

# Влияние моновакансий на ширину террас при сублимации с поверхности (111) алмазоподобного кристалла

© А.В. Зверев, И.Г. Неизвестный, Н.Л. Шварц<sup>¶</sup>, З.Ш. Яновицкая

Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

(Получена 26 сентября 2002 г. Принята к печати 4 октября 2002 г.)

С помощью трехмерной модели Монте-Карло исследовалось влияние моновакансий на диффузионный обмен между ступенями на поверхности (111) алмазоподобного кристалла в процессе сублимации. Определялась критическая ширина террас  $L_{cr}$  (расстояние от края ступени до ближайших устойчивых вакансионных островков) в зависимости от соотношения энергий образования адатома на гладкой террасе  $E_n$  и десорбции адатома с террасы  $E_d$  при сохранении суммы этих энергий  $E_{sub} = E_n + E_d$ , которая характеризует сублимацию вещества. На полученных зависимостях  $L_{cr}(E_n)$  имеется четко выраженный максимум. Предложена формула, хорошо описывающая зависимости  $L_{cr}(E_n)$  при различных величинах  $E_{sub}$ . Экстраполяция зависимости  $L_{cr}(E_n)$  для значения  $E_{sub} = 4.2$  эВ, характерного для кремния, позволила провести сравнение модельных результатов с экспериментальными данными других авторов. Предложено объяснение трехкратного увеличения ширины террас, наблюдаемое экспериментально в области температур 1500 К.

## 1. Введение

Интерес к исследованиям деталей диффузии и сублимации на атомарно-гладких поверхностях кремния связан с необходимостью получения объектов нанометровых размеров. В работах [1–11] подробно исследовался процесс сублимации на поверхностях Si(111) и Si(001). Оказалось, что энергия активации этого процесса практически не зависит от ориентации поверхности и составляет  $4.2 \pm 0.2$  эВ [3]. В работах [1,2] обсуждается вопрос об аномально больших размерах террас на сингулярной поверхности Si(111). Известно, что размеры террас на сингулярных поверхностях Si(111) на порядок больше, чем для поверхности Si(001). При температуре выше 1420 К на поверхности Si(001) между параллельными ступенями формируются вакансионные островки, которые разрастаются со временем [2,3]. Скорость сублимации резко возрастает, так как эти островки являются еще одним источником адатомов на поверхности, помимо ступеней. На поверхности Si(111) при температурах 1273–1537 К зарождение вакансионных островков не наблюдается [2]. Впервые экспериментальное наблюдение зарождения вакансионных островков на поверхности Si(111) было проведено в [4] на дне специально подготовленной поверхности в виде кратера с глубокими стенками в диапазоне температур 1290–1595 К. В результате высокотемпературных прогревов на дне кратера формировались кольцевые ступени высотой в один бислой. При сублимации ступени двигались от центра к внешнему краю кратера, и диаметр самой нижней террасы на дне кратера увеличивался. Когда этот диаметр становился равным удвоенной критической ширине террасы, в центре появлялся вакансионный островок. По расстоянию между ступенями на дне кратера определялась критическая ширина террас.

В настоящее время нет данных об экспериментальном наблюдении взаимодействия адатомов с моновакансиями при высоких температурах на неперестроенных поверхностях кремния из-за недостаточного временного или пространственного разрешения сканирующей или электронной микроскопии, а возможно наблюдение только достаточно больших поливакансионных островков [4–6]. Экспериментально образование поливакансионных островков с помощью сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии и атомно-силовой микроскопии наблюдалось в экспериментах по термическому травлению кислородом поверхности Si(111) [7]. Однако результаты этого эксперимента, с более сложными физико-химическими процессами, происходящими на поверхности, не могут быть напрямую использованы для сопоставления с процессами высокотемпературной сублимации.

В работе [8] было высказано предположение о возможности увеличения эффективной длины пробега адатомов за счет взаимодействия с моновакансиями. Приведенное в [8] аналитическое решение системы уравнений с учетом взаимодействия адатомов с моновакансиями получено для условий, близких к равновесию.

За последнее десятилетие появилось заметное число экспериментальных работ по сублимации на поверхности Si(111) [1–6,9–13]. Однако в этих работах не обсуждаются подробности поведения поверхностных вакансий: их подвижность, зависимость концентрации от температуры, энергия образования. Такие важные параметры поверхностных процессов для кремния как энергия натяжения ступени, энергия образования адатома на террасе и энергия его десорбции с террасы получены из приблизительных оценок. Неясен вопрос о возможном обмене поверхностных моновакансий с объемными, очень подвижными вакансиями [14], а также не исследовался вопрос о критическом размере поливакансионного островка, который должен существовать аналогично

<sup>¶</sup> E-mail: natasha@spy.isp.nsc.ru

тому, как существует критический размер атомного островка [15]. Все эти вопросы для поверхности (111) кремния остаются не до конца изученными. Недавно появилась работа, где исследовались диффузия поверхностных вакансий и взаимодействие двух моновакансий на поверхности Ge(111) [16]. В работе [17] на примере ряда металлических поверхностей показано, что образование пары адатом–вакансия оказывается энергетически выгоднее образования просто вакансии. В этой работе отмечается, что процесс формирования поверхностных вакансий очень сильно отличается от процесса возникновения объемных вакансий.

В настоящей работе с помощью численного моделирования исследовано влияние моновакансии на ширину устойчивых террас при сублимации на поверхности (111) алмазоподобного кристалла.

## 2. Модель

При исследовании процесса образования вакансионных островков в процессе сублимации нами была использована трехмерная модель Монте-Карло, позволяющая моделировать эпитаксиальный рост и сублимацию на поверхности (111) алмазоподобного кристалла [18].

Из ступеней на широкие террасы поступают адатомы. Диффузия и десорбция адатомов происходит с энергиями активации  $E_{dif}$  и  $E_d$ . В модели моновакансия представляет собой отсутствие одного атома в верхнем монослое бислоя. Адаомы на реальной поверхности (111) занимают не те объемные места, что в модели, однако это оказывается не принципиальным, если энергию образования адатома и энергию его десорбции задавать независимо друг от друга. Поверхность (111) кремния при высоких температурах устроена несколько сложнее, чем в нашей модели [19,20], однако основные процессы, происходящие при сублимации, в модели отражены и к ней применимы представления, развитые в работе [8].

Считается, что сублимация с поверхности (111) происходит в 2 этапа: выход атома из ступени на гладкую террасу с последующим испарением. При образовании моновакансии на террасе также появляется дополнительный адатом. Мы предположили, что атом, вышедший из ступени, может не испариться, а попасть в вакансию, понизив временно концентрацию вакансий на поверхности. Так как вакансии образуются на поверхности с постоянной скоростью, то вновь образованная вакансия явится поставщиком нового адатома. По мере удаления от ступени концентрация адатомов уменьшается, а концентрация вакансий растет. При достижении некоторой критической концентрации вакансий начинается образование вакансионных островков (поливакансий). Благодаря градиенту концентрации адатомы по террасе могли бы передаваться „по эстафете“, что привело бы к большей эффективной длине пробега адатомов.

Моделирование проведено в предположениях аддитивности взаимодействия атомов со своими соседями. При этом очевидна связь между энергией образования адатома на террасе и энергией образования моновакансии, бивакансии и т.д. Энергия десорбции адатома бралась независимой от энергии связей в кристалле. Предположения приняты и для взаимодействия адатом–вакансия: встречаясь, они рекомбинируют с единичной вероятностью. В этих предположениях исследован вопрос о том, как меняется критическая ширина террас при изменении соотношения энергии образования адатома  $E_n$  и энергии его испарения  $E_d$  при сохранении суммы этих энергий, которая характеризует энтальпию испарения.

Проведенное нами численное моделирование эквивалентно решению уравнений диффузии, описывающих поведение моновакансий и адатомов на поверхности (111) алмазоподобного кристалла:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \Lambda \nabla^2 \sigma - \Lambda \nabla^2 \sigma - K \rho \sigma - \sigma v e^{\frac{-3E_n}{k_B T}} + [1 - N_{\text{step}}(r, t)] v e^{\frac{-3E_n}{k_B T}}, \quad (1a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho - K \rho \sigma - \rho v e^{\frac{-E_d}{k_B T}} + [1 - N_{\text{step}}(r, t)] v e^{\frac{-3E_n}{k_B T}} + \sigma v e^{\frac{-3E_n}{k_B T}} + N_{\text{step}}(r, t) v e^{\frac{-2E_n}{k_B T}} - K N_{\text{step}}(r, t) \rho, \quad (1b)$$

где  $\rho$  — концентрация моновакансий,  $\Lambda$  — коэффициент диффузии моновакансий,  $\rho$  — концентрация адатомов,  $D$  — коэффициент диффузии адатомов,  $K$  — скорость рекомбинации адатома с вакансией,  $v$  — частота Дебая,  $N_{\text{step}}(r, t)$  — число атомных мест на ступенях, отнесенное к площади поверхности.

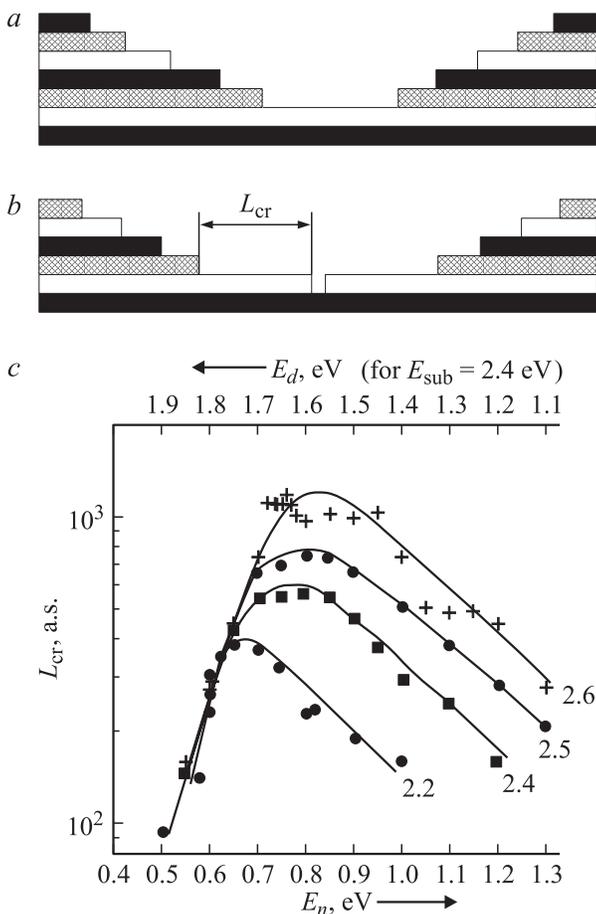
В уравнении (1a) первый член соответствует диффузии моновакансий вдоль поверхности, второй — диффузии моновакансий в глубь кристалла, третий — рекомбинации адатомов с моновакансиями, четвертый — образованию поливакансии, пятый — генерации моновакансий. В уравнении (1b) первый член соответствует поверхностной диффузии адатомов, второй — рекомбинации адатомов с моновакансиями, третий — десорбции адатомов с террасы, четвертый — генерации адатомов за счет образования моновакансий, пятый — генерации адатомов за счет образования поливакансий или изменения их размеров, шестой — генерации адатомов за счет выхода атомов из ступеней, седьмой — встраиванию адатомов в ступень.

В отличие от [8] в системе уравнений, решаемых с помощью модели Монте-Карло, учитывается образование поливакансий, встраивание адатомов в ступень и диффузия моновакансий в глубь кристалла, а также отсутствует условие близости концентраций адатомов и моновакансий к равновесным значениям.

### 3. Результаты вычислительного эксперимента

Для исследования процесса зарождения вакансионных островков была выбрана поверхность, представляющая собой полосу, как бы вырезанную из центральной части круглого кратера, созданного на поверхности Si(111) [4,5]. Поверхность представляла собой полосу шириной от 10 до 300 атомных мест (а.м.) длиной до 3000 а.м. Модельные результаты были получены в диапазоне температур от  $T = 1350$  до 1550 К.

На рис. 1, *a, b* схематически представлены профили модельной поверхности, на которых критическая ширина террас  $L_{cr}$  измерялась как расстояние между ступенями во втором атомном слое при образовании устойчивого вакансионного островка на нижней террасе. Критическая ширина определялась как ширина террас, ограниченных самыми нижними ступенями, после возникновения вакансионного островка на нижней сплош-



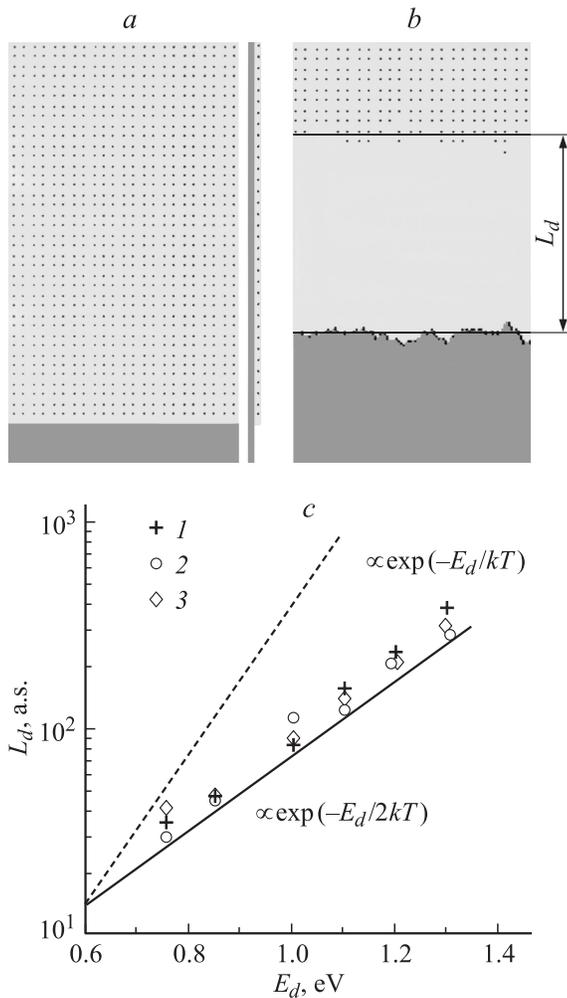
**Рис. 1.** *a, b* — профили модельных поверхностей: *a* — исходная поверхность, *b* — после образования вакансионного островка на нижней террасе в процессе сублимации; *c* — зависимости критической ширины террасы  $L_{cr}$  (в единицах атомных мест) от энергии выхода атома из ступени  $E_n$  при разных значениях энергии сублимации  $E_{sub} = E_n + E_d$ , рассчитанные с помощью модели Монте-Карло. Величина  $E_{sub}$  в эВ указана около кривых.

ной террасе. Размеры террас в более высоких атомных слоях задавались меньшими, чем  $L_{cr}$ , чтобы на них не образовывались вакансионные островки. Погрешность модельных данных по  $L_{cr}$  составляла  $\pm 10\%$ .

На рис. 1, *c* приведены зависимости критической ширины террасы от  $E_n$  для разных значений  $E_{sub} = E_n + E_d$ . Видно, что все кривые имеют колоколообразную форму, а величина максимума растет с увеличением  $E_{sub}$  и смещается в сторону больших  $E_n$ . Если бы  $L_{cr}$  определялась только длиной свободного пробега адатома до испарения, критическая ширина террас должна была бы монотонно уменьшаться с ростом  $E_n$ , так как при этом падает величина  $E_d$ . Однако существует область значений  $E_n$ , в которой  $L_{cr}$  растет, несмотря на уменьшение длины свободного пробега адатома до испарения  $L_d$ . В области возрастания зависимости  $L_{cr}(E_n)$  не зависит также от  $E_{sub}$ , т.е. от  $E_d$ . Такое поведение  $L_{cr}$  можно объяснить влиянием вакансий.

Был проведен специальный вычислительный эксперимент для определения  $L_d$ , длины свободного пробега адатома до испарения без тепловой генерации моновакансий. На рис. 2, *a, b* представлена методика определения  $L_d$ , а на рис. 2, *c* зависимости  $L_d(E_d)$ . Параметр  $E_n$  выбирался таким образом, чтобы не происходила тепловая генерация моновакансий. На исходной модельной поверхности равномерно распределялись моновакансии с концентрацией порядка четверти монослоя (МС), а концентрация адатомов при этом равнялась нулю. При высокой температуре адатомы, поставляемые ступенью, диффундировали по поверхности, рекомбинируя с заранее созданными моновакансиями. Со временем рядом со ступенью образовывалась обедненная моновакансиями область стационарной ширины. Ширина этой области обеднения и является длиной свободного пробега адатома до испарения. Как и следовало ожидать,  $L_d$  экспоненциально возрастает пропорционально  $\exp(E_d/2kT)$ . На рис. 2, *c* приведены значения  $L_d$ , полученные на модельных поверхностях разной ширины. Видно, что результат не зависит от ширины поверхности для  $d$  от 10 атомных мест (а.м.) и более. Это позволило проводить расчеты на узких поверхностях, что сильно сократило время вычислений. Сравнение значений  $L_d$  (рис. 2, *c*) с  $L_{cr}$  (рис. 1, *c*) в области энергий правее максимумов зависимостей  $L_{cr}(E_n)$  показало, что на спадающих участках  $L_{cr}$  совпадает с длиной свободного пробега адатома до испарения  $L_d$ .

В области самых низких значений  $E_n$  ( $E_n = 0.4$  эВ) значение  $E_d$  велико и темп испарения адатомов много меньше темпа их генерации со ступеней и террас. В этом случае концентрации вакансий и адатомов на террасе велики и отсутствуют градиенты концентраций. Критический размер вакансионных островков весьма велик и составляет более 10 атомных мест. Плотность устойчиво растущих вакансионных островков, расстояние между ними, а также между островками и ступенью определяется только темпом генерации вакансий и критическим размером вакансионного островка аналогично



**Рис. 2.** *a* — исходная модельная поверхность с заданными вакансиями (план и сечение); *b* — обедненная вакансиями стационарная зона перед движущейся ступенью для определения длины свободного пробега адатомов до испарения ( $L_d$ ); *c* —  $L_d(E_d)$  для модельной поверхности различной ширины  $d$ , в единицах атомных мест (длина  $L = 1500$  а.м. для всех случаев): 1 — 10, 2 — 50, 3 — 300.

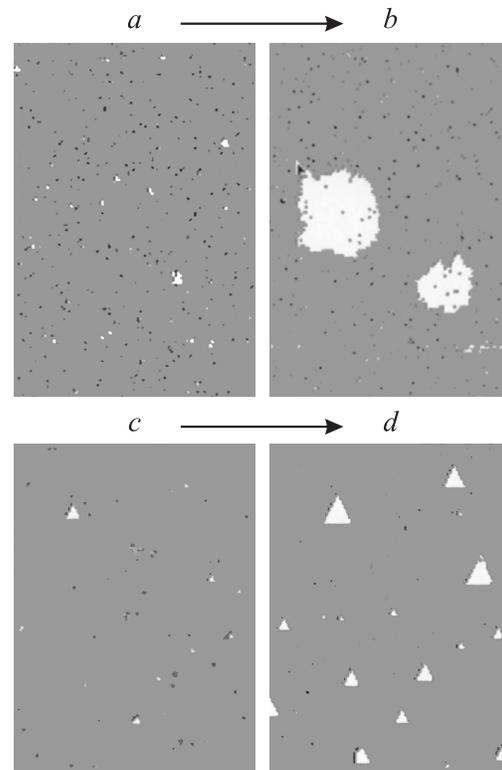
тому, как это происходит при двумерном зарождении атомных островков в соответствии с классической теорией зарождения [15].

С ростом  $E_n$  темп генерации вакансий на террасе уменьшается, плотность их падает и поток адатомов со ступеней начинает превышать поток с террасы. Вблизи ступеней образуются градиенты концентраций адатомов и вакансий. Понижение концентрации вакансий вблизи ступеней отодвигает от ступени место зарождения вакансионных островков,  $L_{cr}$  растет. Максимальная длина пробега адатомов  $L_d$ , соответствующая заданной энергии десорбции  $E_d$ , устанавливается, когда поток адатомов с террасы в ступень становится пренебрежимо мал по сравнению с потоком адатомов из ступени.

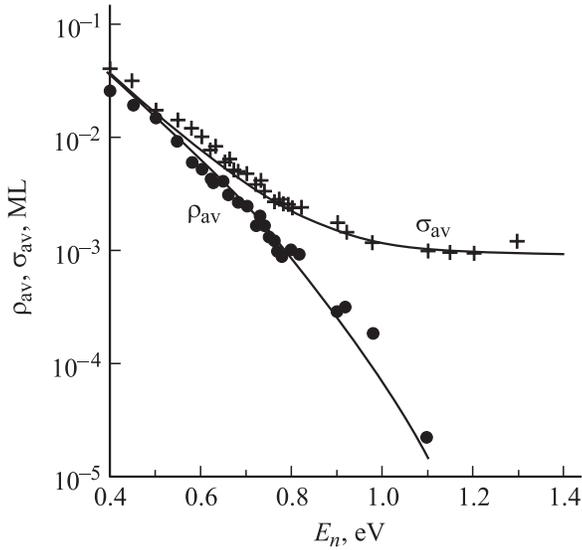
Как следует из рис. 1, *c*, одно и то же значение критической ширины террасы для заданной энергии

сублимации соответствует двум наборам значений  $E_n$  и  $E_d$ . На рис. 3 представлены виды участков модельной поверхности на расстояниях больше  $L_{cr}$  для двух значений энергии слева и справа от максимума  $L_{cr}(E_n)$ , соответствующих  $L_{cr} = 150$  а.м. При малых значениях  $E_n$  (рис. 3, *a*) на поверхности наблюдается большое количество адатомов и вакансий. Причем наряду с моновакансиями присутствует множество адатомов и мелких вакансионных островков докритического размера. Форма стабильных вакансионных островков близка к круглой. При самых малых использованных нами значениях  $E_n = 0.4$  эВ устойчивые вакансионные островки образуются крайне медленно (после большого числа актов испарения) и их размеры малы, хотя плотность велика. Это связано с одновременным возникновением мелких атомных островков, образующихся при большой концентрации адатомов, и с активным обменом атомами между вакансионными и атомными островками. Эта ситуация похожа на предплавление, предполагаемое в экспериментальных работах [4,5,21,22].

На рис. 3, *c, d* представлен участок модельной поверхности на расстоянии от ступеней больше  $L_{cr}$  при больших значениях  $E_n$ . Здесь зарождается сразу много устойчивых растущих вакансионных островков, так как критический размер вакансионного островка примерно равен бислойной вакансии, состоящей из одной вакансии в нижнем монослое и 3 соседних вакансии в верхнем монослое. Поливакансионные островки, обра-



**Рис. 3.** Развитие поливакансионных островков на расстояниях от ступеней больших, чем  $L_{cr}$  ( $E_{sub} = 2.2$  эВ): *a, b* — малые значения  $E_n$ , *c, d* — большие значения  $E_n$ .



**Рис. 4.** Зависимости от энергии усредненных по площади равновесных концентраций адатомов  $\rho_{av}$  и моновакансий  $\sigma_{av}$ : точки — моделирование, кривые — расчет по формулам (3). Концентрации  $\rho_{av}$  и  $\sigma_{av}$  приведены в единицах монослоев (ML).

зующиеся на террасах, имеют характерную для поверхности (111) треугольную форму.

На рис. 4 представлены зависимости от  $E_n$  усредненных по площади концентраций адатомов и моновакансий в стационарных условиях постоянства этих концентраций во времени. Стационарные условия практически реализуются непосредственно перед образованием вакансионных островков. Концентрации адатомов и вакансий близки по своим значениям и убывают с ростом  $E_n$  при малых значениях  $E_n$  по одинаковому закону. Расхождения между ними начинаются при значениях  $E_n$ , соответствующих спадающим участкам зависимостей  $L_{cr}(E_n)$ .

Упрощенная система кинетических уравнений, описывающая средние по площади концентрации адатомов ( $\rho_{av}$ ) и моновакансий ( $\sigma_{av}$ ) на поверхности кристалла, имеет вид

$$\frac{\partial \rho_{av}(t)}{\partial t} = N_{step} e^{\frac{-E_n}{k_B T}} + e^{\frac{-2E_n}{k_B T}} - K_1 \rho_{av} \sigma_{av} - K_2 \rho_{av} N_{step} - C \rho_{av} e^{\frac{-E_d}{k_B T}}, \quad (2a)$$

$$\frac{\partial \sigma_{av}(t)}{\partial t} = e^{\frac{-2E_n}{k_B T}} - K_1 \rho_{av} \sigma_{av}. \quad (2б)$$

Здесь первый член в правой части уравнения (2a) соответствует генерации адатомов из ступени, второй — генерации из террасы при образовании моновакансий, третий член — рекомбинации адатомов с моновакансиями, четвертый — встраиванию адатомов в ступень и пятый — испарению адатомов. В уравнении (2б) первый член определяет генерацию моновакансий, а второй рекомбинацию вакансий с адатомами. Все коэффициенты системы (2a), (2б) нормированы на  $\nu$ .

Аналитическое решение этой системы уравнений в стационарном случае, когда левые части уравнений равны нулю и  $K_2 = K_1 = 1$  (вероятности встраивания адатома в ступени и вакансии равны 1), имеет вид

$$\rho_{av}(t) = \frac{N_{step} e^{\frac{-E_n}{k_B T}}}{N_{step} + C e^{\frac{-E_d}{k_B T}}},$$

$$\sigma_{av}(t) = (N_{step})^{-1} e^{\frac{-E_n}{k_B T}} \left( N_{step} + C e^{\frac{-E_d}{k_B T}} \right). \quad (3)$$

На рис. 4 вместе с модельными приведены результаты расчетов по формулам (3) для заданных значений  $N_{step}$  и  $E_{sub}$ . При больших значениях  $E_d$  (малых  $E_n$ ) экспоненциальным слагаемым в знаменателе можно пренебречь и концентрации адатомов и моновакансий равны и имеют одинаковую экспоненциальную зависимость. При малых значениях  $E_d$  (больших  $E_n$ ) кривые расходятся. Теоретические кривые совпадают с модельными расчетами для значения  $C = 1200$ .

Зависимости  $L_{cr}(E_n)$ , представленные на рис. 1, c, были рассчитаны для значений энергий сублимации, существенно меньших, чем для кремния. Для расчета таких зависимостей при  $E_{sub} = 4.2-4.4$  эВ потребовалось бы нереально большое время из-за слишком малых вероятностей испарения адатомов. Поэтому мы аппроксимировали рассчитанные кривые эмпирической аналитической функцией  $f$ :

$$f = \alpha \left( \frac{1}{\beta} e^{\frac{-E_d}{2k_B T}} + e^{\frac{-3E_n}{2k_B T}} \right)^{-1}. \quad (4)$$

Функция  $f$  хорошо аппроксимирует модельные зависимости  $L_{cr}(E_n, E_d)$  при параметрах  $\alpha = 0.2$  и  $\beta = 5$ . Аналитическое выражение для критической ширины террасы может быть записано в виде

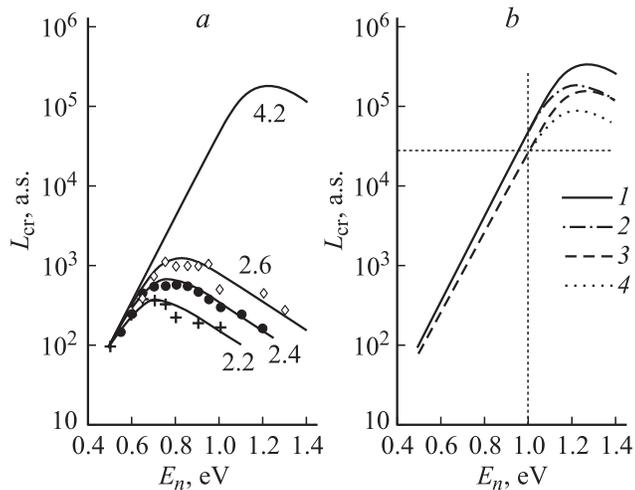
$$L_{cr} = \alpha(W_1 + W_2),$$

где  $W_1 = \exp(-3E_n/2kT)$  — вероятность испарения адатома с поверхности, а  $W_2 = \beta^{-1} \exp(-E_d/2kT)$  — вероятность рекомбинации адатома с вакансиями. Таким образом, время жизни адатома на поверхности  $\tau$  определяется временем жизни до испарения  $\tau_1$  и временем жизни до рекомбинации с моновакансиями  $\tau_2$ :

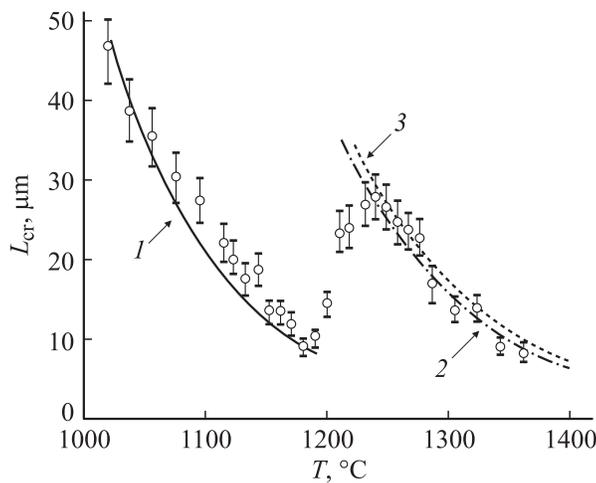
$$\tau = \alpha(1/\tau_1 + 1/\tau_2)^{-1},$$

где  $\tau_1 = \beta \exp(E_d/2kT)$  и  $\tau_2 = \exp(3E_n/2kT)$ .

С помощью подобранной функции была построена зависимость  $L_{cr}(E_n)$  для значений энергии сублимации, соответствующей кремнию. Зависимости  $L_{cr}(E_n)$ , полученные в результате вычислений по методу Монте-Карло и по формуле (4), приведены на рис. 5, a. Полученные теоретические кривые  $L_{cr}(E_n)$  на рис. 5, b для  $E_{sub} = 4.2-4.4$  эВ соответствуют кремнию. Пунктирная горизонтальная линия отмечает экспериментальное значение критической ширины террас при температуре 1190°C (1463 K)  $L_{cr} = 2.8 \cdot 10^4$  а.м. (10 мкм) [5].



**Рис. 5.** *a* — зависимости критической ширины террас  $L_{cr}$  от энергии  $E_n$  для различных значений  $E_{sub}$ , указанных цифрами около кривых. Точки — моделирование, кривые — расчет по формуле (4) при  $T = 1400$  К на рис. *a*. Параметры расчетов на рис. *b*: 1 —  $E_{sub} = 4.4$  эВ,  $T = 1400$  К; 2 —  $E_{sub} = 4.2$  эВ,  $T = 1400$  К; 3 —  $E_{sub} = 4.4$  эВ,  $T = 1463$  К; 4 —  $E_{sub} = 4.2$  эВ,  $T = 1463$  К.



**Рис. 6.** Экспериментальные зависимости  $L_{cr}$  от температуры на поверхности Si(111) (точки из работы [5]) и теоретические зависимости (4). Параметры расчетов: 1 —  $E_{sub} = 4.3$  и  $4.4$  эВ,  $E_n = 1.0$  эВ; 2 —  $E_{sub} = 4.4$  эВ,  $E_n = 1.15$  эВ; 3 —  $E_{sub} = 4.3$  эВ,  $E_n = 1.2$  эВ.

Пересечение этой прямой с теоретической кривой, построенной для этой температуры, позволяет определить значение  $E_n = 1.0$  эВ. Это значение соответствует возрастающему участку зависимости  $L_{cr}(E_n)$ .

С этим значением  $E_n$  по формуле (4) была построена температурная зависимость критической ширины террас. На рис. 6 приведена экспериментальная температурная зависимость  $L_{cr}(T)$ , взятая из работы [5] (точки). Минимальное значение  $L_{cr}(1190^\circ\text{C}) = 10$  мкм послужило опорной точкой для определения предэкспоненты в зависимости  $L_{cr}(T)$  при  $E_n = 1.0$  эВ. На этом же

рисунке сплошными линиями приведены рассчитанные нами кривые для двух температурных интервалов. Ниже температуры  $1190^\circ\text{C}$  значение  $E_n = 1.0$  эВ дает хорошее согласие теории с экспериментальными данными. Некоторая неопределенность значений  $E_{sub}$  не играет роли в этой области температур. Для совпадения теории и эксперимента в высокотемпературной области  $L_{cr}(T)$  требуется изменение  $E_n$  на  $0.1$ – $0.2$  эВ и положение теоретических кривых зависит от  $E_{sub}$ . Для хорошего согласия теоретической кривой с экспериментальными точками были подобраны значения  $E_n$ : для  $E_{sub} = 4.4$  эВ —  $E_n = 1.15$  эВ, а для  $E_{sub} = 4.3$  эВ —  $E_n = 1.2$  эВ.

## 4. Обсуждение

Существуют экспериментальные факты, указывающие на структурный переход на поверхности Si(111) в области температур  $1200^\circ\text{C}$ : для получения гладких ступеней на вицинальных поверхностях требуется нагрев выше  $1200^\circ\text{C}$  [4]; получено увеличение динамического коэффициента натяжения ступеней при повышении температуры в области  $T > 1300$  К [11]; наблюдалось возрастание рассеяния ионов средних энергий от поверхности Si(111) при  $1470$  К [23]; в этой же области температур получено изменение направления тока, приводящее к эшелонированию ступеней [9], а при температуре около  $1500$  К с помощью кривых качания обнаружена новая поверхностная фаза [21–23]. Полученные в результате моделирования зависимости  $L_{cr}(E_n, E_d)$  позволяют высказать гипотезу для объяснения скачкообразного увеличения критической ширины террасы в области температур  $T = 1200^\circ\text{C}$ , наблюдаемого в экспериментальных работах [4,5].

Совпадение экспериментальных результатов и модельных расчетов, продемонстрированное на рис. 6, позволяет сформулировать предположение о том, что перестройка поверхности в области температур  $1200^\circ\text{C}$  сопровождается изменением соотношения  $E_n$  и  $E_d$ , так что  $E_n$  становится больше, а  $E_d$  — меньше. Модельные расчеты показывают, что достаточно увеличения  $E_n$  на  $0.1$ – $0.2$  эВ, чтобы объяснить трехкратное увеличение ширины террас, наблюдаемое экспериментально. Дальнейшее падение ширины террас с температурой выше  $1200^\circ\text{C}$  может свидетельствовать об установившемся новом соотношении  $E_n$  и  $E_d$ . Причиной изменения  $E_n$  и  $E_d$ , возможно, становится ослабление связи адатомов с поверхностью в частично расплавленном слое и уменьшение  $E_d$ . Это приведет к увеличению  $E_n$ , чтобы сохранилась величина  $E_n + E_d$ , так как изменения величины  $E_{sub} = 4.2 \pm 0.2$  эВ экспериментально не наблюдается.

## 5. Заключение

Проведенные исследования зависимости ширины террас от соотношения  $E_n$  и  $E_d$  при постоянстве их суммы  $E_{sub}$  показали, что эта зависимость немонотонна

и имеет максимум при некотором значении  $E_n$ , зависящем от величины суммы. Высказанные первоначально предположения об увеличении критической ширины террас из-за взаимодействия адатомов и моновакансий не оправдались. Хотя перемещение атомов на дальние расстояния из-за этого взаимодействия и существует, но не оно одно определяет критическую ширину террас.

Взаимодействием моновакансий с адатомами объясняется возрастающий участок зависимости критической ширины террасы от энергии связи адатомов. Получена аналитическая формула для описания зависимости критической ширины террасы от энергии десорбции и энергии связи атомов для заданной энергии сублимации вещества. Из сравнения имеющихся экспериментальных данных с расчетными оценена энергия связи атома и энергия десорбции с поверхности Si(111) при температурах 1000–1200°C  $E_n = 1$  эВ, а при температуре выше 1270°C величина  $E_n$  увеличивается на 0.1–0.2 эВ. Выполненный в работе численный эксперимент позволил предложить объяснение экспериментального поведения критической ширины террасы в области температур выше 1200°C.

Данная работа проведена при поддержке РФФИ (№ 02-02-17726), программы ФЦНТ „Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития науки и технологии гражданского направления“ (№ 2-МПН-02) и направления „Поверхностные атомные структуры“ (№ 40.012.1.1.1153).

## Список литературы

- [1] C. Alfonso, J.C. Heyraud, J.J. Metois. Surf. Sci. Lett., **291**, L745 (1993).
- [2] J.M. Bermond, J.J. Metois, J.C. Heyraud, C. Alfonso. Surf. Sci., **331–333**, 855 (1995).
- [3] J.J. Metois, D.E. Wolf. Surf. Sci., **298**, 71 (1993).
- [4] Y. Homma, H. Hibino, T. Ogino, N. Aizava. Phys. Rev. B, **55**, R10237 (1997-II).
- [5] Y. Homma, H. Hibino, T. Ogino, N. Aizava. Phys. Rev. B, **58**, 13 146 (1998).
- [6] P. Finnie, Y. Homma. Phys. Rev. Lett., **82**, 2737 (1999).
- [7] С.С. Косолюбов, А.В. Прозоров, А.В. Латышев, А.Л. Асеев. Тез. докл. конф. „Совещание по росту кристаллов, пленок и дефектам структуры кремния“ (Новосибирск, 9–12 июля 2002) с. 132.
- [8] A. Pimpinelli, J. Villain. Physica A, **204**, 521 (1994).
- [9] A.V. Latyshev, A.B. Krasilnikov, A.L. Aseev. Surf. Sci., **311**, 395 (1994).
- [10] A.V. Latyshev, A.B. Krasilnikov, A.L. Aseev. Appl. Surf. Sci., **60/61**, 397 (1994).
- [11] A.V. Latyshev, H. Minoda, Y. Tanishiro, K. Yagi. Phys. Rev. Lett., **76**, 94 (1996).
- [12] K. Thurmer, D.-J. Liu, E.D. Williams, J.D. Weeks. Phys. Rev. Lett., **83**, 5531 (1999).
- [13] J.J. Metois, J.C. Heyraud, S. Stoyanov. Surf. Sci., **486**, 95 (2001).
- [14] T. Sinno, R.A. Brown, W. Ammon, E. Dornberger. J. Electrochem. Soc., **145**, 302 (1998).

- [15] J.A. Venables, G.D. T. Spiller, M. Handbucken. Rep. Progr. Phys., **47**, 399 (1984).
- [16] A.J. Mayne, F. Rose, C. Bolis, G. Dujardin. Surf. Sci., **486**, 226 (2001).
- [17] Yu.N. Devyatko, S.V. Rogozhkin, A.V. Fadeev. Phys. Rev. B, **64**, 193 401 (2001).
- [18] I.G. Neizvestny, N.L. Shwartz, Z.Sh. Yanovitskaja, A.V. Zverev. Thin Sol. Films, **380**, 61 (2000).
- [19] W.S. Verwoed, V. Nolting, P. Badziag. Surf. Sci., **241**, 135 (1991).
- [20] W. Shimada, H. Tochihara, T. Sato, M. Iwatsuki. Jap. J. Appl. Phys., **39**, 4408 (2000).
- [21] Y. Fukaya, Y. Shigeta. Phys. Rev. Lett., **85**, 5150 (2000).
- [22] Y. Fukaya, Y. Shigeta. Phys. Rev. B, **65**, 195 415 (2002).
- [23] K. Sumitomo, H. Hibino, Y. Homma, T. Ogino. Jap. J. Appl. Phys., **39**, 4421 (2000).

Редактор Т.А. Полянская

## Monovacancy influence on the terrace width during sublimation on (111) diamond-like crystal surface

A.V. Zverev, I.G. Neizvestny, N.L. Shwartz, Z.Sh. Yanovitskaja

Institute of Semiconductor Physics,  
Siberian Branch of Russian Academy of Sciences,  
630090 Novosibirsk, Russia

**Abstract** Monovacancy influence on diffusion exchange between steps on (111) diamond-like crystal surface during sublimation was investigated using 3D Monte Carlo model. The critical terrace width  $L_{cr}$  (distance from step edge to the nearest stable vacancy island) as a function of energy of adatom creation on flat terrace  $E_n$  and adatom desorption energy  $E_d$  on retention of their sum  $E_{sub} = E_n + E_d$ , was determined. Dependence  $L_{cr}(E_n)$  has demonstrated well-defined maximum. Formula, well describing  $L_{cr}(E_n)$  dependence at various  $E_{sub}$  values, was proposed. Extrapolation of  $L_{cr}(E_n)$  dependence for value of silicon sublimation energy  $E_{sub} = 4.2$  eV allowed to compare our simulation results with other experimental data. Explanation of the three times enhancement of the terrace width experimentally revealed at about 1500 K was suggested.