

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Национальный исследовательский
Томский государственный университет

**ТРУДЫ СЕМНАДЦАТОЙ
ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
СТУДЕНЧЕСКИХ
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ
ИНКУБАТОРОВ**

г. Томск, 11–15 мая 2020 г.

Под редакцией В.В. Дёмина

Scientific & Technical Translations



ИЗДАТЕЛЬСТВО

Томск – 2020

ЭПИТАКСИАЛЬНЫЙ РОСТ ДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ IV ГРУППЫ И ЕГО МОДЕЛИРОВАНИЕ

В.П. Винарский

Научный руководитель: канд. физ.-мат. наук К.А. Лозовой

Национальный исследовательский Томский государственный
университет, г. Томск, Россия
E-mail: vinarskiy2017@gmail.com

Аннотация. Работа посвящена теории эпитаксиального роста двумерных материалов IV группы и моделированию их роста методом молекулярно-лучевой эпитаксии.

Ключевые слова: двумерный материал, адсорбция, десорбция, миграция атомов, рост, островок.

Введение. Графен, силицен и германен – три представителя двумерных материалов IV группы, имеющие различную структуру, различные свойства и физические характеристики. Например, графен не обладает запрещённой зоной, а потому не является полупроводником в отличие от силицена и германена, которые, таким образом, являются более перспективными материалами для различных приборных применений.

Цель данной работы состоит в определении параметров осаждаемого материала и подложки, при которых реализуются процессы роста силицена и германена по двумерному механизму. Актуальность работы обуславливается тем, что моделирование эпитаксиального синтеза двумерных материалов IV группы позволяет нам создавать диоды и транзисторы с характеристиками, полезными в наноэлектронике. Работа также позволит увеличить точность расчётов при моделировании процессов роста.

Среди различных методов роста двумерных материалов особое внимание уделяется методу молекулярно-лучевой

эпитаксии (МЛЭ). Объясняется это тем, что метод МЛЭ хорошо себя зарекомендовал при выращивании двумерных материалов IV группы благодаря возможностям анализа и контроля процессов синтеза, а также способности прерывания роста плёнки. Для анализа морфологии растущих структур, например, камеры установки «Катунь-100» могут быть оборудованы дифрактометром быстрых электронов и автоматическим быстродействующим эллипсометром [2]. Точное управление толщиной пленки обеспечивается быстродействующими заслонками. Наличие модулей в установке также позволяет полностью автоматизировать технологический процесс роста.

Методы и материалы. За основу для построения физико-математической модели была взята термодинамическая модель роста наноструктур [1]. При моделировании процессов эпитаксиального роста двумерных материалов элементов IV группы учитывалось наличие в камере установки трёх зон: зоны генерации молекулярных пучков, зоны смешения испаряемых элементов и зоны кристаллизации.

Поскольку рассматривается рост плёнок толщиной менее 100 \AA , необходимо учитывать адсорбцию, десорбцию, диссоциацию молекул и миграцию атомов.

Известны три механизма эпитаксиального роста материалов:

- 1) послойный рост (рост Франка-ван дер Мерве);
- 2) островковый рост (рост Вольмера-Вебера);
- 3) рост слоя с островками (рост Странски-Крастанова).

Математическое описание каждого из механизмов роста основывается на решении общего уравнения:

$$\sigma_s = \sigma_{s/f} + \sigma_f \cos \varphi \quad (1)$$

где φ – краевой угол (рис. 1); σ_s , σ_f и $\sigma_{s/f}$ являются коэффициентами поверхностного натяжения между подложкой и вакуумом, плёнкой и вакуумом и подложкой и плёнкой соответственно [1].

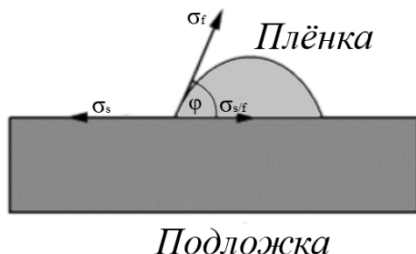


Рис. 1. Трёхмерный островок на подложке

Возможные режимы роста определялись с использованием уравнения (1) для кремния и германия в качестве осаждаемых материалов. В роли подложек для синтеза рассматривались монокристаллические полупроводниковые (кремний, германий) и металлические (алюминий, серебро, золото) пластины с кристаллографическими ориентациями (100) и (111). Значения поверхностных энергий для указанных материалов выбирались из экспериментальных данных.

Результаты. В результате расчетов с использованием (1) определены величины рассогласования параметров осаждаемого материала и подложки, при которых реализуются процессы роста по каждому из возможных механизмов. Режим Франка-ван дер Мерве реализуется при рассогласовании решеток менее 2%, Фольмера-Вебера – при рассогласовании более 8 %, а Странски-Крастанова является промежуточным случаем. Показано, что наилучшим выбором для синтеза силицена и германена являются монокристаллические металлические подложки Al(111), Ag(111) и Au(111). Это обусловлено требуемым из уравнения (1) балансом поверхностных энергий, а также близким совпадением параметров кристаллических решеток осаждаемого материала и подложки, необходимыми для реализации двумерного роста по механизму Франка-ван дер Мерве, без образования нежелательных островков.

Заключение. В работе рассмотрены процессы, происходящие при росте двумерных плёнок в методе МЛЭ. В результате исследований определены границы изменения структурных и термодинамических параметров осаждаемого материала и подложки, при которых реализуется каждый из возможных механизмов роста. Целью дальнейших исследований будет являться расчёт зависимостей параметров двумерных материалов от условий их синтеза и подбор оптимальных ростовых условий для выращивания силицена и германена приборного качества.

*Научное исследование выполнено
в рамках Госзадания (проект № 0721-2020-0048).*

ЛИТЕРАТУРА

1. Дубровский В.П. Теория формирования эпитаксиальных наноструктур. – М. : Физматлит, 2009. – 352 с.
2. Установка для молекулярно-лучевой эпитаксии «Катунь-100» / В.В. Блинов, В.И. Машанов, А.И. Никифоров и др. // Космические аппараты и технологии. – 2018. – Т. 2, № 3. – С. 170–174.