Письма в ЖЭТФ, том 94, вып. 6, с. 477 – 480 © 2011 г. 25 сентября

Влияние дислокаций на форму островков при росте кремния на оксидированной поверхности Si(111)

А. А. Шкляев[+*1)], *К. Н. Романюк*[+*], *А. В. Латышев*[+*], *А. В. Аржанников*[*°]

[+]*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отд. РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

[*]*Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск, Россия*

[°]*Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера Сибирского отд. РАН, 630090 Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 28 июля 2011 г.

Методом сканирующей туннельной микроскопии исследован процесс формирования дислокационных и бездислокационных островков кремния при росте в отсутствие механических напряжений. Округлая форма островков, полученных при температурах роста 400–500 °C на оксидированной поверхности Si(111), ассоциируется с наличием в них дислокаций. Перенос атомов с оксидированной поверхности в островки происходит благодаря барьеру потенциальной энергии на границе SiO_2/Si. В форме островков, выращенных при 500–550 °C, преобладают грани {111} и {311}. Их появление свидетельствует о лимитировании роста стадией зарождения нового атомного слоя и об отсутствии в островках прорастающих дислокаций.

Исследование закономерностей роста лежит в основе получения кристаллов, как совершенных по кристаллической структуре, так и содержащих высокую концентрацию кристаллических дефектов, таких, как дислокации [1]. Дислокации создают энергетические уровни в запрещенной зоне кремния и существенным образом изменяют его электрофизические и оптические свойства [2, 3]. Дислокации могут как вводиться в исходный кристалл [2, 3], так и формироваться в процессе его роста [4]. Высокая концентрация дислокаций в кремнии может быть создана при росте на оксидированной поверхности кремния [5]. Дислокации в кремнии приводят к интенсивной люминесценции с длинами волн в области 1.5 мкм [2, 6, 7]. Нами исследовано влияние прорастающих дислокаций на морфологию поверхности на ранних стадиях роста кремния на оксидированной поверхности кремния при отсутствии механических напряжений.

Для роста кремния на поверхности слоя оксида кремния толщиной 0.2–2.2 нм на подложке Si(100) ранее был установлен механизм начальной стадии, который состоял в зарождении трехмерных островков без образования смачивающего слоя [8, 9]. Трехмерные островки в этом случае образуются не для уменьшения механических напряжений, как это имеет место при росте по механизму Странски–Крастанова. Их появление обусловлено действием кинетических факторов, таких, как стадия зарождения островков и наличие направленного переноса адатомов с поверхности SiO_2 на островок. Нами методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) проведено исследование формы островков кремния, выращенных на оксидированной поверхности Si(111). Установлено влияние термодинамических и кинетических факторов на форму и структуру островков.

Слои кремния выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии в ростовой камере установки СТМ. Чистая поверхность Si(111) получалась высокотемпературным отжигом образцов в сверхвысоковакуумных условиях. Оксидирование поверхности проводилось в ростовой камере посредством экспозиции образца в атмосфере кислорода при давлении $2 \cdot 10^{-6}$ Торр в течение 10 мин при температуре около 500 °C. При таких условиях образуется слой оксида кремния толщиной около 0.3–0.5 нм с разной степенью оксидирования атомов кремния [10]. Для краткости будем называть этот слой "SiO_2". Поток кремния получали посредством сублимации нагретой пластины кремния, расположенной на расстоянии 4 или 8 см от образца. Скорость осаждения определялась в результате анализа изображений СТМ, полученных после осаждения кремния на чистую поверхность Si(111), и обычно находилась в пределах 0.1–0.7 нм/мин.

Рост кремния на оксидированной поверхности Si(111) при температурах 400–500 °C начинается с образования островков округлой формы с концентрацией до 10^{13} см$^{-2}$. Коалесценция островков происходит, когда они достигают размера около 3 нм. При этом округлая форма островков сохраняется и при сравнительно больших покрытиях (~ 12 нм), исследован-

[1)]e-mail: shklyaev@thermo.isp.nsc.ru

ных в данной работе (рис. 1a, b). Анализ направлений нормалей к поверхности островков показал, что они

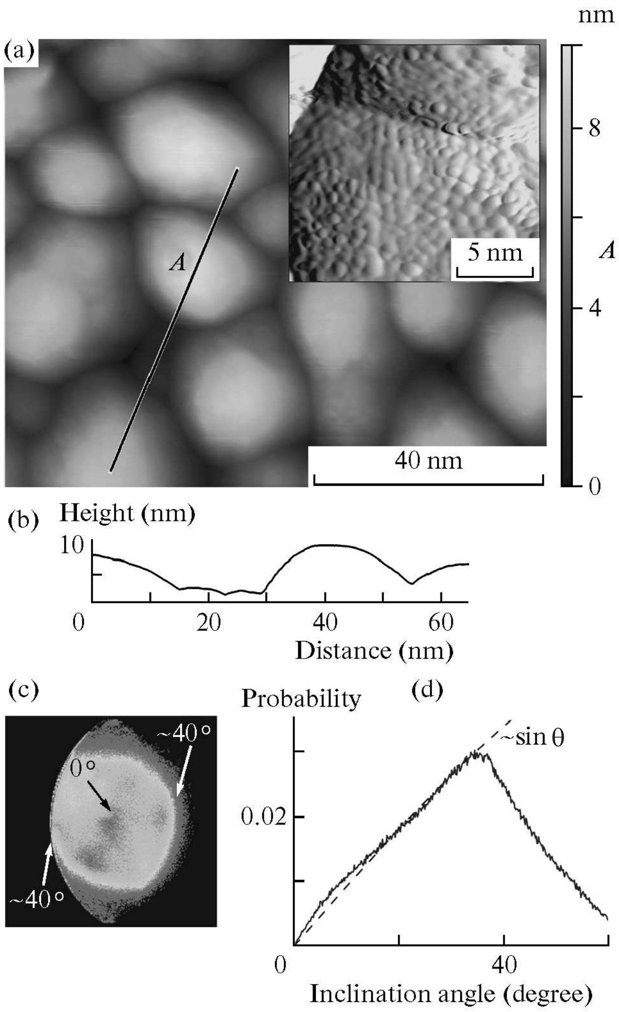

Рис. 1. (a) – СТМ-изображение поверхности после осаждения слоя кремния толщиной около 8 нм на оксидированную поверхность Si(111) при 450 °C. (b) – Профиль рельефа вдоль линии A, показанной на (a). (c) – Распределение по углам вероятности отклонения участка поверхности от нормали к поверхности образца (размер участка поверхности составлял 2×2 пикселя при размере всего изображения 1000×1000 пикселей). (d) – Распределение отклонений участков поверхности от нормали к поверхности по азимуту. Пунктирной линией показана зависимость, пропорциональная $\sin\Theta$. Для получения данных (c) и (d) использовалось СТМ-изображение поверхности размером 300×300 нм^2. Вставка показывает изображение фрагмента поверхности, полученное с большим увеличением

распределены почти равномерно в секторе сферы с $\Theta \leq 37°$, где Θ – угол отклонения локального участка поверхности от плоскости поверхности образца (рис. 1c). Аппроксимация формы островков сектором сферы ($\sim \sin\Theta$) хорошо совпадает с экспериментальной зависимостью (рис. 1d).

В данном диапазоне температур взаимодействие адатомов кремния со слоем SiO_2 на начальной стадии осаждения не приводит к образованию летучих продуктов реакции – молекул SiO [8]. Поэтому зарождение островков и их рост происходят непосредственно на поверхности SiO_2. В этом случае подложка кремния не влияет на структуру островков, и кристаллическая ориентация каждого островка является случайной.

Зарождение островка посредством реакции отдельного адатома с поверхностью SiO_2 [8] и рост трехмерных островков без образования смачивающего слоя свидетельствуют о том, что вероятность встраивания адатома кремния в островок значительно больше, чем вероятность его присоединения к поверхности SiO_2. Кроме того, поверхности SiO_2 и Si обладают разными энергиями адсорбции атомов кремния, которые создает барьер потенциальной энергии для диффузии адатомов через границу SiO_2/островок (рис. 2). Эти условия приводят к направленному переносу адатомов с поверхности SiO_2 в островок. Наличие такого переноса объясняет сам факт роста островков, но не объясняет их форму.

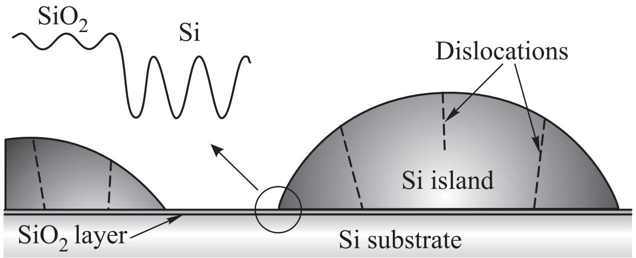

Рис. 2. Схематичное изображение овальных островков кремния на SiO_2 и формы барьеров потенциальной энергии для поверхностной диффузии адатомов в области границы SiO_2/Si

Рост кристалла происходит посредством присоединения адатомов к краям ступеней. Атомные ступени возникают в результате зарождения нового атомного слоя на террасе ступени. Кроме того, постоянным источником ступеней являются дислокации, выходящие на поверхность. Отсутствие террас большого размера в форме округлых островков свидетельствует о том, что атомные ступени всегда присутствуют на поверхности. В нашем случае источником ступеней являются дислокации, которые появляются при коалесценции островков с разной кристаллографической ориентацией. Наличие высокой концентрации атомных ступеней на поверхности островка сни-

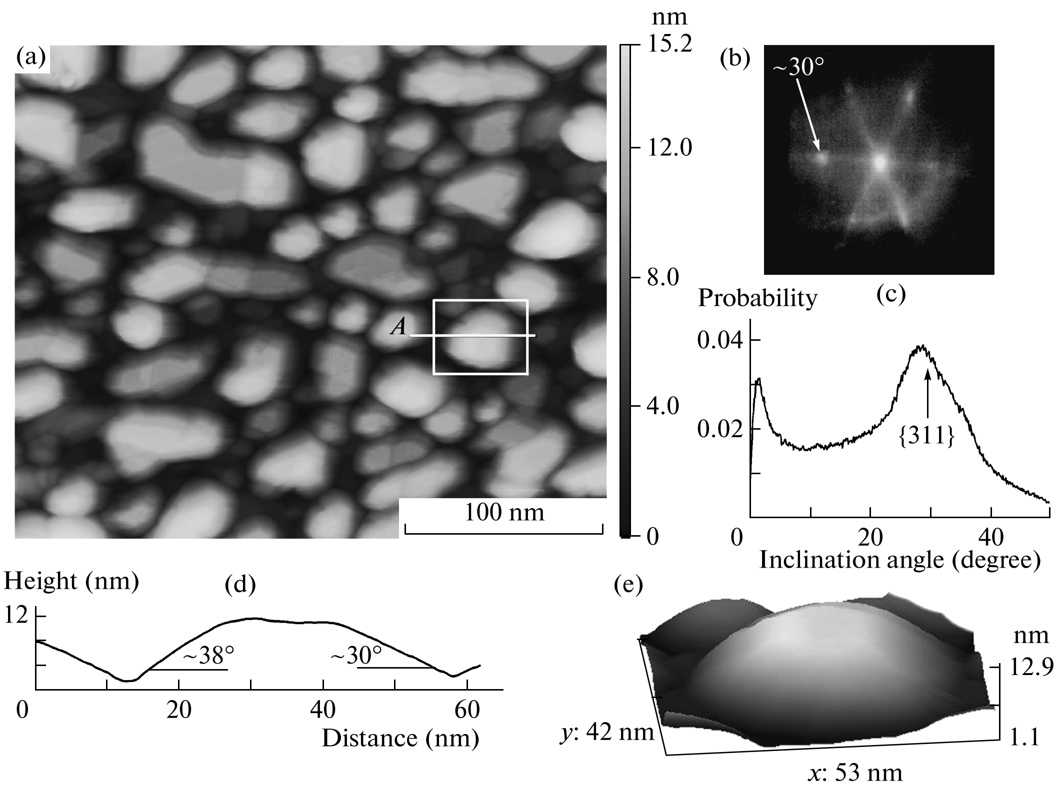

Рис. 3. (a) – СТМ-изображение поверхности после осаждения слоя кремния толщиной около 10 нм на оксидированную поверхность Si(111) при 500 °C. (b) – Распределение по углам вероятности отклонения участка поверхности от нормали к поверхности образца. (c) – Распределение отклонений участков поверхности от нормали к поверхности по азимуту. (d) – Профиль рельефа вдоль линии A, показанной на (a). (e) – Трехмерное изображение островка, обведенного белыми линиями на (a)

мает необходимость образования двумерного зародыша нового атомного слоя, то есть процесса, создающего большой кинетический барьер. Таким образом, форма округлых островков определяется кинетикой присоединения адатомов к атомным ступеням и термодинамикой, минимизирующей площадь поверхности посредством придания островкам формы, близкой к сектору сферы.

Осаждение кремния при температурах около 500 °C приводит к формированию эпитаксиальных островков. Такая возможность возникает в результате образования летучих продуктов реакции (молекул SiO) и, как следствие, появления участков чистого кремния [8]. Островки кремния существенно различаются по размеру и форме (рис. 3). При этом у них преимущественно образуется плоская вершина с ориентацией (111). Анализ ориентаций боковых сторон островков показал, что они отклонены от [111] в направлениях типа $[11\bar{2}]$ и $[\bar{1}\bar{1}2]$ (рис. 3) [11].

Как показано на рис. 3, среди отклонений в направлении $[\bar{1}\bar{1}2]$ преобладают плоскости, лежащие под углом около 29° к [111], которые соответствуют граням {311}. Распределение отклонений от [111] в направлении $[11\bar{2}]$ является более равномерным с небольшим преобладанием плоскостей, отклоненных на 22–31°. Им соответствуют грани типа $\{h\,k\,1\}$ с $h = k$ и величиной от 3 до 9.

Рост кремния при более высокой температуре (~ 550 °C) характеризуется появлением больших плоских островков (рис. 4). В этом случае формируются протяженные грани {311} на боковых сторонах островков, отклоненных в направлениях типа $[\bar{1}\bar{1}2]$, тогда как на боковых сторонах, отклоненных в направлениях типа $[11\bar{2}]$, протяженных граней с какой-либо одной ориентацией не наблюдается. Плоские вершины островков с ориентацией (111), полученные в результате выключения нагрева образца сразу после прекращения осаждения, содержат фрагменты реконструкции 7×7, а также вакансии и адатомы.

Форму бездислокационного кристалла при росте формируют медленно растущие грани. При этом скорость роста грани лимитируется процессом генера-

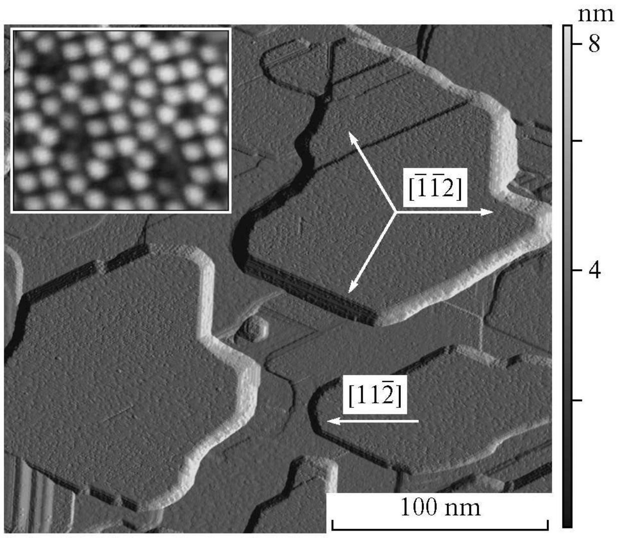

Рис. 4. СТМ-изображение поверхности после осаждения слоя кремния толщиной около 8 нм на оксидированную поверхность Si(111) при 550 °C. Вставка показывает наличие фрагментов реконструкции 7×7 на плоских вершинах островков с ориентацией (111). Нагрев образца был выключен в течение 5 с после перекрытия потока кремния

ции новых атомных ступеней, посредством образования зародыша нового атомного слоя. Появление зародышей на поверхности Si(111) происходит при участии 6–9 адатомов [12, 13] и поэтому требует их высокой концентрации. Зародышеобразование в этом случае является кинетическим фактором, определяющим морфологию поверхности. При этом наличие грани (111) большого размера в форме трехмерного островка кремния указывает на отсутствие в нем дислокаций, выходящих на поверхность. Отметим, что при температурах роста кремния около 600 °C и выше происходит послойный рост граней (111) и образования трехмерных островков не наблюдается.

Грани {311} образуют четырехгранные пирамиды при росте островков кремния на поверхностях Si(100) [14–17]. Они также наблюдаются как стабильные при отжиге образцов кремния с разной ориентацией поверхности [18, 19]. Нами показано, что грани {311}, наряду с гранями {111}, преобладают и в морфологии поверхности при росте островков на поверхности Si(111). Грань {111} имеет минимальную поверхностную энергию [20] и наименьшую скорость роста, которая ограничена стадией зарождения нового атомного слоя. Ее отсутствие в форме округлых островков свидетельствует о том, что энергетический выигрыш от ее появления является недостаточным по сравнению с влиянием на рост такого кинетического фактора, как постоянный источник атомных ступеней в виде дислокаций. В этих условиях трехмерные островки принимают форму, имеющую минимальную площадь поверхности.

1. А. А. Чернов, УФН **73**, 277 (1961).
2. Н. А. Дроздов, А. А. Патрин, В. Д. Ткачев, Письма ЖЭТФ **23**, 651 (1976).
3. В. В. Кведер, В. Я. Кравченко, Т. Р. Мчедлидзе и др., Письма в ЖЭТФ **43**, 202 (1986).
4. С. А. Тийс, Е. М. Труханов, А. С. Ильин и др., Письма в ЖЭТФ **92**, 429 (2010).
5. А. А. Шкляев, М. Ичикава, УФН **178**, 139 (2008).
6. Н. А. Соболев, ФТП **44**, 3 (2010).
7. А. А. Шкляев, А. В. Латышев, М. Ичикива, ФТП **44**, 452 (2010).
8. A. A. Shklyaev and M. Ichikawa, Phys. Rev. B **65**, 045307 (2002).
9. A. A. Saranin, A. V. Zotov, V. G. Kotlyar et al., Appl. Surf. Sci. **243**, 199 (2005).
10. T. Yasuda, S. Yamasaki, M. Nishizawa et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 037403 (2001).
11. B. Z. Olshanetsky and A. A. Shklyaev, Surf. Sci. **82**, 445 (1979).
12. B. Voigtlander, A. Zinne, T. Weber, and H. P. Bonzel, Phys. Rev. B **51**, 7583 (1995).
13. A. A. Shklyaev, M. Shibata, and M. Ichikawa, Surf. Sci. **416**, 192 (1998).
14. J. M. Bermond, J. J. Metois, X. Egea, and F. Floret, Surf. Sci. **330**, 48 (1995).
15. H. Hirayama, M. Hiroi, and T. Ide, Phys. Rev. B **48**, 17331 (1993).
16. A. A. Shklyaev and V. Zielasek, Surf. Sci. **541**, 234 (2003).
17. A. González-González, M. Alonso, E. Navarro et al., Nanoscale Res. Lett. **5**, 1882 (2010).
18. B. Z. Olshanetsky and V. I. Mashanov, Surf. Sci. **111**, 414 (1981).
19. K. Sudoh and H. Iwasaki, Phys. Rev. Lett. **87**, 216103 (2001).
20. L. Vescan, K. Grimm, and C. Dieker, J. Vac. Sci. Technol. B **16**, 1549 (1998).