

Причины устойчивости трехбислойных островков и ступеней на поверхности Si(111)

© А.В. Зверев, И.Г. Неизвестный, И.А. Рейзвих, К.Н. Романюк, С.А. Тийс, Н.Л. Шварц[†], З.Ш. Яновицкая

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

(Получена 11 октября 2004 г. Принята к печати 26 октября 2004 г.)

Начальные стадии роста слоев Ge и Si на сингулярной поверхности Si(111) демонстрируют необычную морфологию ростовой поверхности при осаждении с низкой скоростью: образование треугольных островков высотой до трех атомных слоев. С помощью моделирования по методу Монте-Карло показано, что дополнительный барьер 0.5–0.6 эВ для встраивания атомов на димеризованные связи на краях треугольных островков приводит к ускоренному росту островков в высоту и к изменению ориентации треугольников. Предложена гипотеза, объясняющая начальный рост многослойных островков и ограничение их высоты тремя бислоями влиянием краевых димеров, ориентация которых изменяется при достижении ступени, перпендикулярной направлениям $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$, высоты в 3 бислоя. С помощью сканирующей туннельной микроскопии обнаружены новые особенности атомной структуры регулярных трехбислойных ступеней на поверхности Si(557). Результаты анализа изображений, полученных на сканирующем туннельном микроскопе, подтверждают гипотезу о формировании ряда димеров на краю трехбислойной ступени.

1. Введение

Метод самоорганизации широко используется для формирования низкоразмерных структур в процессе эпитаксиального роста [1,2]. Весьма привлекательным оказывается использование ступенчатых поверхностей Si(111) в качестве исходной подложки для роста „квантовых проволок“, так как на этой поверхности удается получить ступени с низкой плотностью изломов [3]. Недавно было показано, что поверхность Si(557) является многообещающей для формирования наноструктур посредством самоорганизации [4,5]. Эта поверхность представляет собой систему параллельных трехбислойных ступеней, чередующихся с периодом 5.73 нм [6].

Самоорганизация трехмерных островков в гетеросистемах на атомарно-чистой поверхности полупроводниковой подложки активно исследуется с целью получения ансамблей квантовых точек [7,8]. Известные теории рассматривают двумерно-слоевой рост как процесс образования зародышей моноатомной высоты, их дальнейший рост и коалесценцию, приводящую к заполнению атомного слоя [9,10]. Для появления трехмерных островков зародыши следующего слоя должны возникать на двумерных островках задолго до их коалесценции [11]. В гетеросистемах Ge/Si, InAs/GaAs(001) рост трехмерных островков начинается после формирования „смачивающего“ слоя, состоящего из нескольких атомных слоев (механизм Странского–Крастанова). Основной причиной перехода к трехмерному росту считаются напряжения, вызванные несоответствием параметров кристаллических решеток адсорбата и подложки.

Начальные стадии роста островков Ge и Si на атомарно-чистой поверхности Si(111) при малых скоростях осаждения ($\sim 10^{10} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$) демонстрируют особенности, не укладывающиеся в классические представления. Островки сначала растут по трехмерному механизму

и достигают высоты в три атомных слоя [12–14]. При дальнейшем осаждении островки увеличиваются в латеральных размерах, но перестают расти в высоту, и сливаются в сплошной смачивающий слой высотой три бислоя (ЗБС). Впоследствии рост идет в соответствии с известными представлениями: при осаждении Ge возникают трехмерные островки на смачивающем слое, а при осаждении Si рост идет по двумерному механизму.

От системы ЗБС-островков Ge на поверхности Si(111) с помощью метода комбинационного рассеяния света наблюдался ряд пиков [15], связанный с размерным квантованием фонового спектра Ge в направлении роста. Следовательно, можно ожидать квантование других физических параметров этих островков Ge на поверхности Si(111). Поэтому весьма полезно разобраться в причинах формирования и устойчивости ЗБС-островков Ge. В данной работе с помощью моделирования рассматриваются начальные стадии роста островков Ge на атомарно-чистой поверхности Si(111) до формирования смачивающего слоя и исследуется влияние возможной димеризации связей по краям островков на их морфологию.

К настоящему времени установлено существование нескольких типов димеров на поверхностях Ge и Si. На поверхности с ориентацией (001) два соседних атома объединяются в димер с димеризованной связью, в среднем параллельной подложке (горизонтальный димер G_s). Атомы, составляющие такой димер, являются вторыми соседями и оба имеют по две связи с подложкой. Такие димеры называют симметричными [16]. Димеры встраиваются в димерные ряды, образуя сверхструктуры типа (2×1) [17]. При диффузии адатома вдоль димерного ряда энергия активации диффузионного скачка значительно меньше, чем для поперечного скачка [18]. Детальные экспериментальные и теоретические исследования показали, что поверхность (001) является буклированно-димеризованной поверхностью [19,20].

[†] E-mail: natasha@phys.spy.isp.nsc.ru

Разница в высоте атомов Si в димере составляет, по данным разных авторов, 0.31–0.73 Å, и длины меж-атомных связей лежат в промежутке 2.25–2.32 Å. Это соответствует углу наклона димера G_s к плоскости (001) ~ 8 –13°.

В работе [16] описана структура несимметричных димеров G_a , образующихся на краю моноатомной ступени на поверхности Si(001). Эти димеры перпендикулярны краю ступени и симметричным димерам на верхней террасе. В несимметричных димерах один атом имеет три связи с первыми соседями и одну димеризованную связь, а второй атом имеет связи с первыми соседями и одну со вторым соседом в димере. На существование несимметричных димеров на поверхности (105) указывалось в работе [21].

Горизонтальные симметричные димеры с иным расположением связей, чем рассмотренные в [15], являются элементами сверхструктуры Si(111)-(7×7) [22]. Как показано в [23], вдоль края верхней террасы высотой 1 БС на Si(111)-(7×7) образуются горизонтальные димеры с общей связью вдоль ступени. В отличие от димеров в подложке на краях ячеек (7×7), где атомы в димере имеют по четыре насыщенные связи, граничные димеры $G_{(7\times7)ed}$, образующиеся вдоль 1 БС-ступени, имеют по две связи с подложкой и одну между собой. В [23] существование горизонтальных димеров на ступенчатой поверхности Si(111)-(7×7) подтверждено теоретическими расчетами в приближении сильной связи и экспериментальными данными сканирующей туннельной микроскопии.

В данной работе рассмотрено несколько вариантов формирования димеров перпендикулярно линии ЗБС-ступени на Si(111). Проведено детальное исследование изображений краев ЗБС-наноостровков Ge на поверхности Si(111) и ЗБС-ступеней на поверхностях Si(557), снятых на сканирующем туннельном микроскопе (СТМ). Получены новые данные об атомном строении регулярных ЗБС-ступеней на поверхности Si(557). Предложена гипотеза о возникновении ряда димеров, перпендикулярных краю ЗБС-ступени, которые ограничивают рост наноостровков Ge и Si тремя бислоями и стабилизируют высоту ЗБС-ступеней на чистой поверхности Si(111). Результаты анализа профилей ступеней подтверждают гипотезу о формировании ряда перпендикулярных димеров вдоль края ступени.

2. Начальные стадии роста Ge на Si(111) при малых скоростях осаждения

При низких скоростях осаждения Ge на поверхность Si(111) в работах [12–14] наблюдалось образование треугольных островков Ge высотой до трех слоев перед началом формирования смачивающего слоя. В работе [13] осаждение проводилось при скоростях осаждения на порядок ниже (10^{-2} – 10^{-3} БС/мин), чем

в [12] ($7 \cdot 10^{-2}$ БС/мин), и примерно при одинаковых температурах подложки (350–500°C). При более низких скоростях осаждения эффект треугольной формы и ограничение высоты тремя слоями выражены значительно более четко. В [12] описан также эффект возникновения многослойных треугольных островков Si на начальных стадиях гомоэпитаксии.

При температурах ниже 830°C на реальной поверхности Si(111) имеет место структурная перестройка (7×7) [22]. Зародыши эпитаксиальных островков Ge и Si имеют четко выраженную треугольную форму, со сторонами, идущими по границам полуячеек сверхструктуры. Нисходящие ступени, ограничивающие островок, перпендикулярны направлениям $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ [12]. Без структурной перестройки энергетически предпочтительней была бы противоположная ориентация границ. Тогда на один граничный атом приходилась бы одна оборванная связь, а не две, как при реальной ориентации.

Образование минимального островка Ge или Si высотой в один атомный слой происходит, когда небольшие кластеры (15–20 атомов по оценкам [24]) с аморфной структурой заполняют четыре соседние полуячейки структуры (7×7), причем в центре должна находиться F-полуячейка. Образовавшийся островок приобретает сверхструктуру (7×7) и далее какое-то время растет как двумерный, сохраняя треугольную форму [12–14].

Задолго до коалесценции однослойных островков Ge или Si на них возникают зародыши следующего слоя вблизи края или вершины треугольника, а не в середине островка. Второй слой, разрастаясь, заполняет весь нижележащий островок. При наблюдениях осаждения Si в работе [12] было показано, что размер нижнего слоя островка перестает увеличиваться, пока его полностью не покроет следующий слой. Эти обстоятельства свидетельствуют о поступлении атомов на вершину островка преимущественно с подложки, а не из потока. На островках Ge третий слой возникает на втором также вблизи края или вершины, а четвертый слой практически не формируется вплоть до коалесценции островков. После осаждения 0.5 БС Ge из примерно сотни островков 80% составляли островки высотой в три бислоя [13].

Осаждение Si или Ge велось на одинаково приготовленную поверхность Si(111), отожженную до 1250°C и охлажденную до нужной температуры непосредственно перед осаждением. Сходное поведение островков Si и Ge на начальной стадии осаждения позволяет предположить, что указанные выше особенности роста обоих веществ определяются свойствами поверхности Si(111), а разница параметров решетки Si и Ge на этой стадии не имеет решающего значения.

Имеется еще одно явление, свидетельствующее о повышенной устойчивости ступеней высотой в 3 БС. При отклонении подложки Si(111) в направлении $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$, ориентация нисходящих ступеней на vicинальных поверхностях Si(111) та же, что и у границ треугольных островков. Как показано в [25], на такой поверхности присутствуют только ступени высотой в 1

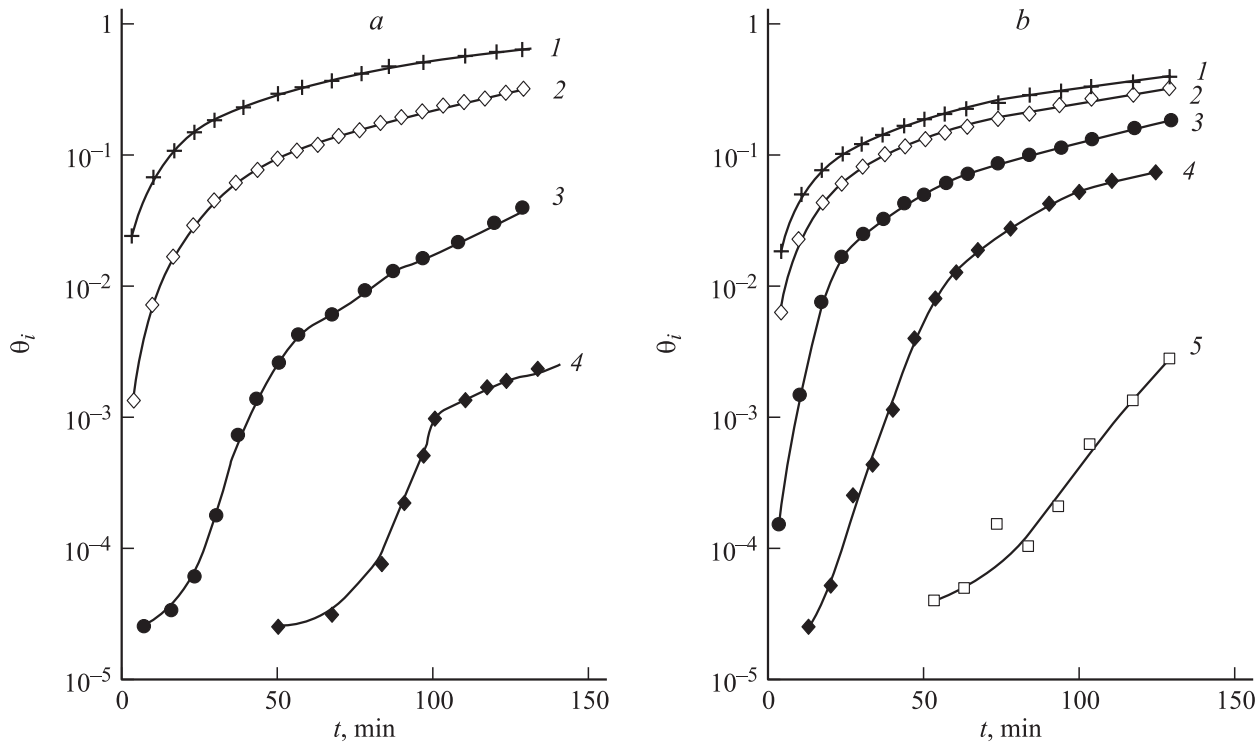


Рис. 1. Зависимости степени покрытия θ_i в разных атомных слоях от времени осаждения для $E_{11} = E_{22} = 1.3$ эВ, $E_{12} = 1.1$ эВ при $T = 653$ К, $V = 6.5 \cdot 10^{-5}$ БС/с. Нумерация кривых совпадает с нумерацией слоев $i = 1-5$, начиная от подложки. Вероятность встраивания атома в решетку P_{dim} : $a - 10^{-3}$, $b - 10^{-5}$.

или 3 БС. С увеличением угла отклонения увеличивается доля ЗБС-ступеней вплоть до образования структурно-совершенной поверхности (557), состоящей только из ЗБС-ступеней, разделенных террасами (111) шириной в одну ячейку (7×7) [6].

3. Моделирование

Для выяснения причин формирования островков высотой 3 БС было проведено моделирование начальных стадий роста Ge на поверхности Si(111). Для моделирования использовалась разработанная авторами кинетическая модель Монте-Карло эпитаксиального роста трехмерных слоев в системе с несколькими компонентами различной химической природы на подложке кристалла с решеткой типа алмаза [26]. Плоскость подложки соответствовала ориентации (111). Основными параметрами модельного кристалла являлись энергии связей атомов с ближайшими соседями и энергетический барьер E_{dim} при встраивании атома на то место в решетке, где он должен разрушить димеризованные связи. Так как моделировалось осаждение Ge на Si, были введены энергии связей Si-Si (E_{11}), Ge-Ge (E_{22}) и Si-Ge ($E_{12} = E_{21}$).

Согласно литературным данным, $E_{11} = 1.3$ эВ [27]. Значения E_{22} и $E_{12} = E_{21}$ варьировались так, чтобы плотность и размеры островков совпадали с данными сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) [13] при одинаковых условиях роста: температуре подложки T ,

скорости осаждения и равном количестве осажденного вещества. Влияние структурной перестройки (7×7) на диффузию осажденных атомов учитывалось эффективной величиной E_{12} , дающей значение плотности островков, совпадающее с экспериментом.

Пока нет данных о прямых экспериментальных исследованиях расположения атомов на границах многослойных островков Ge или Si на Si(111). Чтобы исследовать влияние димеризации атомов на краях островков на их морфологию, мы варьировали величину E_{dim} . Понижение вероятности встраивания атома в решеточное место ($P_{\text{dim}} = \exp(-E_{\text{dim}}/kT)$) происходило для всех случаев, когда соседние атомы в кристаллической решетке имели оборванные связи, направленные друг к другу, т. е. могли димеризоваться. При этом ориентация таких димеров зависит от расположения краевых атомов в кристаллической решетке. Димеры могут располагаться как вдоль, так и поперек края островка.

Из сопоставления модельных и экспериментальных данных при $T = 380^\circ\text{C}$ и скорости осаждения $V = 3.9 \cdot 10^{-3}$ БС/мин получено значение $E_{12} = 1.0-1.1$ эВ. Именно этот параметр наиболее сильно влияет на плотность островков. Косвенно по экспериментальным данным [28,29] можно предположить, что величина E_{22} должна превышать E_{11} , но не намного. Мы варьировали E_{22} в интервале 1.3-1.5 эВ. При $E_{\text{dim}} = 0.5-0.6$ эВ и $P_{\text{dim}} = \exp(-E_{\text{dim}}/kT) = 10^{-4}-10^{-5}$ рост островков в высоту начинался задолго до их коалесценции для значений $E_{12} = 1.0-1.1$ эВ и $E_{22} = 1.3-1.5$ эВ.

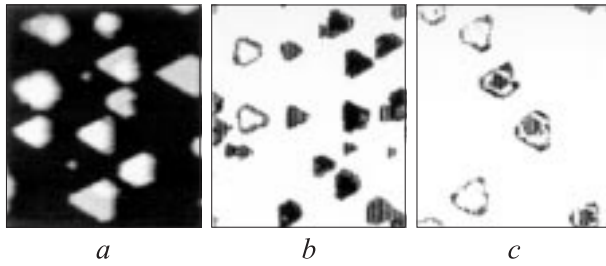


Рис. 2. Островки на реальной (*a*) и модельной (*b, c*) поверхностях Si(111) одинаковой площади $77 \times 67 \text{ нм}^2$, при $T = 653 \text{ К}$, $V = 6.5 \cdot 10^{-5} \text{ В}$ и степени покрытия $\theta = 0.5 \text{ БС}$. *a* — СТМ-изображение экспериментальной поверхности с островками Ge высотой в 2 БС и 3 БС (чем выше островок, тем светлее его изображение). *b, c* — модельные поверхности с параметрами диффузии: *b* — $E_{11} = E_{22} = 1.3 \text{ эВ}$, $E_{12} = 1.1 \text{ эВ}$; $P_{\text{dim}} = 10^{-4}$; *c* — $E_{22} = 1.5 \text{ эВ}$, $E_{12} = 1.0 \text{ эВ}$, $P_{\text{dim}} = 10^{-5}$.

Уменьшение P_{dim} приводит к ускорению зарождения более высоких атомных слоев, что иллюстрируется на рис. 1, где приведены зависимости количества атомов в разных атомных слоях от времени осаждения при двух значениях P_{dim} .

На рис. 2 приведены изображения реальной и модельных поверхностей одного размера с островками, полученными при одних и тех же условиях осаждения и равном количестве осажденного вещества. Плотность островков на модельной и экспериментальной поверхностях одинакова в пределах флуктуаций. При меньших значениях энергетического барьера E_{dim} наблюдался рост двумерных, а не трехмерных островков. Островки на модельной и реальной поверхностях различались по своей ориентации при $P_{\text{dim}} \geq 10^{-4}$ (рис. 2, *a, b*). Уменьшая вероятность встраивания атомов на димеры, мы тем самым уменьшаем скорость присоединения атомов только к ступеням типа $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$, не меняя этой скорости для ступеней $\langle 11\bar{2} \rangle$, где образование димеров не происходит. Поэтому, начиная с некоторых значений $P_{\text{dim}} < 10^{-4}$, ступени типа $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ начинают превалировать в огранке островков. Наилучшее совпадение модельной и экспериментальной системы островков по плотности, размерам и ориентации получено при $E_{11} = 1.3 \text{ эВ}$, $E_{12} = 1.1 \text{ эВ}$, $E_{22} = 1.5 \text{ эВ}$ и $P_{\text{dim}} = 10^{-5}$.

4. Гипотеза

При моделировании мы не могли получить наблюдаемое экспериментально ограничение высоты островков тремя бислоями. Заполнение четвертого и более высоких слоев при осаждении на модельной поверхности росло существенно быстрее, чем в эксперименте. Прекращение роста островков в высоту может произойти, если при достижении высоты в 3 БС изменяются условия диффузии атомов через их границы. Предположительная схема, которая позволяет объяснить многослойный рост и последующее ограничение островков по высоте тремя бислоями как для Ge, так и для Si, сформулирована нами

на основе представлений о том, что расположение димеров на границах может зависеть от высоты островка.

После формирования на островке второго бислоя, который приобретает структурную перестройку (7×7) , атомы в первом бислое становятся в объемные положения. При наблюдаемой ориентации границ краевые атомы первого бислоя могут образовать димеры, только параллельные границе. При образовании третьего бислоя, атомы уже в двух нижних бислоях находятся в объемных положениях, а перестроенным является только третий атомный слой. В этом случае на краю появится возможность сформироваться димерам, перпендикулярным границе островка (поперечные димеры). На рис. 3 представлено модельное изображение 3БС-островка на поверхности (111) со сверхструктурной перестройкой (7×7) как на подложке, так и на вершине островка. Хорошо видны горизонтальные димеры $G_{(7 \times 7)\text{ed}}$ на краю островка в тех местах, где структура (7×7) доходит до края верхней террасы. Именно на этом краю островка возможно образование из краевых атомов первого и второго слоев ряда поперечных димеров, перпендикулярных краю островка. Поперечные димеры могут образовать ряд вдоль границы островка, подобно ряду димеров на поверхности (001). Такой димерный ряд будет препятствовать диффузии атомов с подложки на вершину островка. При этом перестройка (7×7) не позволяет образовать поперечные димеры как между первым рядом и подложкой, так и между вторым и третьим бислоями. В тех местах, где третий БС не доходит до края островка, ряд поперечных димеров не образуется.

На рис. 4 представлены варианты образования на краю островка поперечных димеров, перпендикулярных краю. Такие димеры будем называть P -димерами. На рис. 4 показаны различные варианты строения края островка. Третий бислой и подложка не показаны на этой схеме, так как их атомы не участвуют в образовании P -димеров. На рис. 4, *a* показан край островка с атомами, имеющими оборванные связи, способными димеризоваться, но еще

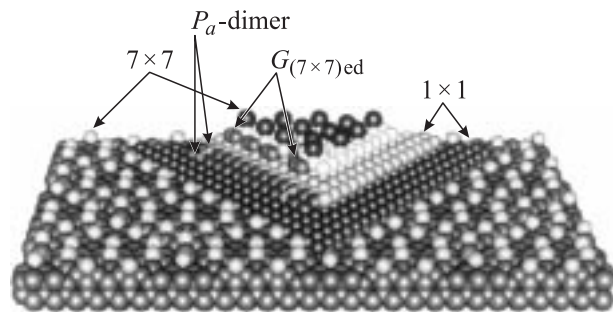


Рис. 3. Схематическое изображение 3БС-островка на поверхности (111) с перестройкой (7×7) на подложке и вершине островка. На левом краю островка указаны горизонтальные димеры структуры (7×7) — $G_{(7 \times 7)\text{ed}}$ в 3-м слое, а также P_a -димеры, образованные атомами первого и второго бислоев. На правом краю островка отсутствует перестройка в первом и втором бислоях, димеры $G_{(7 \times 7)\text{ed}}$ и P_a -димеры.

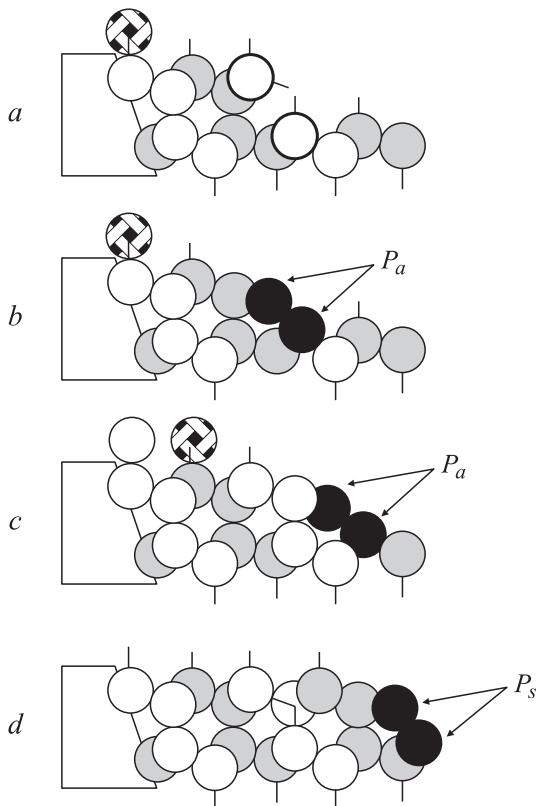


Рис. 4. Расположение атомов в поперечном сечении, перпендикулярном краю островка, и возможные конфигурации краевых P -димеров. Атомы подложки и третий бислои не показаны. Черным цветом отмечены димеризованные атомы, атомы белого цвета лежат в плоскости чертежа, а серого цвета — в плоскости за чертежом: a — край островка без димера; b — P_a -димер, наклоненный на угол порядка 30° ; c — такой же P_a -димер на краю островка, d — P_s -димер, наклоненный к плоскости подложки на угол порядка 55° .

не димеризованными, а на рис. 4, b, c — с несимметричным P_a -димером. Несимметричный P_a -димер состоит из атома верхнего слоя второго бислоя и верхнего атома первого бислоя. При этом до димеризации нижний атом имеет три насыщенные связи и мало смещается со своего исходного положения, а верхний атом имеет две насыщенные связи и после димеризации оказывается смещен сильнее. Наклон края островка в этом случае близок к 30° . Вариант формирования симметричного P_s -димера, когда оба краевых атома симметрично сдвигаются со своих мест и имеют одинаковое число насыщенных связей, соответствует наклону края островка, примерно равному 55° (плоскость (001)), и показан на рис. 4, d .

5. Методика эксперимента

Эксперименты проводились на образцах Si n - и p -типа размером $12 \times 3 \times 0.4$ мм с сопротивлением $10-10^3$ Ом·см. Отклонения от граней (557) и (111) в направлениях $[\bar{1}\bar{1}2]$ и $[11\bar{2}]$ контролировались с помощью рентгеновского дифрактометра. Получение чистой

поверхности Si, эпитаксия Ge и исследования по методу СТМ проводились в вакуумной камере с давлением не выше $2 \cdot 10^{-10}$ Торр в установке производства RIBER-OMICRON. Для получения атомарно-чистой поверхности образец Si прогревался прямым пропуском тока до температуры 1250°C в течение 20 с, затем температура понижалась до 900°C за время порядка 1 мин. После выдержки в течение 2 мин при 900°C в области поверхностного фазового перехода температура снижалась со скоростью порядка $0.1-0.2^\circ\text{C}/\text{с}$ до 800°C . После формирования поверхностной структуры 7×7 около 800°C скорость снижения температуры увеличивалась до $1^\circ\text{C}/\text{с}$, и при температуре 400°C осуществлялся финальный отжиг в течение 30 мин. Рост Ge осуществлялся в диапазоне температур $350-500^\circ\text{C}$ со скоростями осаждения $10^{-2}-10^{-3}$ БС/мин. За величину в 1 БС, т.е. за двойной слой атомов Ge в направлении [111], принималась величина $1.44 \cdot 10^{15}$ ат/см². СТМ-изображения поверхности записывались при комнатной температуре. В качестве зондов СТМ использовались вольфрамовые иглы, полученные электролитическим травлением в растворе щелочи. Основная часть СТМ-изображений записывалась в режиме постоянного тока для выявления рельефа поверхности.

6. Анализ профилей СТМ-изображений трехбислового островка Ge

Для проверки гипотезы о формировании P -димеров на краях трехбислового островка нами были получены СТМ-изображения островков и проведен анализ строения их границ. На рис. 5, a представлено СТМ-изображение островка на поверхности Si(111) после осаждения 0.5 БС Ge. Этот 3БС-островок имеет треугольную форму с достаточно гладкими краями. На верхней и нижней террасах рядом с краем островка наблюдается сверхструктурная перестройка. Были проанализированы профили, перпендикулярные краям островка. На рис. 5, b представлены результаты анализа наиболее гладкой части края островка размером 6.2 нм. Профили снимались вдоль линии сканирования для минимизации экспериментального шума. Было проанализировано более двух десятков профилей и обнаружено только три характерных типа профилей, приведенных на рис. 5, b . На рисунке хорошо видно, что начальные участки всех трех кривых имеют одинаковый наклон порядка 30° . На профиле первого типа (кривая 1) можно видеть два излома на высотах $h \approx 0.3$ нм и $h \approx 0.7$ нм, соответствующих высоте первого и второго бислоев. На профиле второго типа (кривая 2) верхний излом находится несколько ниже, на высоте $h \approx 0.6$ нм. На профиле третьего типа (кривая 3) виден один наклон на всем расстоянии от подложки до конца третьего бислоя, где начинается излом. Участки с профилями одного и того же типа наблюдались на протяжении 2–5 нм и располагались случайным образом вдоль границы островка.

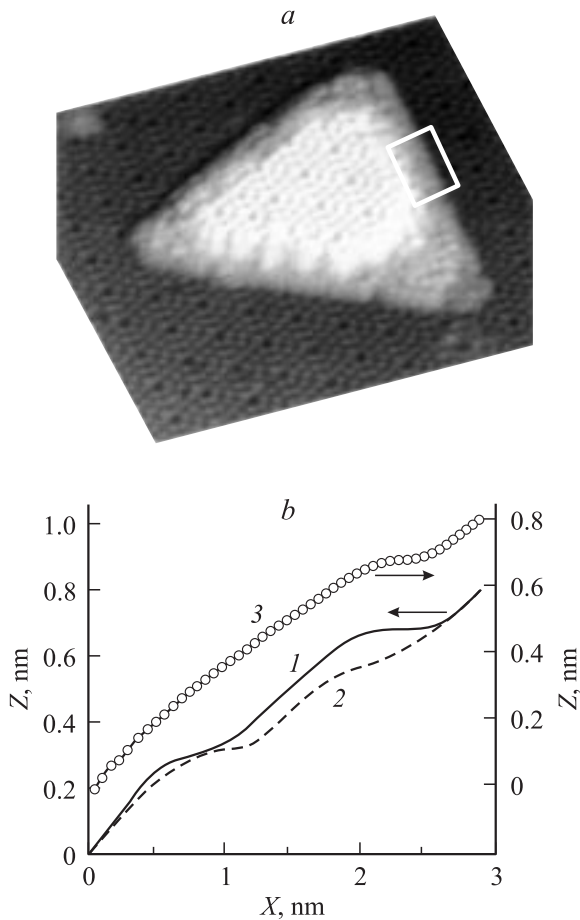


Рис. 5. Трехбислойный островок Ge на Si(111): *a* — СТМ-изображение (27.1×27.1 нм) после осаждения 0.5 БС Ge при $T = 400^\circ\text{C}$, $V = 0.004$ БС/мин (белым прямоугольником отмечен исследуемый участок края островка); *b* — три типа профилей (кривые 1–3) в плоскости, перпендикулярной краю островка. Точки на кривой 3 демонстрируют разрешение экспериментальной техники.

Три типа экспериментальных профилей края островка (рис. 5, *b*) соответствуют конфигурациям края, представленным на рис. 4. Экспериментальный профиль 1 (рис. 5, *b*) соответствует схеме на рис. 4, *a* с полностью заполненным первым бислоем и со вторым бислоем, сдвинутым на два атомных ряда без димеров между первым и вторым слоями. Экспериментально наблюдаемый сдвиг излома по высоте на профиле 2 (рис. 5, *b*) мы связываем с образованием несимметричного P_a -димера, указанного на схеме на рис. 4, *b*. Экспериментальный профиль 3 (рис. 5, *b*) соответствует случаю, когда несимметричный P_a -димер расположен у края островка (рис. 4, *c*). Вполне вероятно, что все три конфигурации близки по энергиям и могут переходить одна в другую во время ростового процесса.

С помощью предложенной схемы можно объяснить ограничение высоты наностроек тремя бислоями следующим образом. Краевые атомы второго бислоя не могут принимать участия в формировании P -димера,

пока его атомы не окажутся в объемных положениях. Как только формируется третий слой, он позволит занять атомам второго бислоя объемные позиции, а между первым и вторым слоями образуются P_a -димеры. Появление ряда P_a -димеров вдоль края островка уменьшает атомный поток с подложки на вершину островка и, соответственно, уменьшает скорость роста островка в высоту. Там, где высота островка меньше 3 БС, ряд P_a -димеров не образуется, и идет увеличение высоты других участков островка до 3 БС.

Предложенная модель объясняет рост ЗБС-островков в поперечных направлениях. Атомы могут встраиваться в край островка, двигаясь со стороны подложки и со стороны вершины. Атомы, подходящие со стороны подложки, образуют нижние бислои, а атомы, подходящие с вершины островка, поставляют материал для формирования P -димеров. Учитывая факт неодновременного образования P -димеров вдоль всей границы островка, продолжается застройка второго и третьего бислоев с одновременным увеличением латеральных размеров островка. Таким образом, только после коалесценции ЗБС-островков толщина растущего слоя может превысить три бислоя.

Формирование наностроек высотой 3 БС не может происходить в условиях сильно неравновесных (при больших скоростях осаждения), когда ряды P_a -димеров не успевают образоваться.

Не исключено, что на краю трехбислойного островка могут быть образованы P -димеры не только с малым, но и с большим наклоном к плоскости подложки. Очевидно, что асимметричные P_a -димеры с малым наклоном формируются в процессе эпитаксии гораздо раньше, чем P_s -димеры с большим наклоном. Вполне вероятно, что симметричные P_s -димеры могут быть обнаружены на краях островков после отжига при определенных температурах.

7. Атомарная структура трехбислойных ступеней на поверхности Si(557)

Как было указано выше, большинство ступеней на вицинальной поверхности Si(111) с различным углом отклонения в направлении $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ имеют высоту в три БС. Такая устойчивость ступеней высотой 3 БС тоже может быть связана с образованием P -димеров. Для проверки этой гипотезы нами были получены и тщательно исследованы СТМ-изображения таких ступеней. Были проанализированы профили ЗБС-ступеней, образующие поверхность Si(557).

Поверхность Si(557) соответствует углу отклонения в направлении $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ $\theta = 9.45^\circ$ и представляет собой чередование террас плоскости (111) и ЗБС-ступеней. Края ступеней параллельны направлению $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$. На ширине террасы укладывается одна ячейка (7×7). Такие поверхности были получены нами в соответствии с методикой, описанной в [6].

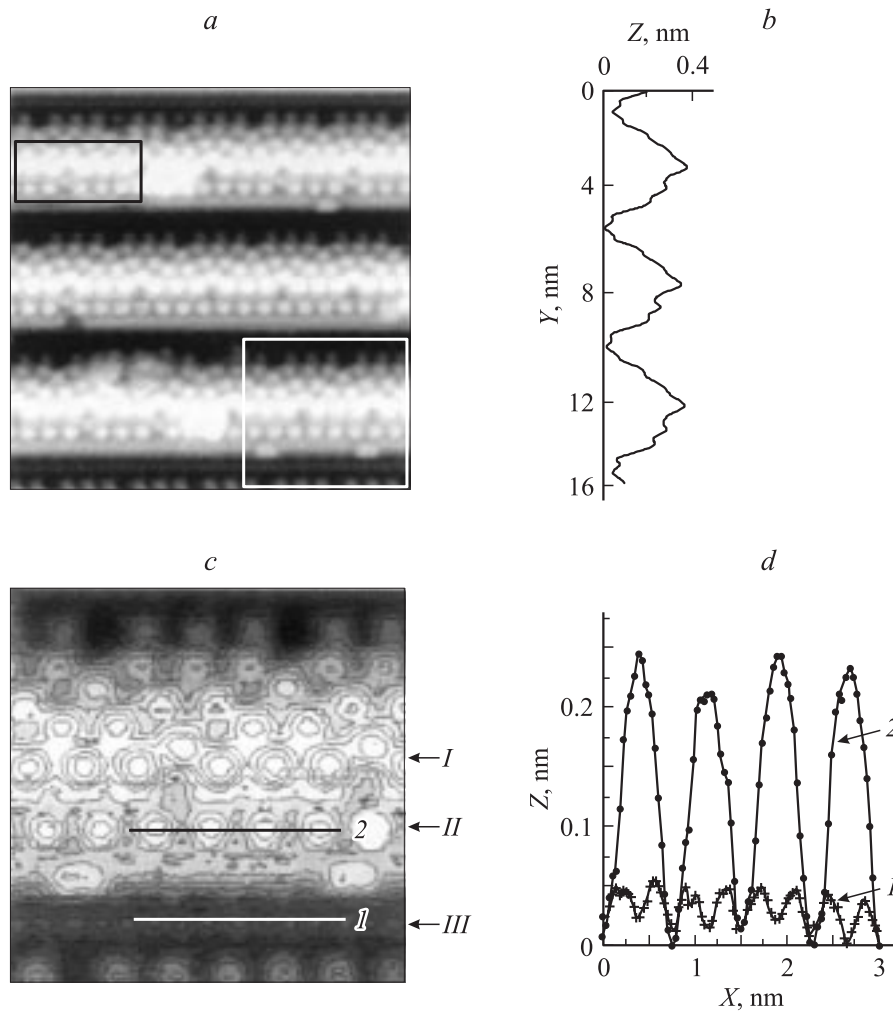


Рис. 6. Поверхность Si(557): *a* — STM-изображение при отрицательном напряжении на острие микроскопа; *b* — усредненный по изображению профиль вертикального сечения; *c* — увеличенный фрагмент STM-изображения, отмеченный светлым прямоугольником в нижнем правом углу рис. 6, *a*, видны изолинии тока. *I* — верхний край ступени, *II* — ряд DAS-атомов на 2-м бислое, *III* — полоска неперестроенных атомов на нижней террасе; *d* — профили горизонтальных сечений *I* и *2*, отмеченных на рис. *c*.

На рис. 6, *a* представлено STM-изображение фрагмента такой поверхности. При сканировании подложка ориентировалась таким образом, чтобы края всех ступеней находились на одной высоте, т.е. наклон террасы с ячейкой (7×7) составлял 9.45° к горизонту. На рис. 6, *a* хорошо видны DAS-атомы сверхструктуры (7×7) . DAS-атомами¹ мы называем атомы, занимающие такие же положения на поверхности, как адатомы в DAS-модели ячейки (7×7) [22]. На краю нижней террасы перед началом ступени мы увидели ряд атомов, находящихся на объемных местах, а перед верхней террасой на краю второго бислоя — DAS-атомы, имеющие периодичность 2×1 . На рис. 6, *b* приведен вертикальный профиль поверхности Si(557). На рис. 6, *c* с помощью изолиний показан увеличенный правый нижний участок STM-изображения, отмеченный на рис. 6, *a* светлым

¹ DAS-атомы — dimers, adatoms and a stacking fault, т.е. димеры, адатомы и дефекты упаковки.

прямоугольником. На рис. 6, *d* представлены профили горизонтальных сечений по неперестроенному ряду атомов (сечение *1* на рис. *c*) и по ряду DAS-атомов на краю второго бислоя (сечение *2*).

Определение вертикального масштаба (вдоль *Z*) проводилось по измерению разницы высот DAS-атомов на границах ячейки (7×7) и известному углу наклона террасы к горизонту. Наличие неперестроенного ряда атомов свидетельствует об отсутствии *P*-димеров между нижней террасой и первым слоем ступени. Однако анализ вертикальных профилей на краю ступеней поверхности Si(557) показывает, что наличие *P_s*-димеров вполне вероятно между первым и вторым слоем ступени. Нами определен угол наклона нижнего края ступени к террасе (нижний край включает первый и второй бислои, считая от нижней террасы). Он составляет 47° , это значение близко к значению 55° — среднему наклону *P_s*-димера.

На краю ступени со стороны верхней террасы в третьем бислое ступени с перестройкой (7×7) можно уви-

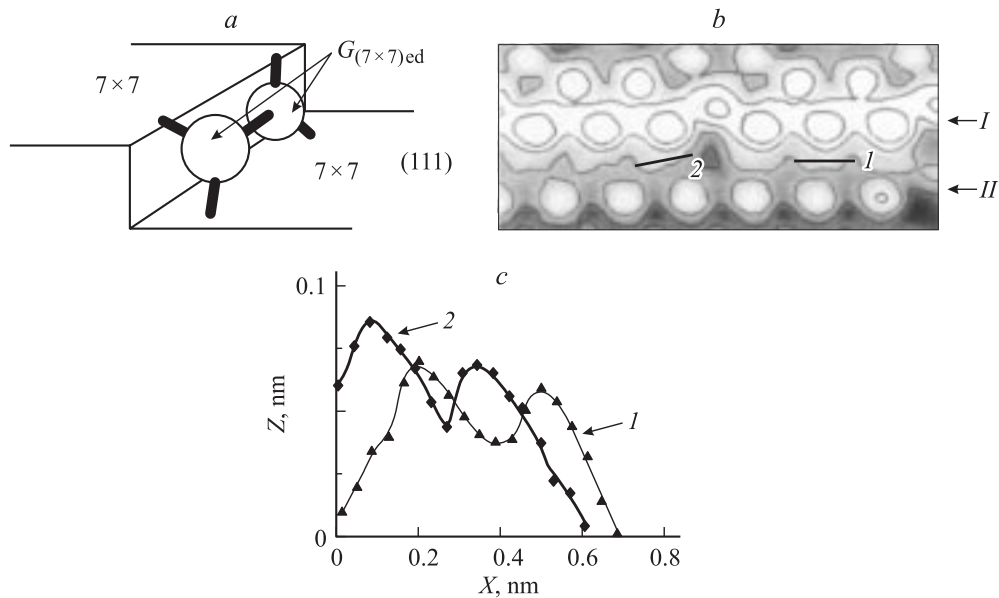


Рис. 7. Горизонтальные димеры $G_{(7 \times 7)ed}$ на краю ступени высотой 1 БС на поверхности Si(111) со структурной перестройкой (7×7): *a* — схематичное изображение горизонтального димера $G_{(7 \times 7)ed}$ на краю; *b* — увеличенный фрагмент STM-изображения, отмеченный темным прямоугольником в верхнем левом углу рис. 6, *a*, *I* и *II* соответствуют рис. 6, *b*; *c* — профили сечений *I* и *2* (см. рис. *b*) двух димеров вдоль их главной оси.

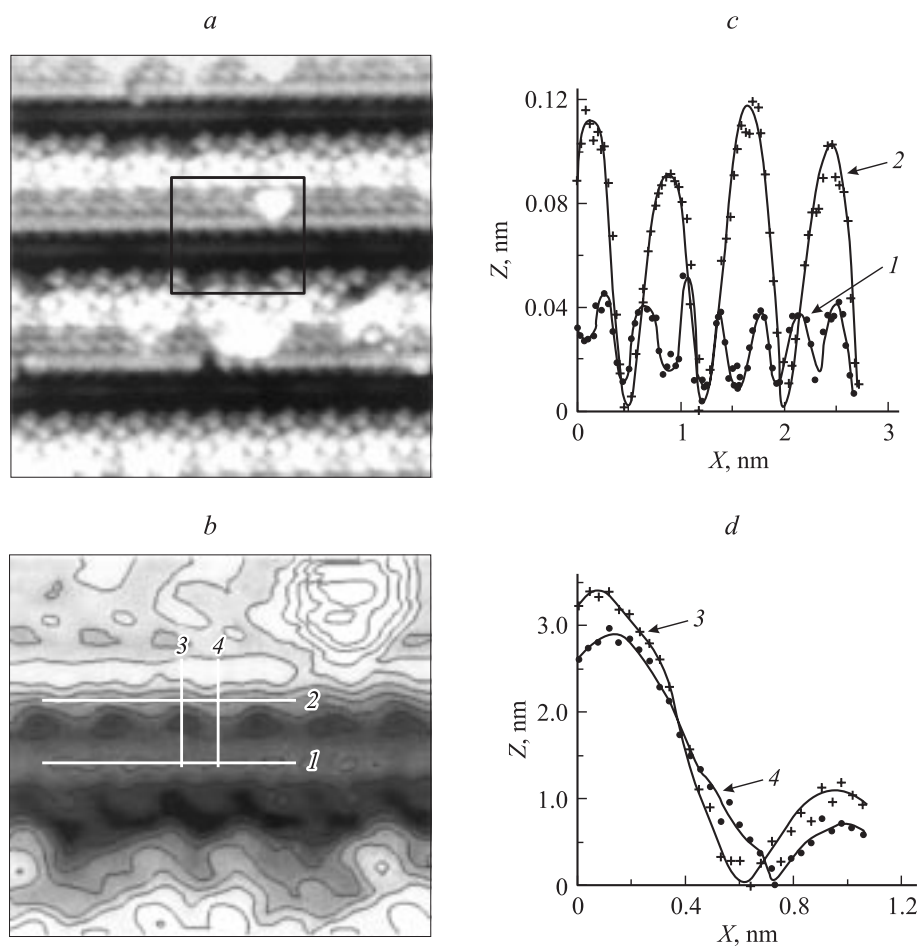


Рис. 8. *a* — STM-изображение поверхности Si(557) при положительном напряжении на острие микроскопа; *b* — увеличенный фрагмент STM-изображения с изолиниями равного тока; *c* — профили горизонтальных сечений неперестроенного ряда атомов (сечение *1* на рис. *b*) и края ступени на высоте менее 2 БС (сечение *2*); *d* — профили вертикальных сечений (*3* и *4* на рис. *b*) на краю ступени до высоты 2 БС: *3* — между выступами и *4* — по центру выступа.

деть ряд горизонтальных димеров края ячейки $G_{(7 \times 7)ed}$. На рис. 7, *a* схематично изображен димер $G_{(7 \times 7)ed}$, а на рис. 7, *b* с помощью изолиний изображен фрагмент СТМ-изображения с верхним участком ступени, отмеченным на рис. 6, *a* черным прямоугольником. Волнистые изолинии на границе террасы, вблизи которых проведены короткие прямые, показывают положение димеров $G_{(7 \times 7)ed}$. На рис. 7, *c* показаны два профиля вдоль указанных прямых. Существование двух четких максимумов вблизи всех крайних DAS-атомов указывает на наличие димеров $G_{(7 \times 7)ed}$. Они то и не допускают образования P -димеров на краю ступени высотой менее 3 БС.

На рис. 8, *a* приведено СТМ-изображение при положительном знаке потенциала на острие микроскопа, а на рис. 8, *b* — фрагмент этого же изображения (отмеченный прямоугольником) с помощью изолиний. При такой полярности напряжения не видны DAS-атомы на поверхности, зато более четко видны некоторые детали структуры самой ступени. На рисунке отмечено положение перестроенных атомов подложки (вдоль линии 1). Гофрированный край части ступени между нижней террасой и вторым бислоем имеет удвоенный период. На рис. 8, *c* приведены профили горизонтальных сечений вдоль перестроенного ряда (сечение 1) и по гофрированному краю ступени (сечение 2). На рис. 8, *d* приведены вертикальные сечения ступени в центре выступа (сечение 4) и между выступами гофрированного края ступени (сечение 3). Такие сечения были сняты по многим участкам ступени и усреднены. Максимальный наклон кривой 3 равен 56° , кривой 4 — 39° . Разница наклонов этих кривых 17° примерно равна разнице наклонов димеров на буклированной поверхности (100) (удвоенный угол наклона G_s -димера к поверхности (001)). Поэтому мы предположили, что на краю ступени образуется ряд димеров, наклон которых чередуется, чем и объясняется наличие удвоенного периода на всем участке края от нижней террасы до высоты 2 БС. Высота ступени вдоль предполагаемого димера (на выступе) оказалась равна 0.30 ± 0.015 нм, а между выступами 0.355 ± 0.015 Å. Это согласуется с тем, что верхний атом в буклированных P_s -димерах имеет разную высоту по отношению к игле микроскопа.

8. Обсуждение результатов

Сопоставляя результаты анализа структуры ступеней на поверхности Si(557) и краев островков, следует отметить различия в углах наклона и расположении краевых атомов в этих случаях, несмотря на одну и ту же высоту в 3 БС. На регулярных ступенях Si(557) нижняя часть ступени высотой в 2 БС имеет наибольший наклон к нижней террасе. Участки с наклоном 56° и 39° чередуются с периодичностью (2×1) . Разница в наклонах с хорошей точностью соответствует разнице в наклонах димеров на буклированной поверхности (001).

Это позволяет предположить существование ряда вертикальных димеров, образованных атомами первого и второго бислоев.

Неожиданным фактом оказалось наличие перестроенной полоски атомов нижней террасы непосредственно перед ступенью. Ее наличие не было зафиксировано в литературе, хотя строение поверхности Si(557) — ширина верхней террасы соответствует размеру ячейки 7×7 плюс 2 атомных ряда [5] — указывает на ее существование. Наблюдаемое нами объемное расположение атомов в полоске на нижней террасе свидетельствует об отсутствии димеризации атомов первого слоя ступени с атомами нижней террасы. Если ячейка (7×7) , примыкающая снизу к ступени, исключает димеризацию нижней террасы, то отсутствие димеров между полоской и первым рядом ступени вызывает вопросы. Можно предположить следующее объяснение этому факту. Симметричные димеры образуются раньше полоски, и они энергетически более выгодны, чем несимметричные димеры, которые могли бы образоваться и при наличии полоски.

Обнаруженные нами на СТМ-изображениях признаки существования димеров $G_{(7 \times 7)ed}$ на верхней террасе согласуются с предположением о невозможности образования P -димеров между третьим и вторым бислоями. На рис. 6 показана четко выраженная разница в ширине террас второго и первого слоев. Второй слой практически прилегает к первому, а ширина террасы 2-го слоя имеет протяженность 4–5 атомных рядов. На такой ширине расположены DAS-атомы, имеющие удвоенную периодичность. Расстояние между рядом DAS-атомов и краем террасы оказывается больше, чем в структуре 7×7 , что и видно на рис. 6, *b*. Благодаря этому наличие DAS-атомов во втором слое не приводит к образованию горизонтальных димеров и не препятствует образованию вертикальных димеров между первым и вторым слоями.

На ЗБС-островках Ge на Si(111) наклон даже очень гладкой части края составляет $30 \pm 2^\circ$, что свидетельствует об ином строении края островка, чем кремниевой ЗБС-ступени. Как было показано выше, между первым и вторым слоем могут формироваться P_a -димеры с углом наклона, близким к 30° . Образование P_a -димера возможно, когда ступень второго слоя отстает от ступени первого слоя, а для формирования P_s -димера требуется, чтобы второй слой был расположен вплотную к краю первого слоя. При эпитаксиальном росте образование P_a -димеров должно предшествовать образованию P_s -димеров. Образование такого участка на краю островка приводит к тому, что диффузия вдоль него из-за образования ряда димеров оказывается облегченной, и начинается усиленный рост второго и третьего слоев на остальной части островка.

Таким образом, все представленные в данной работе экспериментальные результаты не противоречат гипотезе о формировании ряда перпендикулярных димеров как на краю ступени высотой в 3 БС на поверхности Si(111), так и на краю островка Ge, что может

объяснить повышенную устойчивость ЗБС-ступеней и островков. Оценки энергии образования симметричных и несимметричных краевых P -димеров могли бы дать расчеты атомной структуры трехбислойных ступеней методами *ab-initio*.

9. Заключение

Таким образом, в работе получены и исследованы СТМ-изображения трехбислойных островков Ge на поверхности Si(111) и трехбислойных ступеней на поверхности Si(557). Проведено моделирование кинетики формирования островков Ge на Si(111) в предположении образования димеров на их краях. Предложена гипотеза, объясняющая начальный многослойный рост и последующее ограничение высоты островков Ge и Si тремя бислоями. Структура ступеней типа $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$, ограничивающих островки, именно при высоте в три бислоя допускает образование вдоль края островка ряда поперечных димеров, затрудняющее попадание атомов с подложки на вершину островка. Этим же предположением может быть объяснена устойчивость трехбислойных ступеней на вицинальной поверхности Si(111) с отклонением в направлении $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$. Показано, что результаты анализа СТМ-изображений подтверждают наличие P -димеров на краях ступеней трехбислойной высоты.

Данная работа проведена при поддержке РФФИ (№ 02-02-17726, № 03-02-16506), программы ФЦНТ „Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития науки и технологии“ гражданского направления (проект 2-МПН-02) и направления „Размерность“(40.012.1.1.1153).

Авторы благодарят А.Н. Карпова за предоставленные модельные изображения поверхности Si(111)-(7×7).

Список литературы

- [1] V.G. Dubrovskii, G.E. Cirlin, V.M. Ustinov. Phys. Rev. B, **68**, 075 409 (2003).
- [2] G. Jin, Y.S. Tang, J.L. Liu, K.L. Wang. Appl. Phys. Lett., **74**, 2471 (1999).
- [3] J. Viernow, J.-L. Lin, D.Y. Petrovykh, F.M. Leibsle, F.-K. Men, F.J. Himpsel. Appl. Phys. Lett., **72**, 948 (1998).
- [4] J. Viernow, D.Y. Petrovykh, F.-K. Men, A. Kirakosian, J.-L. Lin, F.J. Himpsel. Appl. Phys. Lett., **74**, 2125 (1999).
- [5] R.A. Zhachuk, S.A. Teys, A.E. Dolbak, B.Z. Olshanetsky. Surf. Sci., **565**, 37 (2004).
- [6] A. Kirakosian, R. Bennowitz, J.N. Crain, Th. Fauster, J.-L. Lin, D.Y. Petrovykh, F.J. Himpsel. Appl. Phys. Lett., **79**, 1608 (2001).
- [7] K. Brunner. Rep. Prog. Phys., **65**, 27 (2002).
- [8] Ж.И. Алфёров. ФТП, **32**, 3 (1998).
- [9] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. УФН, **168**, 1083 (1998).
- [10] В.И. Трофимов, В.А. Осадченко. *Рост и морфология тонких пленок* (М., Энергоатомиздат, 1993).
- [11] В.И. Трофимов, В.Г. Мокеров. ДАН, **375**, П 4, 465 (2000).
- [12] B. Voigtlaender. Surf. Sci. Reports, **43**, 127 (2001).
- [13] S.A. Teys, B.Z. Olshanetsky. Phys. Low-Dim. Structur., **1/2**, 37 (2002).
- [14] U. Kohler, O. Jusko, G. Pietsch, B. Muller, M. Henzler. Surf. Sci., **248**, 321 (1991).
- [15] А.Б. Талочкин, С.А. Тийс. Письма ЖЭТФ, **75**, 314 (2002).
- [16] D.J. Chadi. Phys. Rev. Lett., **59**, 1691 (1987).
- [17] Y.W. Mo, R. Kariotis, B.S. Swartzentruber, M.B. Webb, M.G. Lagally. J. Vac. Sci. Technol., **A8**, 201 (1990).
- [18] Zh. Zhang, F. Wu, H.J. Zandvliet, B. Poelsema, H. Metiu, M.G. Lagally. Phys. Rev. Lett., **75**, 3544 (1995).
- [19] H. Okada, Y. Fujimoto, K. Endo, K. Hirose, Y. Mori. Phys. Rev. B, **63**, 195 324 (2001).
- [20] J. Cai, J.-S. Wang. Phys. Rev. B, **64**, 035 402 (2001).
- [21] Y. Fujikawa, K. Akiyama, T. Nagao, T. Sakurai, M.G. Lagally, T. Hashimoto, Y. Morikawa, K. Terakura. Phys. Rev. Lett., **88**, 176 101 (2002).
- [22] K. Takayanagi, Y. Tahishiro, S. Takahashi, M. Takahashi. Surf. Sci., **164**, 367 (1985).
- [23] M. Hupalo, C.Z. Wang, B.J. Min, K.M. Ho, M.C. Tringides. Phys. Rev. B, **67**, 115 333 (2003).
- [24] I.-S. Hwang, Mon-Su Ho, T.T. Tsong. Phys. Rev. Lett., **83**, 120 (1999).
- [25] B.Z. Olshanetsky, A.A. Shklyaev. Surf. Sci., **82**, 445 (1979).
- [26] I.G. Neizvestny, N.L. Shwartz, Z.Sh. Yanovitskaya, A.V. Zverev. Computer Phys. Commun., **147**, 272 (2002).
- [27] H. Nakahara, M. Ichikawa, S. Stoyanov. Surf. Sci., **329**, 115 (1995).
- [28] Л.В. Соколов, М.А. Ламин, В.А. Марков, В.И. Машанов, О.П. Пчеляков, С.И. Стенин. Поверхность, **6**, 53 (1991).
- [29] V. Cherepanov, B. Voigtlander. Appl. Phys. Lett., **81**, 4745 (2002).

Редактор Т.А. Полянская

Reasons for the stability of three-bilayer islands and steps on Si(111) surface

A.V. Zverev, I.G. Neizvestny, I.A. Reizvikh,
K.N. Romanyuk, S.A. Teys, N.L. Shwartz,
Z.Sh. Yanovitskaya

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

Abstract Initial stages of Ge and Si layers growth on singular Si(111) surface demonstrate an unusual morphology at the low deposition rate: triangular multilayer island formation up to three bilayer height. Using Monte-Carlo simulations, the authors have shown that an additional barrier 0.5–0.6 eV for atoms embedded into dimerized bonds of triangular island edges accelerates the island growth in height and changes the triangle orientation. A new hypothesis that explains the initial multilayer island growth with subsequent height limitation by three bilayers is suggested. Changing of edge dimer orientation and vertical dimer row formation along step, when step perpendicular to $\langle \bar{1}\bar{1}2 \rangle$ achieves three bilayer (BL) height, influence on growth process. New peculiarities of atomic structure of 3 BL steps on Si(557) surfaces were revealed using STM. Results of STM images examination verify the hypothesis of vertical dimer row formation along the boundary of 3 BL step.