САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

ПРИОРИТЕТНЫЙ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ
"ОБРАЗОВАНИЕ"

Проект «Инновационная образовательная среда в классическом университете»

Пилотный проект № 22 «Разработка и внедрение
инновационной образовательной программы «Прикладные математика и физика»»

Физический факультет

Кафедра Физики Твердого Тела

В.Г. Дубровский

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОТЕХНОЛОГИИ

Учебно-методическое пособие

.

.

Санкт Петербург
2007 г.

- Рецензент: зав. кафедрой физики твердого тела, д.ф.м.н. Новиков Б.В.

- Печатается по решению методической комиссии физического факультета СПбГУ.

- Рекомендовано Ученым советом физического факультета СПбГУ.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОТЕХНОЛОГИИ. – СПб., 2007

В учебно-методическом пособии рассмотрены процессы формирования полупроводниковых наноструктур различного типа: двумерных пленок, нитевидных нанокристаллов (нановискеров) и квантовых точек. Изложены методы моделирования ростовых процессов при эпитаксиальном выращивании наноструктур на основе теории нуклеации. Рассмотрены зависимости морфологии ансамблей наноструктур от условий эпитаксиального роста и подготовки поверхности, позволяющие создавать наноструктуры с контролируемыми свойствами.

Пособие предназначено для студентов 5-7-го курсов, аспирантов, соискателей и других обучающихся в области физики твердого тела, физики полупроводников и полупроводниковых наноструктур.

Введение

Цель данного пособия – подробное изложение теоретических основ эпитаксиальных полупроводниковых нанотехнологий. Прогресс в технологических методах выращивания и диагностики наноструктур различного типа, достигнутый в последнее время, продолжает буквально на наших глазах преображать информационный мир и повседневную жизнь человека. Фундаментальные и прикладные исследования методов создания и свойств наноструктур в конденсированных средах принято объединять общим термином «наноматериалы и нанотехнологии». В некотором смысле понятие нанотехнологии даже шире традиционного подразделения областей знаний – физики, химии, биологии и других дисциплин, поскольку управление свойствами системы на атомарном уровне стирает различия между объектами исследования. Полупроводниковые гетероструктуры, открытые в 1960-х годах, быстро нашли применение в оптоэлектронных устройствах и высокоскоростной СВЧ электронике. Позднее были созданы наноструктуры с одномерным (квантовые ямы), двумерным (квантовые проволоки) и трехмерным (квантовые точки) ограничением носителей заряда, приводящим к квантованию спектра энергетических состояний. С 2000 года наблюдается рост интереса к нитевидным нанокристаллам, или нановискерам. Уникальные транспортные, электрические, оптические, адсорбционные и иные характеристики ансамбля наноструктур определяются их размером и морфологией. Наличие нетривиальной связи между физическими характеристиками частиц и их геометрией делает актуальной задачу контролируемого выращивания наноструктур с заданным размером, плотностью и формой.

В дальнейшем речь идет о твердотельных наноструктурах, формирующихся на поверхности твердого тела при осаждении материала из газообразной среды. Сопоставление теоретических результатов экспериментальными данными будет проводится на примере эпитаксиальных систем материалов III-V и SiGe. Термин

«эпитаксиальные» объединяет ряд современных ростовых технологий, таких как молекулярно-пучковая или химическая газофазная эпитаксия. При проведении ростового эксперимента в заданной системе материалов в распоряжении экспериментаторов имеется ряд технологически контролируемых параметров процесса. К ним относятся температура поверхности, скорость осаждения и количество осажденного материала, соотношение потоков, а также предварительная подготовка поверхности. Возможность управления размером, концентрацией и формой с помощью изменения ростовых параметров позволяет выращивать наноструктуры со свойствами, необходимыми для конкретных приложений. Например, в случае квантовых точек увеличение ростовой температуры поверхности и толщины осаждения приводит к увеличению среднего размера островков, а повышение потока увеличивает их поверхностную плотность. В результате увеличивается длина волны излучения оптоэлектронных приборов и интенсивность люминесценции. Другим примером служат Si и III-V нановискеры, выращиваемые на активированных поверхностях. Надлежащим образом выбранные условия осаждения и размеры капель катализатора дают возможность получать регулярные вискеры высокого кристаллографического качества с максимальным отношением длины к диаметру. Детальные исследования процессов формирования нановискеров позволяют изменять их форму и состав, например, выращивать радиальные или осевые гетероструктуры внутри нановискеров, заострять их и т.д.

Характерная особенность рассматриваемых ростовых процессов состоит в том, что морфология наноструктур определяется кинетикой их формирования. Параметры ансамбля нанообъектов зависят не только от энергетики системы, температуры и количества осажденного материала, как было бы при термодинамическом характере процесса, но также от кинетических величин – скорости осаждения, времени экспозиции, диффузионных длин, времен жизни адатомов и т.п. Размер, форма и число наноструктур на кинетической стадии являются функциями времени. Учет кинетических факторов

усложняет исследование процессов роста наноструктур, но вместе с тем существенно расширяет возможности по управлению их свойствами. Упор на ростовую кинетику, рассмотрение именно начальных стадий ростового процесса, которые, в большинстве случаев, и наблюдаются в эксперименте, является отличительной особенностью изложения.

Важность рассматриваемых ростовых процессов для эпитаксиальных нанотехнологий – лишь один из факторов, определяющих актуальность исследуемых задач. Второй, не менее важный фактор, состоит в том, что современные методы выращивания и исследования наноструктур дают богатую почву для фундаментальных исследований. Здесь речь идет об образовании пространственно-упорядоченных наноструктур в неравновесных условиях. Теоретическое моделирование таких процессов представляет собой сложную задачу, решение которой невозможно в отрыве от экспериментальных результатов. Уникальные возможности контроля ростового процесса эпитаксиальных наноструктур, в том числе непосредственно в процессе их формирования, а также послеростовой диагностики позволяют получать исчерпывающие данные для проверки теоретических моделей. Точность эксперимента в большинстве случаев даже превосходит точность расчета, что объясняется как ограничениями моделей, так и неопределенностью в выборе некоторых расчетных констант. Сопоставление теоретических и экспериментальных зависимостей морфологии ансамбля наноструктур от времени и условий осаждения позволяет получить полезную количественную информацию об этих константах. Поэтому комплексные теоретические и экспериментальные исследования ростовых процессов позволяют решать как прямую задачу исследования зависимостей различных свойств наноструктур от кинетики роста, так и обратную задачу восстановления кинетических характеристик по полученным данным.

При построении моделей ростовых процессов возникает вопрос о «языке» теории. К сожалению, общепринятого языка в данной области не существует - в силу разнообразия рассматриваемых процессов, относительно короткой истории данной области знаний и огромным потоком новой информации. При моделировании процессов формирования наноструктур используются как термодинамические, так и кинетические методы. Данное пособие исповедует кинетический подход, причем на протяжении всего изложения мы стараемся проследить универсальность принятой точки зрения при исследовании конкретных задач. В качестве единой точки зрения нами выбрана идеология кинетики фазовых переходов первого рода, восходящая к классическим трудам Беккера, Деринга, Фольмера, Странского, Зельдовича, Френкеля и многих других выдающихся ученых. В основе теории лежит уравнение Зельдовича для функции распределения зародышей новой фазы по размерам и классическое выражение для скорости нуклеации зародышей. Большой вклад в развитие общей теории формирования новой фазы на начальном этапе (теория зарождения и независимого роста, в дальнейшем для краткости называемая теорией нуклеации) внесли работы Ф.М. Куни, А.П. Гринина, А.К. Щекина и их коллег из Санкт-Петербургского государственного университета. В применении к процессам формирования островковых тонких пленок теория нуклеации в наиболее полном виде получила развитие в работах А.В. Осипова и С.А. Кукушкина. Им же принадлежит идея использования теории нуклеации для моделирования процессов формирования квантовых точек. Многие теоретические вопросы роста кристаллов на основе теории нуклеации рассматривались ранее Д. Кащиевым. Принятый в данной книге подход ближе всего к обзору [2] и монографии [20], хотя характер изложения и подбор материала существенно отличаются. Основная задача состоит в «адаптации» общей теории нуклеации в неравновесных системах к исследованию процессов роста эпитаксиальных наноструктур, которые в каждом конкретном случае имеют свои отличительные особенности, и часто кажется, что исследуемые задачи вообще не имеют

отношения к фазовым переходам. Учет только начальных стадий зарождения во многих случаях недостаточен для получения исчерпывающей информации о ростовом процессе и морфологии наноструктур. Для моделирования образования сплошных слоев необходимо рассматривать взаимодействие растущих частиц, что делается на основе геометрико-вероятностной модели кристаллизации А.Н.Колмогорова. Исследование более тонких ростовых процессов требует привлечения различных вариантов нелинейных уравнений типа «диффузия плюс реакции».

Это пособие посвящено теоретическим основам полупроводниковых технологий и предназначено для студентов, аспирантов и других обучающихся в области физики твердого тела, физики полупроводников и полупроводниковых наноструктур. Характерные зависимости морфологии квантовых точек и нановискеров от условий роста сопровождаются конкретными примерами и расчетами, поясняются на качественном уровне с большим количеством иллюстраций. Наоборот, многие положения общей теории фазовых переходов, изложены кратко, некоторые вообще остались за рамками изложения. В книгу не включена теория Отвальдовского созревания, не рассматриваются вопросы, касающиеся прямого моделирования ростовых процессов методами Монте-Карло и молекулярной динамики. Не обсуждаются исследования транспортных и оптических свойств наноструктур и приборные приложения, которым посвящены отдельные монографии (например, [34] и [41]).

Несколько слов о структуре книги. Глава I представляет собой введение в теорию образования тонких пленок и наноструктур на поверхности твердого тела. Приводятся общие результаты и модели, используемые в дальнейшем изложении. Кратко рассматриваются механизмы формирования квантовых точек в гетероэпитаксиальных системах и нановискеров на активированных поверхностях. В Главе II общая теория применяется для исследования кинетики формирования тонких пленок с модельной зависимостью скорости роста островков от их размера. Глава III посвящена теории

образования когерентных островков в системах, рассогласованных по параметру решетки. В Главах IV и V излагаются различные модели роста нановискеров. В Главе IV рассматриваются вопросы ростовой кинетики в механизме «пар-жидкость-кристалл»: эффект Гиббса-Томсона, размерный эффект конечного радиуса растущей грани, диффузионный рост кристаллов, комбинированный рост, различные типы зависимостей скорости роста вискеров от радиуса капли и условий осаждения. Никаких предварительных знаний по теории нуклеации, моделям формирования тонких пленок и наноструктур не требуется, все нужные сведения можно найти в тексте.