ФИЗИКА

УДК 532

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ СИММЕТРИЧНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СТРУКТУР ПРИ ЭПИТАКСИАЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ В ПОЛЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО ГРАДИЕНТА

© 2006 г. А.В. Благин, М.А. Афиногенова, А.А. Баранник

In the work step relief of surface structures during epitaxial crystallization in the field of temperature gradient is described. System behavior is analyzed and modeled with boundary conditions determined with streams by steps and ad atoms concentration by a step. There were determined two typical kinds and obtained boundaries of unstable fields: forming of terraces (or beam structures) and multiatom structures.

Изучение ступенчатого рельефа симметричных поверхностных структур имеет большое как научное, так и практическое значение в силу ряда причин: рост кристаллов по механизму продвижения ступеней обеспечивает формирование более качественной поверхности по сравнению с ростом по механизму островкового зарождения; структура эпитаксиальных слоев на ступенчатой поверхности существенно зависит от продольного распределения ширины террас и очень чувствительна к неоднородностям этого распределения; ступенчатый характер поверхностей предоставляет уникальную возможность создания продольных сверхрешеток и квантовых приборов.

В кристаллизующейся системе имеют место факторы, приводящие к нестабильности эквидистантной структуры: интенсивность осаждения и испарения адатомов, асимметрия кинетики переходов адатомов через ступени и их прилипание к ступеням – эффект Швобеля [1], упругое взаимодействие ступеней, ширина террас ступенчатой поверхности [2], электромиграция адатомов при нагреве подложки постоянным током [3], влияние примесей и собственных поверхностных дефектов.

Моделирование системы роста

Ступенчатая поверхность состоит из плоских террас, разделенных элементарными (одноатомными) ступенями. Каждая ступень, в среднем оставаясь прямолинейной, испытывает различные флуктуационные искривления. Рассмотрим упрощенную картину, считая ступени строго прямолинейными. В этом случае структура характеризуется набором расстояний l_i между соседними ступенями (рис. 1).

Будем полагать, что скорость диффузионной миграции адатомов много больше скорости перемещений линий ступеней, при этом распределение

адатомов является во времени квазистационарным $\left(\frac{\partial N}{\partial t} = 0\right)$. На основании закона сохранения концентрации атомов для стационарного состояния отдельной террасы (рис. 1) получим:

$$D\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \frac{N}{\tau} = 0, \qquad (1)$$

где $1/\tau$ – коэффициент испарения; D – коэффициент поверхностной диффузии; N – концентрация адатомов.

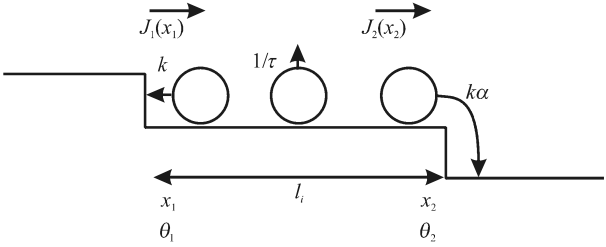


Рис. 1. Схематическое изображение ступеней с возможными переходами адатомов: x – положение ступени; J(x) – поток по краю террасы; α – коэффициент эффекта Швобеля, k – частота перескоков адатомов с террасы на ступень; θ – концентрация адатомов; l_i – ширина террасы

Общее решения уравнения (1) можно представить в виде

$$N(x) = C_1 e^{-px} + C_2 e^{px}. \qquad (2)$$

При этом поток адатомов вычисляется по формуле

$$J(x) = -D\frac{\partial N}{\partial x} = -Dp(-C_1 e^{-px} + C_2 e^{px}), \text{ где } p = \sqrt{\frac{1}{D\tau}}. \qquad (3)$$

Рассмотрим поведение системы при граничных условиях, определяемых потоками на ступени, которые характеризуются отклонением концентрации на ступени от равновесной. Для потоков на краях террасы будем иметь:

$$J_1(0) = k(\theta_0 - N(0)), \ x = 0. \ J_2(l) = k\alpha(N(l) - \theta_0), \ x = l.$$

Подставляя вместо J_1, J_2 соответствующие выражения в (3), получим

$$k\theta_0 = C_1(k + Dp) + C_2(k - Dp), \qquad (4)$$

$$k\alpha\theta_0 = C_1 e^{-pl}(k\alpha - Dp) + C_2 e^{pl}(k\alpha + Dp), \qquad (5)$$

где k – кинетический коэффициент перехода адатомов с одной террасы на другую; α – коэффициент эффекта Швобеля, показывающий несимметричность перехода адатомов с вышестоящей террасы на нижестоящую; θ_0 – равновесная концентрация на ступени; $N(0)$ – концентрация адатомов на ступени в начале террасы; $N(l)$ – концентрация адатомов на ступени в конце террасы.

Скорость перемещения i-й ступени при этом будет определяться разностью потоков с обеих сторон ступени:

$$\frac{dx_i}{dt} = S(-J_1(x_i) + J_2(x_i)), \tag{6}$$

где S – атомная площадь поверхности. Скорость изменения длины террасы определяется разностью скоростей движения ступеней, которые ее ограничивают:

$$\frac{dl_i}{dt} = \frac{dx_{i+1}}{dt} - \frac{dx_i}{dt} = k\alpha(C_1 e^{-pl_i} + C_2 e^{pl_i} - C_1 e^{-pl_{i-1}} - C_2 e^{pl_{i-1}}) + \\ + k\alpha(C_1 e^{-pl_{i+1}} + C_2 e^{pl_{i+1}} - C_1 e^{-pl_i} - C_2 e^{pl_i}). \tag{7}$$

Кинетическое уравнение (6) описывает эволюцию ступенчатой поверхности с произвольными начальными l_i. Исследование поведения корней этого уравнения позволит нам ответить на вопрос: устойчиво ли распределение ступеней, в частности, когда распределение эквидистантно, т.е. все l_i одинаковы и равны определенной величине l. Если l_i слабо отклоняется от l, то эти отклонения будут затухать или нарастать со временем. В первом случае (случай устойчивости) поверхность сохраняет регулярную структуру, во втором (случай неустойчивости) поверхность приобретает сложный рельеф.

Так как малые отклонения l_i от l описываются линеаризованным уравнением (7): $l_i - l = x_i$, то (7) перепишется в виде

$$\frac{d(l+x_i)}{dt} = k\alpha(C_1 e^{-p(l+x_i)} + C_2 e^{p(l+x_i)} - C_1 e^{-p(l+x_{i-1})} - C_2 e^{p(l+x_{i-1})}) + \\ + k(C_1 e^{-p(l+x_{i+1})} + C_2 e^{p(l+x_{i+1})} - C_1 e^{-p(l+x_i)} - C_2 e^{p(l+x_i)}). \tag{8}$$

После преобразований получим

$$\frac{dx_i}{dt} = A\left(-\alpha x_{i-1} + (\alpha - 1)x_i + x_{i+1}\right), \tag{9}$$

где

$$A = 2\theta k^2 p^2 D \frac{(2\alpha(k^2 - p^2D^2) - (k+pD)(\alpha k + pD)e^{pl} - (k-pD)(\alpha k - pD)e^{-pl})}{((k-pD)(\alpha k - pD)e^{pl} - (k+pD)(\alpha k + pD)e^{pl})^2}.$$

Предположим, что перестройка системы ступеней осуществляется в пределах двух террас, в этом случае $x_{i+1} = x_{i-1}$:

$$\frac{dx_1}{dt} = A\left((1-\alpha)x_1 + ((\alpha-1)A - \lambda)x_2,\ \frac{dx_2}{dt} = \left((\alpha-1)A - \lambda\right)x_1 + A(1-\alpha)x_2.\right. \tag{10}$$

Характеристическое уравнение этой системы примет вид

$$\begin{vmatrix} A(1-\alpha)(\alpha-1)A - \lambda \\ (\alpha-1)A - \lambda\ \ A(1-\alpha) \end{vmatrix} = 0. \tag{11}$$

А решения этого характеристического уравнения будут иметь два корня: $\lambda_1 = 0$ и $\lambda_2 = 2A(\alpha - 1)$.

Для устойчивости необходимо, чтобы выполнялось условие $\lambda < 0$. Поскольку всегда $A < 0$, мы можем сделать вывод, что критерием устойчивости системы является величина α. При $\alpha > 1$ система устойчива, при $\alpha < 1$ – неустойчива.

Проведем анализ поведения подобной системы при граничных условиях, зависящих от концентрации адатомов вблизи ступени. Перепишем уравнения скорости изменения длины террасы и скорости перемещения ступени для данных граничных условий. Будем считать, что концентрация адатомов на краях террасы соответствует равновесной:

$$N_1 = n_0 e^{-\varepsilon_1/kT},\ N_2 = n_0 e^{-\varepsilon_2/kT},\ \varepsilon_1 > \varepsilon_2,$$

где n_0 – концентрация поверхностных адатомов; k – постоянная Больцмана; N_1 – равновесная концентрация адатомов вблизи ступени, для которой терраса является задней; N_2 – равновесная концентрация адатомов вблизи ступени, для которой терраса является передней; ε_1 – энергия адатомов вблизи ступени, для которой терраса является задней; ε_2 – энергия адатомов вблизи ступени, для которой терраса является передней; T – температура. $N_1 = 0$ соответствует тому, что $\varepsilon_1 >> \varepsilon_2$.

Распределение концентрации адатомов вдоль террасы с учетом граничных условий примет вид

$$N(x) = \frac{(N_2 - N_1 e^{-pl})e^{px} + (N_1 e^{pl} - N_2)e^{-px}}{e^{pl} - e^{-pl}}. \qquad (12)$$

Полный поток состоит из двух компонент: $J(0)$ – потока к началу террасы и $J(l)$ – потока к концу террасы:

$$J(0) = Dp(N_1 ch(pl) - N_2)/sh(pl),\ \ J(l) = Dp(N_1 - N_2 ch(pl))/sh(pl).$$

Скорость изменения длины террасы, как и ранее, находится из разности потоков на каждой ступени, ограничивающей террасу: $\frac{dl}{dt} = \left[\left(J_+ - J_-\right)_1 - \left(J_+ - J_-\right)_0\right]$. Учитывая предыдущие условия, получим

$$\frac{dl_i}{dt} = \frac{Dp}{n_0} = \left(\frac{(-N_1 + N_2)(ch(pl_i)+1)}{sh(pl_i)} + \frac{N_1 - N_2 ch(pl_{i-1}))}{sh(pl_{i-1})} + \frac{N_1 ch(pl_{i+1}) + N_2}{sh(pl_{i+1})}\right). \qquad (13)$$

При этом скорость перемещения отдельной ступени: $\frac{dx}{dt} = \frac{(J_+ - J_-)}{n_0}$.

При проведении анализа устойчивости был рассмотрен упрощенный вариант при $N_1 = 0$, соответствующей тому, что $\varepsilon_1 >> \varepsilon_2$. Для данных граничных условий были рассмотрены случаи перестройки системы в пределах двух и трех террас. При любых значениях параметров в данном упрощенном рассмотрении система ступеней оказалась устойчивой.

Был проведен анализ системы методом компьютерного моделирования. За основу принято уравнение (13), переписанное в виде:

$$\frac{dl_i}{dt} = \frac{(N_2 - N_1)(ch(l_i)+1)}{sh(l_i)} + \frac{N_2 - N_1 ch(l_{i-1})}{sh(l_{i-1})} + \frac{N_1 ch(l_{i+1}) - N_2}{sh(l_{i+1})}. \qquad (14)$$

При создании компьютерной модели были введены следующие безразмерные параметры: $l_i = pl_i$; $\tau = tDp^2$; $N_2 = e^{-\varepsilon_2/kT}$; $N_1 = e^{-\varepsilon_1/kT}$; $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$.

Результаты и выводы

Устойчивость системы наблюдается на протяжении широкого ряда параметров. Однако существуют области, в которых система становится неустойчивой. Можно выделить два характерных типа неустойчивости системы: эшелонирование (образование террас) и образование многоатомных ступеней. В процессе исследования были получены следующие области, в которых система приобретает устойчивые состояния (рис. 2).

При значениях параметров системы $48 < \varepsilon_1/kT$, $8 \le \varepsilon_2/kT$, $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$, $t \ge 30$ наблюдаются оба типа неустойчивости (рис. 2б): образование многоатомных ступеней и эшелонированной структуры.

При значениях параметров системы $8 \le \varepsilon_1/kT$, $4 \le \varepsilon_2/kT \le 6{,}8$, $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$, $t = 30$ наблюдаются оба типа неустойчивости (рис. 2в): образование многоатомных ступеней и удвоение числа террас.

При значениях параметров системы $0{,}4 \le \varepsilon_1/kT \le 200$, $\varepsilon_2/kT \le 0/36$, $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$, $30 \le t \le 100$ также наблюдаются оба типа неустойчивости (рис. 2г): образование многоатомных ступеней и нескольких террас.

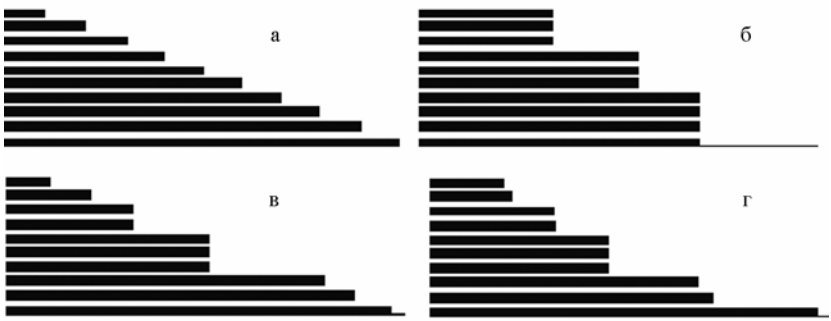


Рис. 2. а – исходная структура прямолинейных ступеней; б – образование эшелонированной структуры из многоатомных ступеней; в – образование многоатомных ступеней и удвоение числа террас; г – образование многоатомных ступеней и нескольких террас

Был проведен аналитический анализ устойчивости регулярного распределения ступеней при двух типах граничных условий: по потоку, по концентрации адатомов вблизи террасы. В первом случае критерием устойчивости системы является величина α. При $\alpha > 1$ система устойчива, при $\alpha < 1$ – неустойчива. Во втором случае при рассмотрении упрощенного варианта перестройка наблюдалась в пределах двух и трех террас. В этих случаях наблюдается абсолютная устойчивость регулярного распределения ступеней.

В процессе моделирования были выявлены два характерных типа неустойчивости системы: образование террас (или пучковой структуры) и образование многоатомных ступеней. Были получены границы областей этих неустойчивостей. Известно, что единичные ступени имеют тенденцию искривляться, их террасы часто нерегулярны. Этот недостаток является причиной трудностей в создании полупроводниковых проволок. Ступени, составляющие эшелонированную структуру, из-за своей ограниченности остаются более прямыми. Эшелонированная структура может иметь различную высоту в зависимости от числа ступеней в эшелоне. Это открывает возможности создания квантовых проволок различной толщины.

Литература

1. *Бартон Ф., Кабрера Ж., Франк М.* Элементарные процессы роста кристаллов. М., 1959.
2. *Березин А.А., Морозов А.И.* // ФТТ. 1999. Т. 41. № 2. С. 354.
3. *Пелещак Р.М., Лукиянец Б.А., Зегря Г.Г.* // ФТП. 1998. Т. 34. № 10. С. 1223.

Волгодонский институт
Южно-Российского технического университета ***16 ноября 2005 г.***

УДК 621.371.334:537.874.6

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ СЕРЕБРЯНЫХ И МЕДНЫХ ПОЛЯРИТОННЫХ НАНОВОЛНОВОДОВ МЕТОДОМ ЭФФЕКТИВНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ

© 2006 г. Б.А. Грибников, Е.И. Грибникова, В.И. Махно, П.В. Махно

The investigation of eigenwaves in 3-dimensional polaritonic waveguides. The method of effective permittivity was used.

На границе раздела сред с различными знаками диэлектрической проницаемости может распространяться поверхностная электромагнитная волна [1]. В оптическом и инфракрасном диапазонах такая волна наблюдается и на границе металл – диэлектрик. В этом случае волна называется поверхностным поляритоном. Наиболее простым типом поляритонного волновода является бесконечная металлическая плёнка, нанесённая на слой диэлектрика. Толщина плёнки может быть мала (порядка 10 нм) в зависимости от длины волны, типа диэлектрика и металла. На практике используется пленка конечной ширины – нанопровод прямоугольного сечения (рис. 1а) [2]. Ещё одним волноводом является так называемый поляритонный щелевой волновод (рис. 1б) [3]: две металлические пластины с небольшим зазором, где в основном локализовано поле электромагнитной волны. В настоящее время уже начаты экспериментальные исследования таких линий передачи.