

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 538.97:539.216.2:539.23

DOI: 10.17223/00213411/63/6/3

Ю.Ю. ЭРВЬЕ

ОБРАЗОВАНИЕ ДВОЙНЫХ СТУПЕНЕЙ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ (100): РОЛЬ ПРОНИЦАЕМОСТИ А-СТУПЕНЕЙ

Предлагается модель движения элементарных ступеней на двухдоменной поверхности кремния (100) при кристаллизации из молекулярного пучка. Модель учитывает возможность перехода адатома на соседнюю террасу до встраивания в излом на краю А-ступени (эффект проницаемости А-ступени). Показано, что проницаемость А-ступени способствует более быстрому сближению А- и В-ступеней и, следовательно, переходу к однодоменной поверхности. Причем для быстрого сближения ступеней достаточно лишь наличия обратного барьера Эрлиха – Швёбеля для присоединения адатомов к А-ступени с террасы В-типа. Прямой барьер (для присоединения с террасы А-типа) может отсутствовать, что согласуется с результатами квантово-химических расчетов.

Ключевые слова: кремний, поверхность, реконструкция, ступени, изломы, диффузия.

Введение

Динамика моноатомных ступеней на вицинальной поверхности Si(100) – (2×1) представляет интерес в плане подготовки поверхности, оптимальной для формирования различных полупроводниковых эпитаксиальных структур [1–3]. Исследования начальной стадии эпитаксиального роста кремния на данной поверхности показали, что при определенных условиях происходит быстрый (за время роста половины монослоя кремния) переход от двухдоменной поверхности к однодоменной за счет быстрого движения моноатомных ступеней В-типа при фактическом отсутствии движения ступеней А-типа [4]. В работе [5] такое быстрое сближение ступеней объясняется наличием прямого и обратного барьеров Эрлиха – Швёбеля [6, 7] для присоединения адатомов к краю А-ступени. Однако результаты квантово-химических расчетов указывают на отсутствие прямого барьера [8]. В настоящей работе предлагается модель движения ступеней, учитывающая проницаемость А-ступени, т.е. возможность переходов адатомов на соседнюю террасу без предварительного присоединения к изломам на краю ступени [9, 10]. Скорости перемещения ступеней определяются из решения соответствующей краевой задачи поверхностной диффузии адатомов. Для фигурирующих в краевых условиях кинетических коэффициентов и коэффициента проницаемости А-ступени используются выражения, полученные с помощью модели встраивания адатомов в проницаемую ступень [10]. Модель демонстрирует возможность быстрого сближения ступеней в отсутствие прямого барьера Эрлиха – Швёбеля.

Модель

Полагалось, что двухдоменная поверхность Si(100) представляет собой вицинальную поверхность, разориентированную относительно сингулярной грани (100) в направлении [110] на некоторый угол. На поверхности присутствуют моноатомные ступени двух типов – А и В, террасы которых имеют различные сверхструктурные домены: (2×1) (терраса типа А) и (1×2) (терраса типа В), соответствующие различной ориентации димерных рядов поверхностных атомов кремния [11] (рис. 1). В отсутствие десорбции концентрации адатомов на А- и В-террасах, n_i ($i = a, b$), удовлетворяют уравнениям непрерывности

$$D_i \frac{d^2 n_i}{dx^2} + F = 0, \quad (1)$$

где D_i – коэффициенты поверхностной диффузии; F – плотность потока адсорбирующихся атомов; x – координата вдоль оси, перпендикулярной ступеням (рис. 1).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://www.elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>