Моделирование методом Монте-Карло структуры поверхности эпитаксиального слоя Si, выращенного в условиях МЛЭ

Арапкина Л.В.

ИОФ РАН, 119991, Москва, ул.Вавилова, 38

DOI 10.34077/Semicond2019-89

Представленная работа посвящена исследованию структурных свойств поверхности эпитаксиальных слоев Si, выращенных методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) в режиме роста *step-flow*. Методом сканирующей туннельной микроскопии изучено строение поверхности слоев Si, выращенных на Si(001) с углами наклона от 0.12° до 0.9° в направлении [110]. Установлено, что по мере увеличения угла наклона поверхности подложки Si(001) на поверхности эпитаксиального слоя Si наблюдается переход от структуры с преобладающими Tb террасами к структуре с равными по ширине террасами [1]. Методом Монте-Карло проведено моделирование процесса роста. Модель основана на допущении о влиянии полей упругих напряжений, возникающих на поверхности Si(001) [2], на проницаемость моноатомных ступеней. Проницаемость ступени определяет возможность перехода атома через край ступени без встраивания в нее. В равновесных условиях релаксация полей упругих напряжений способствует формированию на поверхности террас равной ширины. Известно, что поверхность Si(001) сформирована моноатомными ступенями двух типов: S_a и S_b [1]. Строение, энергии образования этих ступеней различны, что приводит к разной скорости их продвижения во время роста [3,4] и должно бы было способствовать формированию двухатомных ступеней типа Db. Согласно экспериментальным данным формирование ступеней типа D_b наблюдается при больших значениях углов разориентации Si(001) [5]. В исследуемом диапазоне углов наклона ростовая поверхность образована моноатомными ступенями. В условиях роста стабильная структура ростовой поверхности (постоянная ширина террас) поддерживается за счет одинаковой скорости продвижения моноатомных ступеней S_a и S_b типа. В модели предполагается, что влияние полей упругих напряжений на ширину моноатомных террас зависит от угла наклона поверхности Si(001). Чем он меньше, тем более вероятным становится процесс формирования террас разной ширины. Равная скорость продвижения соседних моноатомных ступеней поддерживается изменением их проницаемости в зависимости от расстояния между ними. Результаты моделирования подтверждаются данными СТМ исследования. Исследуемые образцы выращивались методом МЛЭ на установке Riber EVA 32 при температуре 650°C в режиме роста *step-flow*. СТМ исследования проводились при помощи микроскопа GPI-300, присоединенного к ростовой камере через высоковакуумный шибер. В ходе исследования образцы на воздух не выносились.

[1] D.J. Chadi, *Phys.Rev.Lett.* **59**(4) 1691 (1987).

[2] O.L. Alerhand, D. Vanderbilt, R.D. Meade, and J.D. Joannopoulos, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1973 (1988).

[3] H.J. Zandvliet, *Rev. Mod. Phys.* **72** (2) 593 (2000).

[4] Y.-W. Mo, B.S. Swartzentruber, R. Kariotis, M.B. Webb, and M.G. Lagally, *Phys. Rev. Lett.* **63**(21), 2393 (1989).

[5] B.S. Swartzentruber, N. Kitamura, M.G. Lagally, and M.B. Webb, *Phys. Rev. B* **47**, 13432 (1993).