

06

Исследование начальных стадий роста нанокластеров карбида кремния на подложке кремния

© Ю.В. Трушин, Е.Е. Журкин, К.Л. Сафонов, А.А. Шмидт,
В.С. Харламов, С.А. Королев, М.Н. Лубов, Й. Пецольдт

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
E-mail: trushin@theory.ioffe.rssi.ru
С.-Петербургский государственный политехнический университет
Zentrum für Mikro- und Nanotechnologien, TU Ilmenau
Postfach 100565, 98684 Ilmenau, BR Deutschland

Поступило в Редакцию 12 февраля 2004 г.

Описан комплекс экспериментально-теоретических исследований роста нанокластеров SiC на подложке кремния путем молекулярно-лучевой эпитаксии и приведены начальные результаты таких исследований на ранних стадиях роста нанокластеров.

Особые свойства карбида кремния: высокая температурная устойчивость, высокая теплопроводность, значительное поле пробоя, большая скорость насыщения носителей, устойчивость к радиационному воздействию, возможность работы на высоких частотах и другие — делают этот широкозонный материал крайне привлекательным для применения в микро- и оптоэлектронике [1]. Однако он не получил пока широкого технологического распространения вследствие трудностей в получении высококачественных бездефектных монокристаллических подложек требуемого размера при приемлемых материальных затратах. Перспективным на сегодняшний день способом получения образцов 3С–SiC считается его выращивание методом молекулярно-лучевой эпитаксии на высококачественных подложках Si, для которых полностью развита технология производства. Второй привлекательной областью применения является создание полупроводниковых структур, содержащих квантовые точки на основе SiC. В таких структурах SiC способно выполнять роль квантовых антиточек или туннельных барьеров. При этом из-за несоответствия постоянных решетки Si (5.43 Å) и SiC (4.35 Å)

и температурных коэффициентов расширения в материале возникают упругие напряжения, приводящие к образованию дефектов структуры, существенно ухудшающих характеристики материала. Таким образом, с целью получения высококачественных структур SiC с требуемыми свойствами очень важными являются комплексные (экспериментально-теоретические) исследования процессов, происходящих на начальных стадиях роста слоя на SiC поверхности подложки Si.

Экспериментальное исследование начальных стадий зарождения и роста карбида кремния проводилось в условиях молекулярно-лучевой эпитаксии с помощью испарения углерода электронно-лучевыми испарителями и последующего его осаждения на кремниевые подложки с ориентациями (111) и (100). Параметры осаждения варьировались в широком диапазоне температур подложки и потока углерода к ним. Интервалы температур подложки и потоков углерода составляли от 350 до 1250°С и от 10^{12} до 10^{17} см⁻² соответственно. Структура и морфология полученных образцов, а также кинетика протекающих процессов исследовались с помощью дифракции быстрых электронов на отражение (RHEED), атомно-силовой микроскопии (AFM) и спектральной эллипсометрии (SE) [2]. Кроме того, с помощью AFM определялись концентрация, размеры и форма кластеров. В результате проведенных экспериментальных исследований было установлено, что образование SiC включает в себя следующие основные этапы:

- 1) адсорбция элементарного углерода;
- 2) изменения поверхностной сверхструктуры и формирование твердого раствора Si_{1-y}C_y;
- 3) зародышеобразование SiC в твердом растворе Si_{1-y}C_y;
- 4) переход от квазидвухмерного к трехмерному росту зародышей;
- 5) рост зародышей и коалесценция;
- 6) рост слоя SiC и образование полостей на межфазной границе SiC со стороны Si.

Минимальная температура, необходимая для формирования SiC, составляла 500°С. Пример зародышеобразования, исследованный с помощью AFM, показан на рис. 1 для случая, когда поверхность Si (111) подвергалась осаждению углерода с потоком $5 \cdot 10^{13}$ см⁻² · с⁻¹ при температуре 925°С в течение времен порядка 10 с. В результате образовались трехмерные кластеры, имеющие конусообразную форму со средним радиусом порядка 700 Å, средней высотой порядка 40 Å и поверхностной плотностью около 10^9 см⁻².

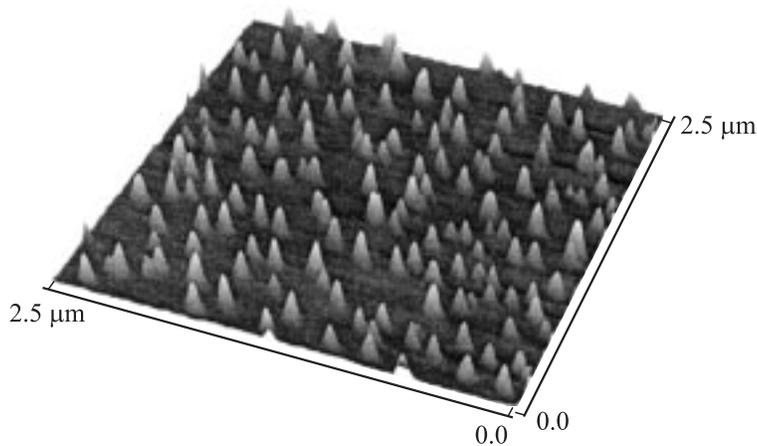


Рис. 1. AFM-изображение поверхности Si(111) после осаждения потоком углерода $5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ в течение 5 s при температуре 925°C .

Физическая модель, описывающая зарождение и рост нанокластеров, должна учитывать микроскопические особенности системы: диффузионные перемещения атомов Si и C по поверхности и в материале подложки, структуру поверхности, упругие напряжения в решетке и др. При этом, однако, крайне тяжело проследить эволюцию макроскопической системы на протяжении макроскопических времен. Поэтому коллективом предлагается одновременное использование как имеющихся экспериментальных методов, так и комплекса компьютерных методов: молекулярной динамики (МД), кинетического Монте-Карло и кинетических уравнений для моделирования роста системы нанокластеров, эволюции их размеров и формы.

В предпринимаемой работе уже изучена возможность использования метода классической молекулярной динамики для оценки энергий активации миграции адатомов на кремниевой поверхности. Метод МД достаточно хорошо описан в литературе (см., например, [3–4]). Его алгоритм сводится к решению уравнений движения Ньютона для заданной системы атомов (модельного кристалла — кристаллита). Детали используемого алгоритма описаны в работах [4–8]. Для вычисления сил, действующих на каждый атом, применялся многочастичный потенциал

Терсова [9], который позволяет с хорошей точностью описывать ряд свойств Si, C и 3C–SiC, в частности, таких, как энергия когезии, постоянная решетки, упругие константы, энергии образования точечных дефектов.

Для того чтобы найти положения адсорбции адатомов (кремния или углерода) на поверхности Si и возможные пути диффузии, необходимо построить так называемую поверхность потенциальной энергии. Локальные минимумы этой поверхности соответствуют возможным местам адсорбции адатома. В качестве первых примеров рассматривались адатомы Si на поверхности Si(100) с реконструкцией (2×1) . Для начальных расчетов был выбран кристалл Si размером $6a_0 \times 6a_0 \times 6a_0$ (a_0 — постоянная решетки) со структурой алмаза, двумерной периодичностью и двумя свободными поверхностями (100), перестроенными в соответствии с симметричной реконструкцией (2×1) (см., например, [10]). Известно, что при данной реконструкции верхний (поверхностный) слой атомов представляет собой ряды димеров вдоль направления $\langle 110 \rangle$. Для оптимизации вычислений на поверхности была выделена минимальная ячейка периодичности. Оси X и Y были направлены перпендикулярно и параллельно рядам димеров соответственно. Поверхность потенциальной энергии вычислялась так, что адатом помещался над одной из заранее заданных позиций (x, y) над определенной ячейкой. Позиции выбирались исходя из равномерной сетки разбиений с шагом $0.04a_0$ (всего 861 точка). Начальная высота адатома над поверхностью — $0.5a_0$. Далее выполнялась процедура минимизации полной потенциальной энергии системы, при этом атомы кристалла могли смещаться произвольно, а адатом мог двигаться лишь в направлении Z (т. е. перпендикулярно к поверхности). Для того чтобы описать диффузию адатома на поверхности, необходимо определить энергию активации для скачка между какими-либо двумя положениями адсорбции. Как следует из ранее проведенных исследований [11], имеются два основных направления возможной диффузии адатомов — вдоль и поперек рядов димеров на поверхности. Анализируя кривые потенциальной энергии вдоль упомянутых двух направлений, нами были получены величины минимальных порогов энергии активации миграции для направления диффузии вдоль ряда димеров (ось Y): для кремния $E_{Si}^m = 0.68$ eV (рис. 2), для углерода $E_C^m = 0.86$ eV. В перпендикулярном направлении (ось X) наименьшая величина барьера оказалась равной 1 eV. Таким образом, диффузия адатомов является анизотропной и преимущественно происходит вдоль направления ряда димеров. Данный

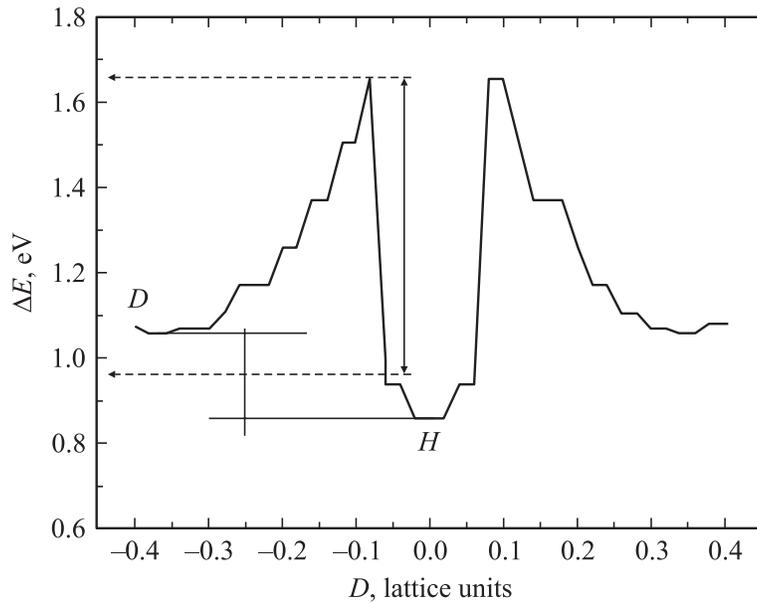


Рис. 2. Изменение потенциальной энергии адатома Si на реконструированной поверхности Si (100) 2×1 для диффузионного пути с минимальным барьером миграции. D и H — обозначения локальных минимумов энергии. Величина барьера указана стрелкой.

вывод так же, как и полученные оценки энергий активации миграции, хорошо согласуются как с результатами расчетов [11], выполненными из первых принципов (ab-initio), так и с экспериментальными данными по сканирующей электронной микроскопии [12] (для сравнения минимальные значения E^m , полученные разными методами, приведены в таблице).

Метод МД не может быть применен для моделирования процесса зарождения кластеров, поскольку из-за больших вычислительных требований характерные временные масштабы моделирования резко возрастают. Поэтому для получения информации о форме и распределении по размерам кластеров на начальных этапах двухмерного роста был использован кинетический метод Монте-Карло [13]. При этом разработана модель образования трехмерных зародышей SiC на Si,

Оценки минимальной энергии активации миграции адатомов Si на поверхности Si(100) 2×1 , выполненные в настоящей работе в рамках МД, методом ab-initio [11] и экспериментальные данные [12]

Энергия активации миграции	MD	Ab-initio	Эксперимент
E_m, eV	0.68	0.60	0.67 ± 0.08

параметры моделирования которой верифицируются путем сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными.

В рамках метода кинетических уравнений для описания эволюции размеров и формы нанокластеров [2,14] предложена физическая модель, описывающая как рост пирамидок, полученных в эксперименте (рис. 1), так и превращение пирамидок при больших выдержках в слой SiC, состоящий из отдельных цилиндров или параллелепипедов („поликристаллический“). В результате столкновений мигрирующих по поверхности кремния адатомов C, осажденных в ходе эпитаксии, образуются зародыши нанокластеров SiC [14]. Сталкиваясь с уже образовавшимися кластерами, адатомы C присоединяются к ним, за счет чего кластеры растут в латеральном направлении. Возрастающие с размером кластера напряжения в областях подложки [15–17] снижают энергетический барьер для перемещения атомов Si и C от подножия кластера к его вершине. Результирующий поток атомов образует и достраивает верхние слои кластеров. Потребность в атомах кремния в верхних слоях подложки компенсируется потоком атомов из приповерхностной области, что приводит к образованию пустот в подложке [18,19]. Описанная модель апробируется на имеющихся экспериментальных данных путем сравнения экспериментальной и теоретической функций распределения кластеров по радиусу и высоте.

Таким образом, коллектив авторов экспериментальными и компьютерными методами начал исследовать процесс роста нанокластеров и слоев карбида кремния на кремнии в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии. В данной публикации уже приведены первые результаты такого комплексного исследования.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 02–02–17610, № 02–02–17605) и проект DAAD — Internationale Qualitätsnetzwerke (IQN): Ilmenauer Koordinationszentrum (ICC).

Список литературы

- [1] *Casady J.B., Johnson R.W.* // Sol. State Electr. 1996. V. 39. N 10. P. 1409.
- [2] *Cimalla V., Pezoldt J., Stauden Th., Schmidt A.A., Zekentes K., Ambacher O.* // Phys. Stat. Sol. C. 2004. V. 1. P. 337.
- [3] *Курсанов В.В.* ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении. М.: Энергоатомиздат, 1990. 304 с.
- [4] *Rapaport D.S.* The Art of Molecular Dynamics Simulation. Cambridge University Press, 1995.
- [5] *Zhurkin E.E., Kolesnikov A.S.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 2003. V. 202. P. 269.
- [6] *Zhurkin E.E., Kolesnikov A.S.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 2002. V. 193. P. 822.
- [7] *Terentiev D.A., Zhurkin E.E.* // Proc. of SPIE. 2003. V. 5127. P. 116.
- [8] *Kharlamov V.S., Zhurkin E.E., Hou M.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 2002. V. 193. P. 538.
- [9] *Tersoff J.* // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 5566; 1990. V. 41. P. 3248.
- [10] *Batra I.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. P. 5048.
- [11] *Brooks G., Kelly P.J., Car R.* // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 1729.
- [12] *Mo Y.M., Kleiner J., Webb M.B., Lagally M.G.* // Surf. Science. 1992. V. 268. P. 275.
- [13] *Schmidt A.A., Safonov K.L., Trushin Yu.V., Cimalla V., Ambacher O., Pezoldt J.* // Phys. Stat. Sol. (a). 2004. V. 201. P. 333.
- [14] *Safonov K.L., Kulikov D.V., Trushin Yu.V., Pezoldt J.* // Proc. of SPIE. 2003. V. 5127. P. 128.
- [15] *Trushin Yu.V.* Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. New York: Nova Science Publishers Inc., 1996. 405 p.
- [16] *Трушин Ю.В.* Радиационные процессы в многокомпонентных материалах. Теория и компьютерное моделирование. СПб: Изд. ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 2002. 384 с.
- [17] *Трушин Ю.В., Сафонов К.Л., Амбахер О., Пецольт Й.* // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. С. 11.
- [18] *Cimalla V., Attenberger W., Lindner J.K.N., Strizker B., Pezoldt J.* // Mater. Sci. Forum. 2000. V. 338/342. P. 285.
- [19] *Cimalla V., Pezoldt J.* // Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1995. V. 355. P. 33.