

08

Методика получения Ge/Si(001) самоформирующихся нанопроволок для реализации на их основе дырочных спиновых кубитов

© Д.В. Юрасов, М.В. Шалеев, А.В. Новиков

Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия

E-mail: Inquisitor@ipmras.ru

Поступило в Редакцию 4 июля 2025 г.

В окончательной редакции 8 августа 2025 г.

Принято к публикации 12 августа 2025 г.

Предложена методика получения методом молекулярно-пучковой эпитаксии на подложке Si(001) самоформирующихся Ge нанопроволок. Подход основан на осаждении в двух зонах подложки различного количества Ge и контроле поверхности одной из зон методом дифракции быстрых электронов, что позволяет осаждать произвольно близкое к критической толщине псевдоморфного роста количество Ge в другой зоне. Совместно с оптимизированными условиями постростового отжига это позволило получить Ge нанопроволоки с различными параметрами, в том числе с длиной более $0.5\text{ }\mu\text{m}$ и низкой поверхностной плотностью, морфология которых удовлетворяет требованиям для формирования на их основе дырочных спиновых кубитов.

Ключевые слова: SiGe гетероструктуры, молекулярно-пучковая эпитаксия, самоформирующиеся островки, нанопроволоки.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.22.61578.20431

В настоящее время рассматриваются различные системы для реализации квантовых вычислений: сверхпроводники, ионы в ловушках, полупроводники, фотонные схемы и др. [1]. Полупроводники, хотя сейчас и уступают другим материальным системам, обладают важным преимуществом — относительно простой масштабируемостью, в том числе за счет использования многолетнего опыта развития микроэлектронной технологии. Наибольший интерес представляют кубиты на основе Si/Ge, так как для их получения могут быть использованы промышленные возможности. В данной гетеросистеме возможно построение как электронных, так и дырочных кубитов. Изначально внимание было обращено на электронные спиновые кубиты, однако дырочные кубиты обладают рядом преимуществ [2]. Интересной платформой для реализации дырочных кубитов являются Ge нанопроволоки (так называемые Ge „hut wires“) [2,3]. Возможность самоформирования Ge hut wires на поверхности Si(001) при молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) без использования катализаторов была продемонстрирована относительно недавно [4,5]. Было показано [4–6], что в узком диапазоне ростовых параметров возможно формирование Ge hut wires из hut-островков за счет диффузии материала из смачивающего слоя в островки при их длительном отжиге в вакууме. Поскольку боковые грани Ge hut-островков есть плоскости типа {105}, а плоскость Ge (105) имеет низкую поверхностную энергию [7], диффундирующий материал встраивается предпочтительно в „торцы“ hut-островков, что и приводит к их удлинению и формированию hut wires с сохранением их высоты [4,6]. При этом hut wires оказываются ориентированы по кристаллографическим направлениям [100]

либо [010] и имеют однородное распределение по высоте и поперечному размеру.

Одной из ключевых проблем, связанных с формированием hut wires, является очень узкий диапазон ростовых параметров (толщины осаждаемого Ge, а также температуры роста и последующего отжига), при которых возможна реализация латерального удлинения изначально зародившихся hut-островков [6]. В связи с этим очевидным требованием для воспроизводимого их получения является высокостабильный источник испарения Ge. В установках SiGe МПЭ возможна реализация двух типов источников для испарения Ge: электронно-лучевой испаритель (ЭЛИ) и эффузионная ячейка. ЭЛИ является основным вариантом, поскольку только с ним возможно достижение приемлемых скоростей осаждения Ge ($\sim 0.1\text{ nm/s}$), а также рост различных по толщине структур, несмотря на флуктуации скорости из-за перемешивания конвективных потоков расплавленного материала. Эффузионная ячейка, хотя и позволяет получать более стабильный поток материала, при испарении Ge имеет существенные недостатки. Во-первых, для получения даже небольших скоростей осаждения Ge (сотые доли nm/s) ее приходится разогревать до температур $> 1300^\circ\text{C}$, существенно превышающих температуру плавления Ge (938°C). Это близко к предельным температурам использования тиглей из пиролитического нитрида бора (PBN), обычно использующихся в ячейках ($T \sim 1400\text{--}1500^\circ\text{C}$). При таких температурах уже начинается термическое разложение PBN. Длительное воздействие высоких температур приводит к деградации PBN, а также к подлегированию испаряемого Ge бором. Во-вторых, охлаждение Ge-ячейки требует медленного снижения температуры ($\sim 1\text{--}2^\circ\text{C/min}$), поскольку Ge

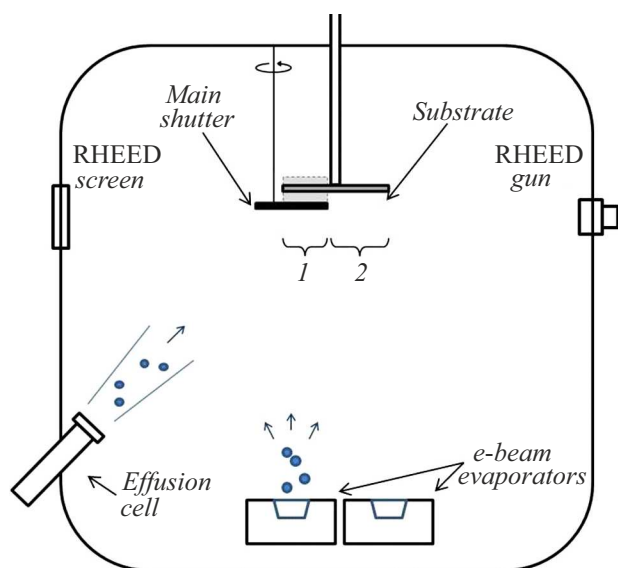


Рис. 1. Схема ростовой камеры установки МПЭ с эффузионной ячейкой, установленной под углом к подложке, ЭЛИ, установленными под подложкой, общей заслонкой подложки и системой ДБЭ. Цифрами 1 и 2 обозначены различные зоны нанесения Ge в используемом методе (см. текст).

при кристаллизации расширяется, и существует опасность разрушения тигля. Наконец, после нескольких десятков циклов расплавления/кристаллизации Ge необходима замена PBN тигля. Узкий диапазон параметров, при которых возможно формирование hut wires, вместе с флуктуациями потока при осаждении Ge из ЭЛИ сильно затрудняет воспроизводимое получение hut wires. В работе предложен метод контролируемого получения Ge hut wires с различными параметрами при использовании ЭЛИ как типового источника осаждения с помощью создания на подложке двух зон нанесения Ge и контроля с помощью системы дифракции быстрых электронов (ДБЭ) состояния поверхности одной из зон.

Рост структур производился на установке МПЭ Riber SIVA-21, оборудованной как ЭЛИ, так и эффузион-

ной ячейкой для испарения Ge. Для формирования Ge hut-островков при температуре $T = 535^\circ\text{C}$ с малой скоростью $\sim 0.005\text{ nm/s}$ (для обоих источников Ge) осаждалось количество Ge чуть меньше критической толщины 2D–3D-перехода (подробнее см. далее). Затем проводился отжиг структур в ростовой камере при $T = 525^\circ\text{C}$ в течение 2–4 h. Исследования выращенных образцов осуществлялись с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) (микроскоп NTEGRAPrima, NT-MDT) в полуконтактном режиме. На рис. 1 схематически показана ростовая камера установки МПЭ (указано не все оборудование). Расположение эффузионной ячейки под углом $\sim 45^\circ$ к подложке позволяет для использованного оборудования получать градиент толщины осажденного Ge порядка $\pm 1\%$ на расстоянии 1 mm от центра пластины.

Сочетание такого градиента и узости диапазона оптимальных толщин приводит к тому, что лишь на малой части подложки реализуются необходимые условия для формирования hut wires, что было подтверждено с помощью АСМ (рис. 2). При смещении по образцу, соответствующему изменению количества осажденного Ge на величину порядка $\pm 5\%$ (соответствует ± 0.25 монослоя (ML), $1\text{ ML} \sim 0.14\text{ nm}$) (рис. 2, *a* и *c*) относительно количества, осажденного в центр пластины (рис. 2, *b*), морфология поверхности сильно изменяется. Были получены как относительно длинные hut wires малой плотности, так и значительно более короткие wires на порядок большей плотности, а также массив типичных hut-островков. Однако полезная часть образца, на которой получают hut wires с требуемыми параметрами, составляет всего несколько mm^2 , т.е. очень малую долю от всей подложки. Это крайне затрудняет проведение последующих операций, необходимых для формирования электростатических квантовых точек и реализации кубитов на их основе.

В настоящей работе реализован метод контролируемого формирования hut wires с использованием ЭЛИ — стандартного для Si/Ge МПЭ источника испарения Ge. С помощью системы ДБЭ при МПЭ можно определить критическую толщину 2D–3D-перехода (h_{crit}). Однако,

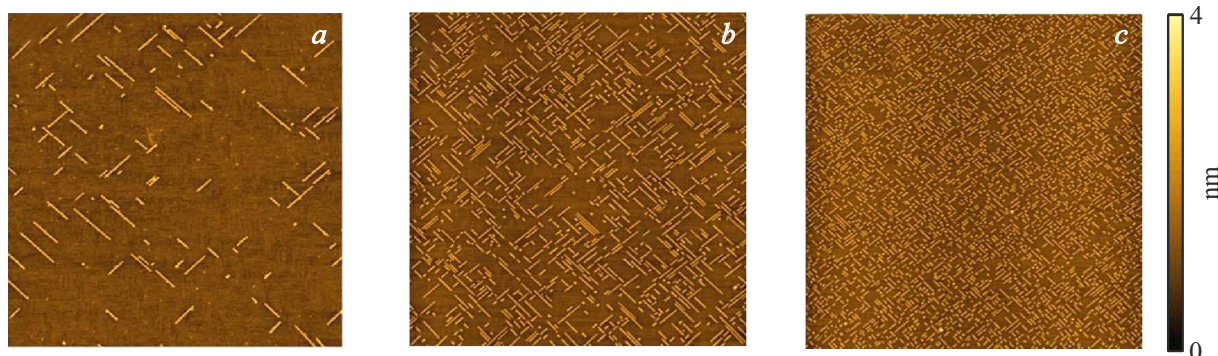


Рис. 2. АСМ снимки различных областей образца, выращенного с градиентом толщины осажденного Ge. *a* — смещение от центра на величину, соответствующую снижению количества Ge на 0.25 ML относительно такового в центре; *b* — центр образца; *c* — смещение от центра на величину, соответствующую увеличению количества Ge на 0.25 ML. Размер всех сканов $3 \times 3\text{ }\mu\text{m}$.

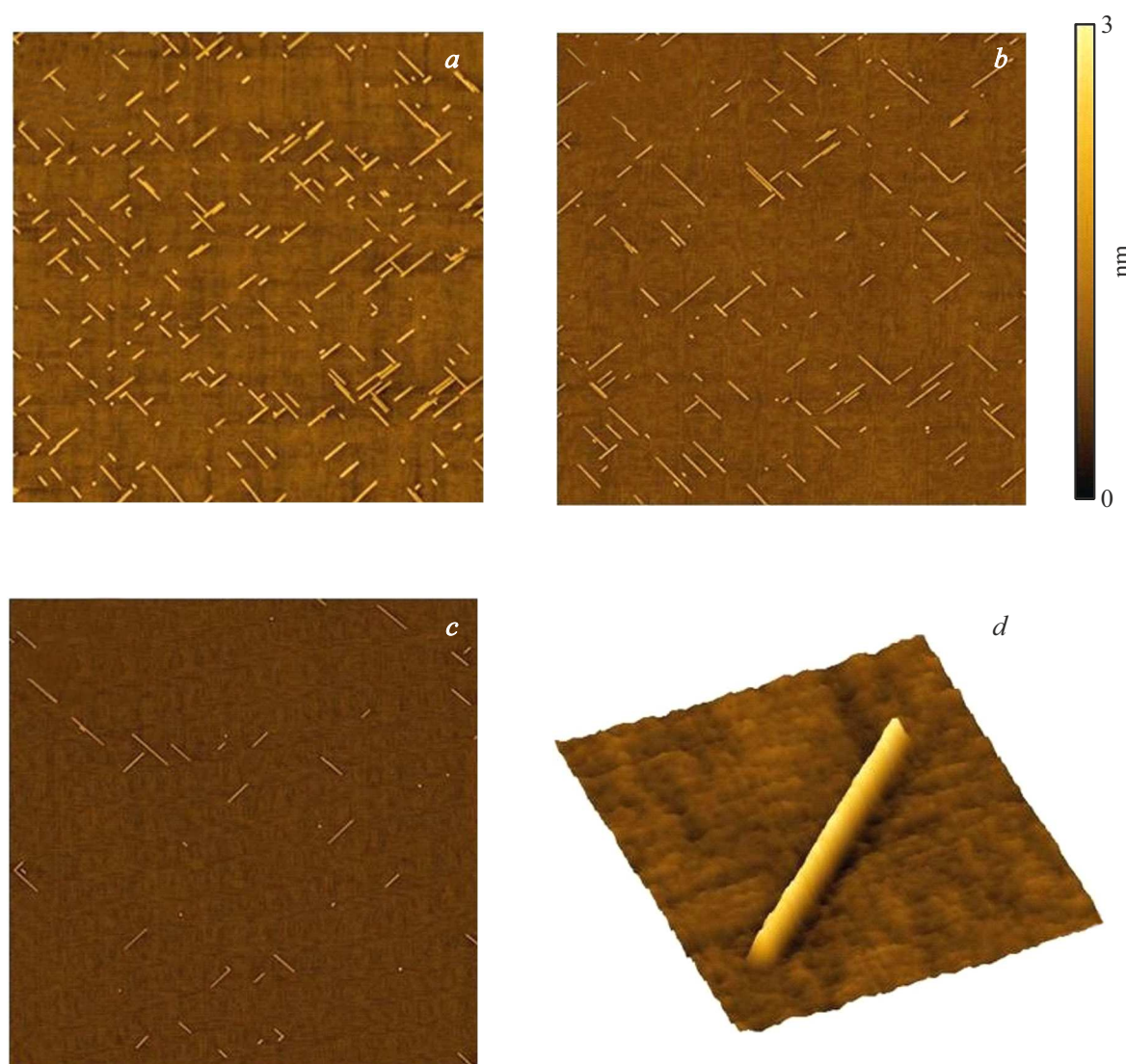


Рис. 3. АСМ снимки структур (в зоне 1 на рис. 1), изготовленных с использованием ЭЛИ по методу, предложенному в настоящей работе. Величина отстройки от критической толщины Δh составляет 0.35 (a), 0.43 (b) и 0.5 ML (c). Размер всех сканов $5 \times 5 \mu\text{m}$. d — 3D АСМ снимок одиночной hut wire, размер скана $0.5 \times 0.5 \mu\text{m}$.

если остановить осаждение материала в этот момент, на поверхности уже будут сформированы островки с достаточно большой плотностью (более 10^{10} cm^{-2} для типичных hut-островков). Поэтому при дальнейшем отжиге образца hut wires не образуются, так как уже нет свободного пространства для удлинения hut-островков в латеральном направлении. Из-за этого для получения hut wires необходимо осадить количество материала немного меньшее, чем h_{crit} . Это количество нельзя определить *in situ* по изменению картины ДБЭ, так как пока h_{crit} не достигнута и плотность зародившихся hut-островков еще мала, картина дифракции соответствует двумерному росту. Его также трудно определить из калибровочных экспериментов из-за флуктуаций скорости испарения Ge из ЭЛИ. Для получения нужного количества осажденного Ge в работе предлагается разделить

Si подложку на две зоны, различающиеся количеством осажденного Ge. Сначала некоторое количество Ge (Δh) осаждается только на часть подложки (зона 2 на рис. 1), при этом другая часть подложки закрыта общей заслонкой (зона 1 на рис. 1). Общая заслонка является типовым решением и, как правило, присутствует в камерах МПЭ. После осаждения слоя Ge толщиной Δh общая заслонка открывается, и Ge осаждается уже на всю подложку до момента наблюдения на ДБЭ перехода к островковому росту в зоне 2. Общая толщина осажденного Ge в зоне 2 будет $h_2 = h_{crit}$, а в зоне 1 — $h_1 = h_{crit} - \Delta h$. При этом в зоне 2 всегда образуются типичные hut-островки большой плотности, а в зоне 1 при правильном подборе величины Δh — редкие hut-островки, которые имеют достаточно пространства для удлинения и могут затем сформировать hut wires при отжиге. В предложенном

методе относительная ошибка из-за флуктуаций потока Ge многократно уменьшается, так как неточное количество осажденного Ge влияет, в основном, только на величину Δh , которая многократно меньше, чем сама величина h_{crit} . Варьируя Δh , можно менять отстройку по толщине от h_{crit} в зоне I подложки и управлять параметрами образующихся hut wires. При этом полезная область подложки, на которой формируются hut wires, может быть многократно больше, чем в случае испарения Ge из наклонно расположенного источника.

С помощью описанного выше подхода были изготовлены образцы с различной величиной отстройки $\Delta h \sim 0.35\text{--}0.5\text{ ML}$ ($h_{crit} \approx 5.3\text{ ML}$). Рост происходил при $T = 535^\circ\text{C}$, постростовый отжиг — при $T = 525^\circ\text{C}$, его длительность была 2–4 ч. Для предотвращения окисления hut wires затем зарастивались слоем Si толщиной 3 nm при $T = 300^\circ\text{C}$ [4]. На рис. 3 показаны АСМ снимки полученных образцов. При $\Delta h = 0.35\text{ ML}$ (рис. 3, а) на поверхности были сформированы короткие hut wires длиной 200–350 nm с плотностью $\sim 10^9\text{ cm}^{-2}$. При увеличении Δh до 0.43 ML плотность hut wires снизилась до $\sim 6 \cdot 10^8\text{ cm}^{-2}$, а длина возросла до 300–500 nm (рис. 3, б). При $\Delta h = 0.5\text{ ML}$ на поверхности образуются достаточно редкие hut wires с плотностью $\sim (1\text{--}2) \cdot 10^8\text{ cm}^{-2}$ и максимальной длиной до 600 nm (рис. 3, в). На рис. 3, д показана одиночная hut wire. Во всех случаях их высота составляла $\sim 1.5\text{ nm}$, что соответствует данным работ [4–6]. Длины порядка 500 nm достаточно для проведения дальнейших технологических операций на отдельной hut wire для создания на ней кубитов [6,8].

Таким образом, предложенный в настоящей работе подход позволяет получать Ge hut wires с контролируемыми параметрами, используя ЭЛИ как стандартный для установок Si/Ge МПЭ источник испарения Ge и метод нанесения в две зоны подложки различного количества Ge. При этом полезная площадь, на которой образуются Ge hut wires, может составлять достаточно большую долю от общей площади подложки. Данные структуры могут быть использованы для создания на их основе дырочных спиновых кубитов, в том числе с применением при росте материалов с пониженным содержанием изотопов ^{29}Si и ^{73}Ge с ненулевым ядерным спином [9] для повышения времен когерентности.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках госзадания ИФМ РАН (FFUF-2024-0019).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] N.P. de Leon, K.M. Itoh, D. Kim, K.K. Mehta, T.E. Northup, H. Paik, B.S. Palmer, N. Samarth, S. Sangtawesin, D.W. Steuerman, *Science*, **372**, eabb282 (2021). DOI: 10.1126/science.abb2823
- [2] G. Scapucci, C. Kloeffer, F.A. Zwanenburg, D. Loss, M. Myronov, J.-J. Zhang, S. De Franceschi, G. Katsaros, M. Veldhorst, *Nat. Rev. Mater.*, **6**, 926 (2021). DOI: 10.1038/s41578-020-00262-z
- [3] H. Watzinger, J. Kukucka, L. Vukušić, F. Gao, T. Wang, F. Schäffler, J.-J. Zhang, G. Katsaros, *Nat. Commun.*, **9**, 3908 (2018). DOI: 10.1038/s41467-018-06418-4
- [4] J.J. Zhang, G. Katsaros, F. Montalenti, D. Scopece, R.O. Rezaev, C. Mickel, B. Rellinghaus, L. Miglio, S. De Franceschi, A. Rastelli, O.G. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 085502 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.085502
- [5] J.J. Zhang, A. Rastelli, O.G. Schmidt, D. Scopece, L. Miglio, F. Montalenti, *Appl. Phys. Lett.*, **103**, 083109 (2013). DOI: 10.1063/1.4818717
- [6] J. Aberl, L. Vukusic, F. Fournel, J.-M. Hartmann, M. Brehm, *Phys. Status Solidi A*, **219**, 2200145 (2022). DOI: 10.1002/pssa.202200145
- [7] G.H. Lu, M. Cuma, F. Liu, *Phys. Rev. B*, **72**, 125415 (2005). DOI: 10.1103/PhysRevB.72.125415
- [8] K. Wang, G. Xu, F. Gao, H. Liu, R.-L. Ma, X. Zhang, Z. Wang, G. Cao, T. Wang, J.-J. Zhang, D. Culcer, X. Hu, H.-W. Jiang, H.-O. Li, G.-C. Guo, G.-P. Guo, *Nat. Commun.*, **13**, 206 (2022). DOI: 10.1038/s41467-021-27880-7
- [9] Д.В. Юрасов, А.В. Новиков, М.В. Шалеев, М.Н. Дроздов, Е.В. Демидов, А.В. Антонов, Л.В. Красильникова, Д.А. Шмырин, П.А. Юнин, З.Ф. Красильник, С.В. Ситников, Д.В. Щеглов, *Письма в ЖТФ*, **50** (10), 22 (2024). DOI: 10.61011/PJTF.2024.10.57767.19813 [D.V. Yurasov, A.V. Novikov, M.V. Shaleev, M.N. Drozdov, E.V. Demidov, A.V. Antonov, L.V. Krasilnikova, D.A. Shmyrin, P.A. Yunin, Z.F. Krasilnik, S.V. Sitnikov, D.V. Sheglov, *Tech. Phys. Lett.*, **50** (5), 56 (2024). DOI: 10.61011/TPL.2024.05.58424.19813].