

На правах рукописи

Бойко Андрей Михайлович

МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВОГО РОСТА ПОВЕРХНОСТИ В
ПРОЦЕССЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ПУЧКОВОЙ ЭПИТАКСИИ СОЕДИНЕНИЙ
 $A^{III}B^V$

01.04.10 — физика полупроводников

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — 2007

Работа выполнена в Физико-техническом институте им. А.Ф.Иоффе РАН.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, академик РАН
Сулис Р. А.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор
Кукушкин С. А.

кандидат физико-математических наук,
Максимов М. В.

Ведущая организация: СПбГЭТУ

Защита состоится “ ____ ” _____ 2007 в ____ ч. ____ мин на заседании диссертационного совета К 002.205.01 при Физико-техническом институте им. А.Ф.Иоффе РАН по адресу: 194021, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д.26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИ им .А.Ф. Иоффе РАН.

Отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организации, просьба направлять по указанному адресу в двух экземплярах не позднее, чем за две недели до защиты.

Автореферат разослан “ ____ ” _____ 2007.

Учёный секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук

Бахолдин С.И.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

Молекулярно - пучковая эпитаксия (МПЭ) наряду с ростом из металло-органических соединений (МОСVD) являются основными экспериментальными и промышленными технологиями изготовления полупроводниковых наноструктур и приборов на их основе последние три десятка лет. В течение этого периода времени идет активное экспериментальное и теоретическое изучение этих методов.

Все теоретические модели роста поверхности можно разделить на три основные группы. Первая группа использует аналитические методы, вторая базируется на методе молекулярной динамики и третья - на методе Монте-Карло.

Модели из первой группы берут свое начало в работах Странского /1/, Беккера и Деринга /2/, Фольмера /3/, Френкеля /4/, Бартонна, Кабреры и Франка /22/. В простейшем случае идеальная вицинальная поверхность кубического кристалла (v_x, v_y, v_z) представляет собой атомно-гладкие участки поверхности (001) - террасы, разделенные ступенями, направленными параллельно $[v_x, v_y, 0]$, расположенными на расстоянии $L = av_z / \sqrt{(v_x^2 + v_y^2)}$ (a - постоянная решетки кристалла) друг от друга. (Рис 1)

Ступени же состоят из отрезков атомно-гладкой ступени $[100]$ длиной $l = av_x / v_y$, разделенных изломами.

Для такой поверхности кристалла формулируется и изучается диффузионное уравнение для распределения концентрации адатомов на его поверхности. Это уравнение описывает процессы адсорбции, десорбции, диффузии адатомов, их захват ступенями и изломами, зарождение и рост островков.

В рамках этой группы моделей изучались, в частности, условия устойчивого роста на вицинальных гранях /5, 6/ и влияние барьера Швёбеля на режим роста плоской грани /7/. Идея существования потенциальной канавы у края ступени и диффузионного транспортного механизма активно использовалась в /8, 9, 10/. В работе /6/ была показана существенная роль этого механизма для стабилизации ступени в процессе роста. В этой работе рассматривалась простейшая ситуация, когда рост кристалла происходит путем захвата атома из газовой фазы на террасу, диффузионному блужданию по

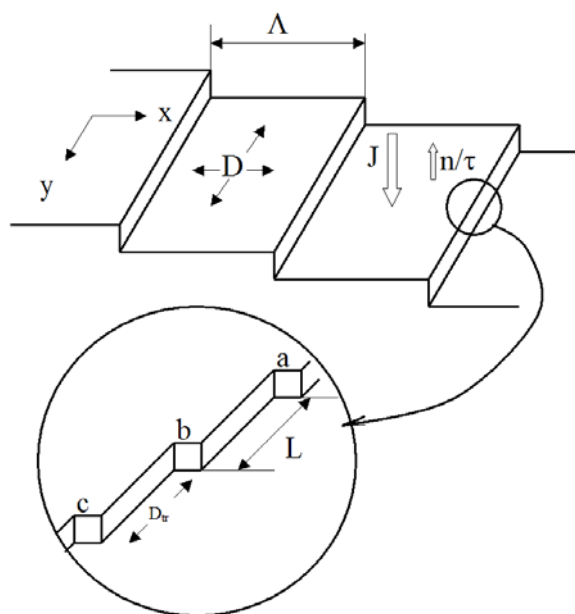


Рис. 1. Схематическое изображение растущей вицинальной поверхности (из работы /6/)

ней (коэффициент диффузии D) с последующим встраиванием в излом на ступени. На вицинальной поверхности имеются "приготовленные" изломы и рост кристалла происходит за счет движения решетки изломов без образования новых. То есть рассматривается рост, при котором сохраняется не только число ступеней (*step-flow*), но и число изломов (*kink-flow*). Сам термин *kink-flow* был введен авторами /6/ по аналогии с термином *step-flow* из работы /11/. В работе /12/ было рассмотрено взаимодействие атомных ступеней, как отдельных объектов поверхности, и получены интересные результаты о формировании структуры ступеней различной формы на поверхности.

Вторая группа моделей базируется на методе молекулярной динамики. При его использовании немедленно возникает необходимость в вычислении энергии взаимодействия моделируемого мигрирующего адатома с поверхностью и с соседними атомами /14, 15/. Эта процедура является сама по себе нетривиальной квантовомеханической задачей и требует серьезных затрат времени на вычисления, и, как следствие, не обеспечивает возможность моделирования роста поверхности кристаллов размерами, например, 1000×1000 постоянных решетки, с производительностью, достаточной для дальнейшей

статистической обработки результатов моделирования в течение разумного времени. Как правило, эти модели применяются для описания процессов реконструкции поверхности и для изучения динамики одиночных димеров на поверхности.

Третья группа моделей - стохастические решеточные модели МПЭ, основанные на прямом методе Монте-Карло/16/, имитируют поведение адатома в поверхностных узлах кристаллической решетки. Этот метод в качестве параметров использует не энергию химических связей, а вероятность «перескока» моделируемого атома из одного узла решетки в другой в зависимости от количества и положения окружающих атомов. В этой группе моделей особый интерес представляют псевдо-трехмерные модели типа «твердое-на-твердом». Такие модели условно обозначают термином «2+1». Это означает, что в модели имеется выбранная плоскость - плоскость подложки. Параллельно этой плоскости движется рассматриваемый адатом, который всегда имеет контакт с подложкой. Как следствие, рост поверхности происходит в направлении, перпендикулярном подложке.

Основные черты таких моделей роста применительно к GaAs, представлены в /17/. Подложка представляет собой простую кубическую решетку, на которой вакансии и нависания запрещены. Для моделирования соединений этого типа используется, как правило, приближение «среднего поля»/5/. Это приближение справедливо при наличии на поверхности постоянного избытка атомов мышьяка, которые равномерно распределены по поверхности в силу того, что коэффициент поверхностной диффузии мышьяка выше, чем у галлия. Следовательно, для моделирования роста всей поверхности достаточно моделировать только рост подрешетки катионов.

В рамках этого подхода вся кинетика роста описывается следующими процессами - осаждением адатома на поверхность, поверхностной миграцией, встраиванием в поверхность и испарением. В моделях, ставших уже классическими, величина вероятности перескока для миграции зависит от локальной конфигурации исходного местоположения атома и определяется арифметической суммой энергий связи адатома с поверхностью и со всеми своими ближайшими соседями /5/.

К существенным недостаткам вышеуказанной модели можно отнести тот



Рис. 2. На рисунке **а** адатом, выделенный темным цветом, показан в момент случайной встречи с другим адатомом, мигрирующим на гладкой поверхности. На рисунке **б** адатом находится вблизи края ступени.

факт, что энергия активации прыжка адатома по поверхности не зависит от конкретного расположения окружающих его атомов. Типичными примерами таких конфигураций окружающих атомов являются нижеследующие. Первая конфигурация - адатом находится вблизи края ступени. Вторая - на гладкой поверхности при случайной встрече с другим мигрирующим адатомом. Видно, что и в том и в другом случае количество ближайших соседей одинаково, но различается количество атомов во второй координационной сфере. (см. рис. 2).

Высокая скорость вычислений, присущая прямому методу Монте-Карло, связанная с отсутствием необходимости вычисления сил взаимодействия атомов, с одной стороны, и возможностью учета различных, заранее заданных конфигураций окружения адатома с другой стороны, позволяют в полной мере реализовать широчайшие возможности прямого метода Монте-Карло по моделированию роста кристаллической поверхности. Таким образом видно, что потенциал однокомпонентных моделей эпитаксиального роста в настоящее время еще далеко не исчерпан, и, следовательно, тема настоящей работы является актуальной.

Цель работы Цель работы состояла в разработке методики моделирования эпитаксиального роста методом МПЭ поверхности кристаллов типа $A^{III}B^V$, учитывающей наличие адатомов во второй координационной сфере, при помощи однокомпонентной монте-карловской модели роста и анализе модели устойчивости роста поверхности в различных режимах роста.

Достижение поставленной цели потребовало решения следующих конкретных задач:

1. разработки однокомпонентной модели эпитаксиального роста и отжига поверхности, базирующейся на прямом методе Монте-Карло. В данной модели должно быть введено различие в энергиях активации для адатомов, у которых отличается конфигурация окружающих атомов в пределах первой и второй координационных сфер.
2. Упрощения численной процедуры расчета роста путем предварительного рассмотрения всех возможных конфигураций окружения моделируемого адатома и физически корректного задания соответствующих величин энергетических барьеров для перескока моделируемого адатома.
3. Моделирования роста и отжига поверхности и существенного расширения существующих аналитических моделей стабильного роста поверхности, а также пересмотре границ применимости таких моделей.

Научная новизна работы

1. Впервые разработана однокомпонентная модель роста и отжига поверхности, базирующаяся на прямом методе Монте-Карло, в которую для каждой конфигурации окружения моделируемого адатома введен свой индивидуальный набор значений энергий активации перескока в каждую сторону. Такая модель впервые позволила учитывать в расчетах край атомной ступени как характерный объект на поверхности кристалла, отличающийся от набора адатомов, выстроенных в ряд.
2. Впервые предложен способ увеличения быстродействия расчетной модели, основанный на предварительном вычислении всех возможных энергий активации прыжка для каждой конфигураций окружения моделируемого адатома.
3. Впервые построена аналитическая модель образования дефектов в режиме роста *kink — flow*, определяющая новые границы стабильного роста для этого режима. Проведено компьютерное исследование стабильности режимов роста, которые не описываются существующими аналитическими моделями.

4. Впервые продемонстрирован механизм влияния волнообразной формы атомных ступеней на поверхности, разориентированной в направлении $[010]$, на скорость коалесценции квантовых точек. Проведено компьютерное моделирование процесса подавления коалесценции при формировании массива квантовых точек.

Практическая ценность

Практическая ценность разработанной методики компьютерного моделирования и, созданной на ее основе численной модели, состоит в том, что с ее помощью стало возможным исследовать эффекты, обусловленные диффузией адатомов в потенциальной канаве у края атомной ступени, и расширить теорию роста атомных ступеней, исследуя развитие неустойчивости роста поверхности, инициированное дефектами роста.

Удалось в рамках одной модели продемонстрировать режимы устойчивого и неустойчивого роста, а также режим спонтанного формирования волнообразной структуры ступеней. Благодаря применению этой модели появилась возможность объяснять данные эксперимента при оправданных затратах времени на расчет.

В частности, разработанная программа численного моделирования продемонстрировала механизм образования волнообразной структуры краев ступеней на вицинальных гранях GaAs, полученных из сингулярной грани (001) разориентированной в направлении $[010]$. Похожая структура наблюдалась в экспериментах [19]. Важно отметить, что такая структура края ступени играет заметную роль в создании гетероструктур с квантовыми точками при помощи молекулярно-пучковой эпитаксии [4].

Результаты работы подтверждают тот факт, что возможно управлять спонтанным формированием регулярной структуры атомных ступеней на поверхности кристалла на вицинальных подложках с изначальным направлением ступеней, не совпадающим с направлением плотной упаковки.

Основные положения, выносимые на защиту

1. Разработанная на основе метода Монте-Карло однокомпонентная модель роста и отжига поверхности отражает существенные различия в энергиях активации перескока для моделируемого адатома на поверх-

ности и у барьера Швевеля. Это обеспечивается при помощи анализа положения окружающих атомов из первой и второй координационных сфер.

2. Учет взаимодействия с адатомами из второй координационной сферы расширяет возможности модели. В результате учета этого взаимодействия удалось получить при расчетах режим роста *kink – flow*, а также волнообразные ступени, имеющую качественное сходство со ступенями, получаемой в эксперименте.
3. Использование в численной модели роста априорного анализа всех возможных конфигураций окружения существенно упрощает процедуру моделирования, поскольку время, необходимое для вычисления следующего шага для данной конфигурации, не зависит от сложности конфигурации вследствие того, что все значения энергий активации заданы заранее и при расчете извлекаются из таблицы.
4. Разработанная аналитическая модель образования одномерных зародышей у края ступени модифицировала условия стабильности роста поверхности в режиме *kink – flow*, а компьютерное моделирование продемонстрировало видоизменение этих зародышей за пределами границ применимости аналитической теории.
5. Спонтанное формирование на разориентированной поверхности волнообразных ступеней образует подложку, оптимальную для выращивания массивов однородных по размерам квантовых точек.

Апробация работы

Результаты работы были представлены на международной конференции Nanostuctures: Physics and technology, St.Petersburg, Russia, 26-30 June, 1995; 11-th International Conference on Ternary and Multinary Compounds, 8-12 September, Salford,USA 1997; 1997 Joint International Meeting -the 192nd Meeting of The Electrochemical Society, Inc. and the 48th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry -ECS Paris,France August 31-September 5,1997 ; International Conference on Advanced Materials ICAM'97

European Materials Research Society Spring Meeting E-MRS'97 June 16-20, 1997, Strasbourg, France; MRS 1997 Fall Meeting, December 1-5, Boston, MA; 24th International Conference on the Physics of Semiconductors Israel, Jerusalem 2-7 August, 1998; Tenth International Conference on Molecular Beam Epitaxy, 31/08-04/09 1998, Cannes, France; International conference «Physics at the Turn of the 21st century» September 28-October 2, 1998, St. Petersburg, Russia; The Fock School on Quantum and Computational Chemistry, Novgorod, Russia, 2001; Nanostuctures: Physics and technology, St. Petersburg, Russia, 26-30 June, 2006

Публикации

По результатам диссертации опубликовано 4 статьи и сделано 12 докладов на конференциях. Список приведен в конце автореферата.

Объем работы

Диссертация состоит из пяти глав, введения и заключения, включает 32 рисунка, список литературы из 77 наименований, полный объем диссертации 113 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность исследуемой проблемы, сформулирована цель и задачи диссертационной работы, перечислены полученные в диссертации новые результаты, их практическая ценность, представлены положения, выносимые на защиту и описана структура диссертации.

Первая глава посвящена обзору литературы. В первом параграфе перечислены наиболее известные аналитические модели послойного роста поверхности посредством продвижения ступеней. Приведено описание ряда моделей, в которых наблюдаются режимы стабильного и нестабильного роста поверхности в режиме продвижения ступеней. Далее обосновывается выбор объекта моделирования роста, который обеспечивает возможность исследования стабильности роста на разориентированных ступенях. В наибольшей степени для исследования стабильности роста подходит образованная ступенями вицинальная поверхность.

Во втором параграфе изложены идеи двух основных методов моделирования роста поверхности кристалла - метода молекулярной динамики и прямо-

го метод Монте-Карло. Рассказано о взаимосвязи экспериментальных данных по дифракции высокоэнергетичных электронов с данными моделирования. В силу необходимости моделирования поведения атомных ступеней на поверхности размерами, по крайней мере, порядка 1000×1000 постоянных решетки делается выбор в пользу моделирования методом Монте-Карло.

В третьем параграфе описаны физические основы метода и алгоритм моделирования. Кратко описаны наиболее известные монте-карловские модели «твердое на твердом» для геометрии «1+1», описывающей квазидвумерный рост в том случае когда нависания в вертикальном направлении запрещены, и, соответственно, для геометрии «2+1», описывающей квазитрехмерный рост также при запрете нависаний.

В четвертом параграфе сформулированы две проблемы, возникающие при моделировании роста поверхности методом Монте-Карло. Первая состоит в том, что «энергия связи» между атомами и высота активационного барьера для перескока напрямую не связаны между собой. При моделировании эпитаксиального роста поверхности GaAs адатом галлия может быть связан как одной, так и двумя связями с поверхностью. Следовательно, усредненная энергия активации в общем виде не является ни энергией связи $Ga - As$, ни энергией связи $Ga - As_2$. Вторая проблема состоит в том, чтобы адекватно трактовать результаты моделирования соединений типа $A^{III}B^V$, полученные при использовании кубической модели "твердое на твердом". Далее представлена общая схема моделирования методом Монте-Карло на двумерной подложке при помощи однокомпонентной модели.

В заключительном параграфе обсуждены работы, в которых были сделаны попытки усовершенствовать расчетную модель посредством учета краевой диффузии.

Вторая глава посвящена описанию компьютерной модели эпитаксиального роста поверхности.

В первом параграфе выбирается объект моделирования - вицинальная поверхность. В силу того, что на реальных поверхностях кристаллов в том или ином виде присутствуют разнообразные дефекты, то все процессы роста такой поверхности в общем случае будут определяться именно этими дефектами. Помимо выхода дислокаций на поверхность, которые детально описаны

в литературе, существуют еще точечные дефекты, и неоднородности поверхности. Таким образом, для моделирования роста плоской поверхности необходима модель, включающая в себя огромное количество нерегулярных объектов. А на разориентированных поверхностях все значимые процессы роста и отжига протекают вблизи краев ступеней, которые являются сложными, но регулярными объектами. Далее, в этом же параграфе доказана необходимость применения именно циклических граничных условий при моделировании разориентированной поверхности.

Во втором параграфе описана методика задания энергетических параметров модели. В работе использованы понятия "ближайшие атомы" и "энергия активации диффузии для перескока адатома на соседнюю позицию", и не используются такие понятия как "число связей" и "энергия связи". В этой модели мы пренебрегаем рядом маловероятных процессов, таких как вырывание атома из плоскости на поверхность, выход на поверхность атома встроенного в ступень и переход адатома с нижележащей террасы на вышележащую. Эти упрощения можно считать правомерным, поскольку в пределах времени формирования какой-либо структуры атомных ступеней, маловероятные процессы не смогут сыграть сколько-нибудь заметную роль. Все эти процессы требуют одновременно разрыва связей с поверхностью и с несколькими соседними атомами, в то время как альтернативные процессы, приводящие к тем же результатам - к примеру, выход из потенциальной канавы вблизи края ступени на поверхность с последующим испарением, требуют последовательного разрыва связей. Таким образом, количество атомов, перешедших в единицу времени напрямую на вышележащую террасу будет в $e^{-E_s/kT}$ (где E_s -энергия связи атома с поверхностью) раз меньше, чем адатомов, которые ушли на нижележащую.

На рис. 3 показаны различные возможные положения адатома в процессе расчета. Поскольку вероятность обнаружить адатом на поверхности в конфигурациях окружения, приведенных на рисунках 3а-3е, выше, чем, к примеру, адатом, окруженный другими адатомами, как показано на рисунке 3з. На рисунках 3б-3е адатом находится в контакте с атомной ступенью, а любая отличная конфигурация окружения может возникать либо как результат зародышеобразования, либо как результат столкновения адатома, диффундиру-

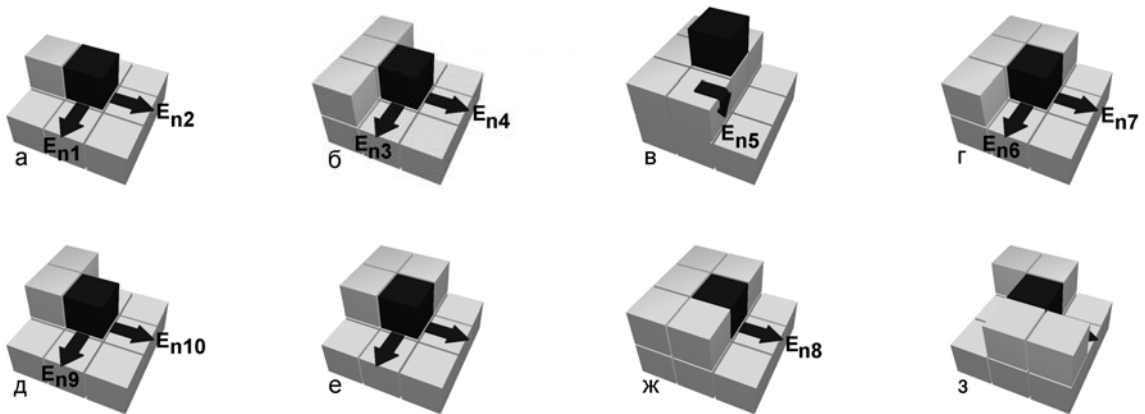


Рис. 3. На рисунке представлены различные конфигурации окружения адатома, диффундирующего по поверхности (адатом обозначен темным цветом). Стрелками показаны возможные направления прыжков адатома в каждом случае. Энергии активации прыжка в каждом направлении для каждой конфигурации являются параметрами модели и обозначаются $E_{n1} \dots E_{n12}$.

ющего вдоль ступени, с одиночным адатомом,двигающимся по поверхности. Других способов сформировать конфигурацию окружения, отличную от показанной на рисунке 3б-3е, не существует. Оценим отношение среднего времени образования любой конфигурации, отличной от показанной на рисунке 3б-3е, к среднему времени образования конфигурации показанной на рисунке 3б-3е. Это отношение пропорционально величине a^2c , где a - это постоянная решетки, а c - концентрация адатомов на поверхности. Ясно, что это отношение много меньше единицы при любых физически допустимых температурах отжига. Поэтому мы предположили, что расчет добавочных энергий активации прыжка адатома для всех конфигураций, отличных от показанных на рисунке 3б-3е, можно скомбинировать из добавочных энергий активации адатома в уже рассмотренных на рисунках 3а-3е конфигурациях окружения. Два примера приведены на рисунках 3ж и 3з. На рисунке 3ж показан адатом, для которого добавочная энергия активации прыжка в любом из двух возможных направлений равна $E_{n9} + E_{n3}$. Таким образом, с учетом возможного наличия в соседних позициях в первой и во второй координационной сферах соседнего адатома, гладкой поверхности вакансии мы рассчитываем $3^8 = 6561$ конфи-

гураций, где δ - число позиций в первой и второй координационных сферах. Темп любого из скачков адатома определяется соотношением Аррениуса

$$p_{lm} = \nu_0 \exp(-(E_{dm} + E_n)/kT)$$

где ν_0 есть частота вибрации адатома на поверхности, T - температура подложки и k_B - постоянная Больцмана, E_n это комбинация из $E_{n1} - E_{n10}$ (а для анизотропного случая - $E_{n1} - E_{n10}$ и $E_{n1'} - E_{n10'}$, где $E_{n1'} - E_{n10'}$ - аналоги $E_{n1} - E_{n10}$ для другого направления), а E_{dm} - это соответственно либо E_{d2} . либо E_{d1} . E_n и E_{dm} определяются непосредственно конфигурацией окружения l и направлением прыжка m .

В заключительном параграфе, начиная с выбора размера моделируемой поверхности, описана программа- симулятор эпитаксиального роста. Далее детально описаны такие важные составляющие компьютерной модели как генератор случайных чисел и методика его проверки в применении к модели роста. Затем представлена методика проверки корректности задания энергетических параметров модели. Уделено внимание разрешению некоторых особых случаев поведения моделируемых адатомов на поверхности, такие как падение адатома из газовой фазы на диффундирующий по поверхности адатом и коррелированное движение независимых адатомов. И в заключении параграфа приведены сведения о методе хранения и представления данных, получаемых в результате моделирования.

В третьей главе рассмотрены результаты моделирования.

В первом параграфе описано влияние размера моделируемой подложки на результаты расчетов для различных исходных поверхностей с учетом краевой диффузии и без. В целом, если параметры модели соответствуют условиям, при которых решались задачи о стабильности роста [6, 13], то результаты моделирования не противоречат результатам расчетов и укладываются в предсказанные теорией рамки. Неожиданностью стало возникновение неустойчивости, зависящей от размера исходной поверхности.

Во втором параграфе описан характер обнаруженной неустойчивости и определены параметры модели, существенно влияющие на найденный механизм разрушения стабильного роста. Для того, чтобы определить источник возникшей неустойчивости - два слипшихся адатома в потенциальной канаве у края ступени, пришлось практически покadroво изучать "снимки поверхно-

сти”, просматривая в обратную сторону последовательность этих ”снимков”.

В третьем параграфе делается качественная оценка возникновения нового механизма неустойчивости. Оказалось, что процесс образования в потенциальной канаве у края атомной ступени квазиодномерного зародыша, состоящего из 2х атомов - ’двойки’, существенно изменяет всю задачу об устойчивости роста ступени. Мы проводим качественную оценку влияния этого процесса на стабильность роста в исследуемом режиме *kink – flow*. Обозначим поток на поверхность как J , коэффициент диффузии в канаве $D = a^2/2\tau_0$ и если время роста монослоя T_{ml} , то

$$J = \frac{1}{T_{ml}a^2}$$

Характерное время диффузии адатома вдоль потенциальной канавы у края ступени между ближайшими изломами обозначим как

$$\tau_D \sim L^2/D \quad (0.1)$$

Процесс роста и образования ”двоек” выглядит так: в потенциальную канаву у края ступени, ограниченную изломами (см. врезку на Рис.1), с нижней террасы попадает адатом и за время порядка τ_D встраивается в излом за счет диффузии вдоль потенциальной канавы у края ступени. Отметим, что мы предполагаем глубину потенциальной канавы достаточной для того, чтобы исключить из рассмотрения процесс выброса атома из канавы обратно на террасу. Затем в течение весьма длительного промежутка времени порядка $\tau_J = \frac{a^2}{\Lambda L} T_{ml}$ потенциальная канавка у края ступени пуста. Здесь τ_J - это средний временной интервал между выпадением атомов из газовой фазы на участок поверхности размерами $L \times \Lambda$. Далее, в процессе заполнения одного монослоя этот процесс повторится $\frac{L\Lambda}{a^2}$ раз. Для образования самой ”двойки” необходимо, чтобы в течение того времени, пока находящийся в потенциальной канаве адатом не успел встроиться в поглощающий излом, в этой канаве оказался еще один адатом. После этого либо образуется ”двойка”, либо ближайший к поглощающему излому адатом встроится в него. В результате дальнейших расчетов получаем, что ситуация, когда в потенциальной канаве между изломами существуют 2 атома одновременно, образуется в среднем

$$N = \left(\frac{L}{a}\right)^4 \left(\frac{\Lambda}{a}\right)^2 \frac{\tau_0}{T_{ml}} \quad (0.2)$$

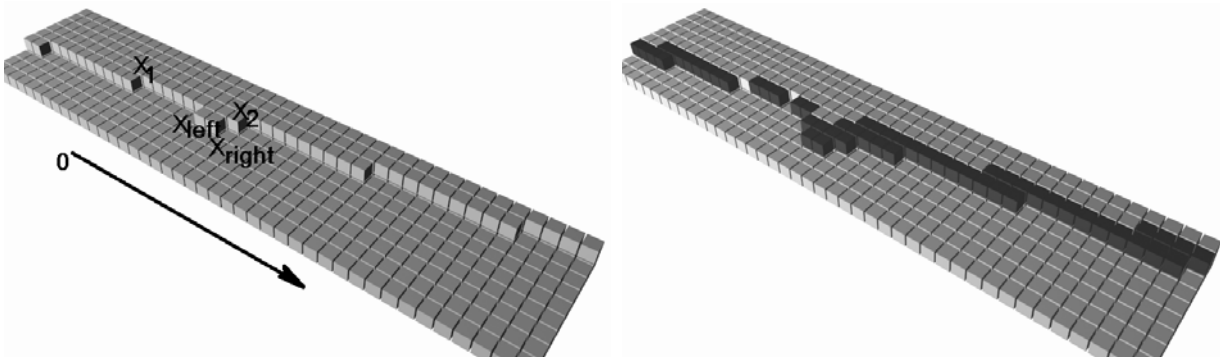


Рис. 4. а атомная ступень, разделенная изломами на участки равной длины, и "двойка" между двух изломов. б- вид ступени в момент, предшествующий полному заполнению ряда атомов между "двойкой" и изломом. Изгиб ступени.

раз за время роста монослоя.

Четвертая глава посвящена разработке и построению аналитической модели формирования одномерных зародышей у края ступени.

Диффузия вдоль края ступени приводит к тому, что адатом заметное время обитает в потенциальной канаве вблизи края ступени, не встраиваясь в излом, и результатом этого становится образование "двойки". Более того, образование "двойки" в моделях с диффузией вдоль края ступени неизбежно. Вопрос только во временном факторе.

Разместим между двумя ближайшими изломами "двойку". Поскольку "двойка" - это одномерный зародыш на краю ступени, то его будет удобно описывать при помощи двух координат - координаты его левого края x_{left} , и координаты его правого края x_{right} . (См Рис.4а) Запишем систему уравнений, описывающую движение изломов с координатами x_1 и x_2 - это изломы, между которыми расположена "двойка", и изломов x_{left} и x_{right} , являющихся, соответственно, левой и правой границами "двойки" (Рис.4а.). Мы рассмотрим ситуацию, при которой изломы x_1 и x_{left} , достигнув один другого, образуют заполненный ряд атомов, и при этом излом x_1 перескакивает в положение излома x_{right} .

Мы продемонстрировали, что можно уменьшать вероятность образования "двоек" уменьшая как расстояние между ступенями и изломами, так и

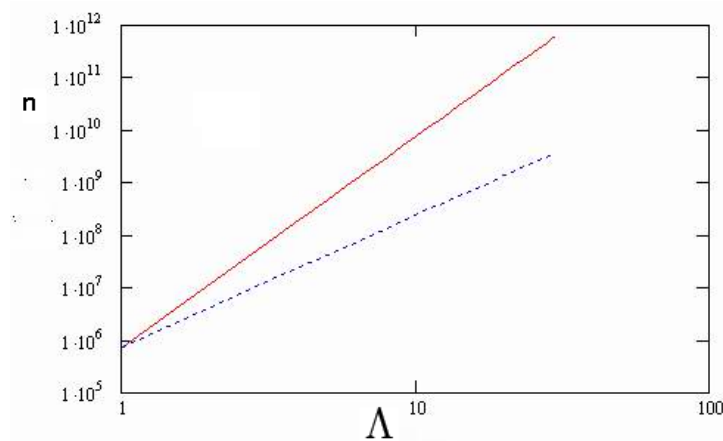


Рис. 5. Зависимость минимальной концентрации "двоек" (нижняя прямая) и максимальной (верхняя прямая) от расстояния между ступенями Λ при постоянной решетке 3\AA . Видно, что с уменьшением угла разориентации увеличивается Λ и растет количество дефектов.

уменьшая скорость роста. Но уж коль скоро двойка возникла, то амплитуда изгиба ступени и длина основания, образовавшегося за время, пока заполняется один ряд атомов между "двойкой" и поглощающим изломом, зависит только от расстояния между изломами и ступенями, а от потока не зависит.

А средняя концентрация "двоек" n на поверхности будет заключена в пределах

$$\frac{2}{3} \frac{1}{a^2} \left(\frac{\Lambda}{a}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{\tau_0}{T_{ml}} < n < \frac{2}{3} \frac{1}{a^2} \left(\frac{\Lambda}{a}\right)^4 \frac{\tau_0}{T_{ml}}$$

При угле разориентации около 2° градусов и постоянной решетки в 3\AA концентрация дефектов, возникших в процессе роста одного монослоя, составит от $3 \cdot 10^9$ до $6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, а при угле разориентации около 6° градусов такая концентрация составит от $2 \cdot 10^8$ до $7 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$. Видно, что уменьшение расстояния между ступенями всего в 3 раза уменьшает концентрацию "двоек" на 2 порядка.

Зависимость концентрации дефектов от Λ представлены на Рис.5. Видно, что с ростом угла разориентации количество дефектов падает, но увеличение угла ведет к уменьшению L и Λ .

К сожалению, аналитические модели из предыдущих глав ограничены в допустимых углах и направлениях разориентации поверхности. При помощи компьютерного моделирования эта проблема разрешается. Особый интерес представляют ступени со сверхмалым расстоянием между изломами. С одной стороны на таких ступенях образование "двоек" маловероятно, но с другой стороны такие ступени очень близки к модели обычного *step – flow* поскольку диффузии вдоль края ступени как такового нет в силу высокой плотности изломов. Предельный случай - это такое направление разориентации поверхности, при котором расстояние между изломами равно одной постоянной решетки. В первом параграфе представлены результаты моделирования долговременного развития неустойчивости на поверхностях с вышеуказанными направлениями разориентации.

Во втором параграфе приведены результаты моделирования поверхности, разориентированной в двух направлениях и продемонстрирован эффект спонтанного формирования волнообразной структуры краев ступеней в зависимости от глубины потенциальной канавы у края ступени.

В третьем параграфе рассматривается влияние анизотропии энергий активации прыжка на форму поверхности. Результаты моделирования свидетельствуют о том, что даже значительная анизотропия не сказывается существенно на формировании волнообразной структуры поверхности, а только влияет на форму самих изгибов ступеней.

В четвертом параграфе проведено компьютерное моделирование процесса поверхностной диффузии материала квантовых точек и доказано, что волнообразные ступени существенно снижает скорость обмена материалом между ближайшими точками, что заметно тормозит процесс коалесценции и, следовательно, способствует формированию более однородных массивов квантовых точек.

Далее показано, как разориентированная подложка, содержащая массив волнообразных ступеней способствует формированию упорядоченного массива квантовых точек на поверхности. Для этого проанализированы экспериментальные данные по выращиванию квантовых точек на поверхностях, разориентированных на 1° , 2° and 6° градусов, приведены гистограммы распределения квантовых точек на этих поверхностях и рассмотрена АСМ образы как подло-

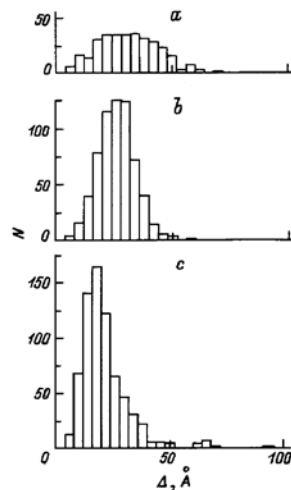


Рис. 6. Гистограммы распределения из работы [19] квантовых точек InAs по высоте (Δ) для вицинальных поверхностей GaAs с углами разориентации в град.: 1° (a), 2° (b) and 6° (c). N - количество точек

жек, так и поверхностей, содержащих квантовые точки (рис. 6).

Основные результаты

1. Создана оригинальная численная однокомпонентная модель роста поверхности, адаптированная к анализу поведения атомных ступеней на поверхности кристалла.
2. Показана эффективность априорного анализа и расчета всех возможных конфигураций окружения адатома в численной модели.
3. Основываясь на результатах моделирования, показана необходимость разработать теорию роста поверхности в режиме *kink – flow* для того, чтобы аналитически описать одномерное зародышеобразование, препятствующее стабильному росту поверхности.
4. Построена аналитическая теория возникновения одномерных зародышей у края ступени в режиме роста *kink – flow* и исходя из этого, определены условия стабильности для этого режима роста.
5. Проведено моделирование процессов спонтанного формирования волнообразной структуры атомных ступеней на поверхности (001) кристалла

типа $A^{III}B^V$, разориентированной в направлении [010].

6. С помощью разработанной модели продемонстрировано подавление поверхностной диффузии при образовании квантовых точек на поверхности с волнистыми ступенями. Показано, что именно волнистая структура дозирует поступление материала при формировании массивов квантовых точек, что приводит к сужению функции распределения квантовых точек по размерам.

Список публикаций:

1. В.П. Евтихийев, В.Е. Токранов, А.К. Крыжановский, А.М. Бойко, Р.А. Сурис, А.Н. Титков, А. Накамура, М. Ичида. Особенности роста квантовых точек InAs на вицинальной поверхности GaAs (001), разориентированной в направлении [010] // Физика и техника полупроводников.— 1998.— т. 32, № 7.—С. 1323–1327.
2. V.P. Evtikhiev, V.E. Tokranov, A.K. Kryganovskii, A.M. Boiko, R.A. Suris, A.N. Titkov. Characteristics of the InAs quantum dots MBE grown on the vicinal GaAs(001) surfaces misoriented to the [010] direction // Journal of Crystal Growth.— 1999.— т. 201/202,—С. 1154–1157.
3. V.P. Evtikhiev, A.M. Boiko, I.V. Kudryashov, R.A. Suris, A.N. Titkov and V.E. Tokranov. Control of density, size and size uniformity of MBE-grown InAs quantum dots by means of substrate misorientation // Semicond. Sci. Technol. 17 № 6 (June 2002) С. 545-550
4. А.М. Бойко, Р.А. Сурис . Роль одномерной диффузии в модели роста поверхности кристалла Косселя // Физика и техника полупроводников.— 2006.— т. 40, № 3.—С. 372–379.

Цитируемая литература:

- [1] I.N. Stranski, Zs. Phys. Chem, **136**, 259 (1928).
- [2] R. Becker, W. Doring. Ann. d. Phys., **24**, 719 (1935).
- [3] M. Volmer. Kinetik der Phasenbildung, Dresden-Leipzig, (1939).

- [4] Я. Френкель. Сборник к 50-летию акад. А.Ф. Иоффе, 44 (1950).
- [5] A.K. Myers-Beaghton, D.D. Vvedenski. Phys. Rev. B, **42**, 9720 (1990).
- [6] И.Л. Алейнер, Р.А. Сурис, ФТТ, **34**, 1522 (1992).
- [7] J. Tersoff, D.W. Denier van de Gon, R.M. Tromp. Phys. Rev. Lett., **72**, 266 (1994).
- [8] *O. Pierre-Louis, M.R. D'Orsogna, T.L. Einstein.*, // Phys. Rev. B.— 1999.— v. 82, N 18 X.—p. 3661—3664.
- [9] *N.C. Bartelt, T.L. Einstein and Ellen D. Williams.* // Surface Science Letters. — 240 (1990)L591-L598.
- [10] *Heike Emmerich.* // Phys. Rev. B.— 2002.— v. 65, 233406
- [11] Y. Tokura, H. Saito, T. Fukui , J. Crystall Growth. **94**, 46 (1989).
- [12] M.Lassig, Phys. Rev. Letters, **77**, num3, pXXXX, (1996)
- [13] G.S. Bales, A. Zangwill. Phys. Rev. B., **41**, 5500 (1990).
- [14] K. Shiraishi. Thin solid films, **272**, 345-363 (1996).
- [15] M. Itoh, G.R. Bell, A.R. Avery, T.S. Jones, B.A. Joyce, D.D. Vvedensky, Phys. Rev.Letters, **81**, 633 (1998).
- [16] *Методы Монте-Карло в стат. физике* под ред. К. Биндер (М. Мир, 1982).
- [17] T. Shirata, D.D. Vvedenski, M.R. Wilby, J. Zhang, J.H. Neave, B.A. Joyce. Phys. Rev. B, **46**, 6815 (1992).
- [18] Pavel Smilauer Dmitri D. Vvedensky //Step edge barriers on GaAs(001)
- [19] V.P. Evtikhiev, V.E. Tokranov, A.K. Kryganovskii, A.M. Boiko, R.A. Suris, A.N. Titkov Journal of Crystal Growth.— 1999.— т. 201/202,.—С. 1154–1157.
- [20] R.L. Schwoebel. J. Allp. Phys., **40**, 614 (1969).
- [21] В.В. Воронков Кристаллография. 1970. Т.15 С.13.
- [22] W. Burton, N.Cabrera, F. Frank, Phil. Trans., **A243**, 299-358 (1951).