

05;06

## **Компьютерное моделирование роста когерентных островков в полупроводниковых системах Ge/Si и InAs/GaAs**

© К.Л. Сафонов, В.Г. Дубровский, Н.В. Сибирев, Ю.В. Трушин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет  
Научно-образовательный комплекс „Санкт-Петербургский  
физико-технический научно-образовательный центр“ РАН  
E-mail: trushin@edu.ioffe.ru

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург  
Институт аналитического приборостроения РАН, С.-Петербург

*Поступило в Редакцию 13 ноября 2006 г.*

Проведено компьютерное моделирование зарождения и роста ансамблей когерентных островков нанометровых размеров в полупроводниковых системах Ge/Si и InAs/GaAs при молекулярно-пучковой эпитаксии. Получены зависимости структурных параметров ансамблей островков от условий эпитаксиального роста: температуры подложки и скорости осаждения. Проведено сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными.

PACS: 81.07.-b, 82.20.wt

На сегодняшний день когерентные упругонапряженные нанометровые островки являются крайне перспективными для применения в качестве нуль-мерных нанообъектов с трехмерным ограничением движения носителей заряда [1,2]. Структурные характеристики ансамблей островков определяют технологические параметры полупроводниковых приборов, изготовленных на их основе [2]. К сожалению, задача эффективного выбора условий роста для получения ансамблей островков с заданными характеристиками еще далека от решения. Целью данной работы является теоретическое исследование физических механизмов образования и роста островков и микроскопических процессов, протекающих при эпитаксиальном росте в рассогласованных системах Ge/Si и InAs/GaAs, которые наиболее широко используются в полупроводниковой технологии. Принимая во внимание высокую физическую сложность системы,

затрудняющую использование аналитических методов, в данном случае применяется метод компьютерного моделирования.

В работе [3] приведены результаты экспериментальных исследований ансамблей островков в системах Ge/Si и InAs/GaAs, имеющих относительное рассогласование решеток  $\varepsilon_0$  примерно 4 и 7% соответственно. Характеристики ансамблей когерентных островков, выращенных методом молекулярно-пучковой эпитаксии, исследовались с помощью атомно-силовой и просвечивающей электронной микроскопии, что позволило установить, что полученные островки имеют, как правило, пирамидальную форму с квадратным основанием. Для обеих систем были определены основные структурные параметры ансамблей островков: их средний латеральный размер  $\bar{L}$  и поверхностная плотность  $S$ . Экспериментальные зависимости этих параметров от температуры (для Ge/Si), а также от температуры и скорости осаждения (для InAs/GaAs) представлены на рис. 1 и 2 соответственно.

Согласно [2,4], в полупроводниковых системах с рассогласованием  $\varepsilon_0 > 2\%$  формирование трехмерных упругонапряженных островков на поверхности смачивающего слоя является механизмом частичного снятия упругой энергии, вызванной несоответствием решеток осаждаемого материала и подложки. Такой механизм роста называется механизмом Странского–Крастанова [2]. Под смачивающим слоем подразумевается упругонапряженная пленка осаждаемого материала, имеющая ту же кристаллографическую структуру, что и подложка. Средняя толщина смачивающего слоя обычно не превосходит 1.7 монослоев в системе InAs/GaAs (100) и 5 монослоев в системе Ge/Si (100). Также, в соответствии с [4], существует активационный барьер зарождения островков  $F_{CR}(t)$ , который определяется как максимум свободной энергии образования островка  $F(n, t)$  в зависимости от числа частиц  $n$ , достигаемый при определенном критическом размере  $n_{CR}$  зародыша островка:  $F(n_{CR}, t) \equiv F_{CR}(t)$ . (Для островков Ge и InAs под числом частиц подразумевается число атомов Ge и число молекул InAs соответственно). Островки закритического размера, преодолевшие барьер за счет флуктуаций, растут стабильно за счет присоединения частиц с поверхности смачивающего слоя через периметр их основания [4]. В результате экспериментальных исследований [5] было установлено, что стабильные островки в обеих системах на начальном этапе роста сохраняют свою форму, включая направления граней (типа {105} для Ge/Si и типа {137} для InAs/GaAs).

По определению:

$$C(t) = \int_{n_{CR}}^{\infty} f(n, t) dn, \quad \bar{L}(t) = \frac{1}{C(t)} \int_{n_{CR}}^{\infty} L(n) f(n, t) dn, \quad (1)$$

где  $f(n, t)$  — функция распределения островков по числу частиц  $n$ ,  $L(n)$  — длина ребра квадратного основания островка из  $n$  частиц, при этом:  $L(n) = (6\Omega n \operatorname{ctg} \theta)^{1/3}$ , где  $\theta$  — угол наклона грани островка относительно плоскости (100) и  $\Omega$  — атомный объем в кристаллической фазе.

В соответствии с методом кинетических уравнений [6], для описания эволюции во времени функции распределения  $f(n, t)$  используется следующая система уравнений:

$$\frac{\partial f(n, t)}{\partial t} = W(t) \Big|_{n=n_{CR}} - \frac{\partial}{\partial n} \left[ f(n, t) \frac{dn(t)}{dt} \right], \quad (2)$$

$$\Omega^{-1} \frac{\partial h(t)}{\partial t} = g(t) - \int_{n_{CR}}^{\infty} f(n, t) \frac{dn(t)}{dt} dn, \quad (3)$$

где  $W(t)$  — скорость зарождения островков критического размера  $n_{CR}$ ;  $\frac{dn(t)}{dt}$  — число частиц смачивающего слоя, присоединяющихся к островку из  $n$  частиц в единицу времени;  $\Omega$  — атомный объем;  $h(t)$  — толщина смачивающего слоя;  $g(t)$  — скорость осаждения вещества. Уравнение (2) представляет собой уравнение непрерывности для функции распределения  $f(n, t)$ , в то время как уравнение (3) описывает изменение во времени величины  $h(t)$  за счет процессов осаждения материала и его поглощения системой растущих островков.

Согласно [4,7,8], скорость образования островков  $W(t)$  можно записать как:

$$W(t) = \frac{N^+(t)}{a_0^2} \sqrt{\frac{|F_{CR}''(t)|}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{F_{CR}(t)}{kT}\right), \quad (4)$$

где  $a_0$  — постоянная решетки подложки;  $k$  — постоянная Больцмана;  $T$  — температура подложки;  $N^+(t)$  — количество частиц смачивающего слоя, приходящих к границе зародыша островка из смачивающего слоя в единицу времени.

Величина свободной энергии образования зародыша из  $n$  частиц имеет вид

$$F(n, t) = \Delta E_{VOL}(n, t) + \Delta E_{SURF}(n), \quad (5)$$

где  $\Delta E_{VOL}(n, t)$  — изменение объемной части свободной энергии и  $\Delta E_{SURF}(n)$  — изменение ее поверхностной части.

Выражение для изменения свободной энергии за счет изменения объема может быть записано в виде [9]:

$$\Delta E_{VOL}(n, t) = n\Delta E_0(t) = n \left[ \Omega \lambda \varepsilon_0^2 \xi - \Psi_0 \exp \left( -\frac{h(t)}{h_0 k_0} \right) \right], \quad (6)$$

где  $\Delta E_0(t)$  — изменение полной энергии одной частицы при присоединении к островку;  $\lambda$  — модуль упругости осажденного материала;  $\xi$  — усредненное отношение величин упругой энергии частиц в островке и в полностью напряженной (до рассогласования  $\varepsilon_0$ ) области смачивающего слоя;  $\Psi_0$  — смачивающая энергия непосредственно на поверхности подложки;  $h_0$  — высота одного монослоя;  $k_0$  — параметр, описывающий дальность действия сил смачивания (см. [9]). Существует равновесное значение толщины смачивающего слоя  $h_{eq}$ , такое, что  $\Delta E_{VOL}(h_{eq}) = 0$  (см. [4,9]). Линеаризуя выражение (6) по  $h$  вблизи  $h_{eq}$ , получим

$$\Delta E_{VOL}(n, t) = nB(h(t) - h_{eq}), \quad (7)$$

где константа  $B$  содержит физические параметры, входящие в (6).

С учетом пирамидальной формы островков изменение  $F(n, t)$  за счет изменения поверхности принимает вид [10]:

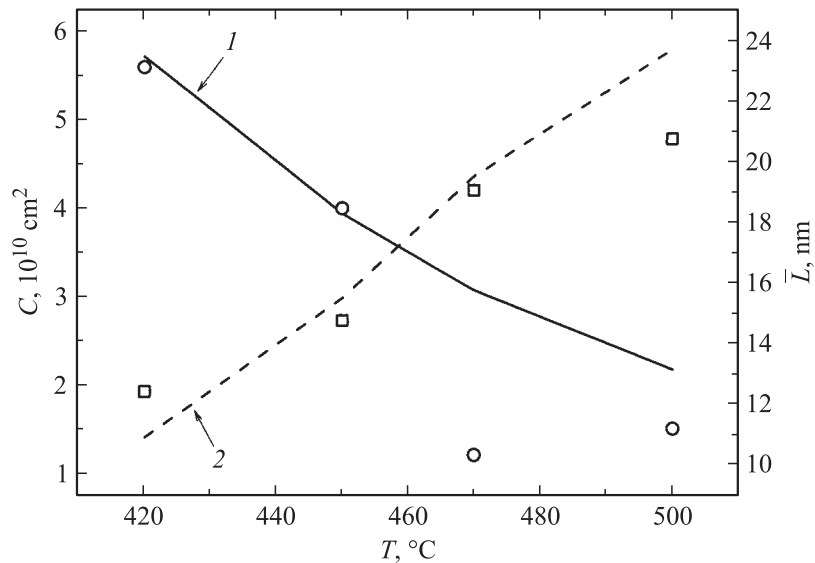
$$\Delta E_{SURF}(n) = \sigma_{CL} L^2(n) / \cos \theta - \sigma_{WL} L^2(n), \quad (8)$$

где  $\sigma_{CL}$  и  $\sigma_{WL}$  — плотности энергии свободной поверхности грани островка и свободной поверхности смачивающего слоя соответственно.

Согласно [9], выражение для потока частиц через периметр островка имеет вид:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \Omega^{-1} \cdot 4L(n) h_0 \frac{\Delta E_0(t)}{l_S} \frac{D}{kT}, \quad (9)$$

где  $4L(n)$  — периметр основания островка;  $l_S$  — расстояние, на которое распространяется упругое поле островка;  $D = D_0 \exp(-E_m/kT)$  — коэффициент диффузии частиц по поверхности смачивающего слоя;  $D_0$  — предэкспоненциальный множитель;  $E_m$  — энергия активации миграции



**Рис. 1.** Расчетные и экспериментальные зависимости поверхностной плотности  $C$  ( $\circ$ , 1) островков Ge/Si и их латерального размера  $\bar{L}$  ( $\square$ , 2) от температуры подложки  $T$  при скорости осаждения  $g = 0.035$  МС/с.  $\circ$ ,  $\square$  — эксперимент, 1, 2 — расчет.

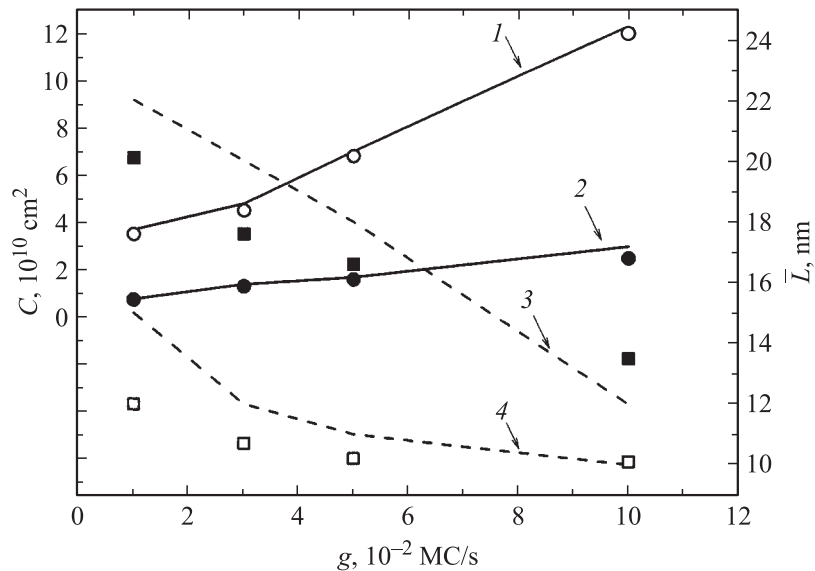
частиц из смачивающего слоя в островок, стимулированной упругими напряжениями.

С другой стороны, число присоединяющихся к островку частиц есть разница потоков частиц к островку и от него:  $\frac{dn(t)}{dt} = N^+(t) - N^-(t)$ , где  $N^-(t)$  — обратный поток частиц из островка в смачивающий слой. При  $h = h_{eq}$  скорость роста островка обращается в ноль, что соответствует  $N^+(t) = N^-(t)$ . Поэтому:

$$N^+(t) = \rho \cdot 4L(n)h_0 \frac{D}{kT} \frac{Bh(t)}{l_s}. \quad (10)$$

Система уравнений (1)–(10) была решена численно методом Гира [11] с использованием следующих значений параметров:

а) для системы Ge/Si [4,5,9,10]:  $a_0 = 3.95 \cdot 10^{-8}$  см,  $h_0 = 1.45 \cdot 10^{-8}$  см,  $\theta = 11.3^\circ$ ,  $k_0 = 1.25$ ,  $\lambda = 1.27 \cdot 10^7$  Н/см<sup>2</sup>,  $\varepsilon_0 = 4.2\%$ ,



**Рис. 2.** Расчетные и экспериментальные зависимости поверхностной плотности  $C$  ( $\circ$ , 1,  $\bullet$ , 2) островков InAs/GaAs и их латерального размера  $\bar{L}$  ( $\blacksquare$ , 3,  $\square$ , 4) от скорости осаждения  $g$  при различных температурах подложки  $T$ :  $\circ$ ,  $\square$  — эксперимент,  $T = 440^\circ\text{C}$ ; 1, 4 — расчет,  $T = 440^\circ\text{C}$ ;  $\bullet$ ,  $\blacksquare$  — эксперимент,  $T = 485^\circ\text{C}$ ; 2, 3 — расчет,  $T = 485^\circ\text{C}$ .

$\Psi_0 = 4.5 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$ ,  $\sigma_{CL} = \sigma_{WL} = 8 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$ ,  $D_0 = 8.8 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,  
 $E_m = 0.55 \text{ eV}$ ,  $l_s = 3.95 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$ ;

б) для системы InAs/GaAs [5,12–14]:  $a_0 = 4.29 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ ,  $h_0 = 3.03 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ ,  $\theta = 25^\circ$ ,  $k_0 = 0.73$ ,  $\lambda = 5.14 \cdot 10^6 \text{ N/cm}^2$ ,  $\varepsilon_0 = 7.2\%$ ,  
 $\Psi_0 = 2.7 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$ ,  $\sigma_{CL} = 6.2 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$ ,  $\sigma_{WL} = 6.7 \cdot 10^{-5} \text{ J/cm}^2$ ,  
 $D_0 = 8.8 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,  $E_m = 0.5 \text{ eV}$ ,  $l_s = 4.29 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$ .

Расчетные зависимости структурных параметров ансамблей когерентных островков (среднего латерального размера  $\bar{L}$  и поверхностной плотности  $C$ ) от температуры подложки и скорости осаждения представлены на рис. 1 и 2. Из рисунков видно удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных зависимостей.

Согласие экспериментальных данных с результатами расчета подтверждает, что предложенная физическая модель образования и роста островков достаточно реально отражает физические механизмы и адекватно описывает микроскопические процессы, протекающие при выращивании когерентных островков в системах Ge/Si и InAs/GaAs методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Из этого следует, что модель роста островков может быть успешно использована для предсказания структурных характеристик выращенных ансамблей островков по заданным условиям роста в различных гетероэпитаксиальных системах.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ № Ри-112.0/001/061, 05-02-16658 и 05-02-16679, а также проекта СПбНЦ РАН.

Н.В.С. благодарен фонду „Династия“ за финансовую поддержку.

## Список литературы

- [1] Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Шукин В.А., Копьев П.С., Алфёров Ж.И., Бимберг Д. // ФТП. 1998. Т. 32. С. 385.
- [2] Bimberg D., Grundmann M., Ledentsov N.N. Quantum Dot Heterostructures. Chichester: Wiley&Sons, 1999.
- [3] Dubrovskii V.G., Cirilin G.E. et al. // J. Cryst. Growth. 2004. V. 267. P. 47.
- [4] Dubrovskii V.G., Cirilin G.E., Ustinov V.M. // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 075 409.
- [5] Costantini G., Rastelli A., Manzano C. et al. // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 85. P. 5673.
- [6] *Современные численные методы* / Ред. Дж. Холл, Дж. Уатт. М.: Мир, 1979.
- [7] Kashchiev D. Nucleation: Basic Theory with Applications. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000.
- [8] Кукушкин С.А., Осипов А.В. // УФН. 1998. Т. 168. С. 1083.
- [9] Osipov A.V., Schmitt F., Kukushkin S.A., Hess P. // Appl. Surf. Sci. 2002. V. 188. P. 156.
- [10] Дубровский В.Г., Мусихин Ю.Г., Цырлин Г.Э., Егоров В.А., Поляков Н.К., Самсоненко Ю.Б., Тонких А.А., Крыжановская Н.В., Берг Н.А., Устинов В.М. // ФТП. 2004. Т. 38. С. 342.
- [11] Hindmarsh A.C. GEAR: Ordinary Differential Equation System Solver. Lawrence Livermore Laboratory, 1974. Report UCID-3000. REV. 3.

- [12] *Kratzer P., Lui Q.K.K., Acosta-Diaz P. et al. // Phys. Rev. B. 2006. V. 73. P. 205 347.*
- [13] *Moll N., Scheffler M., Pehlke E. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. P. 4566.*
- [14] *Xu M.C., Temko Y., Suzuki T., Jacobi K. // Journal Appl. Phys. 2005. V. 98. P. 083 525.*