

Прогнозирование процессов формирования трехкомпонентных 1D-структур электронной техники на основе физико-математической модели роста

И.Г. Попова

Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону

Аннотация: В работе обсуждаются проблемы прогнозирования ростовых режимов квазиодномерных электронных структур – квантовых нитей на основе трехкомпонентных соединений АЗВ5. Показано, что эффективным решением может быть моделирование процессов роста нитей на основе метода Монте-Карло. Формирование квантовых нитей осуществляется за счет внешнего потока частиц, переносимых в первой серии экспериментов перпендикулярно подложке, во второй серии – под случайными углами.

Построенная модель позволяет оценить влияние состава на геометрические параметры формируемых объектов. Приведен расчет критической толщины квазиодномерных структур. Сделаны выводы об управляющих факторах процессов роста нитей. Показано, что эффективным параметром управления процессами формирования трехкомпонентных 1D-структур являются вариации состава.

Ключевые слова: квантовые нити, метод Монте-Карло, рост на подложке, адсорбция, диффузия, одномерные структуры.

Введение

В последние годы возрастающий интерес в электронике вызывают низкоразмерные структуры: квантовые ямы (2D), нити (1D), и точки (0D) [1-3]. Системы промежуточной размерности – квантовые нити, или нановискеры, имеют меньшую популярность. Это связано в первую очередь с трудностями получения таких структур приборного качества. Вторая причина – недостаточная разработанность теории формирования 1D-структур, что ограничивает возможности их воспроизводимого получения. В настоящей работе предпринята попытка создания физико-математической модели формирования квантовых нитей (КН) на основе тройных соединений АЗВ5. Элементная база 1D-электроники, как правило, базируется на комплексах КН. Моновискеры используются как чувствительные элементы (зонды) в конструкциях атомных силовых микроскопов.

КН различаются по топологии, пространственной ориентации относительно подложки, толщине и длине. Очевидно, приборно пригодные комплексы КН должны состоять из вискероидов со сходными характеристиками.

Моделирование процессов формирования КН и их комплексов, как и многих ансамблевых микро- и наноструктур, чаще всего основано на методе Монте-Карло [4]. Ростовая среда, как правило, состоит из всех трех основных фаз (газообразная, жидкая, твердая).

Базовые понятия модели и физические свойства КН

Квантовой нитью будем считать твердотельную структуру с размерами в нанометровом диапазоне и отношением поперечника к длине не более 0,1. Исследования, проведенные за всю историю 1D-структур, показали, что в силу особенностей строения они почти лишены дислокаций [5,6]. У КН резко выражена анизотропия механических, термодинамических и электрофизических характеристик. Вид ансамблей КН приведен по характерным для соединений АЗВ5 фигурам роста [2] (рис. 1).

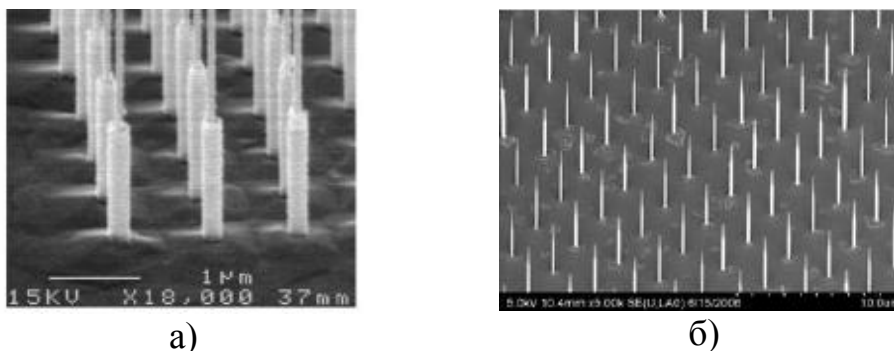


Рис. 1. – Регулярные массивы квантовых нитей АЗВ5, выращенных на комплексах капель Au: а) *InAs*; б) *GaAs* [2]

Первые КН в микрометровом диапазоне были получены свыше 50 лет назад [5]. Однако кинетика роста КН до настоящего времени не может считаться завершенной теорией. Наиболее последовательной является модель Гиваргизова-Чернова [6]. Она учитывает размерный эффект Гиббса-Томсона и позволяет практически точно определять минимальные объемы капель-затравок, а также кинетические характеристики процесса роста.

Фотоэлектрические свойства КН выделяются наличием эффектов поляризации люминесцентного излучения [7] и смещения пиков фотолюминесценции к ультрафиолетовому краю на $\Delta W \approx 0,01 \dots 0,05$ эВ. Эти эффекты становятся ярко выраженными в случаях, когда КН содержит гетеропереход (кластер атомов, или квантовую точку из материала с меньшей шириной запрещенной зоны – в сердцевине нановискера).

Самые интересные эффекты связаны с формированием в КН комбинированной структуры (сфалерита и вюрцита), что позволяет, например, формировать твердые растворы замещения, когда один и тот же компонент может выступать и донором, и акцептором.

Кроме того, в КН возможно проявление ферромагнитных свойств при $T \sim 300$ К (КН на основе германия и *MnP*) [8]. Это позволяет успешно применять такие системы в магнитных устройствах памяти.

Механизм роста КН

Формирование КН на активированной поверхности материала включает 3 стадии:

- а) нанесение пленки катализатора на полупроводниковую матрицу (например, *Au* на поверхность кремния);
- б) нуклеация включений;
- в) равномерное осаждение вещества КН на подложку.

Силы поверхностного натяжения препятствуют расплыванию капли осаждаемого агента: эта капля выносится по координате роста растущим столбиком постоянного диаметра. Скорость подъема капли v определяется интенсивностью потока атомов и в конечном счете зависит от диаметра КН. Параллельно происходит эпитаксиальное наращивание сплошного слоя на подложке со скоростью v_s . Таким образом, эффективная скорость роса КН

$$V = v - v_s.$$

Схема роста изображена на рис. 2, где h_l – толщина эпитаксиальной пленки, растущей одновременно с КН, h – длина КН, D – ее диаметр, φ – угол потока, J – его интенсивность, τ – характерное время десорбции, τ_f – время жизни адатома на боковой поверхности КН, τ_s – время пребывания адатома на поверхности, j_D – диффузионный поток атомов на этой поверхности и вертикальный поток.

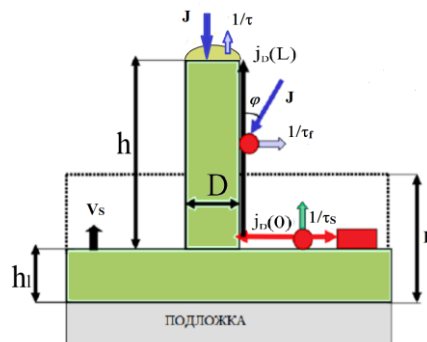


Рис. 2. – Схема роста КН

Построение модели на основе метода Монте-Карло и обсуждение результатов

Внутреннее пространство кристалла будем представлять, как трехмерную сетку позиций, либо занятых атомами, либо вакантных. Входными параметрами является состав, тип решетки, топология первых слоев и последовательность элементарных шагов диффузионного процесса. Вероятность диффузионного прыжка атома i -го элемента задается выражением:

$$W_i = C \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right),$$

где ΔE – энергия активации диффузионного переноса атома i -го элемента, C – нормировочный множитель, $k = 1,23 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – постоянная Больцмана, T – температура по шкале Кельвина.

Энергия активации определяется тремя слагаемыми:

$$\Delta E = \sum_k n_k E_{ik} - \sum_k \delta E_{ik} + \sum_k \Delta E_k.$$

Первый член представляет собой энергию ковалентных связей с соседними атомами, второе и третье слагаемые отражают затраты на выход из позиции с высоким потенциалом взаимодействия и занятие аналогичной вакансии соответственно. Характеристикой темпа роста является «фактор ожидания»

$$\tau = \frac{1}{\nu} \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right),$$

где ν – дебаевская частота.

Параметрами роста являются температура подложки T , скорость осаждения v_i i -го компонента и время перестройки структуры капли.

Разработанный нами программный пакет реализует вычислительные процедуры роста КН в условиях двух методов: а) рост из молекулярных пучков (*molecular beams epitaxy, MBE*), б химические реакции присоединения при контакте поверхности подложки с гидридами металлов (газофазная эпитаксия из металло-органических соединений, *MOC CVD*). Во втором случае значимым фактором является отклонение падающих частиц на различные углы.

Базовым материалом для моделирования был выбран твердый раствор с кристаллической решеткой сфалерита. Подложка ориентации (111), смоченная катализатором, в модели отображалась полубесконечной по оси z средой с циклическими по осям x и y граничными условиями.

Формирование КН осуществляется за счет внешнего потока частиц, переносимых в первой серии вычислений перпендикулярно подложке, а во второй – под случайными углами. Для упрощения вычислений не учитывались температурный градиент вдоль оси КН и вариации энергии связей упругими напряжениями.

Очевидно, для условий МВЕ следует ожидать диффузионно-стимулированный режим, для *MOC CVD* – адсорбционно-стимулированный.

Возможно формирование КН и в отсутствие катализатора. Большой опыт по выращиванию КН на основе ZnO методом карботермического безкатализного синтеза накоплен в Южном федеральном университете и Южном научном центре РАН [9,10].

В разработанной нами программной оболочке задавались характеристики материалов, на основе которых формируются двухслойные КН: $AlxIn1-xSb$ (внешний цилиндр) и $InSb<Bi>$ (цилиндр-сердечник). Брались значения $x = 0,05$; $x = 0,09$ и $x = 0,2$, что соответствовало составам гетероструктур, полученным из жидкой фазы ранее. Внедрение алюминия в целом стимулирует напряжения сжатия, висмута – растяжения. Для плоских эпитаксиальных слоев такие комбинированные составы могут способствовать компенсации дефектов [10].

Расхождение с эталонным состоянием описывалось величинами

$$m_i^k = \frac{a_i^k - a_i^l}{a_i^l} \text{ и } m_i^k = \frac{a_i^k - a_i^l}{a_j^l}.$$

Компоненты тензора деформаций в цилиндрической системе координат (r, θ, φ) задаются производными от энергии деформации $U(r, \theta, \varphi)$:

$$m_{nn} = \frac{\partial U_n}{\partial r}; m_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \theta} + \frac{U_r}{r}$$
$$m_{zz} = \frac{\partial U_z}{\partial z}; m_{rz} = \frac{1}{2} \frac{\partial U_r}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial r}$$
$$m_{nn} = \frac{\partial U_r}{\partial r}; m_{\theta\theta} = \frac{U_r}{r}; m_{zz} = \frac{\partial U_z}{\partial z}.$$

Решение задачи с граничным условием – энергией дислокации

$$E_d = \frac{1}{2} kab^2 \left(\ln \frac{8a}{r_0} - 2 \right),$$

где a, b – эффективные постоянные решеток, k – приведенный модуль Юнга, r_0 – равновесное межатомное расстояние на боковой поверхности КН,

представлено на рис. 3. Цифры при кривых соответствуют составам по x : 1 – 0,2; 2 – 0,09; 3 – 0,05.

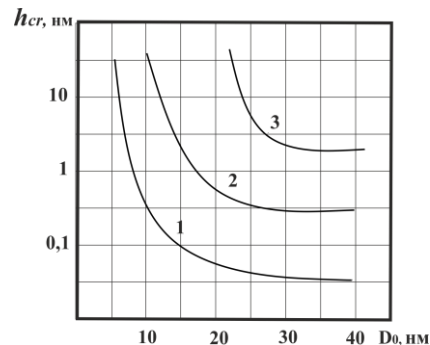


Рис. 3. – Зависимость критической толщины КН (h_{cr}) от диаметра сердечника (D_0)

Зависимость с увеличением диаметра сердечника исчезает ($h_{cr} \approx const$), принимая значения в интервале 0,3...8,5 нм, что соответствует формированию полых КН. Анализ результатов показывает, что результаты моделирования с использованием эмпирических данных позволяют определять геометрические характеристики квантовых нитей, в частности, их критические размеры. Вариации состава играют роль эффективного фактора управления при формировании трехкомпонентных 1D-структур.

Выводы

В работе показано, что полуэмпирическая модель роста квантовых нитей позволяет сделать оценки влияния состава и вклада механизмов диффузии и адсорбции частиц при формировании структур. Детали ростового режима в трехфазной системе, тем не менее, не могут быть описаны *ab initio*. Для воспроизводимого получения систем на основе многокомпонентных соединений АЗВ5 приборного качества необходим банк статистических данных по характеристикам проведенных процессов и выращенных в их ходе структур. Показано, что эффективным параметром управления процессами получения 1D-структур электронной техники является концентрационная функция легирующего компонента.

Литература

1. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // ФТП. 1998. Т. 32. вып. 1. С. 3-18.
2. Дубровский В.Г. Теоретические основы технологии получения полупроводниковых наноструктур // СПб: Университет ИТМО. 2019. 225 с.
3. Благин А.В., Благина Л.В., Попова И.Г., Подольцев В.В. Оптические и электрические параметры гетероструктур в физике полупроводниковых материалов: моделирование и эксперимент // Инженерный вестник Дона, 2018. № 4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2018/5354.
4. Настовьяк А.Г., Неизвестный И.Г., Шварц Н.Л., Яновицкая З.Ш. Моделирование роста нановискеров методом Монте-Карло // ФТП. 2010. Т. 44. вып. 1. С. 130-135.
5. Wagner R.S., Ellis W.S. Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth // Appl. Phys. Lett. 1964. V. 4. № 5. 89 p.
6. Беляев А.П., Антипов В.В., Рубец В.П. Формирование нитевидных нанокристаллов CdS методом вакуумного испарения и конденсации в квазизамкнутом объеме // ФТП. 2016. Т. 50. вып. 3. С. 420-422.
7. Haraguchi K., Katsuyama T., Hiruma K. Polarization dependence of light emitted from GaAs p-n-junctions in quantum wire crystals // J. Appl. Phys. 1994. V. 75. 4220 p.
8. Bouravleuv A.D., Mitani S., Rubinder Re. H., Celeste do Carmo M., Sobolev N.A., Ishibashi T., Koukitsu A., Takanushi K., Sato K. Magnetic properties of MnP nanowhiskers grown by MBE // Physika E 40, 2008. – P. 2037.
9. Лянгузов Н.В., Дрюков А.Г., Кайдашев Е.М., Галий И.В. Получение и исследование морфологии массивов микро - и наностержней



ZnO на подложках Si с пленочным подслоем ZnO // Инженерный вестник Дона, 2011, №4 URL:ivdon.ru/magazine/archive/n4y2011/522.

10. Благин А.В., Благина Л.В., Кодин В.В., Нефедова Н.А., Попова И.Г. Структура эпитаксиальных слоев узкозонных твердых растворов и компенсация дефектов // Инженерный вестник Дона, 2018. № 2. URL:ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2018/4820.

References

1. Alferov ZH.I. FTP. 1998. Т. 32. вып. 1. pp.3-18.
2. Dubrovskij V.G. SPb: Universitet ITMO. 2019. 225 p.
3. Blagin A.V., Blagina L.V., Popova I.G., Podol'cev V.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2018, № 4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2018/5354.
4. Nastov'yak A.G., Neizvestnyj I.G., SHvarc N.L., YAnovickaya Z.SH. FTP. 2010. Т. 44. вып. 1. pp. 130-135.5.
5. Wagner R.S., Ellis W.S. Appl. Phys. Lett. 1964. V. 4. № 5. 89 p.
6. Belyaev A.P., Antipov V.V., Rubec V.P. FTP. 2016. Т. 50. вып. 3. pp. 420-422.
7. Haraguchi K., Katsuyama T., Hiruma K. J. Appl. Phys. 1994. V. 75. 4220 p.
8. Bouravleuv A.D., Mitani S., Rubinder Re. H., Celeste do Carmo M., Sobolev N.A., Ishibashi T., Koukitu A., Takanushi K., Sato K. Physika E 40, 2008. 2037 p.
9. Lyanguzov N.V., Dryukov A.G., Kajdashev E.M., Galij I.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2011, №4. URL:ivdon.ru/magazine/archive/n4y2011/522.
10. Blagin A.V., Blagina L.V., Kodin V.V., Nefedova N.A., Popova I.G. Inzhenernyj vestnik Dona, 2018, № 2. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2018/4820.