



Национальный
исследовательский

**Томский
государственный
университет**



**Радиофизический
факультет**



8-я Международная научно-практическая конференция

**Актуальные проблемы радиофизики
АПР 2019**

Сборник трудов конференции



**РОССИЙСКИЙ ФОНД
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**

**1-4 октября 2019 года
г. Томск**

Образование двойных ступеней на поверхности кремния (100): роль проницаемости А-ступеней

Эрвье Юрий Юрьевич

Томский государственный университет

E-mail:ervye@mail.tsu.ru

Динамика моноатомных ступеней на вицинальной поверхности Si(100)2x1 представляет интерес в плане подготовки поверхности, оптимальной для формирования различных полупроводниковых эпитаксиальных структур. Исследования начальной стадии эпитаксиального роста кремния на данной поверхности показали, что при определенных условиях происходит быстрый (за время роста половины монослоя кремния) переход от двухдоменной поверхности к однодоменной поверхности за счет быстрого движения моноатомных ступеней В-типа при фактическом отсутствии движения ступеней А-типа [1]. В работе [2] такое быстрое сближение ступеней объясняется наличием прямого и обратного барьеров Эрлиха-Швёбеля [3,4] для присоединения адатомов к краю А-ступени. Однако результаты квантово-химических расчетов указывают на отсутствие прямого барьера [5]. В настоящей работе предлагается модель движения ступеней, учитывающая проницаемость А-ступени, т.е. возможность переходов адатомов на соседнюю террасу без предварительного присоединения к изломам на крае ступени [6,7]. Скорости перемещения ступеней определяются из решения соответствующей краевой задачи поверхностной диффузии адатомов. Для фигурирующих в краевых условиях кинетических коэффициентов и коэффициента проницаемости А-ступени используются выражения, полученные с помощью модели встраивания адатомов в проницаемую ступень [7]. Модель демонстрирует возможность быстрого сближения ступеней в отсутствие прямого барьера Эрлиха-Швёбеля.

Полагалось, что двухдоменная поверхность Si(100) представляет собой вицинальную поверхность, разориентированную относительно сингулярной грани (100) в направлении [110] на некоторый угол. На поверхности присутствуют моноатомные ступени двух типов – А и В, террасы которых имеют различные сверхструктурные домены: (2×1) (терраса типа А) и (1×2) (терраса типа В), соответствующие различной ориентации димерных рядов поверхностных атомов кремния [8] (рис. 1). В отсутствие десорбции, концентрации адатомов на А и В-террасах, n_i ($i = a, b$), удовлетворяют уравнениям непрерывности:

$$D_i \frac{d^2 n_i}{dx^2} + F = 0, \quad (1)$$

где D_i – коэффициенты поверхностной диффузии, F – плотность потока адсорбирующихся атомов, x – координата вдоль оси перпендикулярной ступеням (рис. 1).

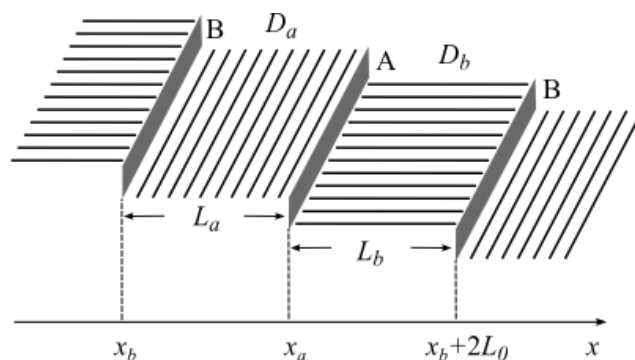


рис.1 Схематичное изображение двухдоменной поверхности Si(100)

Плотность изломов на краях В-ступеней очень высока [1,8], поэтому такие ступени можно считать непроницаемыми. Кроме того, в отсутствие дополнительных (к диффузионным) барьеров для присоединения адатомов к В-ступеням, в качестве краевых условий для уравнений (1) можно положить [2]: $n_a(0) \approx n_b(L_b) \approx \tilde{n}_b$, где $\tilde{n}_b$ – концентрация адслоя в равновесии с В-ступенью (L_b – ширина В-террасы, см. рис. 1). Для относительно гладких (с малой плотностью изломов) А-ступеней краевые условия представляют собой уравнения баланса потоков адатомов, поступающих к краю ступени с нижней (l) и верхней (u) террас за счет диффузии, встраивающихся в ступень и пересекающих ступень без встраивания:

$$\begin{aligned} -D_a \frac{dn_a}{dx} \Big|_{x=L_a} &= \beta_u [n_a(L_a) - \tilde{n}_a] + \beta_p [n_a(L_a) - n_b(0)], \\ D_b \frac{dn_b}{dx} \Big|_{x=0} &= \beta_l [n_b(0) - \tilde{n}_a] + \beta_p [n_b(0) - n_a(L_a)], \end{aligned} \quad (2)$$

где β_l и β_u - кинетические коэффициенты ступени, β_p - коэффициент проницаемости ступеней.

Будем полагать, что миграция адатомов вдоль гладких участков края ступени полностью отсутствует и встраивание адатомов в ступень происходит исключительно за счет прямого присоединения к изломам [10]. Тогда, для кинетических коэффициентов в (2) можно принять [7]: $\beta_l = \theta_k k_{le}^+$, $\beta_u = \theta_k k_{ue}^+$, $\beta_p = (1 - \theta_k) k_{ue}^+ k_{le}^+ / (k_{ue}^+ + k_{le}^+)$, где θ_k - относительная концентрация изломов на ступени, $k_{\alpha\beta}^\mp$ ($\alpha, \beta = l, u, e$) - соответствующие константы скоростей элементарных актов присоединения (+) и отрыва (-) адатомов с нижней (l) и верхней (u) террас к гладкому участку края ступени (e). Скорости перемещения ступеней определялись путем подстановки решения краевой задачи в выражения:

$$V_a = D_b \frac{dn_b}{dx} \Big|_{x=0} - D_a \frac{dn_a}{dx} \Big|_{x=L_a}, \quad V_b = D_a \frac{dn_a}{dx} \Big|_{x=0} - D_b \frac{dn_b}{dx} \Big|_{x=L_b}.$$

Полученные выражения можно представить в виде $V_a = [F(L_a + L_b) - \Delta V]/2$ и $V_b = [F(L_a + L_b) + \Delta V]/2$, где разность скоростей перемещения ступеней ($\Delta V \equiv V_b - V_a$) равна:

$$\begin{aligned} \Delta V &= \left[\theta_k \left(\frac{L_b}{l_b} + 1 \right) L_a + \theta_k \left(\frac{L_a}{l_a} + 1 \right) L_b + (1 - \theta_k) \left(1 + \frac{D_a L_b + D_b L_a}{D_a l_b + D_b l_a} \right) (L_a + L_b) \right] \frac{F}{Q} - \\ &- 2\theta_k \left[\left(\frac{L_b}{l_b} + 1 \right) \frac{D_a}{l_a} + \left(\frac{L_a}{l_a} + 1 \right) \frac{D_b}{l_b} \right] \frac{\tilde{n}_b - \tilde{n}_a}{Q}. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $Q = \theta_k \left(\frac{L_a}{l_a} + 1 \right) \left(\frac{L_b}{l_b} + 1 \right) + (1 - \theta_k) \left(1 + \frac{D_a L_b + D_b L_a}{D_a l_b + D_b l_a} \right)$, $l_a = D_a / k_{ue}^+$ и $l_b = D_b / k_{le}^+$ - характерная длина присоединения адатома к краю А-ступени с верхней и нижней террасы, соответственно.

Полагая в (4) $l_a = a \ll L_a$ (отсутствие прямого барьера Эрлиха-Швёбеля), $l_b \gg L_b$ (наличие обратного барьера Эрлиха-Швёбеля) и $\theta_k \ll a/L_a \ll 1$ (проницаемая А-ступень), имеем:

$$\Delta V \approx (L_a + L_b)F - 2\theta_k \left(\frac{D_a}{a} + \frac{D_b}{l_b} \right) (\tilde{n}_b - \tilde{n}_a). \quad (4)$$

Здесь a - межатомное расстояние на поверхности. Из (4) следует, что быстрое сближение ступеней, когда $V_b \approx F(L_a + L_b) \gg V_a$, возможно при малой концентрации изломов при наличии одного лишь обратного барьера Эрлиха-Швёбеля. Это связано с видом потенциального рельефа для адатома, пересекающего гладкий участок проницаемой А-ступени (рис. 2). Здесь, в соответствии с реальной ситуацией на поверхности Si(100)2x1, полагается, что значение энергии активации диффузии на А-террасе больше, чем на В-террасе ($E_{Da} > E_{Db}$) [5,9]. Если $E_{Db} + \Delta E_{le} < E_{Da}$ (рис. 2а), то адатом, присоединившийся к краю ступени с верхней террасы, с большой вероятностью переходит на нижнюю террасу. Наличие обратного барьера Эрлиха-Швёбеля, ΔE_{le} , препятствует возвращению адатома на край ступени. В данном случае имеет место эффективный перенос адатомов с А-террасы на В-террасу с последующим встраиванием в непроницаемую В-ступень. Если $E_{Db} + \Delta E_{le} > E_{Da}$ (рис. 2б), то барьер препятствует присоединению к краю ступени адатомов с В-террасы и переходу адатомов с края ступени на В-террасу. В отсутствие миграции адатома вдоль края ступени, адатом отрывается от края ступени раньше, чем достигает излома. Таким образом, адатом с А-террасы отражается от края ступени, как и в случае обычного прямого барьера Эрлиха-Швёбеля (в этом случае ступень проницаема для адатомов, поступающих на край ступени с нижней террасы, но непроницаема для адатомов с верхней террасы [7]). В результате, атомы, адсорбирующиеся на А и В-террасы, в основном встраиваются в В-ступень.

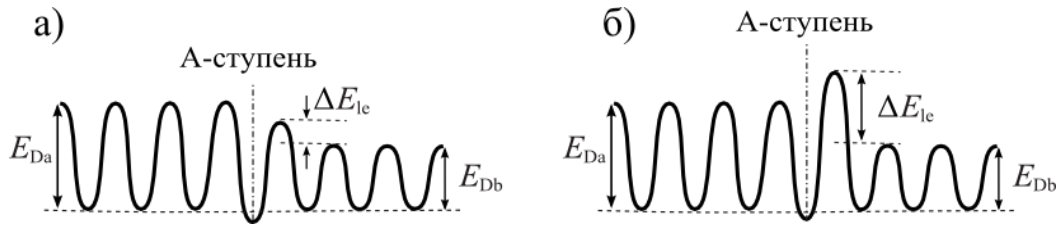


рис.2 Вид потенциального рельефа для адатома, пересекающего проникаемую А-ступень

Таким образом, увеличение проникаемости А-ступени (уменьшение концентрации изломов) способствует более быстрому сближению ступеней, подобно увеличению дополнительных барьеров для присоединения адатомов к непроницаемой ступени. Для проверки сделанных выводов и оценки существенности эффекта проникаемости А-ступени в условиях эксперимента проведено численное интегрирование уравнений движения А и В-ступеней:

$$\frac{dx_a}{dt} = V_a(L_a(t), L_b(t)), \quad \frac{dx_b}{dt} = V_b(L_a(t), L_b(t)).$$

Для скоростей перемещения ступеней, $V_a(L_a, L_b)$ и $V_b(L_a, L_b)$, использовались полученные ранее выражения (см. (3)). Принималось, что в начальный момент времени все ступени находятся на одинаковом расстоянии друг от друга $L_a(0) = L_b(0) = L_0$. Полагая для начального положения ступеней $x_a(0) = L_0$ и $x_b(0) = 0$, можно записать $L_a(t) = x_a(t) - x_b(t)$ и $L_b(t) = 2L_0 + x_b(t) - x_a(t)$ (см. рис. 1). Для разности равновесных концентраций адатомов принималось [2]:

$$\tilde{n}_b(t) - \tilde{n}_a(t) = 2\tilde{n} \sinh \left[\frac{\pi \alpha^2}{2L_0 k_B T} \cot \left(\frac{\pi(x_a(t) - x_b(t))}{2L_0} \right) \right],$$

где $\tilde{n} = e^{-\Delta E / k_B T}$ - равновесная концентрация адатомов в случае эквидистантных ступеней ($L_a = L_b = L_0$), α - константа упругого отталкивания ступеней. Плотность изломов рассчитывалась по формуле $\theta_k = 2 \exp(-\varepsilon_k / k_B T)$, где ε_k - работа образования излома на крае А-ступени [11]. Использовались следующие постоянные значения параметров модели, характерные для рассматриваемой поверхности, $\Delta E = 1.34$ эВ, $E_{Db} = 0.65$ эВ, $E_{Da} = 1.1$ эВ, $\varepsilon_k = 0.2$ эВ, $a = 0.384$ нм, а также $\alpha = 6.25 \times 10^{-2}$ эВ/нм [2] и $\nu = 10^{13} \text{ с}^{-1}$. Значения среднего расстояния между ступенями ($L_0 = 30$ нм), температуры ($T = 750$ К) и адсорбционного потока ($F = 1$ монослой/мин) соответствовали условиям эксперимента [1]. Прямой и обратный барьеры Эрлиха-Швёбеля полагались равными 0 эВ и 0.4 эВ, соответственно.

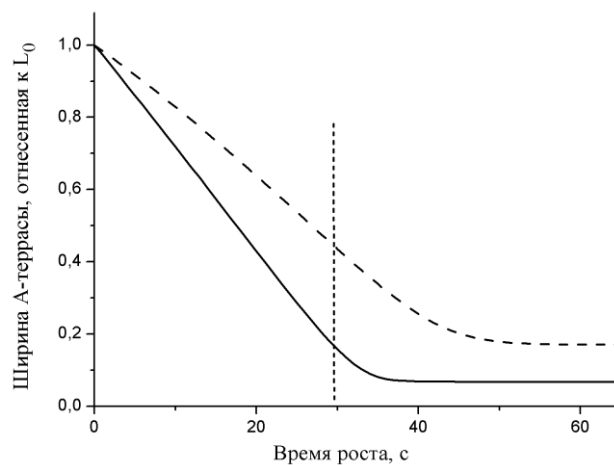


рис.2 Зависимость ширины А-террасы от времени роста в случаях проникаемой и непроницаемой А-ступени (сплошная и пунктирная линии, соответственно). Вертикальная пунктирная линия указывает время роста половины монослоя

Результаты численного интегрирования демонстрируют уменьшение ширины А-террасы с увеличением времени роста, что соответствует сближению А и В-ступеней (рис. 3). В случае проницаемой А-ступени ($\theta_k = 0.09$) время сближения ступеней приблизительно равно времени роста половины монослоя кремния, что согласуется с экспериментом [1]. Для быстрого сближения ступеней требуется наличие обратного барьера Эрлиха-Швёбеля, препятствующего присоединению адатомов к А-ступени с В-террасы, ширина которой по мере роста увеличивается. При этом, в случае малых θ_k , наличие прямого барьера не является обязательным. Заметим, что из-за упругого отталкивания ступеней их сближение возможно лишь до отличного от нуля расстояния. Минимальная ширина А-террасы в случае проницаемой А-ступени меньше, чем в случае непроницаемой ступени. Это обусловлено увеличением скорости движения В-ступени.

Таким образом, в работе предложена модель движения ступеней А и В-типа на вицинальной поверхности Si(100)2x1. Модель учитывает анизотропию поверхностной диффузии адатомов, наличие дополнительных барьеров для встраивания адатомов в А-ступень, упругое отталкивание ступеней и эффект проницаемости А-ступени (возможность переходов адатомов между соседними террасами без встраивания в изломы на ступени). Для кинетических коэффициентов А-ступени и коэффициента проницаемости использованы выражения, учитывающие особенности потенциального рельефа для адатома на крае ступени. Полученные результаты показывают, что увеличение проницаемости А-ступени должно способствовать более быстрому сближению А и В-ступеней. Причем, при достаточно малой концентрации изломов на крае А-ступени быстрое сближение ступеней возможно и в отсутствие прямого барьера Эрлиха-Швёбеля, что согласуется с результатами квантово-химических расчетов [5] потенциального рельефа для адатома кремния на крае А-ступени.

Список литературы:

- [1] Hoeven A.J. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 63. P. 1830.
- [2] Hong W., Zhang Z., Suo Z. // *Phys. Rev. B.* 2006. V.74. P. 235318.
- [3] Ehrlich G., Hudda F.G. // *J. Chem. Phys.* 1996. V. 44. P. 1039.
- [4] Schwoebel R.L., Chipsey E.J. // *J. Appl. Phys.* 1966. V. 37. P. 3682.
- [5] Zhang Q.-M. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1995. V.75. P. 101.
- [6] Tanaka S. et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V.78. P. 3342.
- [7] Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. // *Surf. Sci.* 2004. V.553. P.133.
- [8] Chadi D.J. // *Phys. Rev. Lett.* 1987. V.59. P. 1691.
- [9] Mo Y.-W., Lagally M.G. // *Surf. Sci.* 1991. V.248. P. 313.
- [10] Filimonov S., Voigtländer B. // *Surf. Sci.* 2004. V. 549. P. 31.
- [11] Markov I.V. *Crystal growth for beginners.* World Scientific: Singapore, 2003. 546 p.