

06

Переход от двумерных к трехмерным нанокластерам карбида кремния на кремнии

© Ю.В. Трушин, К.Л. Сафонов, О. Амбахер, Й. Пецольт

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

E-mail: trushin@theory.ioffe.rssi.ru

Zentrum für Mikro- und Nanotechnologien, TU Ilmenau,

Postfach 100565, 98684 Ilmenau, BR Deutschland

Поступило в Редакцию 9 апреля 2003 г.

В заметке проведены оценки критического среднего расстояния между растущими нанокластерами карбида кремния на кремнии и времени перехода от двумерного роста к трехмерному при молекулярно-лучевой эпитаксии.

В работах [2] экспериментально было начато исследование роста нанокластеров SiC на кремнии. Также были предприняты попытки теоретического описания этого процесса [3–5]. Однако вопрос о физических причинах перехода от двумерного к трехмерному росту нанокластеров в гетероэпитаксиальной системе на примере SiC на Si еще не рассматривался. В данной заметке предлагается такое качественное рассмотрение, относящееся к ведущимся в настоящее время экспериментам.

На основе экспериментальных данных, полученных в [1], предположим, что на кремнии при температуре роста 660°C при молекулярно-лучевой эпитаксии уже образовались двумерные нанокластеры со средним радиусом R_* , расположенные на среднем расстоянии L друг от друга, т.е. со средней поверхностной концентрацией $C_c \approx 1/L^2$ (рис. 1). Пусть при этом есть термодинамически равновесные концентрации межузельных атомов кремния в областях между нанокластерами (в областях A) $C_i^{eA}(\text{Si})$ и в нанокластерах (в областях I) $C_i^{eI}(\text{Si})$.

В областях A межузлия имеют релаксацию объема $\Delta\Omega_i^A \approx \Omega_{\text{Si}}\text{Si}$, т.е. приблизительно равную объему атома кремния в кремнии. Поскольку для средних атомных параметров карбида кремния ($a_{\text{SiC}} = 4.35 \text{ \AA}$) и кремния ($a_{\text{Si}} = 5.43 \text{ \AA}$) можно записать, что $a_{\text{Si}} > a_{\text{SiC}}$, то можно также

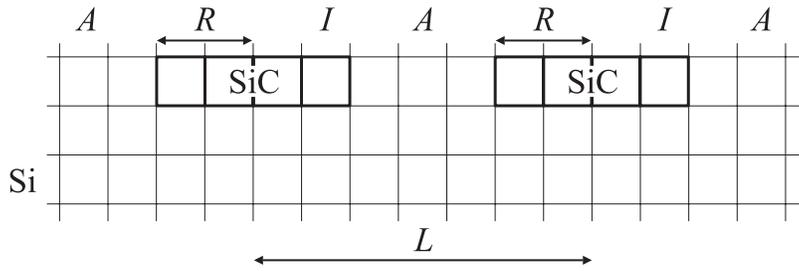


Рис. 1. Схема расположения двумерных нанокластеров SiC (область I) радиусов R на кремнии (область A), L — среднее расстояние между нанокластерами.

полагать, что в структуре SiC (кластер, область I) атому кремния „просторнее“, чем в области A , а значит, его релаксация

$$\Delta\Omega_i^I \approx (a_{\text{SiC}})^3 < \Delta\Omega_i^A. \quad (1)$$

Рассмотрим качественную возможность начала трехмерного роста нанокластера карбида кремния путем скачков атомов Si из области A , где они сжаты, в области I (нанокластеры), где их расположение более свободно.

Из [6–8] можно записать выражения для термодинамически равновесных концентраций межузельных атомов в разных областях $F = A, I$:

$$C_i^{eF} = \chi_i^F \rho_n^{\text{Si}}(F) \exp\{-\varepsilon_i^f(F)/kT\},$$

где

$$\chi_i^F = \exp\{-E_i^F/kT\}, \quad (2)$$

E_i^F — энергия взаимодействия межузельного атома кремния в областях F с областью нанокластера, создающего как в областях между кластерами (области A), так и в самих кластерах (области I) напряжения σ^F , т. е.

$$E_i^F = \Delta\Omega_i^F S p \sigma^F, \quad (3)$$

ρ_n^{Si} — ядерная плотность кремния в области F , $\varepsilon_i^f(F)$ — энергия образования межузлия кремния в области F , k — постоянная Больцмана, T — температура.

Для величин $S\rho\sigma^F$ из [6–9] можно записать

$$S\rho\sigma^A = -\frac{2E}{1-\nu}\eta_C(\varepsilon_A - \varepsilon_I),$$

$$S\rho\sigma^I = \frac{2E}{1-\nu}(1 - \eta_C)(\varepsilon_A - \varepsilon_I),$$

где E — модуль Юнга, ν — коэффициент Пуассона, ε_A и ε_I — относительные деформации вне и внутри нанокластера, η_C — поверхностная доля нанокластеров (области I).

Области A (между нанокластерами) „сжаты“ для межузлий кремния больше, чем сами нанокластеры (области I). Поэтому для оценки нужно учесть, что

$$|E_i^A|/|E_i^I| > 1. \quad (4)$$

Из (3) имеем

$$E_i^A = \frac{2E}{1-\nu}(\varepsilon_1 + \varepsilon')\Delta\Omega_i^A\eta_C, \quad (5)$$

$$E_i^I = -\frac{2E}{1-\nu}(\varepsilon_I + \varepsilon')\Delta\Omega_i^I(1 - \eta_C).$$

Подставляя выражения (5) в соотношение (4), получим с учетом (1)

$$\frac{\Delta\Omega_i^A\eta_C}{\Delta\Omega_i^I(1 - \eta_C)} > 1. \quad (6)$$

Обозначим $\Delta\Omega_i^A/\Delta\Omega_i^I \equiv \alpha$, из (6) имеем

$$\eta_C > 1/(1 + \alpha).$$

Записывая величину $\eta_C \approx \pi R_*^2/L^2$, получим условие для начала скачков кремния из „сжатых“ областей A между нанокластерами на „второй этаж“ однослойных нанокластеров в виде

$$L < \{\pi(1 + \Delta\Omega_i^A/\Delta\Omega_i^I)\}^{1/2}R_* = L_C. \quad (7)$$

Оценим теперь (7) критическую величину расстояния L между нанокластерами, начиная с которого атомы кремния путем выталкивания из областей A будут наращивать второй слой (область I). Для этого воспользуемся значениями релаксаций объемов $\Delta\Omega_i^F$, приведенными

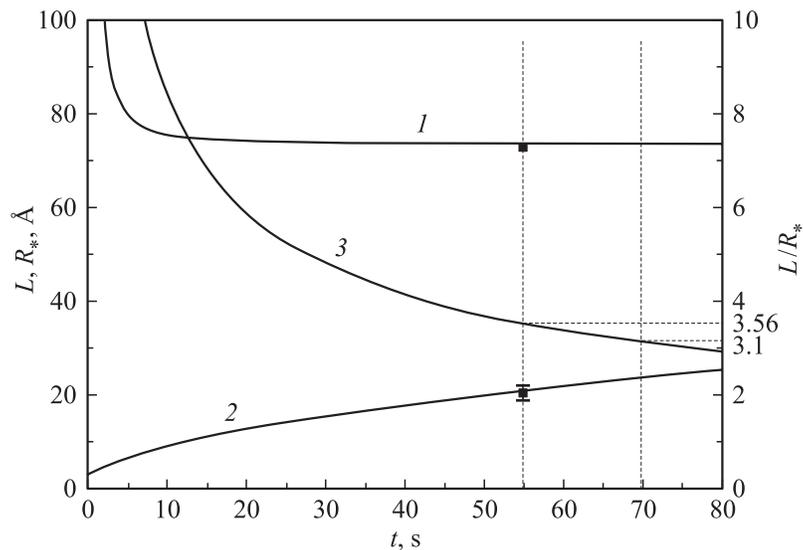


Рис. 2. Расчетные зависимости от времени: 1 — среднего расстояния L между однослойными нанокластерами, 2 — среднего радиуса R_* однослойных нанокластеров, 3 — отношения L/R_* . Темными квадратами показаны экспериментальные значения $L^e = 72.7 \text{ \AA}$ и $R_*^e = 20.4 \text{ \AA}$ для момента времени 55 s.

в начале заметки, откуда получим $\alpha \approx 2$, а значит, по (7) имеем $L_C \approx 3.1R_*$.

Таким образом, при достижении величиной L значения порядка $L_C \approx 3.1R_*$ должен начаться объемный рост нанокластеров.

Обработка электронно-микроскопической фотографии [2,3] формирующихся в процессе роста при молекулярно-лучевой эпитаксии нанокластеров, дала функцию распределения $f(R)$ однослойных нанокластеров по размерам R к моменту времени 55 s, приведенную в [3,4]. Решение системы уравнений для функции $f(R)$, концентраций атомов углерода и двойных кластеров SiC, а также величины радиуса $R(t)$ дает расчетную кривую, см. [3,4]. Совпадение этих двух зависимостей позволяет полагать, что кинетические параметры расчета выбраны достаточно реально.

В результате можно воспользоваться оценкой величины отношения L/R_* , которое к моменту времени 55 s равно 3.56, что соответствует состоянию еще однослойных нанокластеров и что подтверждается экспериментом. При этом экспериментальные значения среднего радиуса нанокластеров и средних значений расстояний между ними составляют 20.4 и 72.7 Å соответственно, а теоретические значения этих же величин получены 20.9 и 73.7 Å (рис. 2, кривые 1 и 2). Эти совпадения являются основанием для прогноза того, что величина $L_C/R_* \approx 3.1$ будет достигнута, исходя из расчетных оценок, при временах порядка 70 s (рис. 2, кривая 3).

Авторы благодарят А.А. Шмидта, В.С. Харламова, Е.Е. Журкина за полезные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 02-0217605, Федеральной программы по поддержке ведущих научных школ и программы ДААД „Internationale Qualitätsnetzwerke (IQN): Ilmenauer Koordinationszentrum“.

Список литературы

- [1] *Attenberger W., Lindner J., Cimalla V., Pezoldt J.* // Mater. Sci. and Eng. 1999. B61/62. P. 544.
- [2] *Scharmann F., Lindner J., Pezoldt J. et. al.* // Thin Solid Films. 2000. V. 380. P. 92.
- [3] *Kulikov D.V., Safonov K.L., Trushin Yu.V., Pezoldt J.* // Modern Condensed Matter Physics. M.: Akadempriint, 2001. P. 299.
- [4] *Safonov K.L., Kulikov D.V., Trushin Yu.V., Pezoldt J.* // Proc. of SPIE. 2002. N 4627. P. 165.
- [5] *Safonov K.L., Kulikov D.V., Trushin Yu.V., Pezoldt J.* // Proc. of the SPb Acad. of Sci. on Strength Problems. 2002. V. 6. P. D4.
- [6] *Трушин Ю.В.* // ЖТФ. 1987. Т. 57. С. 226.
- [7] *Trushin Yu.V.* Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. New York: Nova Sci. Publishers, 1986. 405 p.
- [8] *Трушин Ю.В.* Радиационные процессы в многокомпонентных материалах. Теория и компьютерное моделирование. СПб.: Изд. ФТИ, 2002. 384 с.
- [9] *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.