, учитывающая образование неравновесных изломов на краях 2D островков и особенности встраивания адатомов в островок, растущий по механизму “ряд-за-рядом”.
- Разработаны оригинальные модели многостадийного процесса образования 2D островков на реконструированной поверхности. Показано, что при определенных условиях имеет место степенная зависимость концентрации островков от величины потока осаждаемого вещества с нестандартным значением показателя степени 1/4.
- Проведено обобщение стандартной модели субмонослойного роста, учитывающее характерный для магических 2D островков механизм роста “ряд-за-рядом”. Показано, что в пределе большой частоты отрыва адатома от края магического островка концентрация островков слабо зависит от скорости роста и увеличивается с увеличением температуры. При этом распределение островков по размерам представляет собой последовательность пиков при магических размерах, высота которых монотонно уменьшается с увеличением магического размера.
- Разработана модель нестационарного процесса легирования при МЛЭ, учитывающая кооперативные эффекты при встраивании в ступень атомов примеси и атомов основного вещества и эффект оттеснения примеси движущейся ступенью. Показано, что блокирование атомов примеси в изломах атомами основного вещества и оттеснение адатомов примеси движущимися ступенями могут быть причинами наблюдаемой в эксперименте немонотонной зависимости размытия концентрационного профиля легирования от температуры.
- Предложена модель легирования при низких температурах эпитаксии, когда рост происходит по механизму образования и разрастания 2D островков, а изломы на краях островков формируются по неравновесному механизму образования одномерных зародышей. Модель позволяет воспроизвести характерные для низкотемпературного легирования зависимости размытия концентрационного профиля легирования от температуры и скорости роста.

Практическая значимость работы состоит в том, что полученные в ней результаты способствуют пониманию процессов роста и легирования в системах молекулярно-лучевой эпитаксии, которое необходимо для развития эпитаксиальных технологий получения наноразмерных структур.

В ряде случаев разработанные модели могут быть напрямую использованы для интерпретации результатов экспериментальных наблюдений, получения информации о механизмах роста и легирования в конкретных системах, оценки энергий активации эле-

ментарных процессов роста.

Развитый подход к описанию процессов на ступенях и полученные выражения для кинетических коэффициентов могут быть использованы при создании мультимасштабных моделей, сочетающих континуальное описание процессов на террасах с квантово-химическими расчетами потенциального рельефа для атома на ступени.

На защиту выносятся следующие положения

1. Коэффициенты встраивания адатомов в ступень и коэффициенты проницаемости ступени представляют собой определенные комбинации констант скоростей элементарных процессов и концентрации изломов на ступени, связанные соотношениями, отражающими взаимозависимость процессов встраивания адатомов в ступень и перехода через нее на соседнюю террасу.

2. Увеличение доли изломов, формирующихся по неравновесному механизму образования одномерных островков на крае ступени, приводит к уменьшению проницаемости ступени при увеличении скорости роста и может иметь следствием немонотонную зависимость проницаемости ступени от температуры.

3. Перенос вещества на начальной стадии перехода от двумерного к трехмерному росту может происходить за счет перескоков адатомов через края 2D островков. Для этого необходимо, чтобы край 2D островка был проницаемым для адатомов. При постоянном наличии изломов на краях 2D островков требуется также асимметрия потенциального рельефа для адатома, способствующая переходу адатома на поверхность островка и препятствующая возвращению на край островка.

4. Кинетика многостадийного процесса образования 2D островков на реконструированной поверхности существенным образом зависит от механизма превращения неэпитаксиального кластера в эпитаксиальный 2D островок. Если превращение кластера в островок инициируется присоединением дополнительных атомов, то, при определенных условиях, реализуется квазистационарный режим образования островков, характеризующийся нестандартной слабой зависимостью концентрации островков от потока осаждаемого вещества.

5. Особенности формирования изломов на краях 2D островков, растущих по механизму “ряд-за-рядом”, могут оказывать существенное влияние на кинетику образования островков на субмонослойной стадии роста, если скорость образования кристаллического ряда ограничена частотой встречи адатомов на крае островка, необходимой для формирования изломов (одномерного островка). В этом случае поток адатомов в островки нелинейно зависит от концентрации адатомов, что приводит к нестандартным зависимостям концентрации островков от температуры роста и потока осаждаемого вещества.

6. Накопление примеси в адслое по механизму перескоков адатомов примеси через движущиеся ступени приводит к немонотонным зависимостям ширины переходной концентрационной области легирования (ширины ПКО) от температуры и скорости роста, подобным зависимостям, наблюдаемым в экспериментах по легированию полупроводников рядом примесей. Характерное для низкотемпературного режима легирования уменьшение ширины ПКО с уменьшением температуры и увеличением скорости роста может быть связано с более эффективным блокированием атомов примеси в изломах атомами основного вещества и с оттеснением адатомов примеси движущейся ступенью.

Достоверность полученных результатов обусловлена тем, что в основе развитых в работе подходов и моделей лежат общепризнанные представления о процессах эпитаксиального роста и легирования при кристаллизации из молекулярного пучка. Кроме того, достоверность полученных результатов подтверждается в ряде случаев сопоставлением предсказаний аналитических моделей с результатами компьютерного моделирования, сравнением с теоретическими результатами, полученными другими авторами, качественным и количественным сопоставлением с имеющимися данными экспериментальных исследований.

Личный вклад автора. Результаты, сформулированные в защищаемых положениях и выводах, получены при определяющем участии автора. Постановка задач, поиск путей их решения, разработка аналитических моделей и интерпретация результатов проведены лично автором. Численные расчеты, обсуждение, презентация и публикация результатов осуществлялись совместно с соавторами. Кинетические Монте-Карло модели, использованные в главе 3, разработаны С.Н. Филимоновым. Экспериментальные результаты в работах [19]-[21] из списка публикаций по теме диссертации получены немецкими коллегами при участии автора в обсуждении постановки эксперимента.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на следующих конференциях и симпозиумах: 8 Всесоюзная конференция по росту кристаллов (Харьков, 1992); Конференция по электронным материалам (Новосибирск, 1992); Международная конференция “Кремний” (Москва, 1996; Новосибирск, 2002; Иркутск, 2004; Нижний Новгород, 2010); Международная конференция по росту и физике кристаллов памяти Шаскольской (Москва, 1998); IX Национальная конференция по росту кристаллов (Москва, 2000); Российская конференция по физике полупроводников (Новосибирск, 1999; Нижний Новгород, 2001); Международная конференция “Современные проблемы физики и высокие технологии” (Томск, 2003); European conference on surface science – ECOSS (Krakow, 2001; Paris, 2006; Parma, 2009); 2nd International SiGe Technology and Device Meeting (Frankfurt (Oder), 2004); International Symposium “Nanostructures: physics and technology” (Санкт-Петербург, 2005; Новосибирск, 2007); Конференция по физической электронике (Ташкент, 2005 и 2009 гг.); Symposium on Surface Science – 3s05 (Les Arcs, 2005); International meeting “Instabilities at surfaces” (Слънчев Бряг, 2006); V International conference on silicon epitaxy and heterostructures (Marseille, 2007), а также обсуждались на “Странски-Каишев” коллоквиуме в Институте физической химии (София) и на научных семинарах в Сибирском физико-техническом институте (Томск).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 26 научных статей. Из них 23 статьи в реферируемых журналах (21 статья опубликована в изданиях, рекомендованных ВАК) и три статьи в трудах конференций. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения, в котором сформулированы основные результаты и выводы. Каждая из глав диссертации включает необходимый краткий обзор литературы по рассматриваемым в главе вопросам и раздел, в котором формулируются основные результаты, полученные в главе. Объем диссертации составляет 238 страниц, включая 38 рисунков, 3 таблицы и список цитированной литературы с общим числом 242 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе предлагаются аналитические модели элементарных процессов роста на ступенях, допускающих обмен адатомами между соседними террасами без предварительного встраивания в изломы на торце ступени (т.н. проникаемые ступени). Согласно рассматриваемому в моделях атомному механизму проникаемости ступени, для встраивания в кристалл адатом должен попасть в излом либо напрямую, за счет диффузионного скачка с ближайшего положения адсорбции на террасе, либо в результате присоединения к гладкому участку края ступени и последующей миграции вдоль края к излому. При этом адатом, присоединившийся к гладкому участку края ступени, может оторваться от него либо на террасу, на которой он находился до присоединения, либо на соседнюю террасу (рис. 1). В последнем случае адатом пересекает ступень без встраивания. Существенно, что адатом на пути в излом и на соседнюю террасу проходит одно и то же промежуточное положение адсорбции на атомно-гладком участке ступени (положение e на рис. 1).

Рассматривались два типа ступеней: прямолинейные вицинальные ступени и замкнутые ступени, ограничивающие 2D островки. В случае вицинальной ступени полагалось, что ступень содержит изломы, удаленные друг от друга на одинаковое расстояние $L_k \gg 1$ (здесь и далее все расстояния выражаются в межатомных расстояниях). Необратимый (результатирующий) поток адатомов к ступени (на единицу ее длины) с нижней террасы определялся как сумма потоков адатомов, необратимо присоединяющихся к изломам и к гладким участкам края ступени:

$$g_l = \theta_k k_{lk}^+ (n_l - \tilde{n}_l) + (1 - \theta_k) L_k^{-1} \int_0^{L_k} j_l(x) dx, \quad (1)$$

где $\theta_k = 1/L_k$ – концентрация изломов на ступени, n_l – концентрация адатомов вблизи ступени, $\tilde{n}_l$ – равновесная концентрация адатомов на нижней террасе, x – расстояние от некоторого положения адсорбции на крае ступени до ближайшего излома, $j_l(x) = k_{le}^+ n_l - k_{el}^- n_e(x)$ – локальный поток адатомов к ступени в точке с координатой x . Здесь $k_{\alpha\beta}^\pm$ – константы скоростей элементарных актов присоединения (+) и отрыва (–) адатомов (левый нижний индекс обозначает начальную позицию атома, а правый – конечную). Концентрация адатомов на крае ступени $n_e(x)$ удовлетворяет стационарному уравнению непрерывности

$$D_e \frac{d^2 n_e}{dx^2} - (k_{el}^- + k_{eu}^-) n_e(x) + k_{le}^+ n_l + k_{ue}^+ n_u = 0 \quad (2)$$

с краевыми условиями, следующими из условий баланса потоков адатомов на изломах

$$D_e (dn_e/dx)|_{x=0} = k_{ek}^+ [n_e(0) - \tilde{n}_e]; \quad -D_e (dn_e/dx)|_{x=L_k} = k_{ek}^+ [n_e(L_k) - \tilde{n}_e]. \quad (3)$$

Здесь $D_e = \nu \exp(-E_e/k_B T)$ – коэффициент диффузии вдоль края ступени.

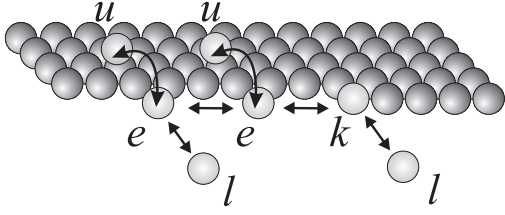


Рис. 1: Изображение атомных процессов на ступени (l - атом на нижней террасе; u - атом на верхней террасе; e - атом на гладком участке края ступени; k - атом в изломе).

Подстановка решения краевой задачи (2)-(3) в (1) и интегрирование позволяет записать $g_l = \beta_{inc}^l(n_l - \tilde{n}_l) + \beta_p^l n_l - \beta_p^u n_u$. Фигурирующие в этом выражении коэффициенты встраивания адатомов β_{inc}^l и проницаемости ступени β_p^l равны

$$\beta_{inc}^l = \theta_k k_{lk}^+ + (1 - \theta_k) f(q) k_{le}^+; \quad \beta_p^l = (1 - \theta_k) [1 - f(q)] \frac{k_{eu}^- k_{le}^+}{k_{eu}^- + k_{el}^-}, \quad (4)$$

где $f(q) = \tanh(q) / [q(1 + 2\theta_k q \tanh(q) k_{ek}^+ / D_e)]$ и $q = L_k / 2\lambda_e$ ($\lambda_e = \sqrt{D_e / (k_{el}^- + k_{eu}^-)}$ - средняя длина миграции адатома вдоль края ступени, не содержащей изломов). Выражения для потока адатомов с верхней террасы g_u и коэффициентов β_{inc}^u и β_p^u следуют из выражения для g_l и выражений (4) при замене l на u . Отметим, что:

- а) выражения (4) допускают простую вероятностную интерпретацию, например, коэффициент β_p^l , отнесенный к константе скорости присоединения k_{le}^+ , есть доля адатомов, которые пересекут ступень в результате присоединения к ее краю с нижней террасы, не попав в излом и не вернувшись на данную террасу;
- б) выражения (4) демонстрируют взаимозависимость процессов встраивания адатомов в ступень и перескоков через нее на соседнюю террасу. В частности, при $k_{eu}^- = k_{el}^-$ (симметричная потенциальная яма для адатома на крае ступени) и $k_{l(u)k}^+ = k_{l(u)e}^+$ (отсутствует дополнительный барьер для присоединения к излому) из (4) следует

$$\beta_{inc}^l + 2\beta_p^l = k_{le}^+; \quad \beta_{inc}^u + 2\beta_p^u = k_{ue}^+. \quad (5)$$

Равенства (5) являются условиями нормировки на вероятности для адатома встроиться в кристалл, $\beta_{l(u)}^{inc} / k_{l(u)e}^+$, и оторваться на одну из террас, $2\beta_p^{l,u} / k_{l(u)e}^+$;

в) для коэффициентов проницаемости ступени выполняется равенство $\beta_p^l \tilde{n}_l = \beta_p^u \tilde{n}_u$, что соответствует выполнению соотношений Онсагера между феноменологическими коэффициентами взаимности (в частности, при гомоэпитаксии $\tilde{n}_l = \tilde{n}_u$ и, следовательно, $\beta_p^l = \beta_p^u$).

Существенно, что выражения для потоков и коэффициентов получены без использования предположения о слабых отклонениях от равновесия. В общем случае потоки нелинейно зависят от концентраций адатомов вблизи ступени ввиду зависимости концентрации изломов θ_k от пересыщения. Такая зависимость должна учитываться, если основной вклад в θ_k дают изломы, формирующиеся по неравновесному механизму образования одномерных островков на крае ступени [10].

Использование в (4) формулы Аррениуса $k_{\alpha\beta}^\pm = \nu \exp(-E_{\alpha\beta}^\pm / k_B T)$ позволяет рассмотреть условие проницаемости ступени $\eta_l \equiv \beta_p^l / \beta_{inc}^l \gg 1$ в терминах энергий активации элементарных процессов $E_{\alpha\beta}^\pm$ и концентрации изломов θ_k . В случае симметричной потенциальной ямы для адатома на крае ступени ($E_{el}^- = E_{eu}^- = E_{es}^-$) и в отсутствие дополнительного барьера для присоединения адатома с края ступени к излому ($E_{ek}^+ = E_e$)

ступень проницаема, если $q \gg 1$ или $E_{es}^- < E_e - 2k_B T \ln \theta_k$. Это неравенство означает, что адатом с большой вероятностью оторвется до того, как достигнет излома, ввиду большой частоты отрыва или малой скорости миграции вдоль края ступени.

Исследование влияния температуры и потока осаждаемого вещества F на проницаемость ступени требует знания зависимостей от T и F концентрации изломов. Для учета различных механизмов образования изломов использовались основанные на приближении среднего поля выражения для скоростей образования изломов, предложенные в работе [11]. Это позволило сформулировать уравнение баланса скоростей образования и аннигиляции изломов при стационарном росте:

$$(2D_e \bar{n}_e + \omega_{se}^+ + \omega_{ke}^- + \omega_{ks}^-) \theta_k^2 = 4(2D_e \bar{n}_e + \omega_{se}^+) \bar{n}_e + (\omega_{ke}^- + \omega_{ks}^-) \tilde{\theta}_k^2, \quad (6)$$

где средняя концентрация адатомов на крае ступени $\bar{n}_e = [1 - f(q)] \omega_{se}^+ / \omega_{es}^- + f(q) \tilde{n}_e$. Здесь $\omega_{se}^+ = k_{le}^+ n_l + k_{ue}^+ n_u$, $\omega_{ks}^- = k_{kl}^- + k_{ku}^-$ и $\omega_{ke}^- = 2k_{ke}^-$ – элементарные частоты присоединения и отрыва. Уравнение (6) связывает между собой θ_k и ω_{se}^+ . Другое уравнение, связывающее эти величины, следует из условия баланса потоков адатомов, присоединяющихся к краю ступени и встраивающихся в нее. В случае эквидистантных ступеней, движущихся в условиях полной конденсации с постоянной скоростью $V = Fl$ (l – расстояние между ступенями):

$$Fl = g_l + g_u = [\theta_k + (1 - \theta_k) f(q)] (\omega_{se}^+ - \omega_{ks}^-). \quad (7)$$

Температурные зависимости θ_k и η при различных значениях барьера для миграции адатома вдоль края ступени E_e , полученные с помощью численного решения уравнений (6)-(7), представлены на рис. 2. Как видно из рис. 2а,б, $\theta_k(T)$ имеет минимум при некоторой температуре T^* , что связано с увеличивающимся (с уменьшением T) вкладом неравновесных изломов. При этом параметр проницаемости ступеней η достигает максимума вблизи T^* (рис. 2в). С уменьшением E_e значение T^* смещается в область низких T вследствие увеличения шансов встраивания адатомов в уже существующие изломы. При быстрой миграции адатомов ступень является непроницаемой ($q \ll 1$) и η монотонно уменьшается с уменьшением T (рис. 2г). Т.е. непроницаемая ступень становится еще более непроницаемой с уменьшением T несмотря на уменьшающуюся концентрацию изломов. Это связано с более резким увеличением длины миграции адатома до отрыва от края ступени. Расчеты также показывают, что η монотонно уменьшается с увеличением F из-за увеличения интенсивности формирования неравновесных изломов.

Встраивание адатомов в прямолинейный сегмент ступени, например сегмент края “фасетированного” 2D островка, имеет особенности, связанные с необходимостью образования изломов и с обменом адатомами с соседними сегментами. Если при прочих равных условиях, длина сегмента L меньше среднего расстояния между изломами на бесконечной ступени, то перемещение сегмента происходит по механизму “ряд за рядом”. Данный механизм включает формирование 1D островка на сегменте, не содержащем изломов, (время ожидания данного события t_{nuc}) и разрастание 1D островка вдоль сегмента за характерное время t_{gr} . Выражение для скорости перемещения такого сегмента ступени в отсутствие миграции адатомов вдоль ступени получено Воронковым [10]. В диссертации рассматривался случай быстрой миграции, когда время, необходимое адатому для посещения всех позиций на сегменте ступени, много меньше среднего

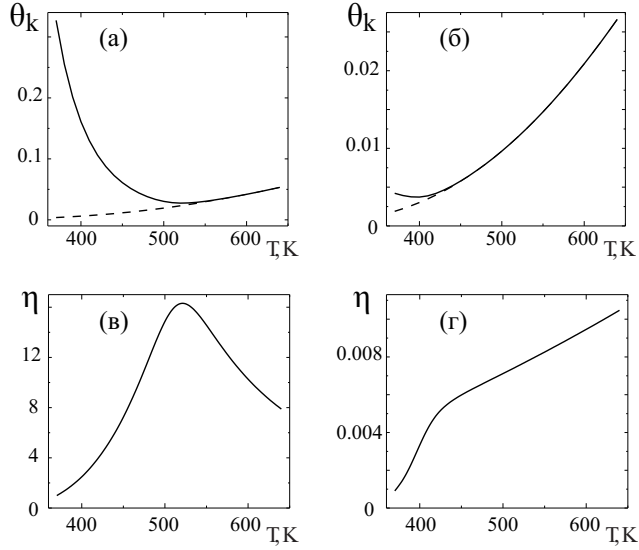


Рис. 2: Температурные зависимости концентрации изломов (а, б) и параметра проницаемости ступени (в,г) при различных значениях энергии активации миграции адатома вдоль края ступени E_e : 1.0 эВ (а,в) и 0.45 эВ (б,г). Пунктирные линии изображают температурную зависимость равновесной концентрации изломов.

интервала времени между актами присоединения адатомов и среднего времени пребывания адатома на гладкой ступени бесконечной длины до отрыва на террасу.

Результирующий поток адатомов, присоединяющихся к сегменту ступени с нижней террасы, усредненный по длине сегмента и времени $t_{1D} = t_{nuc} + t_{gr}$ формирования кристаллического ряда, $g_l = L^{-1} \int_0^L t_{1D}^{-1} \int_0^{t_{1D}} j_l(x, t) dx dt$, оценивался в пренебрежении отрывом атомов из изломов. Тогда, адатом, присоединившийся к сегменту ступени в течение интервала времени t_{gr} , не имеет шансов оторваться — он либо встраивается в имеющийся излом, либо покидает данный сегмент ступени за счет перехода на соседний сегмент. В этом случае $j_l(x, t) = k_{le}^+ n_l - k_{el}^- n_e(x)$ в интервале времени t_{nuc} и $j_l(x, t) = k_{le}^+ n_l$ в интервале времени t_{gr} . Интегрирование дает $g_l = (1 - \tau_k)(k_{le}^+ n_l - k_{el}^- \bar{n}_e) + \tau_k k_{le}^+ n_l$, где $\tau_k = t_{gr}/(t_{gr} + t_{nuc})$ — доля времени, в течение которого на сегменте ступени присутствует хотя бы один излом. Вычисление средней концентрации адатомов на гладком (без изломов) крае сегмента $\bar{n}_e$ связано с решением уравнения непрерывности (2) с соответствующими краевыми условиями.

В случае замкнутой ступени с одинаковыми сегментами (например ступень, ограничивающая треугольный 2D островок Si на грани Si(111)-7x7 [4]) при быстрой миграции адатома вдоль края ступени и в отсутствие дополнительного барьера для перехода через ее углы, решение уравнения (2) удовлетворяет периодическим краевым условиям на углах островка. Это дает $g_l = \beta_{inc}^l n_l + \beta_p^l n_l - \beta_p^u n_u$, где выражения для кинетических коэффициентов совпадают с выражениями (4) при $f(q) = 0$ и $\theta_k = \tau_k$. Параметр проницаемости сегмента ступени (края 2D островка) в данном случае равен

$$\eta_l = \beta_p^l / \beta_{inc}^l = t_{nuc} k_{eu}^- / [t_{gr} (k_{eu}^- + k_{el}^-)]. \quad (8)$$

Как следует из (8), сегмент края островка может быть проницаемым ($\eta_l \gg 1$) даже в случае быстрой миграции адатома вдоль края островка, если $t_{gr} \ll t_{nuc}$, т.е. если скорость роста островка лимитирована скоростью образования изломов.

В случае ступени, образованной чередующимися гладкими и шероховатыми сегментами (например ступень, ограничивающая прямоугольный 2D островок Si на поверхности Si(001)-1x2), вероятность встраивания адатома в гладкий сегмент зависит не только

от наличия изломов, но и от способности адатома перейти на соседний сегмент за счет миграции вдоль края ступени. При формулировании краевых условий полагалось, что переход адатома с гладкого сегмента ступени на шероховатый происходит необратимо и требует преодоления дополнительного барьера для огибания угла ступени ΔE_{ec} . В этом случае

$$\eta = \frac{(1 - \tau_k)[1 - f_c(q_L)]k_{eu}^-}{[\tau_k + (1 - \tau_k)f_c(q_L)](k_{el}^- + k_{eu}^-)},$$

где $q_L = L/(2\lambda_e)$. Величина $f_c(q_L)$ имеет смысл вероятности того, что адатом успеет перейти на соседний участок прежде, чем произойдет его отрыв от ступени. Выражение для $f_c(q_L)$ совпадает с выражением для $f(q)$ в случае бесконечной ступени при замене L на L_k и k_{ek}^+ на k_{ec}^+ , где k_{ec} - константа скорости огибания угла ступени адатомом. Здесь соседние сегменты действуют как пара изломов, расположенных на коротком ($L < L_k$) расстоянии, что препятствует проницаемости сегмента ступени. При быстрой миграции адатомов $q_L \ll 1$, поэтому необходимое условие проницаемости сегмента $f_c(q_L) \ll 1$ выполняется лишь если $\Delta E_{ec} > E_{es}^- - E_e - k_B T \ln(L/2)$, где E_{es}^- меньший из барьеров для отрыва на нижнюю и верхнюю террасы.

Во второй главе исследуется влияние проницаемости края 2D островка на образование многослойных островков и на переход от 2D к 3D росту. Полагалось, что начальная стадия формирования 3D островка связана с быстрым, за время существенно меньшее времени роста монослоя, образованием зародыша нового кристаллического слоя на поверхности 2D островка и с последующим быстрым сближением ступеней двухуровневой пирамиды, образовавшейся в результате появления зародыша (рис. 3). Рассматривались два механизма межслоевого переноса вещества необходимого для протекания данного процесса: отрыв атомов из края (из изломов) 2D островка на его поверхность и переход адатомов с исходной поверхности через край 2D островка. Существенно, что в первом случае происходит частичное растворение нижнего островка пирамиды роста, а во втором случае возможно сближение ступеней пирамиды без растворения нижнего островка. Реализация второго механизма переноса зависит от проницаемости края 2D островка.

Для оценки влияния проницаемости края 2D островка на образование зародыша на его поверхности рассматривался ансамбль одинаковых 2D островков, имеющих форму дисков толщиной в 1 монослой (МС) и растущих за счет атомов, адсорбирующихся в пределах ячеек радиуса ρ_0 (рис. 3а). Концентрации адатомов на исходной поверхности $n_1(r)$ и на поверхности островка $n_2(r)$ удовлетворяют уравнениям непрерывности

$$D_i \nabla^2 n_i + F = 0 \quad (9)$$

($i = 1, 2$) с краевыми условиями, учитывающими проницаемость края островка:

$$\begin{aligned} (dn_1/dr)|_{r=\rho_0} &= (dn_2/dr)|_{r=0} = 0; \\ -D_1(dn_1/dr)|_{r=\rho} &= \beta_{inc}^l[n_1(\rho) - \tilde{n}_l] + \beta_p^l n_1(\rho) - \beta_p^u n_2(\rho); \\ D_2(dn_2/dr)|_{r=\rho} &= \beta_{inc}^u[n_2(\rho) - \tilde{n}_u] + \beta_p^u n_2(\rho) - \beta_p^l n_1(\rho). \end{aligned} \quad (10)$$

Если на краях 2D островков имеется достаточное количество равновесных изломов, то кинетические коэффициенты являются не зависящими от концентрации адатомов

постоянными и уравнения (9)-(10) представляют собой линейную краевую задачу, имеющую точное решение. Из полученных выражений для $n_1(r)$ и $n_2(r)$ следует, что увеличение проницаемости края островка приводит к увеличению концентрации адатомов в ячейке, что должно способствовать появлению зародыша нового островка. Предпочтительное образование зародыша на поверхности 2D островка должно иметь место, если концентрация адатомов в центре островка больше, чем на границе ячейки, т.е. $\Delta n = n_2(0) - n_1(\rho_0) > 0$, где

$$\Delta n \sim 1 + \ln \theta - \theta \left[1 - \frac{D_1}{D_2} \right] + \frac{2\theta}{\rho} \left[1 + \frac{D_1 l_S}{D_2} - \frac{1}{\theta} \right] + \frac{4D_1}{F\rho_0^2} \left[1 + \frac{F\rho_0^2 l_S \beta_p^l}{2D_2 \rho \beta_{inc}^l \tilde{n}_u} \right] (\tilde{n}_u - \tilde{n}_l).$$

Здесь $l_S = \exp(\Delta E_s/k_B T)$ – характерная длина, связанная с барьером Швёбеля ΔE_s и $\theta = Ft$ – степень покрытия поверхности.

Анализ данного выражения с учетом выражений (4) для β_p^l и β_{inc}^l показывает, что проницаемость края островка способствует ускоренному появлению зародыша на его поверхности, если потенциальный рельеф для адатома, пересекающего край островка, характеризуется наличием потенциальной ямы на поверхности 2D островка относительно исходной поверхности и наличием барьера Швёбеля. Указанное требование обусловлено тем, что перешедший на поверхность островка адатом всегда имеет возможность вернуться на край островка и встроиться в излом. Наличие потенциальной ямы создает необходимую движущую силу для перехода адатома на поверхность островка. Но если, как предполагалось, на крае островка всегда присутствует излом, то адатом с примерно одинаковой вероятностью находит другой адатом на поверхности островка и излом. Наличие барьера Швёбеля препятствует присоединению к излому и, таким образом, способствует встрече адатомов (образованию зародыша). В случае эпитаксии по механизму Странского-Крастанова, переход адатомов на поверхность островка может быть обусловлен особенностями потенциального рельефа, связанными с неоднородным распределением упругих напряжений вблизи островка и на его поверхности.

Скорость перемещения i -ой ($i = 1, 2$) ступени двухуровневой пирамиды, образовавшейся в результате появления зародыша на поверхности 2D островка, равна

$$d\rho_i/dt = \beta_{inc,i}^l [n_i(\rho_i) - \tilde{n}_{l,i}] + \beta_{inc,i}^u [n_{i+1}(\rho_i) - \tilde{n}_{u,i}].$$

Входящие в данное выражение концентрации адатомов вблизи ступени $n_i(\rho_i)$ и $n_{i+1}(\rho_i)$ определялись путем решения краевой задачи, подобной краевой задаче (9)-(10). В результате получены следующие уравнения динамики ступеней пирамиды

$$\frac{d\theta_1}{d\theta} = 1 - \frac{d\theta_2}{d\theta}; \quad \frac{d\theta_2}{d\theta} = \frac{\theta_1 - \theta_2 + M + 2l_{S,1}(\eta_{l,1} + \theta_1)/(\rho_0\sqrt{\theta_1}) + 2\sqrt{\theta_2}/\rho_0}{\ln(\theta_1/\theta_2) + 2l_{S,1}(\eta_{l,1} + 1)/(\rho_0\sqrt{\theta_1}) + 2(\eta_{u,2} + 1)/(\rho_0\sqrt{\theta_2})}, \quad (11)$$

где $\theta_i = \rho_i^2/\rho_0^2$ – степень заполнения i -го кристаллического слоя и $M = 4D_2(\tilde{n}_{u,1} - \tilde{n}_{l,2})/(F\rho_0^2)$. В случае непроницаемых ступеней и в отсутствие барьера Швёбеля уравнения (11) сводятся к уравнениям, полученным Стояновым и Марковым [12]. Как показано в [12], при $\tilde{n}_{u,1} - \tilde{n}_{l,2} > 0$ и достаточно высоких T (малых F) происходит частичное растворение нижнего островка ($d\theta_1/d\theta < 0$) и быстрый рост верхнего островка за счет

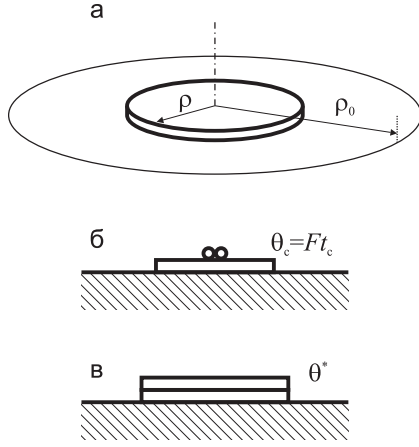


Рис. 3: Схематичные изображения: (а) поверхностная ячейка, содержащая 2D островок; (б) образование зародыша на поверхности 2D островка; (в) сближение ступеней двухуровневой пирамиды.

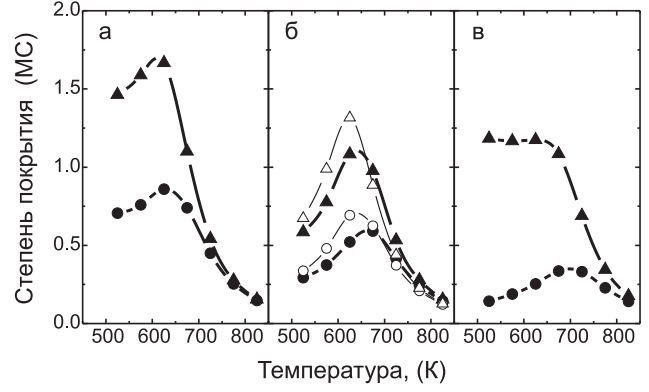


Рис. 4: Зависимости степеней покрытия θ_c (круги) и θ^* (треугольники) от температуры: (а) $E_e = 1$ эВ и $\Delta E_s = 0.1$ эВ; (б) $E_e = 1.4$ эВ и $\Delta E_s = 0.1$ эВ; (в) $E_e = 1.4$ эВ и $\Delta E_s = 0.3$ эВ. Скорость роста $F = 0.1$ МС/с (черные символы) и 0.05 МС/с (белые символы).

присоединения атомов, отрывающихся из изломов нижнего островка. В результате ступени пирамиды сближаются за время гораздо меньшее времени роста монослоя, что можно рассматривать как начало трансформации пирамиды в 3D островок.

В случае проницаемой нижней ступени, когда слагаемые в (11), содержащие параметр проницаемости нижней ступени $\eta_{i,1}$, превосходят остальные слагаемые, имеем $d\theta_2/d\theta \approx 1$ и $d\theta_1/d\theta \ll 1$, т.е. верхняя ступень поглощает почти все вещество, поступающее на поверхность в пределах ячейки. Здесь верхний островок растет за счет присоединения атомов, адсорбирующихся на пирамиду, и за счет адатомов, переходящих через край нижней ступени с исходной поверхности, что приводит к быстрому сближению ступеней пирамиды, но без растворения нижнего островка. Из (11) с учетом выражений (4) для кинетических коэффициентов следует, что данный процесс возможен при наличии потенциальной ямы на террасе пирамиды относительно исходной поверхности $\Delta\epsilon_{ul,1}$ и при наличии барьера Швёбеля. Причем величина барьера Швёбеля не должна превышать $\Delta\epsilon_{ul,1} + \epsilon_1$, где ϵ_1 – энергия формирования излома на нижней ступени.

Численное решение уравнений (11) с начальными условиями $\theta_1(0) = \theta_c = Ft_c$ и $\theta_2(0) = \theta_2(t_c)$, где t_c – время появления зародыша на поверхности островка (рис. 3б), позволяет оценить степень покрытия поверхности θ^* , при которой происходит сближение ступеней пирамиды (рис. 3в). Значение θ^* характеризует возможность 2D-3D перехода во время роста данного кристаллического слоя. Принималось, что переход происходит, если $\theta^* < 1$. В противном случае более вероятно слияние краев 2D островков в соседних ячейках, ведущее к формированию сплошного кристаллического слоя. В случае эпитаксии по механизму Странского-Крастанова, зависимость θ^* от потока осаждаемого вещества и температуры позволяет судить о влиянии этих параметров на критическую

толщину смачивающего слоя, при которой начинается формирование 3D островков.

Для оценки времени появления зародыша t_c применялась стандартная модель перехода к многоуровневому росту [13]. При этом для локальной концентрации адатомов на поверхности 2D островка $n_2(r)$ использовалось решение краевой задачи (9)-(10), учитывающее проницаемость края островка. В случае устойчивого димера на исходной поверхности и на поверхности островка принималось $\theta_2(t_c) = 2/(\pi\rho_0^2)$ (доля поверхности ячейки, занятой димером) и $\rho_0 \sim 1/\sqrt{N}$, где $N \sim (F/D)^{1/3}$ – концентрация 2D островков, образующихся на субмонослойной стадии роста [6]. Для учета особенностей эпитаксии по механизму Странского-Крастанова полагалось, что энергия отрыва адатома от гладкого участка нижней ступени и энергия отрыва атома из излома уменьшаются с увеличением радиуса нижнего островка согласно выражениям, подобным использовавшимся в работе [14]: $E_{el,1}^-(\rho_1) = E_{e0}^- + E_e^- [\ln(\rho_1) + 1]/\rho_1$ и $E_{kl,1}^-(\rho_1) = E_{k0}^- + E_k^- [\ln(\rho_1) + 1]/\rho_1$. При этом считалось, что энергии отрыва от верхнего островка превосходят энергии отрыва от нижнего островка того же размера на величину $\Delta\varepsilon_{ul}$.

На рис. 4 а,б представлены результаты численного интегрирования уравнений (11) при заданных постоянных значениях $E_s = E_{e0}^- = 0.6$ эВ, $E_e^- = 1.8$ эВ, $E_{k0}^- = E_k^- = 1.2$ эВ, $\Delta\varepsilon_{ul} = 0.05$ эВ, $\Delta E_s = 0.1$ эВ. В этом случае при фиксированных T и F проницаемость ступени определяется энергией активации миграции адатома вдоль края островка E_e . Как показано на рис. 4а,б, зависимости $\theta_c(T)$ и $\theta^*(T)$ имеют максимум в области средних температур. В случае медленной миграции адатома вдоль края островка максимальные значения θ_c и θ^* меньше, чем в случае быстрой миграции и, соответственно, меньшей проницаемости ступени. Примечательно, что если максимальное значение θ^* больше единицы, то переход к 3D росту в области средних температур менее вероятен, чем при низких и высоких T . Т.е. зависимость толщины смачивающего слоя от температуры может быть немонотонной, что согласуется с результатами экспериментов [15] по эпитаксии Ge на поверхности Si(100).

Увеличение $\theta_c(T)$ в области низких T связано как с уменьшением влияния барьера Швёбеля, так и с уменьшением проницаемости ступени из-за увеличивающейся концентрации равновесных изломов. Уменьшение $\theta_c(T)$ при высоких T обусловлено увеличением частоты отрыва атомов от 2D островка на его поверхность. Эти же факторы обуславливают и смену основных механизмов трансформации пирамиды роста, что отражается в качественном подобии зависимостей $\theta_c(T)$ и $\theta^*(T)$, представленных на рис. 4а,б. Однако, как показано на рис. 4в, в общем случае появление зародыша на поверхности 2D островка не гарантирует перехода к 3D росту при низких T . Здесь, ввиду более высокого значения барьера Швёбеля ($\Delta E_s = 0.3$ эВ) зародыш образуется на ранней стадии роста во всем температурном интервале. Но такой большой барьер Швёбеля препятствует переходу адатомов с исходной поверхности на террасу пирамиды. Следует также отметить, что данная модель не учитывает формирования неравновесных изломов (1D островков). Интенсивное образование таких изломов при достаточно низких T (больших F) должно приводить к уменьшению проницаемости ступени и, следовательно, к формированию сплошного кристаллического слоя.

Экспериментальные исследования [4,16] показали, что многослойные островки Si и Ge на поверхности Si(111)-7x7 образуются при относительно высоких температурах и малых потоках осаждаемого вещества. При этом рост верхних бислоев (БС) происходит

без растворения нижних бислоев и 2D островки имеют четко выраженную *кинетическую* форму роста в виде равносторонних треугольников. Указанное влияние температуры и потока осаждаемого вещества на формирование островков может быть связано с особенностями переноса вещества через края 2D островков, растущих по механизму “ряд-за-рядом”. Данный процесс рассматривался при следующих упрощающих предположениях. Считалось, что формирование многослойного островка определяется скоростью разрастания зародышей верхних слоев. Использовалась модель роста двухуровневых пирамид, состоящих из 2D островков толщиной 1 БС. Полагалось, что верхний островок пирамиды поглощает все вещество, поступающее на поверхность пирамиды за счет адсорбции и перехода адатомов через нижнюю ступень и что отрыв атомов из изломов несуществен. В этом случае

$$\frac{d\theta_1}{d\theta} = \frac{1 - \theta_1}{1 + \eta_l(\theta)}; \quad \frac{d\theta_2}{d\theta} = \frac{\theta_1 + \eta_l(\theta)}{1 + \eta_l(\theta)}. \quad (12)$$

Для параметра проницаемости нижней ступени η_l использовалось выражение (8) при $k_{eu}^- \gg k_{el}^-$. В случае быстрой миграции адатомов вдоль края и вокруг углов островка $t_{gr} = 1/(3k_{le}^+ n_1)$, где концентрация адатомов вблизи ступени n_1 удовлетворяет уравнению баланса потоков атомов, адсорбирующихся на исходную поверхность и присоединяющихся к островкам, $F(1 - \theta_1) = 3Lk_{le}^+ N n_1$ ($3L$ – периметр островка). Время ожидания появления зародыша 1D островка $t_{nuc} = \Delta t/p_{nuc}$, где $\Delta t = 1/(3Lk_{le}^+ n_1)$ – средний интервал времени между актами присоединения адатомов к краю пирамиды и p_{nuc} – вероятность образования устойчивого зародыша в расчете на один акт присоединения. При вычислении p_{nuc} полагалось, что зародыш образуется, если в момент присоединения адатома на крае островка уже присутствует i адатомов, где i – размер критического зародыша 1D островка [17]. Наилучшее согласие с экспериментом было достигнуто при $i = 2$. При этом $\eta_l \sim (k_{dis}/D_e)[k_{eu}^- N/(1 - \theta_1)F]^2$, где k_{dis} – константа скорости диссоциации димера на крае островка.

Численное интегрирование уравнений (12) проводилось при $N = C(F/\nu)^\chi e^{E/k_B T}$, где $C = 0.25$, $\nu = 5 \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$, $\chi = 0.8$ и $E = 1.44 \text{ эВ}$, (что соответствует экспериментальным результатам [16]) и при значениях энергий активации, типичных для системы Ge/Si(111) и удовлетворяющих приближениям модели: $E_e = 0.8 \text{ эВ}$, $E_{dis} = 1.3 \text{ эВ}$ и $E_{eu}^- = 1.6 \text{ эВ}$. Принималось, что зародыш на поверхности 2D островка появляется при $\theta_1 = 0.1 \text{ БС}$. Результаты интегрирования демонстрируют сближение ступеней пирамиды без растворения нижнего 2D островка при степени покрытия $\theta = \theta^*$, причем θ^* уменьшается с уменьшением F и увеличением T (Рис. 5а). Таким образом, в соответствии с экспериментом [4,16], формирование многослойных островков должно происходить при относительно малых F и высоких T .

Полученные результаты объясняются поведением параметра проницаемости η_l при изменении F и T (рис. 5б). Увеличение η_l с уменьшением F обусловлено уменьшением концентрации адатомов n_1 . Вследствие этого увеличивается интервал времени между актами присоединения адатомов к краю островка, что приводит к увеличению времени ожидания появления 1D островка и, следовательно, к росту проницаемости края островка. Увеличение η_l с ростом температуры обусловлено увеличением частот диссоциации димера и отрыва адатома от края островка.

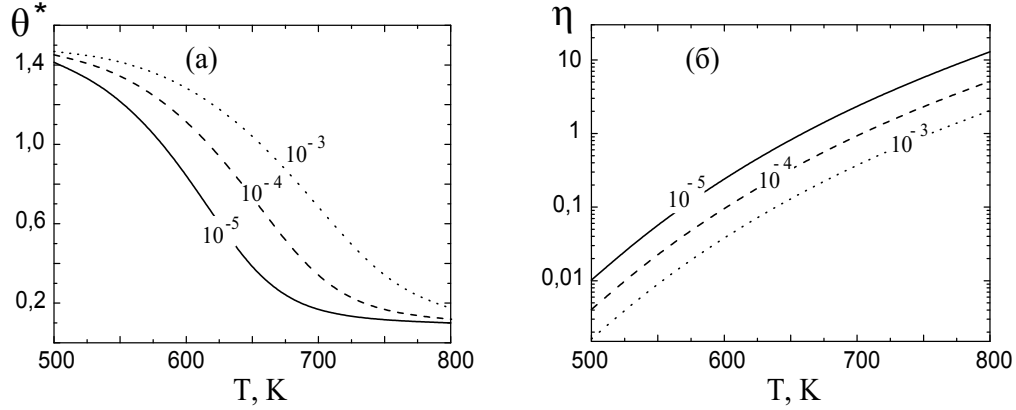


Рис. 5: Зависимости характерной степени покрытия поверхности (а) и параметра про-
ницаемости ступени (б) от температуры при значениях потока осаждаемого вещества
 $F = 10^{-5}$, 10^{-4} и 10^{-3} (БС/с).

В третьей главе аналитически и с помощью компьютерного моделирования исследу-
ется кинетика образования 2D островков на начальной (субмонослойной) стадии роста
на реконструированной поверхности. Аналитические модели представляют собой обо-
бщения стандартной модели [6], учитывающие характерные особенности образования и
роста 2D островков на реконструированной поверхности: формирование метастабиль-
ных неэпитаксиальных кластеров и наличие магических размеров 2D островков. При
компьютерном моделировании использовалась кинетическая Монте-Карло модель эпи-
таксиального роста, позволяющая имитировать двухстадийный процесс формирования
зародыша 2D островка и механизм роста 2D островков “ряд за рядом”.

Минимальная модель многостадийного процесса образования эпитаксиальных 2D
островков предполагает, что кластер, образовавшийся при встрече двух адатомов (ди-
мер), неподвижен и не распадается на адатомы за время роста монослоя. При этом ато-
мы димера находятся в метастабильных положениях, отличных от положений атомов
нового кристаллического слоя (эпитаксиальных положений). Дальнейший устойчивый
рост данного кластера требует локального снятия реконструкции в поверхностном слое
под кластером и перехода атомов кластера в эпитаксиальные положения. Рассматрива-
ются два возможных атомных механизма протекания данного процесса. Согласно пер-
вому механизму (модель А), локальное снятие реконструкции (трансформация димера)
не требует присоединения дополнительных атомов и представляет собой термически ак-
тивируемый необратимый процесс, связанный с преодолением потенциального барьера
 E_{nuc} . Второй механизм (модель Б) предполагает, что трансформация “неэпитаксиаль-
ного” димера в минимальный эпитаксиальный островок инициируется присоединением
дополнительного атома. При этом также требуется преодоление активационного барье-
ра E_{nuc} , превышающего энергию активации поверхностной диффузии E_s на величину
 ΔE_{nuc} . Принципиальное отличие данных механизмов заключается в том, что частота

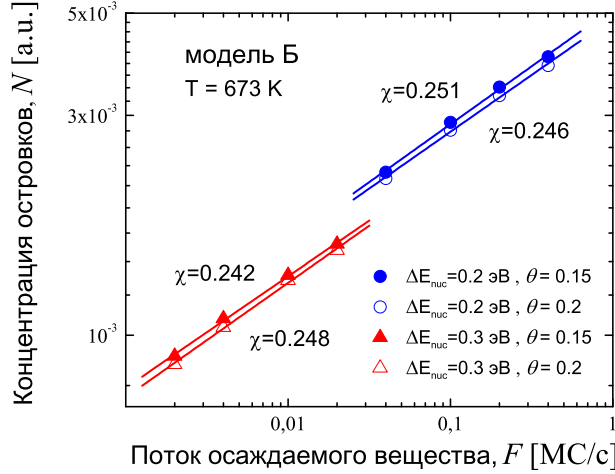


Рис. 6: Зависимости концентрации эпитаксиальных 2D островков, образующихся в нестандартном стационарном режиме, от потока осаждаемого вещества при различных значениях степени покрытия и барьера трансформации.

трансформации “неэпитаксиальных” кластеров в эпитаксиальные островки в модели А не зависит от протекания других процессов на поверхности, тогда как в модели Б частота трансформации уменьшается с уменьшением концентрации адатомов.

Концентрации адатомов n_1 , “неэпитаксиальных” димеров N_2^* и эпитаксиальных островков N удовлетворяют кинетическим уравнениям

$$\frac{dn_1}{dt} = F - 2\sigma_1 D n_1^2 - G_{inc}, \quad \frac{dN_2^*}{dt} = \sigma_1 D n_1^2 - G_{tr}, \quad \frac{dN}{dt} = G_{tr}, \quad (13)$$

где G_{inc} – поток адатомов, необратимо присоединяющихся к кластерам размера $s \geq 2$ и G_{tr} – скорость трансформации димера. В модели А: $G_{inc} = \sigma_{av} D n_1 N$, где $N = \sum_{s=2} N_s$; $G_{tr} = K_{tr} N_2^*$, где $K_{tr} = \nu \exp(-E_{nuc}/k_B T)$ – частота трансформации димера в минимальный эпитаксиальный островок. В модели Б: $G_{inc} = G_{tr} + \sigma_{av} D n_1 N$, где $N = \sum_{s=3} N_s$; $G_{tr} = \sigma_2 K_{tr} n_1 N_2^*$. Здесь σ_1 и σ_{av} – коэффициенты захвата (capture numbers [6]), которые полагаются постоянными порядка единицы.

Анализ уравнений (13) и компьютерное моделирование показали, что независимо от механизма трансформации неэпитаксиального кластера, при малых F (высоких T) реализуется стандартный квазистационарный режим образования 2D островков, при котором выполняется классическое скейлинговое соотношение $N \sim (F/D)^{1/3}$. В случае трансформации по механизму А для этого должно выполняться неравенство $P_{tr} \gg (F/D)^{1/2}$, где $P_{tr} = K_{tr}/D = \exp(-\Delta E_{nuc}/k_B T)$ – вероятность трансформации кластера за время диффузионного скачка. В модели Б требуется выполнение более жесткого условия $P_{tr} \gg (F/D)^{1/3}$. При больших F (низких T) образование 2D островков происходит в режиме накопления адсорбирующихся атомов в неэпитаксиальных кластерах. Здесь концентрация островков уменьшается с увеличением F и увеличивается с увеличением T : $N \sim (D/F)P_{tr}$ (модель А) и $N \sim (D/F)^{1/2}P_{tr}$ (модель Б). Данные соотношения реализуются при $P_{tr} \leq (F/D)^{3/2}$ и $P_{tr} \leq F/D$, соответственно. В целом, зависимости концентрации островков от потока осаждаемого вещества и температуры роста немонотонные (имеют максимум и минимум, соответственно).

Интересно, что в случае превращения по механизму Б при $(F/D)^{1/3} \geq P_{tr} \gg (F/D)^{1/2}$

модель предсказывает существование нестандартного стационарного режима образования островков, в котором адатомы, в основном, встраиваются в островки, но образование островков тормозится трансформацией неэпитаксиальных кластеров. При этом имеет место нестандартное скейлинговое соотношение $N \sim (F/D)^{1/4} P_{tr}^{1/4}$, указывающее на необычно слабую зависимость концентрации островков от потока осаждаемого вещества, близкую к полученной в экспериментах по эпитаксии кремния на поверхности Si(111)-7x7 при относительно низкой температуре роста. Предсказания аналитической модели находятся в хорошем соответствии с результатами Монте-Карло моделирования (рис. 6).

Обобщение модели для описания образования 2D островков кремния на поверхности Si(111)-7x7 основывалось на следующих экспериментальных данных (работы [19]-[21] в списке публикаций по теме диссертации): (а) при субмонослойном покрытии на поверхности наблюдаются три типа объектов: одиночные неэпитаксиальные кластеры, содержащие восемь атомов кремния; пары кластеров, находящихся в соседних полуячейках реконструкции 7x7; эпитаксиальные 2D островки. Концентрация пар кластеров намного превышает концентрацию, получающуюся при случайном размещении кластеров по полуячейкам, что указывает на предпочтительное образование кластера в полуячейке, соседней с уже образовавшимся кластером; (б) минимальный 2D островок занимает площадь, равную одной ячейке 7x7; (в) неэпитаксиальные кластеры неподвижны и стабильны как относительно распада, так и относительно присоединения дополнительных атомов. Модель предполагает, что образование минимального эпитаксиального островка Si происходит в результате трехстадийного процесса, включающего: (1) образование стабильного кластера в свободной полуячейке за счет попадания в нее мигрирующих по поверхности адатомов Si; (2) образование стабильного кластера в соседней полуячейке и, таким образом, формирование пары кластеров, занимающей ячейку реконструкции 7x7; (3) локальное снятие реконструкции в ячейке, занятой парой кластеров, в результате чего данная пара трансформируется в 2D островок. Процесс описывается цепочкой кинетических уравнений для концентраций адатомов n_1 , одиночных кластеров n_c , пар кластеров n_p и 2D островков N :

$$\frac{dn_1}{dt} = F - G^* - G_{inc}; \quad \frac{dn_c}{dt} = J_c - J_p; \quad \frac{dn_p}{dt} = J_p - J_{2D}; \quad \frac{dN}{dt} = J_{2D}, \quad (14)$$

где G^* – число адатомов, расходуемых в единицу времени на формирование кластеров; $G_{inc} = \sigma_{av} D n_1 N$ – поток адатомов в 2D островки; $J_c = \sigma_i D e^{E_i/k_B T} n_1^{i+1}$, $J_p = \sigma_j D e^{E_j/k_B T} n_1^{j+1} n_c$ и $J_{2D} = \sigma_k D e^{E_k/k_B T} n_1^{k+1} n_p$ – скорости формирования одиночных кластеров, пар кластеров и 2D островков, соответственно. Здесь i и j – размер критического зародыша одиночного кластера и кластера, образующегося по соседству с одиночным кластером, соответственно; E_i и E_j – соответствующие энергии диссоциации критических зародышей; $k + 1$ – число атомов, которые должны присоединиться к паре кластеров, чтобы инициировать превращение ее в эпитаксиальный островок; E_k – сумма энергии диссоциации критического зародыша и взятого с обратным знаком дополнительного барьера для трансформации пары кластеров ΔE_{nuc} .

Экспериментальные зависимости концентраций одиночных кластеров, пар кластеров и 2D островков от потока атомов Si и температуры можно представить в виде:

$n_c \sim F^\beta e^{E_c/k_B T}$; $n_p \sim F^\gamma e^{E_p/k_B T}$; $N_{2D} \sim F^\chi e^{E_{2D}/k_B T}$. Такого типа соотношения формально следуют из уравнений (14), если $dn_1/dt \approx F - G_{inc} \approx 0$ (квазистационарная стадия образования островков) и если реализуется один из следующих четырех режимов образования островков: (I) $J_c \approx J_p \approx J_{2D}$; (II) $J_c \approx J_p$ и $J_p \gg J_{2D}$; (III) $J_c \gg J_p$ и $J_p \approx J_{2D}$; (IV) $J_c \gg J_p \gg J_{2D}$. Сравнение с экспериментальными данными показало, что в случае относительно низких температур ($613K < T < 680K$) соответствие теории эксперименту достигается лишь при образовании островков в режиме II. Здесь при $i = j = 1$ и $k = 0$ имеем $\beta = 0$, $\gamma = 0.5$ и $\chi = 0.25$, что близко экспериментальным значениям $\beta = -0.1 \pm 0.1$, $\gamma = 0.44 \pm 0.1$ и $\chi = 0.24 \pm 0.03$. Поскольку $i = j = 1$, то димер Si является стабильным зародышем одиночного кластера и кластера в соседней полуячейке. При этом $k = 0$ означает, что присоединение лишь одного дополнительного атома требуется для того, чтобы инициировать превращение пары кластеров в 2D островок. Сравнение экспериментальных и теоретических зависимостей позволило также оценить значения глубины потенциальной ямы для адатома, создаваемой кластером в соседней ячейке (0.49 эВ), барьера для трансформации пары кластеров (1.26 эВ) и энергии активации поверхностной диффузии (1.11 эВ).

Следует отметить, что возможность реализации квазистационарного режима II следует из рассмотренной выше минимальной модели образования 2D островков на реконструированной поверхности. Действительно, в данном режиме образование одиночных кластеров и их превращение в пары кластеров не являются процессами, лимитирующими скорость образования 2D островков. Следовательно, образование 2D островков можно рассматривать независимо от наличия одиночных кластеров. В этом случае при $i = j = 1$ и $k = 0$ уравнения (14) фактически сводятся к уравнениям (13) модели Б, где нетрансформированный димер играет роль пары кластеров.

Слабая зависимость концентрации островков от потока осаждаемого вещества может быть также связана с особенностями встраивания адатомов в края магических островков. Присутствие в распределении островков по размерам четко выраженных пиков при магических размерах имеет место, если скорость формирования кристаллического ряда вдоль края магического островка ограничена скоростью образования зародыша ряда (1D островка). Замедленное образование зародыша ряда может быть обусловлено слабой связью адатома с островком (большой частотой отрыва адатома) из-за сравнительно малой плотности оборванных связей на торце реконструированной ступени, ограничивающей островок. В этом случае стандартное выражение $G_{inc} = \sigma_{av} D n_1 N$ для потока адатомов в 2D островки, предполагающее безотрывное присоединение адатома к островку, непригодно для описания образования и роста островков.

Выражение для G_{inc} , учитывающее упомянутые особенности роста 2D островков, было получено в рамках следующей модели. Рассматривался ансамбль 2D островков, растущих по механизму “ряд за рядом”, при котором завершение рядов соответствует последовательности магических размеров островков m_k ($k = 1, 2, 3, \dots$). Полагалось, что образование устойчивого зародыша нового атомного ряда происходит при встрече двух адатомов на крае магического 2D островка. Пренебрегалось возможностью отрыва атома из излома, угла островка и полностью застроенного ряда вдоль края островка. При вычислении времени ожидания появления 1D островка использовался подход, подобный использовавшемуся в [17] для вычисления частоты образования зародыша нового

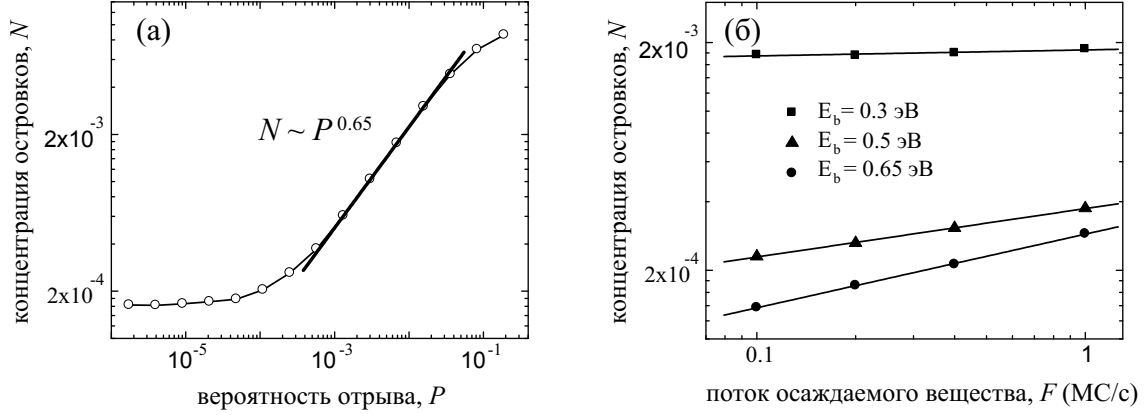


Рис. 7: Зависимости концентрации островков от вероятности отрыва адатома от края магического островка (а) и от потока осаждаемого вещества (б).

слоя на поверхности 2D островка. При этом учитывалось, что адатом, оторвавшийся от края островка, имеет шансы вернуться на край данного островка до встречи с другим адатомом или до присоединения к краю какого-либо иного островка. Поэтому, вместо элементарной частоты отрыва адатома от края магического островка размера m_k рассматривалась частота $\gamma_{m_k+1} \sim \sigma_{m_k} \omega_{m_k+1}^- / (m_{k+1} - m_k)$, с которой адатом безвозвратно уходит от островка данного размера в результате отрыва [18]. Здесь элементарная частота отрыва $\omega_{m_k+1}^- \sim D e^{-E_b/k_B T}$, где E_b – энергия связи адатома с атомно-гладким краем островка. Под частотой присоединения адатома понималась частота, с которой адатом, совершающий случайные блуждания по поверхности, находит островок данного размера: $\omega_{m_k}^+ = \sigma_{m_k} D n_1$.

При большой частоте отрыва адатома от края магического островка из модели следует: $G_{inc} = \zeta \sigma_{av} D P^{-1} n_1^2 \theta$, где $P = e^{-E_b/k_B T}$ – вероятность отрыва адатома и ζ – постоянная порядка единицы. С учетом данного выражения, стационарные кинетические уравнения принимают вид

$$dn_1/dt \approx F - \zeta \sigma_{av} D P^{-1} n_1^2 \theta \approx 0, \quad dN/dt = \sigma_1 D n_1^2. \quad (15)$$

При постоянных коэффициентах захвата из (15) следует

$$n_1 \sim (F/D)^{\frac{1}{2}} P^{\frac{1}{2}}, \quad N \sim P. \quad (16)$$

Согласно (16) концентрация островков не зависит от потока осаждаемого вещества и увеличивается с увеличением температуры роста. Такое необычное, с позиций классической теории [6], поведение концентрации островков обусловлено тем, что при больших γ_{m_k+1} встраивание адатомов в островок, как и образование зародыша островка, является процессом второго порядка по концентрации адатомов.

Для проверки предсказаний аналитической модели было проведено компьютерное моделирование методом Монте-Карло. В компьютерной модели атомы случайным образом осаждались на поверхность и совершали случайные блуждания путем прыжков в

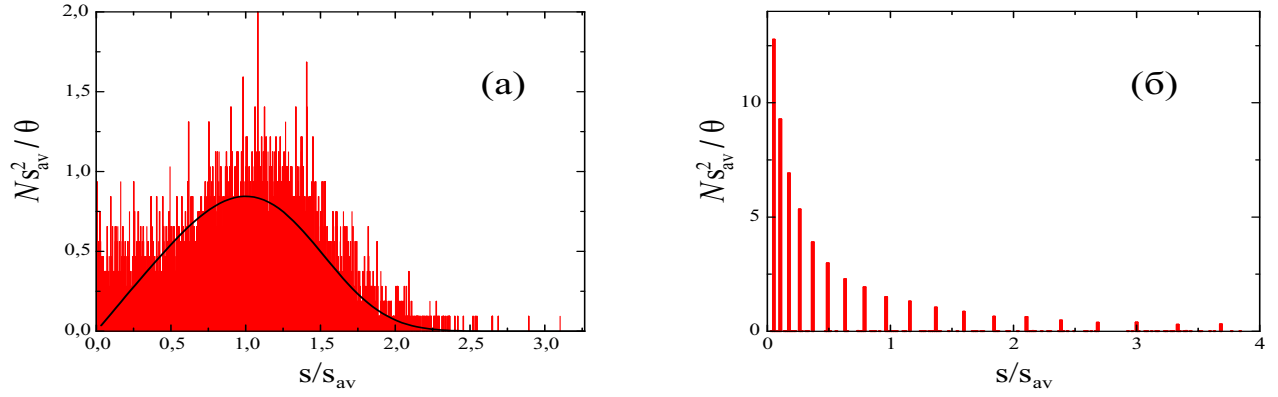


Рис. 8: Распределение островков по размерам при $T = 700$ К, $F = 0.2$ МС/с и энергии связи E_b равной 0.8 эВ (а) и 0.3 эВ (б).

соседние адсорбционные центры. Для адатома, присоединившегося к атомно-гладкому участку края островка, допускались возможность миграции вдоль края островка и возможность отрыва от него. В соответствии с аналитической моделью, адатом становился неподвижным при попадании в излом или при встрече с другим адатомом. Моделирование проводилось при $E_e = E_s = 0.6$ эВ и $\nu = 10^{13} \text{ с}^{-1}$ на треугольной решетке размером 4000×2000 атомных мест до достижения степени покрытия $\theta = 0.1$ МС.

Рис. 7а демонстрирует нелинейную в целом зависимость $N(P)$. Слабая зависимость при малых P связана с фактически необратимым присоединением адатомов к островкам. При больших P поступающие на поверхность атомы образуют островки минимального магического размера $m_1 = 3$, без дальнейшего роста островков. Наклон линейного (в двойных логарифмических координатах) участка зависимости на рис. 7а равен 0.65 ± 0.01 , что существенно меньше значения 1, предсказываемого соотношениями (16). Это связано с относительно малым значением отношения D/F ($\approx 2.4 \times 10^9$) при выбранных параметрах моделирования. Моделирование, проведенное при $D/F = 2.4 \times 10^{10}$, показало увеличение наклона до 0.7 ± 0.01 . Как показано на рис. 7б, зависимость $N(F)$ может быть аппроксимирована степенной зависимостью. Показатель степени меняется от почти стандартного значения 0.32, при большой энергии связи адатома с островком ($E_b = 0.65$ эВ), до очень малого значения ≈ 0.03 , при малой энергии связи ($E_b = 0.3$ эВ), что превосходно согласуется с предсказаниями аналитической модели. Результаты компьютерного моделирования демонстрируют переход, с уменьшением E_b , от стандартной (убывающей) зависимости $N(T)$ к возрастающей зависимости, что также находится в хорошем согласии с выводами аналитической модели. Кроме того, уменьшение энергии связи E_b имеет следствием переход от распределения островков по размерам, близкого к стандартному распределению, с пиком вблизи среднего размера островка, к последовательности пиков при магических размерах, высота которых монотонно уменьшается с увеличением магического размера (рис. 8а,б).

В четвертой главе исследуется кинетика захвата примеси и формирования переходных концентрационных областей (ПКО) при легировании в условиях МЛЭ. Полагается, что встраивание атомов примеси в кристалл, так же как и встраивание атомов основно-

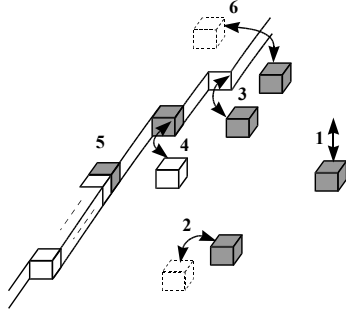


Рис. 9: Элементарные процессы, рассматриваемые в модели: (1) адсорбция и десорбция примеси; (2) поверхностная диффузия примеси; (3) присоединение и отрыв примеси в изломе; (4) блокирование примеси атомами основного вещества; (5) заблокированный атом примеси; (6) перескок атома примеси через ступень.

го вещества, происходит в изломах на ступенях, а накопление примеси на поверхности кристалла во время роста (поверхностная сегрегация примеси) имеет место вследствие перескоков атомов примеси через движущиеся ступени. Учитываются кооперативные эффекты при встраивании атомов примеси и основного вещества в изломы [9], эффект оттеснения примеси движущейся ступенью и особенности поверхностной сегрегации примеси при росте по механизму образования 2D островков.

Анализ кинетики встраивания атомов примеси в изломы на ступенях проводился в рамках следующей простой модели легирования при соосаждении примеси и основного вещества. Полагалось, что рост кристалла происходит за счет движения прямолинейных винциальных ступеней с расстоянием между ступенями равным l ; изломы равномерно распределены вдоль края ступени и имеют единичную глубину; корреляции между положениями соседних изломов [9] отсутствуют. Считалось, что барьеры для присоединения примеси к ступени с нижней и верхней террас одинаковы; примесь однородно распределена по поверхности кристалла; атом примеси присоединяется к излому напрямую, минуя положение адсорбции на гладком участке края ступени; концентрация примеси на террасах, на ступенях (в изломах) и в объеме кристалла мала. Захват примеси ступенью происходит в результате блокирования (“замуровывания” [9]) атомов примеси в изломах атомами основного вещества. Данный механизм захвата примеси предполагает, что атом примеси может оторваться от излома лишь когда он является последней частицей в незавершенном атомном ряду (рис. 9).

Относительные концентрации примеси в адслое c_1 , в изломе c_2 и в изломе, блокированной $i - 2$ атомами основного вещества, c_i ($i = 3, 4, 5, \dots$) удовлетворяют бесконечной цепочке кинетических уравнений (обозначения A и B относятся к основному веществу и к примеси, соответственно):

$$\begin{aligned}
 dc_1(t)/dt &= J - (k_{des} + 2\Theta_k k_{AB}^+)c_1(t) + \Theta_k \omega_{AB}^- c_2(t); \\
 dc_2(t)/dt &= 2k_{AB}^+ c_1(t) - (\omega_{AB}^- + \omega_{BA}^+)c_2(t) + \omega_{BA}^- c_3(t); \\
 dc_3(t)/dt &= \omega_{BA}^+ c_2(t) - (\omega_{BA}^- + \omega_{AA}^+)c_3(t) + \omega_{AA}^- c_4(t); \\
 dc_4(t)/dt &= \omega_{AA}^+ c_3(t) - (\omega_{AA}^- + \omega_{AA}^+)c_4(t) + \omega_{AA}^- c_5(t); \\
 &\dots
 \end{aligned} \tag{17}$$

где J - поток адсорбирующихся атомов примеси, k_{des} - константа скорости десорбции, $\Theta_k = \theta_k/l$ - концентрация изломов на поверхности, k_{AB}^+ - константа скорости присоединения атома примеси к излому, ω_{AB}^- - частота отрыва атома примеси из излома, $\omega_{\alpha A}^+$ и $\omega_{\alpha A}^-$ ($\alpha = A, B$) - частоты присоединения (+) к излому атомов основного вещества и

отрыва (—) от него. Частоты отрыва равны удвоенным константам скоростей реакций ($2k_{AB}^-$ и $2k_{\alpha A}^-$), а частоты присоединения равны $\omega_{\alpha A}^+ = 2k_{\alpha A}^+ n_A$, где n_A - концентрация адатомов основного вещества вблизи излома.

Атомом примеси, необратимо встроившимся в кристалл, считался атом, блокированный в изломе $1/\sigma$ атомами основного вещества, где $\sigma = (\omega_{AA}^+ - \omega_{AA}^-)/\omega_{AA}^-$ - относительное пересыщение вблизи излома [9]. Характерное время τ установления стационарного значения концентрации встроившейся примеси c_d определялось как $\tau = \int_0^\infty [1 - c_d(t)/c_d] dt$. При типичных значениях ширины ПКО (сотни монослоев) концентрацию захваченной ступенью примеси $c_d(t)$ можно считать непрерывной функцией толщины легируемой пленки $z = Ft$. Зависимость $c_d(z)$ при этом соответствует концентрационному профилю легирования, а величина $\Delta = F\tau$ - ширине ПКО.

Уравнения (17) позволяют найти точное выражение для ширины ПКО. При характерных для МЛЭ значениях параметров модели и в соответствии с использованными предположениями, из данного выражения следует приближенное выражение

$$\Delta = F/(k_{des} + K_d F), \quad (18)$$

формально совпадающее с классическим феноменологическим выражением. Кроме того, из (17) и (18) следует, что переходы между состояниями примеси, начиная с $i = 2$, можно рассматривать в квазистационарном приближении, полагая $dc_2/dt = dc_3/dt = \dots = 0$. В этом случае $c_d(t) = K_d c_1(t)$, т.е. время достижения стационарного режима легирования и, следовательно, ширина ПКО фактически определяются временем достижения стационарной концентрации атомов примеси в адслое.

Фигурирующий в (18) коэффициент захвата примеси изломом K_d равен

$$K_d = \frac{(1 + \sigma)e^{-E_{eq}/k_B T}}{1 + \sigma e^{E_1/k_B T} + \sigma(1 + \sigma)e^{(E_2 - E_{eq})/k_B T}}, \quad (19)$$

где $E_{eq} = E_{AA}^- - E_{AA}^+ + E_{AB}^+ - E_{AB}^- + E_{BA}^+ - E_{BA}^-$, $E_1 = E_{BA}^- - E_{AA}^-$ и $E_2 = E_{AB}^+ - E_{AA}^-$ ($E_{\alpha\beta}^\pm$ - энергии активации элементарных актов присоединения и отрыва). На рис. 10а представлены возможные зависимости $K_d(\sigma)$: немонотонная, с максимумом при $\sigma = \sigma^*$, (кривая 1) и монотонно убывающая (кривая 2). Первый тип зависимости характерен для примеси, плохо блокируемой в изломе ($E_1 < 0$), а второй — для хорошо блокируемой примеси ($E_1 > 0$). В типичных условиях МЛЭ пересыщение σ увеличивается с увеличением потока основного вещества F и уменьшается с увеличением температуры роста. Поэтому, возможные зависимости $K_d(F)$ подобны зависимостям $K_d(\sigma)$, а зависимости $K_d(T)$ подобны кривым на рис. 10б.

При слабых отклонениях от равновесия ($\sigma \ll 1$) из (18) с учетом (19) следует $\Delta = F/(k_{des} + \tilde{K}_d F)$, где $\tilde{K}_d = e^{-E_{eq}/k_B T}$ - равновесный коэффициент захвата примеси изломом. При низких T , когда десорбция примеси незначительна, $\Delta = 1/K_d(F, T)$. Для плохо блокируемой примеси при $\sigma^* > \sigma \gg 1$: $K_d \sim \sigma e^{-E_{eq}/k_B T}$. В этом случае ширина ПКО уменьшается с уменьшением T и увеличением F , что согласуется с результатами экспериментов по низкотемпературному легированию полупроводников рядом примесей. Такое поведение $\Delta(F, T)$ связано с тем, что увеличивающееся с уменьшением T и увеличением F пересыщение вблизи ступени способствует более эффективному блокированию примеси в изломах и уменьшению, таким образом, поверхностной сегрегации.

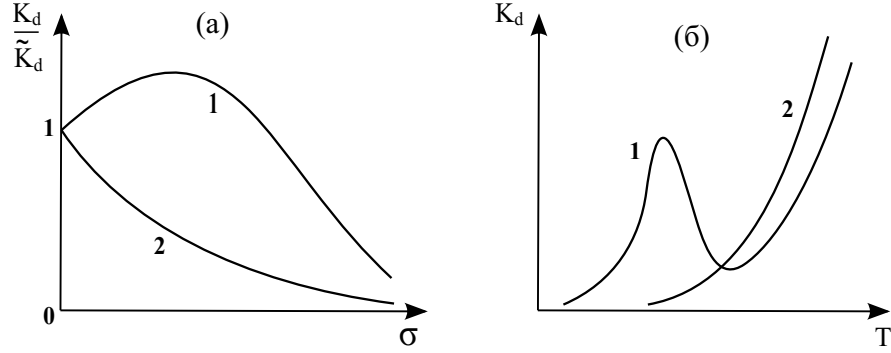


Рис. 10: Зависимости коэффициента захвата примеси изломом от пересыщения (а) и температуры (б): 1 — примесь, плохо блокируемая в изломе; 2 — примесь, хорошо блокируемая в изломе.

Рассмотренная выше модель предполагает, что адатомы примеси могут без затруднений мигрировать по поверхности и пересекать движущиеся ступени. Учет в явном виде поверхностной диффузии примеси проводился в рамках следующей модели. Полагалось, что рост кристалла происходит путем перемещения эквидистантных прямолинейных ступеней, движущихся с постоянной скоростью V , а захват примесных атомов происходит, в основном, в изломах ступеней. Уравнение непрерывности для концентрации адатомов примеси имеет вид:

$$\frac{\partial c_1(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c_1(x, t)}{\partial x^2} + V \frac{\partial c_1(x, t)}{\partial x} - k_{des} c_1(x, t) + J, \quad (20)$$

где x - расстояние от ступени и D - коэффициент поверхностной диффузии примеси. В качестве начального условия принималось $c_1(x, 0) = 0$. Краевые условия формулировались как уравнения баланса потоков примеси на ступени с учетом дрейфового потока $V c_1(x, t)$:

$$\begin{aligned} [D \partial c_1(x, t) / \partial x + V c_1(x, t)]_{x=0} &= \beta_{inc} c_1(0, t) + \beta_p [c_1(0, t) - c_1(l, t)]; \\ -[D \partial c_1(x, t) / \partial x + V c_1(x, t)]_{x=l} &= \beta_{inc} c_1(l, t) + \beta_p [c_1(l, t) - c_1(0, t)], \end{aligned} \quad (21)$$

где коэффициент встраивания примеси в ступень и коэффициент проницаемости ступени для примеси равны $\beta_{inc} = K_{st} V / 2$ и $\beta_p = [1 - K_{st} V / (2k_{AB}^+)] k_{AB}^+ / 2$, соответственно. Здесь $K_{st} = (\omega_{es}^- + v_k) K_d / (\omega_{es}^- + V)$ — коэффициент захвата примеси ступенью ($v_k = \omega_{AA}^+ - \omega_{AA}^-$ — скорость перемещения излома, ω_{es}^- — частота отрыва адатома примеси от гладкого участка края ступени). При выводе данных выражений пренебрегалось миграцией адатома примеси вдоль края ступени, но учитывалась возможность захвата адатома примеси на крае ступени движущимся изломом.

Следует отметить, что кинетические коэффициенты удовлетворяют соотношению $\beta_{inc} + 2\beta_p = k_{AB}^+$ подобному соотношению (5). Однако выражения для потоков и кинетических коэффициентов отличны от соответствующих выражений в случае основного вещества. Это связано с тем, что присоединение атома примеси к излому еще не означает встраивания примеси в кристалл. Проницаемость ступени для примеси определяется

возможностью перехода атома примеси с одной террасы на другую с учетом возможности отрыва от излома. Максимальное значение коэффициента проницаемости ступени ($k_{AB}^+/2$) достигается при $K_{st}V \ll k_{AB}^+$, т.е. в отсутствие встраивания, а не в отсутствие миграции вдоль края ступени.

В квазистационарном приближении $c_d(t) = K_{st}[c_1(0, t) + c_1(l, t)]/2$, поэтому

$$\Delta = F \int_0^\infty [1 - c_d(t)/c_d] dt = F[L_y(0, 0) + L_y(l, 0)]/[c_1(0) + c_1(l)],$$

где $L_y(x, s) = \int_0^\infty e^{-st} y(x, t) dt$ преобразование Лапласа функции $y(x, t) = c_1(x) - c_1(x, t)$. С использованием преобразования Лапласа в (20)–(21) получено точное, в рамках модели, выражение для ширины ПКО. При быстрой поверхностной диффузии примеси данное выражение совпадает с (18) с заменой K_d на K_{st} . В отсутствие десорбции примеси

$$\Delta = \frac{(V + k_{AB}^+ \kappa)[\kappa \sinh \kappa + K_{st}(\kappa \cosh \kappa - \sinh \kappa)/2]}{K_{st} \kappa^2 (V \cosh \kappa + k_{AB}^+ \sinh \kappa)}, \quad (22)$$

где $\kappa = Vl/2D$. При достаточно низких температурах $\kappa \gg 1$ и $k_{AB}^+ \ll V$. Тогда, в случае $k_{AB}^+ \sim D$ из (22) следует $\Delta \sim D/(K_{st}Fl)$. Если из-за наличия дополнительного барьера для присоединения адатома примеси к ступени $D \geq k_{AB}^+ l$, то $\Delta \approx 2D/(K_{st}Fl^2)$. Согласно данным выражениям, даже в случае равновесного захвата примеси ступенью, когда коэффициент захвата K_{st} зависит только от температуры, возможно характерное для низкотемпературного легирования уменьшение Δ с увеличением скорости роста и с уменьшением температуры. Это обусловлено усилением накопления примеси перед движущейся ступенью, в результате которого мигрирующие по поверхности адатомы примеси большее время проводят вблизи ступени и, следовательно, имеют больше шансов быть захваченными кристаллом (эффект оттеснения примеси ступенью).

Захват и поверхностная сегрегация примеси при росте по механизму образования 2D островков исследовались в рамках модели ячеек, подобной использовавшейся во второй главе диссертации для описания перехода от 2D к 3D росту. Полагалось, что к началу роста в пределах участка поверхности, приходящегося на один островок, находится N_0 адатомов примеси. Осаждение дополнительных адатомов и десорбция не учитывались. Рассматривался случай одноуровневого роста, когда формирование кристаллических слоев происходит в результате периодического процесса образования и слияния 2D островков. При сделанных предположениях, числа адатомов примеси на террасе и на поверхности 2D островка, растущего в пределах ячейки радиуса ρ_0 , удовлетворяют уравнениям баланса $dN_1/dt = -G_{inc,1} - G_{cl}$ и $dN_2/dt = -G_{inc,2} + G_{cl}$, где $G_{inc,1}$ и $G_{inc,2}$ – потоки адатомов примеси, встраивающихся в островок с террасы и с поверхности 2D островка, соответственно; G_{cl} – результирующий поток адатомов примеси с террасы на поверхность островка.

При выводе выражений для $G_{inc,i}$ ($i = 1, 2$) и G_{cl} принималось, что примесь однородно распределена в пределах террасы и поверхности островка. Для коэффициентов встраивания примеси и проницаемости ступени использовались выражения, полученные в случае вицинальных ступеней, где под V понималась скорость перемещения края 2D островка: $V = F\rho_0/(2\sqrt{\theta})$. Это дает

$$\frac{dN_1}{d\theta} = -\frac{\Lambda_+(\theta)}{1-\theta} N_1 + \frac{\Lambda_-(\theta)}{\theta} N_2; \quad \frac{dN_2}{d\theta} = \frac{\Lambda_-(\theta)}{1-\theta} N_1 - \frac{\Lambda_+(\theta)}{\theta} N_2, \quad (23)$$

где $\Lambda_{\pm}(\theta) = k_{AB}^{\pm} \sqrt{\theta} / (F \rho_0) \pm K_{st}(\theta) / 4$. Число адатомов примеси, встраивающихся в k -ый кристаллический слой ($k = 1, 2, 3, \dots$; нумерация от исходной поверхности) за единицу времени, равно $dN_{inc}^{(k)} / dt = G_{inc,1}^{(k)} + G_{inc,2}^{(k)}$. Данное соотношение можно представить в виде

$$\frac{dN_{inc}^{(k)}}{d\theta} = \frac{K_{st}(\theta)}{2} \left(\frac{N_1^{(k)}(\theta)}{1 - \theta} + \frac{N_2^{(k)}(\theta)}{\theta} \right). \quad (24)$$

Полное количество адатомов примеси, встраивающихся в k -ый кристаллический слой, находилось путем численного интегрирования уравнения (24) совместно с уравнениями (23), от момента появления 2D островка k -го слоя, до его слияния с соседними 2D островками. Концентрация примеси в k -ом слое определялась как отношение количества встроившихся адатомов к площади участка. Полагалось, что все адатомы примеси, находящиеся на террасе к моменту слияния островков, переходят на поверхность островка, т.е. при слиянии 2D островков происходит эффективное вытеснение примеси на поверхность завершающегося кристаллического слоя.

Результаты численного интегрирования показали, что переход к росту по механизму образования 2D островков приводит к ослаблению влияния температуры и скорости роста на ширину ПКО. Это обусловлено уменьшением среднего расстояния между ступенями и, как следствие, уменьшением пересыщения вблизи ступени. Уменьшение пересыщения приводит к ослаблению эффекта блокирования примеси в изломах атомами основного вещества и, следовательно, к усилению поверхностной сегрегации примеси. Аналогичное влияние оказывает и появление неравновесных изломов на краях островков. Если концентрация изломов θ_k равна равновесной концентрации $\bar{\theta}_k$, то при относительно низкой температуре ($T = 320^\circ \text{C}$) $\Delta \sim F^{-0.8}$. При этом, в случае плохо блокируемой подвижной примеси, модель захвата примеси вицинальными ступенями дает $\Delta \sim F^{-1}$. Если изломы формируются, в основном, за счет образования 1D островков по механизму Воронкова ($\theta_k \approx \bar{\theta}_k \sqrt{\sigma}$ при $\sigma \gg 1$ [10]), то $\Delta \sim F^{-0.55}$ (в случае вицинальных ступеней $\Delta \sim F^{-2/3}$). Зависимость $\Delta \sim F^{-0.55}$ находится в хорошем соответствии с зависимостями $\Delta \sim F^{-1/2}$, полученными в экспериментах [8] по легированию кремния (поверхность (100)) фосфором и сурьмой.

Развитые модели позволяют описать немонотонную зависимость ширины ПКО от температуры подложки, однако наблюдавшееся в экспериментах по легированию кремния сурьмой [19] увеличение Δ более чем на три порядка при изменении T в пределах ста градусов не находит объяснения в рамках данных моделей. Причиной резкой (суперэкспоненциальной) зависимости $\Delta(T)$ может быть увеличивающаяся с увеличением температуры частота возвращения атомов примеси из поверхностного слоя в адсорбционный слой (диффузионная релаксация [2]).

Разработанная в диссертации простая модель, учитывающая данный процесс, предполагает, что рост происходит по механизму перемещения вицинальных ступеней; адатомы примеси однородно распределены в адслое; адатом примеси переходит в поверхностный слой за счет встраивания в ступень и за счет прямого обмена с атомом основного вещества, а обратный переход в адсорбционный слой происходит путем непосредственного отрыва атома примеси из поверхностного слоя. В отсутствие латеральной диффузии примеси в поверхностном слое концентрация адатомов примеси в адслое c_1 и в

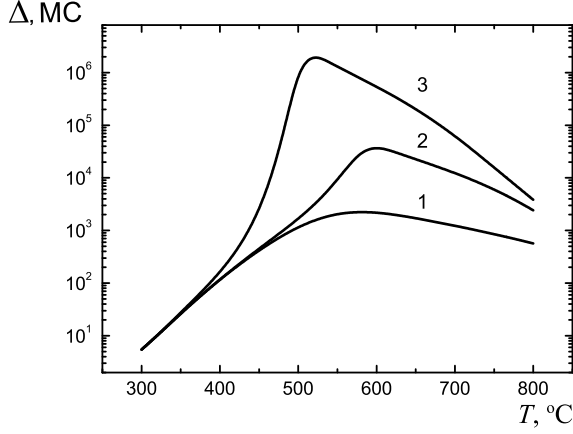


Рис. 11: Зависимости ширины ПКО от температуры роста при различных значениях энергии активации перехода примеси из поверхностного слоя в адслой: 1 – 1.8 эВ; 2 – 1.6 эВ; 3 – 1.4 эВ.

поверхностном слое c_s удовлетворяют уравнениям

$$\frac{dc_1}{dt} = J - (k_{des} + K_d F + k_{ex})c_1(t) + k_{dex}\bar{c}_s(t); \quad (25)$$

$$\frac{\partial c_s(x, t)}{\partial t} = V \frac{\partial c_s(x, t)}{\partial x} - k_{dex}c_s(x, t) + k_{ex}c_1(t), \quad (26)$$

где $\bar{c}_s(t) = \int_0^l c_s(x, t) dx / l$ – средняя концентрация примеси в поверхностном слое, k_{ex} и k_{dex} – константы скоростей перехода примеси из адслоя в поверхностный слой и из поверхностного слоя в адслой, соответственно. В отсутствие миграции атомов примеси из приповерхностного слоя в поверхностный слой, прохождение ступени над атомом примеси в поверхностном слое приводит к необратимому переходу данного атома в объем кристалла. В этом случае концентрация захваченной примеси $c_d(t)$ равна концентрации примеси в поверхностном слое перед краем набегающей ступени $c_s(0, t)$. Если характерное время установления стационарного режима легирования гораздо больше времени роста монослоя, то в квазистационарном приближении можно пренебречь производной по времени в (26). Тогда из решения уравнений (25)-(26) при условии, что концентрация примеси в поверхностном слое, непосредственно за фронтом движущейся ступени, равна концентрации примеси захваченной изломом ($c_s(l, t) = K_d c_1(t)$), следует

$$\Delta = F \left[k_{des} + K_d F e^{-k_{dex}/F} + \frac{k_{ex}}{k_{dex}} F (1 - e^{-k_{dex}/F}) \right]^{-1}. \quad (27)$$

Величина $e^{-k_{dex}/F}$ имеет смысл вероятности того, что атом примеси в поверхностном слое не успеет вернуться в адслой за время роста монослоя, т.е. до встречи с набегающей ступенью. На рис. 11 представлены зависимости $\Delta(T)$ при различных значениях энергии активации перехода атома примеси из поверхностного слоя в адслой E_{dex} , полученные из (27) с учетом выражения (19) для коэффициента K_d . Как следует из рис. 11, при относительно небольшом значении E_{dex} имеется участок суперэкспоненциальной зависимости $\Delta(T)$. Увеличение E_{dex} приводит к исчезновению такого участка. Зависимость $\Delta(T)$ в этом случае совпадает с зависимостью ширины ПКО от температуры в отсутствие вертикального обмена примесью между адслоем и поверхностным слоем.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Развита теория элементарных процессов роста на ступенях, допускающих обмен адатомами между соседними террасами без предварительного встраивания в изломы (т.н. проницаемые ступени). Получены выражения для кинетических коэффициентов встраивания адатомов и коэффициентов проницаемости вицинальной ступени через константы скоростей элементарных процессов и концентрацию изломов на ступени, учитывающие миграцию адатомов вдоль торца ступени и асимметрию потенциального рельефа для адатома вблизи ступени. Полученные выражения в явном виде демонстрируют взаимозависимость процессов встраивания адатома в ступень и перехода через нее на соседнюю террасу, а также выполнение соотношений Онсагера между феноменологическими коэффициентами взаимности.

2. Исследовано влияние температуры и скорости роста на проницаемость вицинальных ступеней. Показано, что с понижением температуры непроницаемая ступень остается непроницаемой несмотря на уменьшающуюся концентрацию равновесных изломов, что связано с более существенным влиянием увеличения длины свободного пробега адатома вдоль края ступени. Переход от проницаемой ступени к непроницаемой может происходить с уменьшением T и с увеличением F вследствие увеличения доли изломов, формирующихся по неравновесному механизму образования одномерных островков на крае ступени. При этом температурная зависимость проницаемости ступени немонотонна и имеет максимум при температуре приблизительно соответствующей температуре, при которой зависимость концентрации изломов от температуры имеет минимум.

3. Получены выражения для кинетических коэффициентов встраивания и коэффициентов проницаемости ступени малой длины (прямолинейного сегмента ступени), перемещающейся по механизму образования и разрастания одномерного островка вдоль края ступени. Показано, что такая ступень может быть проницаемой даже в случае быстрой миграции адатома вдоль края ступени, если скорость перемещения ступени лимитирована скоростью образования изломов (одномерных островков). При наличии соседних сегментов, содержащих изломы, необходимым условием проницаемости ступени является наличие дополнительного барьера для огибания угла ступени.

4. С целью исследования роли проницаемости ступеней в кинетике перехода от 2D к 3D росту проведено обобщение стандартной модели образования зародыша на поверхности 2D островка и модели роста двухуровневых пирамид. Показано, что необходимое для перехода от 2D к 3D росту быстрое образование зародыша и быстрое сближение ступеней сформировавшейся в результате двухуровневой пирамиды может происходить без растворения 2D островка, за счет перескоков адатомов с исходной поверхности. Для этого необходимо, чтобы край 2D островка был проницаемым для адатомов. Кроме того, при постоянном присутствии изломов на крае 2D островка требуется наличие барьера Швёбеля и потенциальной ямы на поверхности островка (на террасе пирамиды) относительно исходной поверхности.

5. Проведено численное моделирование роста двухуровневой пирамиды с учетом характерного для эпитаксии по механизму Странского-Крастанова уменьшения энергии связи атома с краем 2D островка с увеличением размера островка. Показано, что с понижением температуры эпитаксии возможна смена механизма межслоевого переноса

вещества — от переноса за счет отрыва атомов из изломов нижнего 2D островка пирамиды к переносу за счет перескоков адатомов с исходной поверхности через край 2D островка. Такая смена механизмов переноса вещества может иметь следствием образование сплошного кристаллического слоя в области средних температур с переходом к 3D росту при повышении и понижении температуры, т.е. немонотонную температурную зависимость толщины смачивающего слоя.

6. Предложена простая модель переноса вещества при формировании многослойных островков Si и Ge на поверхности Si(111)-7x7, учитывающая кинетику образования неравновесных изломов и особенности встраивания адатомов в 2D островок, растущий по механизму “ряд-за-рядом”. Увеличение проницаемости края такого островка с ростом температуры и уменьшением потока осаждаемого вещества способствует переносу адатомов с поверхности подложки на поверхность 2D островка, что согласуется с наблюдаемым в эксперименте переходом от роста сплошного слоя к формированию многослойных островков с увеличением T и уменьшением F .

7. Разработаны аналитические и компьютерные модели многостадийного процесса образования 2D островков на субмонослойной стадии эпитаксиального роста на реконструированной поверхности. Показано, что при определенных условиях реализуется нестандартный стационарный режим образования островков, в котором адатомы встраиваются, в основном, в эпитаксиальные 2D островки, но образование островков тормозится трансформацией неэпитаксиальных кластеров. Данный режим характеризуется необычно слабой зависимостью концентрации эпитаксиальных островков от потока осаждаемого вещества $N \sim F^{1/4}$, близкой к зависимости $N \sim F^{0.24}$ концентрации 2D островков кремния на поверхности Si(111)-7x7 от потока адатомов Si, полученной в экспериментах при относительно низкой температуре роста.

8. Предложено обобщение стандартной модели субмонослойного роста применительно к образованию и росту двумерных островков, имеющих магические размеры и растущих по механизму “ряд-за-рядом”. Показано, что в пределе большой частоты отрыва адатома от края магического 2D островка, когда скорость образования кристаллического ряда лимитирована частотой встречи адатомов на крае островка, концентрация островков слабо зависит от скорости роста и увеличивается с увеличением температуры. При этом распределение островков по размерам представляет собой последовательность пиков при магических размерах, высота которых монотонно уменьшается с увеличением магического размера.

9. Разработаны модели легирования при молекулярно-лучевой эпитаксии, предполагающие, что встраивание атомов примеси в кристалл в основном происходит в изломах на ступенях, а поверхностная сегрегация примеси имеет место вследствие “перескоков” адатомов примеси через движущуюся ступень. В случае легирования при росте по механизму перемещения вицинальных ступеней получено аналитическое выражение для ширины ПКО, учитывающее процессы адсорбции, десорбции и встраивания примеси в ступени, а также отеснение адатомов примеси движущимися ступенями. Полученное выражение воспроизводит характерную немонотонную зависимость ширины ПКО от температуры. Показано, что уменьшение ширины ПКО с уменьшением температуры при низких T может быть связано с более эффективным блокированием атомов примеси в изломах атомами основного вещества и с отеснением адатомов примеси движущейся

ступенью.

10. Предложена модель захвата и поверхностной сегрегации примеси при характерном для низкотемпературного легирования росте по механизму образования 2D островков. Показано, что переход от роста за счет движения вицинальных ступеней к росту по механизму образования 2D островков приводит к ослаблению зависимостей ширины ПКО от температуры подложки и скорости роста. Это связано с уменьшением пересыщения из-за увеличения плотности ступеней (краев островков) и, как следствие, ослаблением эффекта блокирования атомов примеси в изломах атомами основного вещества. Аналогичное влияние оказывает появление дополнительных (к равновесным) изломов, формирующихся за счет образования одномерных островков на краях 2D островков.

Цитируемая литература

1. Бартон В., Кабрера Н., Франк Ф. Рост кристаллов и равновесная структура их поверхностей // Элементарные процессы роста кристаллов / Под ред. Г.Г. Лемлейна, А.А. Чернова. — М.: ИЛ, 1959. — С.10-109.
2. Современная кристаллография. Т.3 Образование кристаллов / Под ред. Б.К. Вайнштейна. — М.: Наука, 1980. — 407 с.
3. Stoyanov S. Current-induced step bunching at vicinal surfaces during crystal sublimation // Surf. Sci. — 1997. — V.370. — P.345-354.
4. Voigtländer B. Fundamental processes in Si/Si and Ge/Si epitaxy studied by scanning tunneling microscopy during growth // Surf. Sci. Rep. — 2001. — V.43. — P.127-254.
5. Pala R.G.S., Liu F. Critical epinucleation on reconstructed surfaces and first-principle calculation of homonucleation on Si(100) // Phys. Rev. Lett. — 2005. — V.95. — P.136106 (4 p.).
6. Venables J.A., Spiller G.D.T., Hanbücken M. Nucleation and growth of thin films // Rep. Prog. Phys. — 1984. — V.47. — P.399-459.
7. Andrieu S., d'Avitaya F.A., Pfister J.C. Surface segregation mechanism during two-dimensional epitaxial growth: the case of dopants in Si and GaAs molecular-beam epitaxy // J. Appl. Phys. — 1989. — V.65, N7. — P.2681-2687.
8. Nützel J.F., Abstreiter G. Segregation and diffusion on semiconductor surfaces // Phys. Rev. B. — 1996. — V.53, N20. — P.13551-13558.
9. Воронков В.В., Чернов А.А. Захват примеси при движении элементарной ступени // Кристаллография. — 1967. — Т.12, Вып.2. — С.222-229.
10. Воронков В.В. Движение элементарной ступени посредством образования одномерных зародышей // Кристаллография. — 1970. — Т.15, Вып.1. — С.13-19.
11. Caffisch R.E., E W., Gyure M.F., Merriman B., Ratsch C. Kinetic model for a step edge in epitaxial growth // Phys. Rev. B. — 1999. — V.59. — P.6879-6887.
12. Stoyanov S., Markov I. On the 2D-3D transition in epitaxial thin film growth // Surf. Sci. — 1982. — V.116. — P.313-337.
13. Tersoff J., Denier van der Gon A.W., Tromp R.M. Critical island size for layer-by-layer growth // Phys. Rev. Lett. — 1994. — V.72. — P. 266-269.
14. Dobbs H.T. et al. Mean-field theory of quantum dot formation // Phys. Rev. Lett. — 1997. — V.79. — P.897-900.
15. Nikiforov A.I., Ulyanov V.V., Timofeev V.A., Pchelyakov O.P. Wetting layer formation in superlattices with Ge quantum dots on Si(100) // Microelectronics J. — 2009. — V.40. —

P.782-784.

16. Teys S.A., Talochkin A.B., Olshanetsky B.Z. Formation of Ge nanoislands before the completion of a wetting layer in the Ge/Si(111) system // J. Cryst. Growth. — 2009. — V.311. — P.3898-3903.
17. Krug J., Polity P., Michely T. Island nucleation in the presence of step-edge barriers: Theory and applications // Phys. Rev. B. — 2000. — V.61. — P.14037-14046.
18. Bales G.S., Zangwill A. Self-consistent rate theory of submonolayer epitaxy with attachment / detachment kinetics // Phys. Rev. B. — 1997. — V.55. — P.R1973-R1976.
19. Jorke H. Surface segregation of Sb on Si(100) during molecular beam epitaxy growth // Surf. Sci. — 1988. — V.193. — P.569-578.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Рузайкин М.П., Эрвье Ю.Ю. О нестационарном легировании при низкотемпературной кристаллизации из молекулярного пучка // Кристаллография. — 1992. — Т.37, Вып.3. — С.807-812.
2. Рузайкин М.П., Эрвье Ю.Ю. О связи между характеристиками стационарного и нестационарного процессов захвата примеси при кристаллизации из молекулярного пучка // Изв. вузов. Физика. — 1995. — Т.38, N8. — С.102-107.
3. Рузайкин М.П., Эрвье Ю.Ю. О роли эффекта оттеснения примеси ступенью на начальной стадии ее захвата при кристаллизации из молекулярного пучка // Кристаллография. — 1996. — Т.41, Вып.4. — С.597-601.
4. Рузайкин М.П., Филимонов С.Н., Эрвье Ю.Ю. Имитационное моделирование эволюции структуры поверхности при росте кристаллов из молекулярного пучка // Изв. вузов. Физика. — 1997. — Т.40, N8. — С.103-109.
5. Котляревский В.М., Рузайкин М.П., Эрвье Ю.Ю. Моделирование миграции адатомов в плотных многокомпонентных адсорбционных слоях // Изв. вузов. Физика. — 1998. — Т.41, N6. — С.89-94.
6. Hervieu Yu.Yu., Ruzaikin M.P. Surface processes of impurity incorporation during MBE growth // Surf. Sci. — 1998. — V.408. — P.57-70.
7. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. On the kinetics of δ -doping during MBE // Phys. Low-Dim. Struct. — 1998. — N7/8. — P.91-100.
8. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. The dopant incorporation and surface segregation during 2D islands growth in MBE: a computer simulation study // Phys. Low-Dim. Struct. — 1998. — N9/10. — P.141-152.
9. Филимонов С.Н., Эрвье Ю.Ю. Модели поверхностной сегрегации и захвата примеси при различных механизмах кристаллизации из молекулярного пучка // Изв. вузов. Материалы электронной техники. — 2000. — Вып.2. — С.50-54.
10. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Growth kinetics in surfactant mediated MBE: effects of blocking of kinks // Phys. Low-Dim. Struct. — 2000. — N1/2. — P.81-92.
11. Филимонов С.Н., Эрвье Ю.Ю. О статистике образования зародышей когерентных 3D-островков при гетероэпитаксии из молекулярного пучка // Изв. вузов. Физика. — 2001. — Т.44, N4. — С.34-38.
12. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Statistics of second layer nucleation in heteroepitaxial growth // Surf. Sci. — 2002. — V.507-510 C. — P.270-275.

13. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Origin of step permeability in growth of coherently strained 2D islands // *Phys. Low-Dim. Struct.* — 2002. — N7/8. — P.15-25.
14. Hervieu Yu.Yu., Ruzaikin M.P. Growth and doping of semiconductor compounds: kinetics of incorporation processes at kink sites // *Growth of Crystals* / Eds. E.I.Givargizov and A.M.Melnikova. — Kluwer Academic (Consultant Bureau), NY, Boston, London, Moscow, 2002. — V.21. — P.1-9.
15. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Terrace-edge-kink model of atomic processes at the permeable steps // *Surf. Sci.* — 2004. — V.553, N1/3. — P.133-144.
16. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Permeability of steps - interplay of the step edge diffusion, detachment and kink creation processes // *Proc. Symposium on Surface Science, Les Arcs 1800, France.* — 2005. — O39 (1-2).
17. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Kinetics of adatom incorporation and step crossing at the edges of nanoislands // *Nanostructures: physics and technology, Proc. 13 Intern. Symposium, St Petersburg.* — 2005. — P.320-321.
18. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Step permeability effect and interlayer mass-transport in the Ge/Si(111) MBE // *Mat. Sci. Semicon. Proc.* — 2005. — V.8, N1/3. — P.31-34.
19. Filimonov S.N., Cherepanov V., Hervieu Yu.Yu., Voigtländer B. Non-standard scaling of the 2D island density on Si(111)-7x7 // *Nanostructures: physics and technology, Proc. 15 Intern. Symposium, Novosibirsk.* — 2007. — P.170-171.
20. Filimonov S., Cherepanov V., Hervieu Yu., Voigtländer B. Multistage nucleation of two-dimensional islands on Si/Si(111)-7x7 during MBE growth: STM experiments and extended rate-equation model // *Phys. Rev. B.* — 2007. — V.76. — P.035428 (7 p.).
21. Filimonov S.N., Cherepanov V., Hervieu Yu.Yu., Voigtländer B. Si nucleation on Si(111)-7x7: from cluster pairs to 2D islands // *Surf. Sci.* — 2007. — V.601. — P.3876-3880.
22. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Adatom incorporation and step crossing at the edges of 2D nanoislands // *Int. J. Nanosci.* — 2007. — V.6, N3/4. — P.237-240.
23. Filimonov S., Hervieu Yu. Kink formation kinetics and submonolayer density of magic two-dimensional islands in molecular beam epitaxy // *Phys. Rev. E.* — 2009. — V.80. — P.051603 (9 p.).
24. Филимонов С.Н., Эрвье Ю.Ю. Зарождение и рост "магических" наноостровков при кристаллизации из молекулярного пучка // *Узбекский физический журнал.* — 2010. — Т.12, N1-2. — С.18-25.
25. Филимонов С.Н., Эрвье Ю.Ю. Влияние проницаемости края 2D островка на переход от 2D к 3D росту // *Изв. вузов. Материалы электронной техники.* — 2010. — Вып.3. — С.52-59.
26. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Kinetics of two-dimensional island nucleation on reconstructed surfaces // *Phys. Rev. B.* — 2012. — V.85. — P.045423 (7 p.).