Структура напряжённых слоёв Si на поверхности Ge(111)

Жачук Р.А.¹, Долбак А.Е.¹, Кутины Ж.², Черепанов В.^{3,4}, Фойхтлендер Б.^{3,4}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13, Россия

² Department of Physics & I3N, University of Aveiro, Campus Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal

³ Peter Grünberg Institut (PGI-3), Forschungszentrum Jülich, 52425 Jülich, Germany

⁴ JARA-Fundamentals of Future Information Technology, 52455 Jülich, Germany

DOI 10.34077/Semicond2019-99

В то время как эпитаксиальный рост по механизму Странского-Крастанова, при котором растущая плёнка испытывает деформацию сжатия, достаточно хорошо изучен, информации о росте плёнки в обратном случае, при деформации растяжения, значительно меньше. В качестве модельной системы мы изучали рост кремния на поверхности Ge(111) [1]. Работа была выполнена методами дифракции медленных электронов (ДМЭ), электронной оже-спектроскопии (ЭОС), сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и расчетов на основе теории функционала плотности (ТФП).

С помощью ЭОС было показано, что в отличие от роста Ge на Si(111), рост Si на Ge(111) сопровождается значительным перемешиванием атомов Si и Ge даже при комнатной температуре.

При росте Si на Ge(111) при $T=550$ °C на поверхности наблюдается формирование доменов структуры $c(2\times 4)$, разделённых доменными стенками. Это наблюдение совпадает с расчетными данными, предсказывающими формирование структуры $c(2\times 4)$ на поверхности Si(111) при деформации растяжения (рис. 1), тогда как релаксированная поверхность Si(111) имеет структуру 7×7 . На основе расчетов ТФП предложена атомная модель структуры $c(2\times 4)$ и доменных стенок, согласующаяся с данными СТМ, ДМЭ, приводящая к низкой энергии поверхности и определена средняя ширина доменов.

С помощью расчётов ТФП было показано, что формирование доменных стенок структуры $c(2\times 4)$ на чистой поверхности Si(111) энергетически не выгодно, так как они не приводят к достаточной релаксации напряжённых слоёв кремния. Поэтому доменные стенки на чистой поверхности Si(111) не должны наблюдаться в эксперименте и для их объяснения необходимо учесть эффект перемешивания атомов Si и Ge.

Было показано, что сегрегация атомов Ge на поверхность растущей пленки Si значительно понижает энергию поверхности, объясняя высокую интенсивность перемешивания атомов Si и Ge даже при комнатной температуре. Кроме того, теоретически было показано, что такое перемешивание индуцирует формирование доменных стенок структуры $c(2\times 4)$. Причина уменьшения энергии поверхности при сегрегации атомов Ge на поверхность растущей пленки Si состоит в более слабой связи Ge-Ge по сравнению со связью Si-Si. Таким образом, перемешивание Si и Ge при росте Ge на поверхности Si должно приводить к росту энергии системы, поэтому перемешивание в такой системе происходит только за счет увеличения энтропии и при повышенной температуре.

[1] R. Zhachuk, J. Coutinho, A. Dolbak, V. Cherepanov, B. Voigtländer, *Phys. Rev. B* 96, 085401 (2017).

Рис.1. – Расчетные зависимости энергии поверхности Si(111).