

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А.Ф. ИОФФЕ

на правах рукописи

ШМИДТ Александр Александрович

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО
ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ И МОДИФИКАЦИИ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР

специальность

01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2006

Работа выполнена на кафедре «Физика твердого тела» физико-технического факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор Ю.В. Трушин

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор А.И. Титов
доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией И.А. Овидько

Ведущая организация: Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск

Защита состоится «__» _____ 2006 г. в часов на заседании диссертационного совета К.002.205.01 при Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН по адресу: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая улица, д. 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

Автореферат разослан «__» _____ 2006 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
К.002.205.01 при Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН
кандидат физико-математических наук С.И. Бахолдин

Общая характеристика работы

Актуальность темы. В настоящее время компьютерное моделирование, которое включает создание физической и математической моделей исследуемого явления, разработку алгоритма решения уравнений математической модели и реализацию этого алгоритма в виде компьютерной программы, является важным инструментом теоретической физики вообще и физики твердого тела, в частности. При исследовании процессов эпитаксиального роста и модификации полупроводниковых многокомпонентных структур под воздействием ионного и нейтронного облучения компьютерное моделирование позволяет получать не только качественную, но и количественную информацию о протекающих физических процессах. Это делает возможным использование моделирования не только для решения фундаментальных физических задач, но и для поиска оптимальных технологических процессов и инженерных решений.

Стохастические методы компьютерного моделирования (методы Монте-Карло) имеют преимущество перед другими в том случае, когда исследуемая физическая система имеет большое количество степеней свободы. При применении детерминистических методов объем вычислений, необходимых для получения результата с заданной точностью, быстро увеличивается с ростом размерности фазового пространства, при использовании же стохастических методов объем вычислений от его размерности не зависит. Использование методов Монте-Карло позволяет эффективно осуществлять прямое компьютерное моделирование физических систем на атомарном уровне, что необходимо для исследования таких процессов как облучение твердых тел быстрыми частицами и молекулярно-пучковая эпитаксия. Поскольку эти процессы широко используются в современной полупроводниковой технологии, развитие их математических моделей и алгоритмов компьютерного моделирования является на сегодняшний день актуальной задачей физики твердого тела.

Рассмотрим вначале подробнее возможности применения компьютерного моделирования методом Монте-Карло для исследования взаимодействия пучков ионов и нейтронов с твердыми телами. В современной полупроводниковой технологии можно условно выделить два основных направления использования результатов воздействия ускоренных частиц на твердое тело. Во-первых, с помощью облучения быстрыми частицами могут проводиться исследования микроструктуры вещества, например, методом вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС). В этом случае компьютерное моделирование позволяет детально изучить сложные физические процессы, сопровождающие ионное травление твердого тела и тем самым, используя комбинацию экспериментальных данных и результатов расчетов, повысить точность определения послойного состава исследуемого

образца. Во-вторых, облучение дает возможность создавать структуры с заданными параметрами и изменять электрофизические свойства вещества. Примерами такого использования облучения являются: ионная имплантация примесей в полупроводники и их нейтронное трансмутационное легирование. Компьютерное моделирование в этом случае помогает определить оптимальные дозы облучения и предсказать результаты радиационного воздействия.

Перейдем к молекулярно-пучковой эпитаксии, которая является одним из основных современных методов создания наноструктур. Несмотря на то, что она широко используется уже более четверти века, в настоящее время не существует достаточно полного описания всех физических процессов, сопровождающих эпитаксиальный рост многокомпонентных полупроводников. Последнее время появилось новое перспективное направление развития современной полупроводниковой опто- и наноэлектроники – использование структур с нанокластерами (квантовыми точками). Применение численного моделирования дает возможность исследовать сложные физические процессы роста квантовых точек и определять различные характеристики формирующейся структуры: форму, поверхностную концентрацию, функцию распределения нанокластеров по размерам. Это позволяет определять параметры роста, необходимые для создания полупроводниковых наносистем с заранее заданными структурными свойствами. Особый интерес представляет исследование эпитаксии многокомпонентных структур с рассогласованием параметров решетки.

Цели работы:

1. создание компьютерной модели процесса нейтронного трансмутационного легирования фосфором изотопно-модулированных кремниевых структур с помощью обобщения физических моделей ионного и нейтронного облучения многокомпонентных полупроводниковых материалов;
2. разработка физической и компьютерной моделей молекулярно-пучковой эпитаксии структур с рассогласованием параметров решетки для исследования эпитаксиального роста нанокластеров карбида кремния на кремниевой подложке;
3. определение энергетических параметров диффузии адатомов Si и C на поверхности Si(111);
4. объяснение физического механизма самоорганизации нанокластеров карбида кремния на кремнии;
5. определение пороговых энергий смещения примеси цинка, имплантированной в GaAs и сурьмы в Si.

Научная новизна работы определяется следующим:

1. впервые для изотопно-модулированных структур кремния теоретически исследованы все стадии процесса нейтронного трансмутационного легирования фосфором;
2. разработана оригинальная компьютерная модель молекулярно-пучковой эпитаксии многокомпонентных структур с рассогласованием параметров решетки;
3. впервые путем сравнения результатов расчетов методом Монте-Карло с экспериментальными данными получены величины энергий активации миграции адатомов кремния и углерода на поверхности кремния;
4. впервые путем численного моделирования исследовано влияние ступенек на кремниевой подложке на пространственное распределение нанокластеров SiC, объяснен физический механизм пространственной самоорганизации нанокластеров на подложке;
5. впервые методом Монте-Карло получены значения пороговых энергий смещения примесей цинка в GaAs и сурьмы в Si.

Практическая значимость работы.

Практическая значимость работы обусловлена тем, что данные о физических механизмах эволюции полупроводниковых материалов при облучении и эпитаксиальном росте, полученные с помощью численного моделирования методом Монте-Карло, могут быть использованы при разработке технологий создания многокомпонентных полупроводниковых структур с заданными свойствами. При этом:

1. разработанная компьютерная модель процесса нейтронного облучения позволяет провести расчет оптимальной дозы нейтронного облучения, необходимого для введения заданной концентрации примеси фосфора в кремний, что дает возможность снизить нежелательную диффузию примесей при пострadiационном отжиге и создавать имплантационные профили с резкими границами;
2. полученные в работе значения пороговых энергий смещения примесей Sb в кремнии и Zn в арсениде галлия могут использоваться для моделирования результатов ионного травления в методе ВИМС и повышения его точности;
3. полученные в работе значения энергий активации миграции адатомов углерода и кремния на поверхности Si(111) дают возможность провести уточнение данных о кинетике эпитаксиального роста в системе SiC/Si;
4. разработанные физические модели молекулярно-пучковой эпитаксии карбида кремния на кремнии позволяют определять физические параметры роста нанокластеров SiC, необходимые для создания их массивов с заранее заданными свойствами;
5. полученные в работе данные об атомарном составе, морфологии растущего слоя и форме нанокластеров могут быть использованы для

создания кинетических моделей процесса эпитаксии на длительных временах осаждения.

Апробация результатов работы. Основные результаты работы обсуждались на семинарах в Физико-Техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербургском государственном политехническом университете и Техническом Университете Ильменау (Германия), а также на следующих конференциях: Fourth, Fifth and Sixth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering, Saint-Petersburg, Russia, (2000, 2001, 2002), 4-th Moscow Int. ITP School of Physics "Modern Condensed Matter Physics Experimental Methods and Devices, Related Topics", Zvenigorod, Russia, (2001), Четвертый Международный Уральский семинар "Радиационная физика металлов и сплавов", Снежинск, Россия, (2001), Ferien-Akademie, Sarntal, Italy, (2001), Fifth ISTC Scientific Advisory Committee Seminar, "Nanotechnologies in the area of physics, chemistry and biotechnology", St. Petersburg, Russia, (2002), 16th European Material Research Society Fall Meeting, Warsaw, Poland, (2003), 48. Internationales Wissenschaftliches Kolloquium, Technische Universität Ilmenau, Ilmenau, Germany, (2003), IV и V Российские конференции по физике полупроводников «Полупроводники 2003» и «Полупроводники 2005», Санкт-Петербург, Россия, (2003, 2005), V International Seminar on Silicon Carbide and Related Materials, Velikiy Novgorod, Russia, (2004), Conference on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids, Helsinki, Finland, (2004), International Conference on Silicon Carbide and Related Materials, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, (2005).

По теме диссертации опубликовано 13 печатных работ (в том числе 9 в реферируемых научных журналах) и сделано 15 докладов на конференциях.

Положения, выносимые на защиту.

1. Комплексная методика компьютерного моделирования процесса нейтронного трансмутационного легирования и пострadiационного отжига структур на основе кремния, при помощи которой показана возможность использования нейтронного спектра исследовательского реактора ВВР-М для создания кремниевых структур, содержащих тонкие слои, легированные фосфором.
2. Методика и результаты расчетов методом Монте-Карло функции распределения по размерам нанокластеров карбида кремния на кремнии в широком диапазоне температур с учетом внутренних упругих напряжений, вызванных рассогласованием параметров кристаллических решеток материалов.
3. Методика расчета и вычисление энергий активации миграции адатомов углерода (1.1 эВ) и кремния (0.6 эВ) при росте SiC на Si.

4. Объяснение механизма самоорганизации нанокластеров SiC на поверхности Si(111) и определенные при помощи прямого компьютерного моделирования методом Монте-Карло соотношения параметров роста, при которых возникают массивы нанокластеров с заданными свойствами.
5. Расчет значений пороговых энергий смещения примесей Zn в арсениде галлия (7 эВ) и Sb в кремнии (6.5 эВ).

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения, включает 31 рисунок, 3 таблицы и список литературы из 138 наименований, полный объем диссертации 110 страниц.

Содержание работы

Во введении кратко обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цели работы, отмечены ее научная новизна и практическая ценность, изложены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава носит обзорный характер, в ней представлено современное состояние теоретических представлений об облучении твердых тел быстрыми частицами и выращивании полупроводниковых структур методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Также представлен обзор основных разновидностей алгоритмов компьютерного моделирования этих процессов методом Монте-Карло.

В параграфе 1.1 изложена краткая история исследований в области радиационной физики твердого тела и основные методики современных полупроводниковых технологий, использующих облучение. Дан обзор современных физических моделей взаимодействия пучков ускоренных ионов и нейтронов с твердыми телами. Описаны физические основы методов вторично-ионной масс-спектрометрии и нейтронного трансмутационного легирования. Представлен обзор современных методов компьютерного моделирования модификации твердых тел при облучении. Сделан вывод о том, что для исследования процессов ионного травления полупроводниковых структур, а также нейтронного трансмутационного легирования метод Монте-Карло в приближении парных соударений оказывается оптимальным, поскольку он сочетает достаточную точность и производительность.

В параграфе 1.2 дан обзор основных современных методов формирования полупроводниковых многокомпонентных структур. Описаны физические свойства карбида кремния и обоснована научная и технологическая важность создания наноструктур SiC на кремнии методом молекулярно-пучковой эпитаксии. Представлены основные методы компьютерного моделирования эпитаксиальных процессов и сделан вывод о том, что для определения оптимальных параметров роста структур SiC на Si необходимо использовать метод Монте-Карло. Он, с одной стороны, позволяет учитывать протекающие на поверхности процессы на атомарном

уровне, а, с другой стороны, дает возможность моделировать эпитаксию на достаточно длительных временах.

В параграфе 1.3 сформулированы задачи и цели диссертации.

Вторая глава посвящена разработке моделей и алгоритмов компьютерного моделирования баллистических процессов ионном и нейтронном облучении полупроводниковых структур. Основное внимание уделено процессу распыления при высокодозном облучении ионами, являющемуся основой метода ВИМС, и процессу нейтронного трансмутационного легирования кремния, обогащенного изотопом ^{30}Si .

В параграфе 2.1 описаны основные физические процессы, сопровождающие ионное травление, и представлена методика их моделирования методом Монте-Карло, позволяющая учитывать динамические изменения мишени при ионном травлении.

При ионном травлении неоднородных полупроводниковых структур происходит перемешивание компонент мишени, вызванное каскадами атомных соударений. При этом, поскольку глубина проникновения первичных ионов обычно значительно больше средней глубины выхода вторичных, распределения компонент, полученные при помощи ВИМС, получаются шире истинных распределений [1]. Таким образом, уширение профилей компонент вследствие радиационного перемешивания налагает принципиальное ограничение на точность метода ВИМС по глубине. Для того чтобы избавиться от этого ограничения, необходимо при помощи компьютерного моделирования определить величину радиационных изменений мишени и корректировать данные ВИМС экспериментов.

Основным физическим параметром, определяющим величину радиационного уширения распределения атомов примеси по глубине, является их пороговая энергия смещения (E_d). Таким образом, для проведения точного количественного моделирования процесса ионного травления и повышения точности метода ВИМС необходимо определить значения пороговых энергий смещения примесей в изучаемых полупроводниковых структурах. Имеющиеся в настоящее время экспериментальные методы определения пороговых энергий смещения не подходят для многокомпонентных веществ и, тем более, примесей. Поэтому для определения значений E_d примесей была использована комбинированная экспериментально-расчетная методика, основанная на сравнении экспериментальных данных вторично-ионной масс-спектрометрии (ВИМС) с результатами динамического моделирования методом Монте-Карло. С помощью данной методики были определены значения пороговых энергий смещения примеси Sb, введенной в кремний при эпитаксиальном росте, и примеси Zn, имплантированной в арсенид галлия.

Суть методики заключается в проведении серии расчетов, моделирующих ВИМС-профилирование, с различной пороговой энергией

смещения примеси и определении по ним зависимостей параметров, описывающих форму распределения примеси по глубине, от ее пороговой энергии смещения. Такими параметрами являются:

- 1) ширина распределения на половине его высоты (FWHM),
- 2) скорость спада заднего фронта распределения λ .

На рис. 1 представлены зависимости FWHM и λ от пороговой энергии смещения примеси Sb в Si. Из экспериментальных данных ВИМС были также получены значения этих величин и по ним найдены пороговые энергии смещения примеси. Численные значения E_d Sb в Si, определенные с использованием обоих параметров формы оказываются достаточно близки, что является дополнительным косвенным подтверждением точности методики.

Если невозможно создание эпитаксиальных слоев примеси в полупроводниковой структуре, то для применения описанной методики можно использовать предварительную ионную имплантацию примеси. В этом случае сначала производится

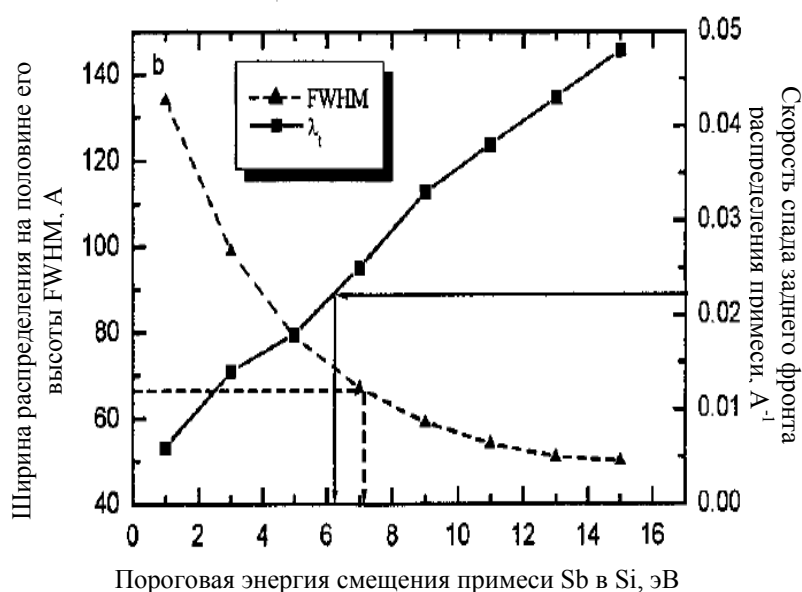


Рис. 1. Расчетные зависимости параметров, определяющих форму распределения примеси Sb в Si от ее пороговой энергии смещения. Стрелками показаны данные, полученные в эксперименте, и найденные по ним значения E_d .

моделирование имплантации и определяется исходное распределение примеси, после чего методика применяется сходным образом. Это было сделано для оценки пороговой энергии смещения Zn в GaAs. Однако, большая энергия имплантации привела к значительному размытию первичного профиля примеси, что не позволило добиться высокой точности определения численного значения $E_d(\text{Zn})$ в GaAs.

Также было проведено исследование начальных стадий ионного травления арсенида галлия с целью определения глубины, на которой процесс ионного травления двухкомпонентной мишени выходит на стационарный режим. Это важно, поскольку методы количественного ВИМС анализа состава мишени развиты только для стационарной фазы процесса распыления и, таким образом, примесь в тестовых структурах должна быть расположена

на глубине, достаточной для установления стационарного процесса травления. Показано, что уменьшение энергии первичных ионов ускоряет процесс установления стационарного ионного травления. Расчеты показали также, что часто используемый критерий стационарности процесса травления – равенство парциальных коэффициентов распыления компонент мишени [1] – не всегда соответствует состоянию равновесия процесса травления. В момент, когда устанавливается полное равновесие, становится равным единице относительный коэффициент распыления первичных ионов, именно этот параметр следует использовать для определения стационарности процесса распыления.

Параграф 2.2 посвящен исследованию нейтронного трансмутационного легирования кремния. Суть этого метода состоит в облучении материала потоком тепловых нейтронов, с тем, чтобы вызвать их радиационный захват изотопами кремния ${}_{14}\text{Si}^{30}$, доля которых в естественном материале составляет около 3%. При этом происходит ядерная реакция (n,γ) и ядро кремния превращается в ядро фосфора. Поскольку вступающие в реакцию изотопы случайным образом распределены в материале, однородность трансмутационного легирования в этом случае больше, чем у других методов введения примеси. Кроме того, можно добиться большой точности легирования, т.к. при постоянном нейтронном потоке концентрация примеси прямо пропорциональна времени облучения.

Метод нейтронного трансмутационного легирования имеет ряд ограничений [2]. Во-первых, не все полупроводники могут быть легированы этим методом из-за отсутствия соответствующих изотопов или слишком малого сечения захвата нейтронов. Во-вторых, за приемлемое время облучения невозможно достичь концентраций примесей более 10^{15} – 10^{16} ат/см³, поскольку обычно доля изотопов, способных осуществить трансмутацию, невелика, а сечения захвата нейтронов малы. В-третьих, основной проблемой остаются многочисленные радиационные повреждения материала, т.к. в спектре облучения всегда присутствуют и быстрые нейтроны, создающие в облучаемом материале ПВА и, соответственно, каскады атомных соударений. Поэтому определение оптимальной дозы, которая, с одной стороны, обеспечивала бы необходимую концентрацию примеси, а, с другой стороны, не вносила бы в образец излишних повреждений, является важной задачей. Для ее решения использовано компьютерное моделирование при помощи программы DYTRIRS_N, созданной в ходе работы над диссертацией для изучения нейтронного облучения и являющейся специальной модификацией DYTRIRS [3].

Тепловые нейтроны могут учувствовать лишь в реакциях трансмутации, в то время как быстрые нейтроны с энергией более (2 МэВ) в основном испытывают упругие рассеяния, поскольку сечение их неупругого рассеяния на несколько порядков меньше. Это позволяет разделить поток нейтронов на

две части: низкоэнергетичные тепловые, которые вступают исключительно в трансмутационные реакции, и быстрые, которые создают ПВА в результате упругих столкновений.

Эволюция дефектной структуры при пострadiационном отжиге исследовалась при помощи системы кинетических уравнений, учитывающих диффузию собственных межузлий, вакансий и комплексов фосфор-межузлие. Учитывалась также эффективная диффузия фосфора, вызванная дрейфом собственных вакансий кремния.

При помощи комплексной методики моделирования процесса нейтронного трансмутационного легирования и пострadiационного отжига исследовано облучение в спектре водо-водяного реактора структуры ^{28}Si , содержащей слой чистого изотопа ^{30}Si толщиной 30 нм. Найдены параметры облучения и отжига, позволяющие создать в кремниевой подложке тонкий слой кремния, легированного фосфором, обладающий резкими границами.

Таким образом, динамическое моделирование методом Монте-Карло позволяет проводить не только качественные исследования баллистической стадии радиационных процессов в полупроводниках, но и получать количественные данные об изменениях структуры облученного материала.

Третья глава содержит описание разработанных моделей и алгоритмов компьютерного моделирования методом Монте-Карло роста полупроводниковых структур SiC/Si и Ge/Si.

Параграф 3.1 посвящен компьютерному исследованию молекулярно-пучковой эпитаксии карбида кремния на кремнии. Представлены экспериментальные данные трансмиссионной электронной и атомно-силовой микроскопии, показывающие, что при низких температурах происходит двумерный рост SiC на Si, а при высоких – трехмерный. Для изучения процесса перехода от одного типа роста к другому использовалось

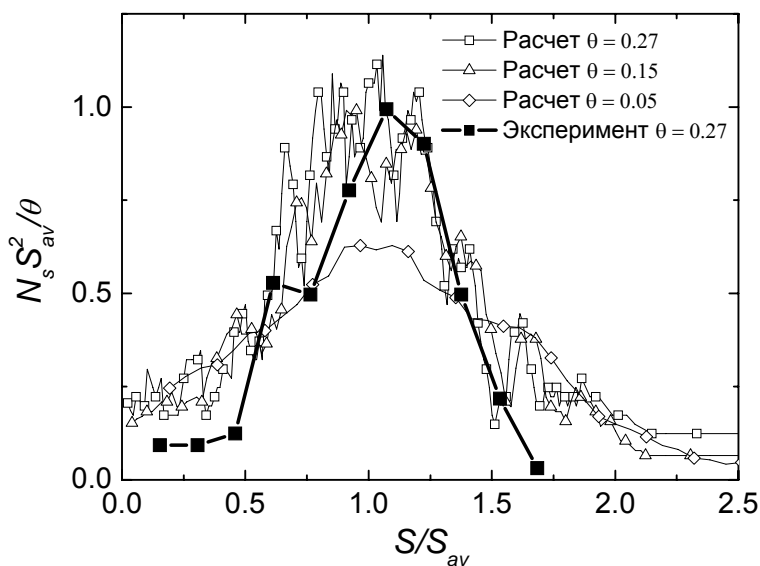


Рис. 3 Функция распределения по размерам нанокластеров при низких температурах: сравнение результатов экспериментов и моделирования методом Монте-Карло.

компьютерное моделирование, позволяющее учитывать влияние упругих напряжений на эпитаксиальный рост на атомарном уровне. Разработанная в диссертации модель основана случайном выборе элементарных процессов на

растущей поверхности – осаждении и десорбции атомов, их поверхностной и объемной диффузии. Вероятность выбора того или иного процесса зависит от его частоты, определяемой из физической модели.

Для исследования двумерного роста нанокластеров карбида кремния на кремнии при низкой (около 660° С) температуре подложки был разработан алгоритм моделирования методом Монте-Карло. Полученная в результате функция распределения кластеров по размерам обладает свойством масштабирования [5], т.е. эта функция при построении ее в специальных нормированных координатах постоянна во все моменты времени (см. рис. 3).

Экспериментальные данные показывают, что при более высоких температурах уже на самых начальных этапах происходит зарождение трехмерных кластеров SiC. Поэтому физическая модель и программа для моделирования были модифицированы, чтобы учесть также возможность диффузии адатомов углерода и атомов кремния в верхние слои уже существующих кластеров. Это предположение необходимо, поскольку в системах с большой разницей в параметрах решетки, к которым относится SiC на Si, начиная с некоторого критического размера объемные кластеры энергетически выгоднее плоских, а при достаточно высоких температурах вероятность диффузионных скачков адатомов наверх становится существенной, и этим процессом нельзя пренебрегать. В разработанной модели учитываются процессы диффузионных прыжков атомов по узлам кристаллической решетки и осаждение новых атомов.

При этом величина энергетического барьера, который нужно преодолеть атому для начала диффузии, зависит от его локального окружения (в расчет берутся первые две координационные сферы):

$$E_{Si} = \sum_{\substack{1\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{Si-Si}^1 + \sum_{\substack{1\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{Si-C}^1 + \sum_{\substack{2\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{Si-Si}^2 + \sum_{\substack{2\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{Si-C}^2 \quad (1)$$

$$E_C = \sum_{\substack{1\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{C-C}^1 + \sum_{\substack{1\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{C-Si}^1 + \sum_{\substack{2\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{C-C}^2 + \sum_{\substack{2\text{-ая} \\ \text{коорд.} \\ \text{сфера}}} E_{C-Si}^2 \quad (2)$$

здесь E_{Si} , E_C - энергетические барьеры для атомов Si и C, соответственно, нижний индекс определяет пару взаимодействующих атомов, а верхний индекс обозначает номер координационной сферы. Суммирование проводится по всем не пустым узлам, находящимся в данной координационной сфере. Для определения вероятности диффузионных прыжков используется закон Аррениуса: $p = \gamma \exp(-E/kT)$, где p – вероятность начала диффузии, γ – дебаевская частота, k – постоянная Больцмана, T – температура подложки, E – величина энергетического барьера для данного атома. Учет взаимодействия не только с ближайшими соседями, но и с

атомами из второй координационной сферы позволяет с большей точностью исследовать взаимодействие адатомов со ступеньками.

После того как атом преодолевает энергетический барьер, он находится в “промежуточном” нестабильном состоянии, из которого переходит в один из доступных узлов решетки (любой не занятый узел, находящийся в пределах первых трех координационных сфер вокруг узла, из которого атом начал движение). Вероятность выбора того или иного финального положения пропорциональна энергии связи с окружением, то есть узел, в котором атом будет иметь более высокую энергию связи с окружением, более предпочтителен. Это позволяет моделировать диффузию адатомов вдоль ступенек и повышает эффективность расчетов, поскольку исследуемая система быстрее переходит к энергетически более выгодному состоянию. Помимо диффузии, в систему добавляются новые атомы углерода с частотой, зависящей от потока углерода.

В параграфе 3.2 изложена разработанная модель внутренних упругих напряжений, вызванных рассогласованием решеток подложки и эпислоя. Предполагается, что каждый бислой решетки материала представляет собой набор атомов, связанных «пружинками». Поскольку их равновесная длина в кремнии и карбиде кремния различна, а рост SiC предполагается когерентным подложке, в кластере возникают упругие напряжения, возрастающие с увеличением его латерального размера. С ростом высоты кластера происходит релаксация степени рассогласования параметров решетки материалов и, соответственно, уменьшаются напряжения. Это снижает энергетический барьер для перемещения атомов Si и C от подножия кластера к его вершине и приводит в переходу от двумерного роста нанокластеров к трехмерному.

Эффективную энергию упругих напряжений, возникающих в i -ом слое кластера можно оценить как

$$E_{\sigma}^i = k\theta_i^2 N_i \quad (3),$$

здесь k – эффективная жесткость межатомных связей Si-C, а θ_i – рассогласование решеток i -ого слоя кластера карбида кремния на кремниевой подложке, а N_i – число молекул SiC в i -м слое. В соответствии с [5] предполагается, что рассогласование решеток SiC и Si экспоненциально уменьшается с удалением от подложки, то есть:

$$\theta_i = \theta_0 \exp\left(-\frac{3\pi(i-1)}{2\sqrt{N_0}}\right), \quad (4)$$

здесь θ_0 – исходное рассогласование параметров кристаллических решеток Si и SiC (19.3%), N_0 – число молекул SiC в самом нижнем слое кластера, а i – номер слоя.

Было проведено моделирование методом Монте-Карло процесса перехода от двумерного зарождения кластеров SiC к трехмерному росту. При низких температурах вероятность перехода атомов в верхние слои кластеров мала, и поэтому рост преимущественно двумерный. При повышении температуры диффузия происходит более активно, и на поверхности появляются трехмерные нанокластеры.

Параграф 3.3 посвящен исследованию процесса самоорганизации трехмерных нанокластеров SiC на Si. Интерес к этому вопросу обусловлен тем, что пространственно упорядоченные нанокластеры SiC на Si представляют пример квантовых анти-точек (квантовых точек вещества, ширина запрещенной зоны которого превышает ширину запрещенной зоны подложки). Квантовые анти-точки являются нелинейными рассеивающими центрами и их упорядоченные массивы влияют на фотопроводимость и проводимость в квантовых ямах [6]. Для исследования сложной физики этих систем необходимо иметь, в первую очередь, доступный технологический метод их создания.

В работе проведено исследование возможности использования ступенек, присутствующих на поверхности кремния, для создания цепочек нанокластеров SiC. При помощи метода атомно-силовой микроскопии обнаружено, что при достаточно высоких температурах роста (800-900 °C), начиная с самых первых этапов роста, нанокластеры являются объемными, а их зарождение происходит преимущественно на ступеньках (см. Рис. 4).

Параметры роста – температура подложки (T) и поток атомов углерода (J_C) – однозначно определяют поверхностную концентрацию кластеров n , и, следовательно, среднее расстояние между

кластерами на поверхности $l = \sqrt{1/n}$. В то же время угол скола подложки и характер ее термической обработки задают направление ступенек и среднюю ширину террас w . Если $w \approx l$, то возможно возникновение самоупорядочения нанокластеров на ступеньках. Если $w \gg l$, то кластеры будут зарождаться не только на ступеньках, но и на террасах, и самоупорядочения не будет, также как и в случае $w \ll l$. Таким образом, путем подбора условий эксперимента и предварительной обработки подложки, можно создавать цепочки нанокластеров, поперечное расстояние между которыми контролируется шириной террас между ступеньками, которая, в свою очередь, определяется

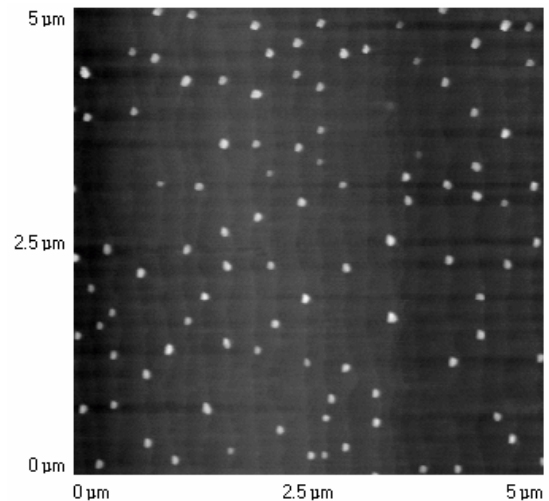


Рис. 4 АСМ изображение поверхности кремния после осаждения углерода. Кластеры SiC (светлые точки) располагаются вблизи краев террас (вертикальные линии). Масштаб по высоте – 10 нм.

углом скола подложки и предварительной термической обработкой подложки.

Для определения условий эксперимента, при которых образуются массивы нанокластеров с заданными параметрами, использование исключительно экспериментальных методов оказывается неэффективным. Поэтому было применено компьютерное моделирование методом Монте-Карло.

В начале проводилось моделирование процесса роста кластеров в отсутствии ступенек, что позволило определить среднее расстояние между ними при данных T и J_C . Моделировалось также осаждение при наличии на поверхности подложки террас различной ширины. Результаты показаны на Рис. 5

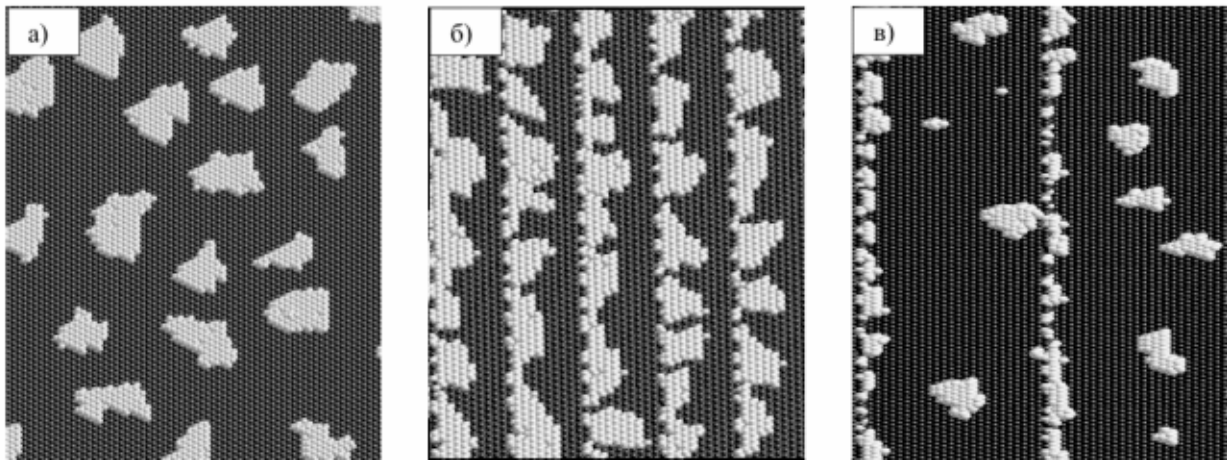


Рис. 5 Результаты моделирования: изображение части поверхности Si (темно-серый) с кластерами SiC (светло-серый); а) ступенек нет, среднее расстояние между кластерами $l = 22a$ (a - постоянная решетки Si); б) ширина террас $w = 20a$, все кластеры зарождаются на ступеньках, есть упорядочение в перпендикулярном им направлении; в) $w = 50a$, зарождение происходит не только на ступеньках, упорядочения нет.

Полученные данные показывают, что, используя подложки с шириной террас приблизительно равной среднему расстоянию между кластерами на поверхности без ступенек, можно добиться упорядочения расстояний между кластерами. В случае большей ширины террас упорядочения нанокластеров не будет, а их концентрация окажется ниже, поскольку часть карбида кремния образуется прямо на краях террас.

Таким образом, в третьей главе описана разработанная компьютерная модель эпитаксиального роста, использующая метод Монте-Карло и проведено исследование зарождения и роста в многокомпонентной структуре SiC на Si. Полученные функции распределения кластеров по размерам и их концентрация находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Проведено также моделирование начальных этапов зарождения нанокластеров в широком диапазоне температур. Объяснен физический

механизм возникновения цепочек нанокластеров SiC на Si и найдены закономерности их самоорганизации.

В заключении приводятся основные результаты работы, делаются выводы, обсуждаются перспективы применения полученных результатов и дальнейшего развития исследований.

Основные результаты, полученные в работе:

1. разработан метод комплексного численного моделирования процесса нейтронного трансмутационного легирования структур на основе кремния, с помощью которого определены количественные зависимости между характеристиками облучения и отжига и параметрами распределения примеси фосфора;
2. разработана оригинальная физическая модель трехмерного роста многокомпонентных полупроводниковых материалов методом молекулярно-пучковой эпитаксии, учитывающая внутренние упругие напряжения, возникающие в структуре;
3. впервые получены температурные зависимости концентрации и функции распределения по размерам нанокластеров SiC на поверхности Si, которые позволили определить значения энергий активации миграции атомов углерода (1.1 эВ) и кремния (0.6 эВ) на поверхности кремния;
4. объяснены физические механизмы спонтанной самоорганизации нанокластеров карбида кремния на ступеньках на кремниевой подложке, определены закономерности влияния условий роста на процесс самоорганизации нанокластеров;
5. определены значения пороговых энергий смещения для примеси Zn, имплантированной в GaAs (7 эВ) и примеси Sb в Si (6.5 эВ).

Приведенные выше результаты позволяют сделать следующий вывод: разработан обобщенный алгоритм компьютерного моделирования методом Монте-Карло, который позволяет на атомарном уровне исследовать физические процессы создания и модификации многокомпонентных полупроводниковых структур, определять значения важных энергетических параметров и объяснить наблюдаемую в экспериментах самоорганизацию трехмерных нанокластеров SiC на Si.

Основные результаты опубликованы в следующих работах:

- A1. *V.S. Kharlamov, B.J. Ber, Yu.V. Trushin, E.E. Zhurkin, A.P. Kovarski, A.A. Schmidt.*

Estimation of the displacement threshold energies in Si and GaAs by means of the ion sputtering of structures with thin marker layers.

Proc. of SPIE, (2001), vol. 4348. p. 275-281.

- A2. *A.A Schmidt, Yu.V. Trushin, B.J. Ber, E.E Zhurkin.*
Determination of the displacements threshold energies of impurities in semiconductor heterostructures.
 Proc. of the 4th Moscow Int. ITEP School of Physics,
 Ed.: A.L. Suvorov, Yu.G. Abov, V.G. Firsov (2001) pp. 287-291.
- A3. *B.J. Ber, A.P. Kovarsy, A.A. Schmidt, Yu.V. Trushin, E.E. Zhurkin, F.A. Krutzenstern.*
Computer simulation and SIMS profiling of Zn implantation in A³B⁵ semiconductors.
 Proc. of SPIE, (2002), vol. 4627. pp. 177-180.
- A4. *Б.Я. Бер, А.П. Коварский, Д.Ю. Казанцев, Ю.В. Трушин, Е.Е. Журкин, А.А. Шмидт, С.Ф. Белых*
ВИМС-профилирование гетероструктур GaAs/δ-AlAs/GaAs/... с помощью многоатомных ионизованных кластеров кислорода
 Письма в ЖТФ, т.30, 2004, в.19, с.80-86.
- A5. *Yu.V. Trushin, G.V. Mikhailov, E.E Zhurkin, V.S. Kharlamov, A.A. Schmidt, F.A. Krusenstern.*
Computer simulation of the creation of ³¹P doped layer in ²⁸Si/³⁰Si/²⁸Si heterostructure by neutron transmutation doping.
 Proc. of SPIE, (2003), vol. 5127, pp. 124-127.
- A6. *D.V. Kulikov, V.S. Kharlamov, A.A. Schmidt, K.L. Safonov, S.A Korolev and Yu.V. Trushin*
Computer simulation of neutron transmutation doping of isotopically engineered heterostructures
 Nucl. Inst. and Meth. Phys. Res. B, vol. 228, (2005), pp. 230-234.
- A7. *K.L. Safonov, A.A. Schmidt, Yu.V. Trushin, D.V. Kulikov, V. Cimalla, J. Pezoldt.*
Modelling the formation of nano-sized SiC on Si.
 Material Science Forum, (2003), vols. 433-436, pp. 591-594.
- A8. *A. A. Schmidt, K. L. Safonov, Yu. V. Trushin, V. Cimalla, O. Ambacher, and J. Pezoldt.*
Kinetic Monte Carlo simulation of SiC nucleation on Si(111).
 physica status solidi a, (2004), vol. 201, no. 2, pp. 333-337.
- A9. *Ю.В.Трушин, Е.Е.Журкин, К.Л.Сафонов, А.А.Шмидт, В.С.Харламов, С.А. Королев, М.Н. Лубов, Й. Пецольдт.*
Исследование начальных стадий роста нанокластеров карбида кремния на подложке кремния.
 Письма в ЖТФ, т.30, (2004), в.15, с.48-54.

- A10. *A.A. Schmidt, V.S. Kharlamov, K.L. Safonov, Yu.V. Trushin, E.E. Zhurkin, V. Cimalla, O. Ambacher and J. Pezoldt*
Growth of three-dimensional SiC clusters on Si modelled by KMC
 Computational Materials Science, vol. 33, (2005), pp 375-381
- A11. *V. Cimalla, J. Pezoldt, Th. Stauden, A.A. Schmidt, K. Zekentes, and O. Ambacher.*
Lateral alignment of SiC dots on Si.
 physica status solidi c, (2004), vol. 1, no. 2, pp. 337-340.
- A12. *V. Cimalla, A. A. Schmidt, Th. Stauden, K. Zekentes, O. Ambacher and J. Pezoldt.*
Linear alignment of SiC dots on silicon substrates
 J. Vac. Sci. Technol. B, vol. 22(5), (2004), pp. L20-L23.
- A13. *V. Cimalla, A.A. Schmidt, Ch. Foerster, K. Zekentes, O. Ambacher and J. Pezoldt*
Self-organized SiC nanostructures on silicon •
 Superlattices and Microstructures, vol. 36, 1-3, (2004), pp. 345-351.

Список цитированной литературы:

- [1] Л. Фелдман, Д. Мейер. Основы анализа поверхности и тонких пленок. – М., "Мир", 1989 – 344 с.
- [2] J.M. Meese (ed.), 2nd Int. Conf. on Neutron Transmutation Doping in Semiconductors, 1978, Plenum Press, NY.
- [3] B.J. Ber, V.S. Kharlamov, Yu.A. Kudrjavitsev, A.V. Merkulov, Yu.V. Trushin, E.E. Zhurkin. - Nucl. Instrum. Meth. B, **127/128** (1997) 286.
- [4] M.C. Bartelt, C.R. Stoldt, C.J. Jenks, P.A. Thiel, J.W. Evans, Phys. Rev. B, **59** (1999) 4.
- [5] E. Schoell and S. Bose, Solid-State. Electronics, **42** (1998) 1587.
- [6] Yu. Vasiyev, S. Suchalkin, M. Zundel, D. Heisenberg, K. Eberl, and K. von Klitzing, Appl. Phys. Lett., 75 (1999) 2942.