

Е. Е. Родякина¹, С. С. Косолюбов^{1,2}, А. В. Латышев^{1,2}¹ Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090, Россия² Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

E-mail: rodyakina@thermo.isp.nsc.ru

ЭЛЕКТРОМИГРАЦИЯ АДАТОМОВ КРЕМНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ (111)

Методами *in situ* сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии и *ex situ* атомно-силовой микроскопии показано существование градиента концентрации адатомов по поверхности между эшелонами ступеней в условиях сублимации, гомоэпитаксиального роста и квазиравновесия на поверхности кремния (111) при температурах выше 900 °С. Экспериментально подтверждено наличие у адатомов отрицательного (при 1 100 °С) и положительного (при 1 300 °С) эффективного заряда. Установлено, что знак эффективного заряда не зависит от величины пересыщения на поверхности. На основе полученных экспериментальных данных приведена оценка величины эффективного заряда адатома при 1 280 °С, составившая от $0,07 \pm 0,01$ до $0,17 \pm 0,02$ от величины заряда электрона.

Ключевые слова: атомные ступени, поверхность кремния, электромиграция, эффективный заряд адатома.

Введение

Задача о распределении атомов по поверхности кристалла является привлекательной как с научной, так и практической точки зрения, но в настоящее время не имеет окончательного решения. При повышенных температурах из-за большой скорости перемещения адатомов невозможно проследить экспериментально за их перемещением по поверхности, а следовательно, и определить распределение и концентрацию в каждой отдельной точке. Косвенно судить о концентрации адатомов можно по перемещению ступеней при высоких температурах, поскольку скорость ступени непосредственно зависит от концентрации. Для этого используются разработанные теоретические модели движения ступеней [1–3] и сравниваются с результатами экспериментов и компьютерного моделирования [4; 5].

Особое внимание в литературе уделяется влиянию электрического тока, нагревающего кристалл, на распределение атомных ступеней на поверхности. При протекании через образец кремния электрического тока наблюдается дрейф адатомов, вызванный электрическим полем [6; 7]. Сила электромиграции F , действующая на диффундирующий адатом, пропорциональна электрическому полю E . Коэффициент пропорциональности определяют как эффективный заряд адатома q_{eff} [8], выраженный в единицах заряда электрона e :

$$F = eq_{\text{eff}}E.$$

Наличие у адатомов эффективного заряда вызывает перераспределение атомных ступеней в эшелоны [9], флуктуации ступеней в фазе (*in phase step wandering*) [10–12], попарному сближению ступеней [8; 13] и другим эффектам [14]. В электрическом поле адатомы, имеющие ненулевой заряд,

* Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 10-02-01011) и грантов Министерства образования и науки.

смещаются вдоль поля, что должно приводить к возникновению градиента концентрации адатомов по террасе между атомными ступенями. Однако существуют экспериментальные и теоретические противоречия в вопросе о влиянии внешнего потока атомов на поведение атомных ступеней в присутствии силы электромиграции [15].

Цель настоящей работы – экспериментально показать наличие градиента концентрации адатомов и его изменение при контролируемом изменении пересыщения на поверхности кристалла кремния, нагреваемого постоянным электрическим током.

Методика эксперимента

Образцы размером $10 \times 1,1 \times 0,3$ мм³ вырезались из кремниевой шайбы, разориентированной от направления (111) менее чем на 1°. После стандартной химической очистки образцы закреплялись в танталовом держателе и помещались в сверхвысоковакуумную камеру (остаточное давление менее 10^{-9} Торр) отражательного электронного микроскопа [16]. С целью очищения поверхности от естественного оксида проводился термический отжиг при температуре выше 1250 °С посредством резистивного нагрева пропусканием электрического тока. Использование отражательного электронного микроскопа позволило проводить *in situ* диагностику структурных и морфологических перестроек на поверхности образца при нагреве кристалла вплоть до температуры плавления. Последующий анализ профиля поверхности образцов проводился *ex situ* методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) при атмосферных условиях. В настоящей работе использовался метод полуконтактной АСМ в режимах топографии и фазового контраста на базе атомно-силового

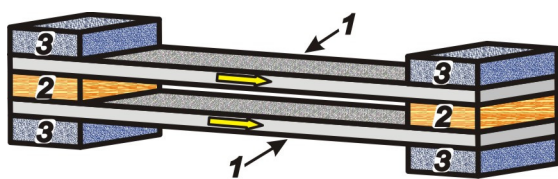


Рис. 1. Схема устройства плоского капилляра: 1 – прямоугольные образцы кремния; 2 – диэлектрические изоляторы между пластинами; 3 – электрические танталовые контакты-держатели

микроскопа Solver P47H (НТ-МДТ), позволяющий измерять высоту с точностью 0,05 нм и латеральные размеры с точностью 5–10 нм [17].

Для реализации плавного изменения концентрации адсорбированных на поверхности кремния атомов (адатомов) использовалась система плоского капилляра (рис. 1). Плоский капилляр состоит из двух прямоугольных пластин кремния (1), расположенных параллельно друг другу на расстоянии порядка 100 мкм и разделенных по краям диэлектрическим материалом (2), что позволяло независимо нагревать пластины пропусканием электрического тока. Применение такой конструкции позволяет контролируемо изменять пересыщение по адатомам на исследуемой поверхности кремния за счет осаждения атомов кремния с другой пластины при любой температуре выше 900 °С. Таким образом, можно реализовать квазиравновесные условия (суммарный поток атомов с исследуемой поверхности равен нулю) и условия эпитаксиального роста (суммарный поток атомов на поверхность больше нуля) вплоть до температуры исследуемого образца, близкой к температуре плавления кремния.

Теория

Согласно классической работе Бартона, Кабреры и Франка (БКФ) [18], при гомоэпитаксиальном росте скорость ступени V пропорциональна пересыщению адатомов

$$\sigma(x) = (n(x) - n_{\text{eq}})/n_{\text{eq}},$$

где $n(x)$ и n_{eq} концентрация адатомов на поверхности в точке x и равновесная концентрация соответственно. Следовательно, чем больше градиент концентрации адатомов, тем выше скорость ступени. Для ступени, разделяющей две полубесконечные плоскости, решение дифференциального уравнения, описывающего диффузию адатомов по поверхности кристалла, с учетом граничных условий (концентрация адатомов на ступени равна n_{eq}) можно записать в виде

$$n(x) = n_{\text{eq}} \exp(x/\lambda_s),$$

где λ_s – длина диффузии адатома. Эта зависимость описывает диффузионное поле адатомов, вызванное наличием ступени. Перекрывание диффузионных полей от двух соседних ступеней приводит к куполообразному распределению концентрации адатомов по террасе. При наличии внешней си-

лы F , действующей на адатомы, распределение концентрации адатомов может измениться. На рис. 2 схематически представлено распределение адатомов по террасе и их концентрация $n(x)$ между атомными ступенями в рамках теории БКФ при $F = 0$ (рис. 2, а), под действием силы электромиграции в сторону нижележащих террас $F < 0$ (рис. 2, б) и вышележащих террас $F > 0$ (рис. 2, в). Стрелками показано направление действующей силы F .

При резистивном нагреве кристалла из-за взаимодействия адатома, имеющего эффективный заряд q_{eff} , с электрическим полем E возникает сила электромиграции, действующая на диффундирующий адатом $F = q_{\text{eff}}eE$, где e – заряд электрона [8]. Если заряд адатома положителен, то направление дрейфа адатомов будет соответствовать направлению действующей на адатом силы электромиграции.

На чистой вицинальной поверхности кремния с углом разориентации от грани (111) в пределах $0,05$ – $0,2^\circ$ расстояние между регулярно расположенными атомными ступенями составляет 360 – 90 нм. Поэтому следует учитывать не только вклад в скорость ступени перекрытия диффузионных полей адатомов, но и упругое взаимодействие ступеней между собой, так как величина этого взаимодействия обратно пропорциональна квадрату расстояния между ступенями [19]. Вследствие этого выделить составляющую скорости за счет влияния внешней силы на распределение адатомов по поверхности образца достаточно сложно из-за высокой плотности ступеней. Увеличить расстояние между ступенями можно, например, используя эффект эшелонирования атомных ступеней при нагреве образца прямым пропусканием постоянного электрического тока [9]. Эшелоны представляют собой группы близкорасположенных ступеней, разделенных широкими участками со ступенями на расстоянии нескольких микрон друг от друга. Типичные расстояния между ступенями в эшелонах составляют 1 – 10 нм [20], и, следовательно, двигаются они медленно по сравнению с отдельными ступенями, что позволяет считать эшелоны практически неподвижными источниками и стоками для адатомов. Взаимодействием моноатомных ступеней, находящихся между эшелонами, можно пренебречь, поскольку типичное расстояние между ними составляет 3 – 40 мкм [21].

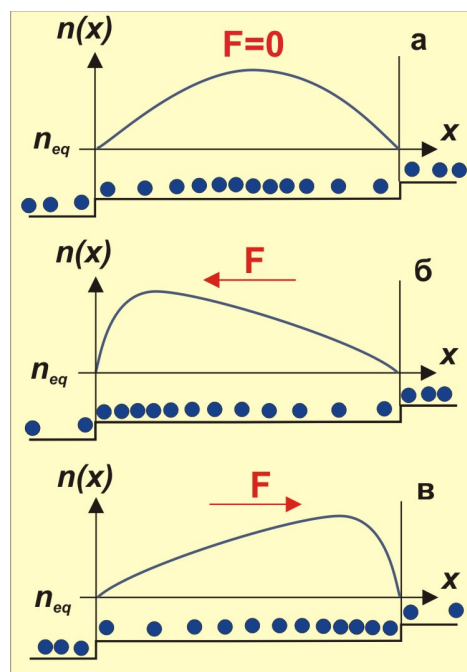


Рис. 2. Схематическое представление перераспределения концентрации адатомов между ступенями под воздействием внешней силы

Рассмотрим движение одиночной ступени параллельно двум соседним эшелонам в условиях ее взаимодействия с диффузионным полем адатомов от соседних эшелонов. Скорость ступеней в точке x зависит от концентрации $n(x)$, определяемой расстоянием до соседних эшелонов. Правомерность такого подхода описана в работе [22]. На рис. 3, а в верхнем ряду показано распределение концентрации адатомов между эшелонами с учетом действия внешней силы F , направленной сторону нижележащих террас. Штриховой линией показано распределение без воздействия внешней силы. Градиент концентрации можно считать постоянным везде, кроме областей вдоль эшелонов, на которых концентрация стремится стать равновесной n_{eq} , так как эшелоны являются эффективными стоком для адатомов.

В условиях эпитаксиального роста на поверхности ступень смещается со стороны вышележащей террасы (обозначена как «верх») в сторону нижележащей террасы (обозначена как «низ»). Исходная форма ступени в момент времени t_1 будет меняться, так как разные фрагменты ступеней (по координате x) будут смещаться на разные расстояния из-за разного пересыщения (см. рис. 3). Характерно, что через время t_2 ступень приоб-

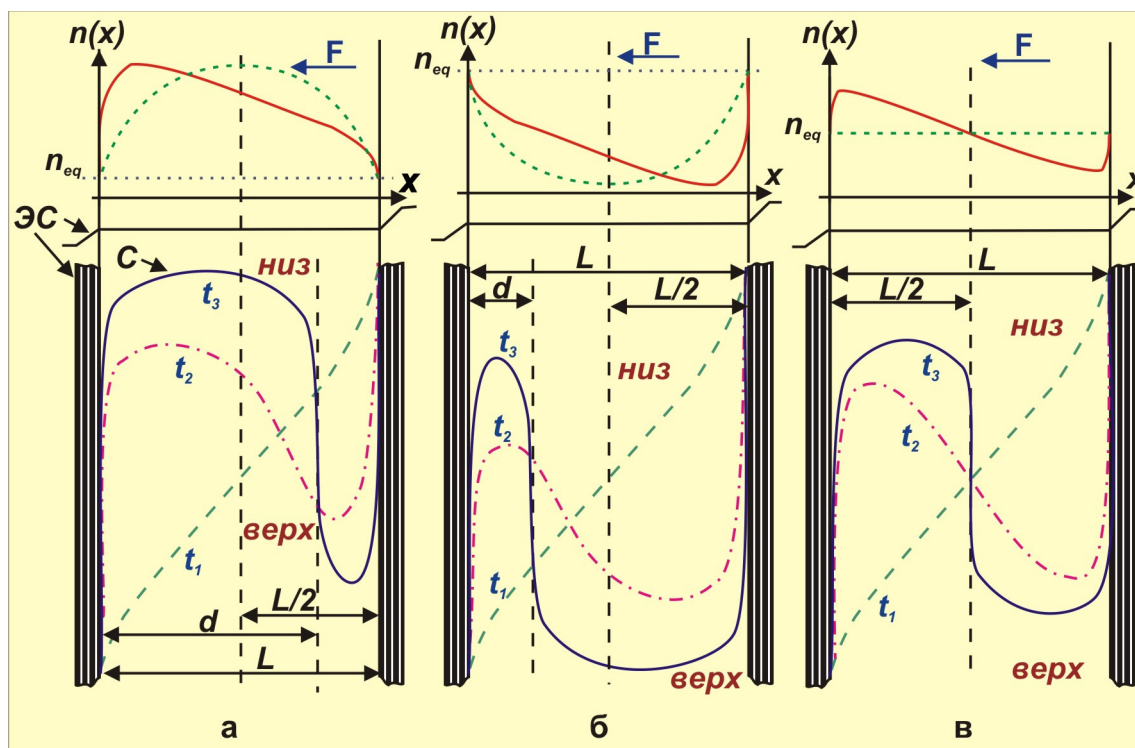


Рис. 3. Схематическое представление распределения концентрации адатомов между эшелонами вдоль оси, перпендикулярной эшелонам (сверху), и последовательных стадий изгиба ступени (изменений формы ступеней) (снизу) при различных условиях: (а) рост; (б) сублимация; (в) квазиравновесие

ретаает S -образную форму, и, наконец, через время t_3 образуется участок ступени, параллельный эшелону и имеющий противоположный по знаку фронт роста относительно ступеней в эшелоне (обозначим этот участок как антиступень). Расстояние между эшелонами обозначено как L , а ширина террасы от антиступени до нижележащего эшелона – как d , при этом $d > L/2$.

При высоких температурах (выше $900\text{ }^\circ\text{C}$) на поверхности кремния (111) при отсутствии потока атомов из внешнего источника смещение ступеней обусловлено процессом сублимации. Если при фиксированной температуре создать поток атомов на поверхность, равный потоку с поверхности при сублимации, можно реализовать условие квазиравновесия, когда при отсутствии внешней силы ступени сдвигаться не будут. На рис. 3, б, в (в верхнем ряду) показаны распределения концентрации для условий сублимации и равновесия соответственно: штриховыми линиями – распределение вдоль оси x концентрации адатомов $n(x)$ при $F = 0$; сплошными – при $F < 0$, т. е. направленной в сторону нижних террас. Горизон-

тальные линии, состоящие из точек, указывают положения равновесной концентрации. В условиях эпитаксиального роста концентрация больше равновесной (рис. 3, а), при сублимации – меньше равновесной (рис. 3, б) и квазиравновесия, когда $F = 0$, концентрация постоянна и совпадает с равновесной (рис. 3, в).

В условиях сублимации $d < L/2$, а квазиравновесия – $d = L/2$. Необходимо отметить, что при равновесии (рис. 3, в) участок посередине между эшелонами не сдвигается, тогда как при росте и сублимации горизонтальные фрагменты ступени сдвигаются вдоль эшелонов.

Экспериментальные результаты

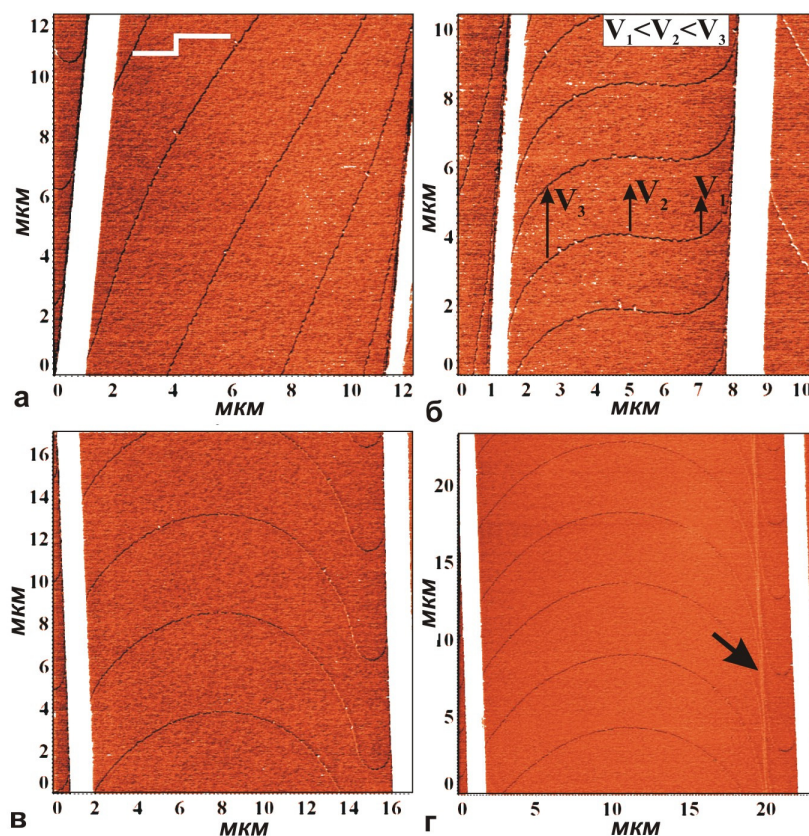
Эксперименты методом сверхвысоковакуумной электронной микроскопии проводились при различных температурах – от 900 до $1350\text{ }^\circ\text{C}$, и направлениях нагревающего образец постоянного электрического тока. Для подтверждения гипотезы о том, что градиент концентрации адатомов связан с электромиграцией, в данной работе кон-

тролируемо изменялось пересыщение на поверхности кремния при постоянной температуре и величине электрического поля. Экспериментально на поверхности кремния (111) были реализованы различные условия: эпитаксиальный рост, сублимация и квазиравновесие. На рис. 4 представлены типичные АСМ-изображения (фазовый контраст) участка поверхности кремния, содержащего атомные ступени (тонкие линии на сером контрасте) между эшелонами ступеней (широкие светлые полосы) на различных стадиях изгиба ступени в процессе движения при эпитаксиальном росте (температура подложки 1100 °С, скорость роста порядка 0,2 монослоя/с). На изображении вышележащие террасы находятся справа, как схематично указано на рис. 4, а. Во время эпитаксиального роста ступени сдвигались в сторону нижележащих террас, т. е. на изображениях справа налево. Электрический ток, нагревающий образец, протекал в направлении вышележащих террас и перпендикулярно эшелонам. На рис. 4, б стрелками указаны скорости различных участков ступени: чем длиннее стрелка, тем выше скорость.

Формы ступеней на рис. 4, а–в качественно соответствует профилям ступени на рис. 3, а в моменты времени t_1 , t_2 и t_3 соответственно. Дрейф адатомов и, следовательно, сила электромиграции были направлены в сторону нижележащих террас. Так как нагревающий электрический ток был направлен в сторону вышележащих террас, то эффективный заряд адатома должен быть отрицательным, что для данной температуры соответствует работе [9].

При схематическом рассмотрении мы учитывали только одну ступень между эшелонами, тогда как в экспериментальных условиях в большинстве случаев линию, перпендикулярную эшелонам, пересекает несколько ступеней (рис. 4, а). Через некоторое время из антиступеней формируется антиэшелон ступеней (линия справа на рис. 4, г, параллельная эшелону и обозначенная «жирной» стрелкой), так как участки антиступеней, параллельные эшелону, двигаются медленно. Формирование антиэшелонов ранее наблюдалось только при сублимации [10; 23].

Рис. 4. АСМ-изображения (фазовый контраст) последовательных стадий изменения формы ступеней при движении в условиях роста



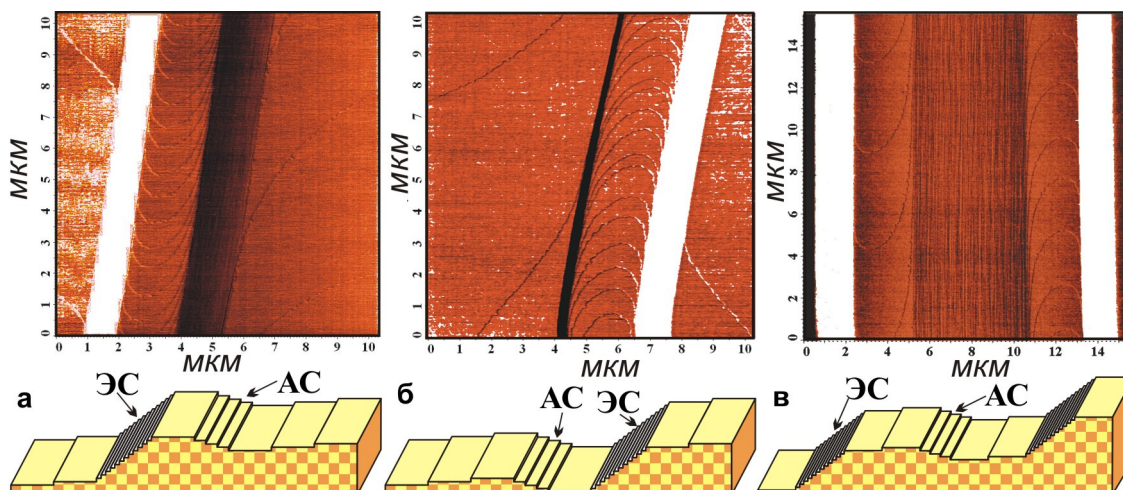


Рис. 5. АСМ-изображения (фазовый контраст) антиэшелонов (темные области), сформировавшихся в различных условиях, и схематические изображения профиля поверхности: при сублимации (а), росте (б) и равновесии (в)

На рис. 5 представлены АСМ-изображения (фазовый контраст) участков поверхности кремния после отжига в различных условиях при температуре $1\ 300\ ^\circ\text{C}$. На рисунке видны эшелон (широкие светлые полосы обозначены как ЭС на схематическом рисунке), сформировавшиеся антиэшелон (полосы темного контраста обозначены как АС) и атомные ступени (тонкие линии на сером контрасте) между эшелонами и антиэшелонами ступеней. Направление нагревающего электрического тока было в сторону нижележащих террас (на рисунке справа налево) и перпендикулярно эшелонам. Положения антиэшелонов в условиях сублимации (рис. 5, а), роста (рис. 5, б) и квазиравновесия (рис. 5, в) находятся в полном соответствии со схематическим представлением антиступеней после времени t_3 на рис. 3, а, б и в соответственно. Учитывая направление электрического тока, можно сделать вывод о том, что при данной температуре знак эффективного заряда адатомов положителен во всех трех случаях.

Необходимо отметить, что процессы эшелонирования и формирования антиэшелонов происходят в одних и тех же температурных интервалах при заданном направлении тока при любой величине пересыщения или недосыщения на поверхности, которое варьировалось в широких интервалах за счет изменения температуры подложки-источника.

Впервые экспериментально показано, что от величины пересыщения зависит положение

антиэшелона относительно двух соседних эшелонов, между которыми он образовался: в условиях роста антиэшелон формируется вблизи вышележащего эшелона, при сублимации – вблизи нижележащего эшелона, при квазиравновесии – в центре между эшелонами. О смещении антиэшелона от нижележащего эшелона к центру при частичной компенсации сублимации сообщалось в первой экспериментальной работе по антиэшелонам [23].

Система «эшелон – антиэшелон», сформированная при квазиравновесии

Будем считать, что экспериментально достигнуто состояние квазиравновесия на поверхности кристалла, когда эквидистантно расположенные ступени не сдвигаются, а только флуктуируют возле среднего положения. Такое состояние реализуется при определенных соотношениях температур пластин в капилляре. Экспериментально исследовалось поведение ступеней в условиях квазиравновесия при температуре подложки порядка $1\ 300\ ^\circ\text{C}$. На рис. 6 представлены изображения, составленные из пяти АСМ-изображений (фазовый контраст), антиэшелонов, образовавшихся при квазиравновесии. Тонкие светлые линии – это атомные ступени, формирующие антиэшелон, между черными областями – участками эшелонов ступеней. Анализ изображений, полученных для условий роста, сублимации и квазиравновесия, показал, что плотность

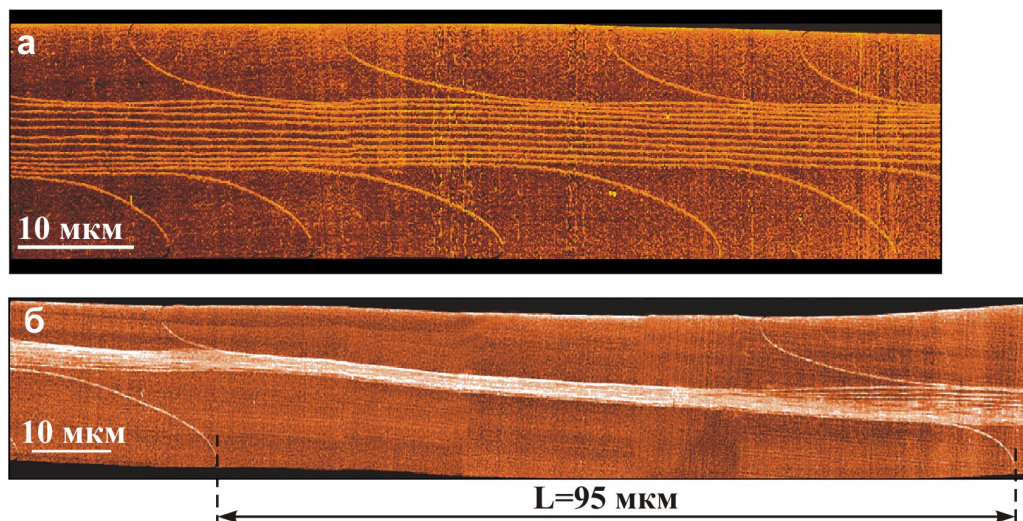


Рис. 6. Антиэшелоны, образовавшиеся в условиях близких к равновесным

ступеней в антиэшелоне при квазиравновесии (рис. 6, а) значительно меньше, чем для роста или сублимации (рис. 5, а, б). Это объясняется двумя причинами. Во-первых, распределение концентрации адатомов при квазиравновесии отлично от роста и сублимации. Как было описано выше, антиэшелон формируется в области, где концентрация адатомов близка к равновесной, и поэтому ступени в антиэшелоне не сдвигаются. Между антиэшелонном и нижележащим (вышележащим) эшелонном концентрация адатомов меньше (больше) равновесного значения. При этом суммарно поток с поверхности равен нулю, следовательно, происходит перераспределение адатомов по поверхности. Второй причиной является отсутствие кинетического эффекта движения атомных ступеней. При сублимации и росте есть направленное движение ступеней, принадлежащих антиэшелону, в сторону выше лежащих или нижележащих террас соответственно. Когда ближние к эшелону ступени замедляются, то дальние, продолжая двигаться с прежней скоростью, догоняют их, тем самым уменьшая ширину антиэшелона и соответственно расстояние между ступенями в нем.

Другой особенностью системы «эшелон – антиэшелон» является распределение наклонных ступеней между эшелонном и антиэшелонном. Из литературных данных (см., например, [24]) известно, что при температурах больше 1 200 °С в условиях сублимации максимальное расстояние между ступе-

нями составляет менее 20 мкм. Нами было определено, что расстояние между наклонными ступенями L может составлять более 95 мкм (рис. 6, б), т. е. значительно превышает максимальное расстояние между ступенями при сублимации. Объяснить это можно следующим образом. Максимальное расстояние между наклонными ступенями L пропорционально диффузионной длине адатома λ_s , [24] $L \approx \lambda_s \cdot \gamma / k_B T$, где γ – коэффициент жесткости ступени, k_B – постоянная Больцмана, T – температура образца. Или грубо $L \approx 2\lambda_s$, [25]. В свою очередь λ_s , по отношению Эйнштейна $\lambda_s^2 = D_s \tau_s$, пропорциональна корню из времени жизни. При равновесии десорбируемый адатом эффективно возвращается обратно, таким образом, увеличивается эффективное время жизни адатома, а следовательно, и длина диффузии. Иначе говоря, при равновесии диффузионная длина адатома, а точнее длина миграции адатома вдоль эшелонов, составляет порядка 47 мкм (в два раза меньше L).

Итак, методом эшелонирования поверхности кремния в условиях, близких к равновесным, можно создавать террасы шириной более 100 мкм для различных применений.

Обсуждение экспериментальных результатов

В условиях квазиравновесия метод плоского капилляра использовался в работах для измерения высокотемпературных флуктуа-

ций ступеней, по которым определялись жесткость, коэффициент линейного натяжения и величина упругого взаимодействия ступеней между собой [26–28]. Изгиб ступени между эшелонами на начальных стадиях при сублимации описывается в работе [22]. Рассмотрим возможные причины формирования антиэшелонов, т. е. прекращения движения антиступени в сторону эшелона и остановки на некотором расстоянии, вместо взаимной аннигиляции со ступенью, выходящей из эшелона. В рамках уравнения для скорости движения ступени, полученного в работе [29] можно использовать подход, предложенный Стояновым [8], и записать скорость V ступени в виде

$$V = f(\mu, \mu_+, \mu_-) \cdot k n_{\text{eq}} a^2 / 2kT + k_+ w_+ + k_- w_-;$$

$$k_{\pm} = k n_{\text{eq}} a^2 F / 2kT + 1/2\tau_e,$$

где $f(\mu, \mu_+, \mu_-)$ – функция от химических потенциалов рассматриваемой, вышележащей и нижележащей ступеней соответственно; τ_e – время испарения одного монослоя; n_{eq} – равновесная концентрация адатомов на поверхности; k – кинетический коэффициент встраивания адатома в ступень; a^2 – площадь поверхности, приходящаяся на один атом; w_{\pm} – ширина вышележащей и нижележащей, относительно рассматриваемой ступени, террас соответственно; F – сила электромиграции, вызывающая направленный дрейф адатома; T – температура образца, k – постоянная Больцмана.

Химический потенциал ступени μ пропорционален разности обратных кубов рас-

стояний до соседних ступеней [30; 31], функция $f(\mu, \mu_+, \mu_-)$ пропорциональна кубу высоты ступени (для кремния (111) она равна 0,31 нм), поэтому, учитывая, что расстояния между ступенями и эшелонами могут составлять до 40 мкм, первым слагаемым в уравнении для скорости можно пренебречь. Перегруппировав оставшиеся слагаемые, зависящие от расстояния между ступенью и эшелонами, можно переписать выражение для скорости в виде

$$V = V^0 + V^F,$$

где $V^0 = (w_+ + w_-) / 2\tau_e$ – скорость ступени за счет сублимации, $V^F = k c_{\text{eq}} a^2 F (w_+ - w_-) / 2kT$ – составляющая скорости под действием электромиграции.

Соответствующие направления составляющей скорости за счет электромиграции для ступени (обозначим буквой s) V_s^F и антиступени (обозначим as) V_{as}^F в зависимости от того, к какому эшелону они ближе находятся, представлены на рис. 7. Ширина вышележащей и нижележащей относительно ступени террас обозначены как w_{s+} и w_{s-} соответственно, для антиступени – w_{as+} и w_{as-} .

Таким образом, вследствие протекания электрического тока ступень приобретает составляющую скорости, параллельную току и пропорциональную разнице ширин вышележащей и нижележащей террас. Следовательно, скорость ступени за счет дрейфа адатомов под действием силы электромиграции будет увеличиваться или уменьшаться в зависимости от того, ближе к какому эшелону она находится – к верхнему или нижнему. Рассмотрим для упрощения движение только участков ступеней параллельных эшелонам, чтобы вектора скорости за счет сублимации и действия тока были параллельны или антипараллельны друг другу. Учет других направлений движения ступени относительно направления тока приводит к более сложному поведению ступеней (см., например, работы [11; 32]).

В условиях сублимации, когда движение ступеней происходит в сторону вышележащих террас, составляющая скорости ступени $V_s^0 > 0$ между эшелонами, тогда как $V_s^F > 0$, если ступень ближе к вышележащему эшелону, и $V_s^F < 0$, если ступень ближе к нижележащему эшелону (так как сила электромиграции противоположно направлена оси x , то $F < 0$). Следовательно, участок ступени со стороны вышележащего эшелона

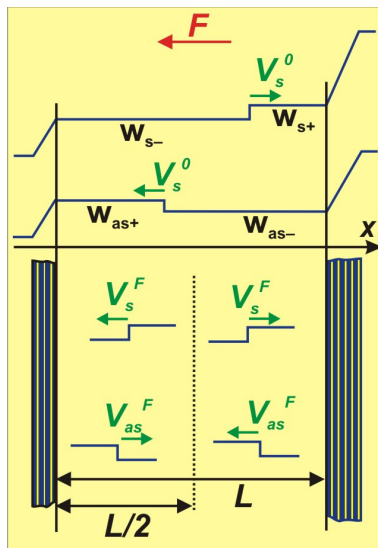


Рис. 7. Схематическое представление ступени и разворнутой ступени и соответствующих направлений составляющих скорости для них

двигается быстрее, чем участок ступени со стороны нижележащего эшелона, и ступень будет изгибаться (см. положение ступени через время t_2 на рис. 3, а).

Отметим, что составляющая скорости V_{as}^0 будет отрицательна для антиступени, поскольку движение антиступени в сторону вышележащих террас противоположно направлению выбранной нами оси x . При этом $V_{as}^F > 0$, если антиступень ближе к нижележащему эшелону, и $V_{as}^F < 0$, если ближе к вышележащему эшелону. Таким образом, когда антиступень ближе к вышележащему эшелону, она движется быстрее, а подходу к нижележащему, замедляется. Следовательно, может возникнуть такая ситуация, когда составляющие скорости сравняются, но будут противоположно направлены $V_{as}^0 = -V_{as}^F$, и антиступень остановится на некотором расстоянии $d < L/2$ (см. рис. 3, а) от нижележащего эшелона. Таким образом, принимая во внимание, что $L = w_+ + w_-$, получим:

$$w_{as+} = d = \xi L,$$

$$w_{as-} = L - d = (1 - \xi)L,$$

где $\xi = 0,5 - kT/2kn_{eq}a^2|F|\tau_e$.

Определив экспериментально величину ξ , можно вычислить эффективный заряд адатома в единицах заряда электрона:

$$q_{\text{eff}} = kT/2kn_{eq}a^2eE\tau_e(0,5 - \xi).$$

Если поток атомов из внешнего источника такой, что происходит частичная компенсация сублимации, то скорость ступени V^0 будет меньше, чем без внешнего потока. Следовательно, расстояние от эшелона до антиступени d начнет увеличиваться. В случае роста направление вектора скорости будет противоположным по сравнению со случаем сублимации, и составляющая скорости V^0 будет отрицательной для ступени и положительной для антиступени, тогда как V^F не изменит своего знака. Следовательно, быстрее будет двигаться участок ступени, который находится возле нижележащего эшелона. Аналогичные изменения произойдут и с антиступенью, что может привести к остановке антиступени на расстоянии $d > L/2$ (см. рис. 3, б).

Если создать внешний поток атомов на поверхность, равный потоку с поверхности, за счет сублимации, то можно реализовать условия квазиравновесия, когда суммарный поток равен нулю. В этом случае составляющая скорости $V^0 = 0$, и движение ступени и антиступеней может происходить

только за счет электромиграционной составляющей, т. е. за счет градиента концентрации адатомов, вызванного протеканием электрического тока через образец. Тогда со стороны нижнего эшелона движение ступени будет в сторону роста, а около вышележащего эшелона – в сторону сублимации. В этом случае участки ступени в центре между эшелонами не двигаются и антиступень остановится при $d = L/2$ (см. рис. 3, в).

Следует отметить, что, несмотря на квазистатические приближения (справедливые при 900 °С, когда диффузия достаточно быстрая, а скорость движения ступеней мала), модельное поведение ступеней совпадает с экспериментальным. Как указано в экспериментальных результатах, в широком температурном интервале (вплоть до 1350 °С) и различных потоках на поверхность антиэшелона занимают положения в соответствии с положением антиступени на рис. 3.

Выбрав участки на поверхности образца, где линию перпендикулярную эшелонам пересекает одна ступень, как при теоретическом рассмотрении, можно измерить расстояние от антиэшелона, состоящего из одной ступени, до нижележащего эшелона в зависимости от расстояния между эшелонами. Для случая изгиба ступени при движении вдоль эшелона в условиях сублимации при температуре 1280 °С зависимость положения антиступени от расстояния между эшелонами приведена на рис. 8. Обозначения на графике соответствуют обозначениям на рис. 3. Измеряемой величиной выбрана разность $L - d$ для уменьшения относительной погрешности измерений (абсолютная погрешность составила порядка 0,3 мкм).

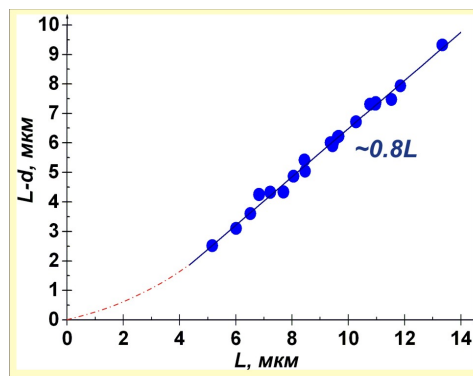


Рис. 8. Зависимость расстояния между антиступенью и нижним эшелонами от расстояния между эшелонами

Полученные экспериментальные точки аппроксимируются прямой с тангенсом угла наклона к оси абсцисс равным

$$1 - \xi = 0,82 \pm 0,05.$$

Однако пересечение с осью x проходит в точке порядка $L = 1,7$ мкм, что не описывается предложенной моделью, где пересечение должно происходить в точке $L = 0$. По-видимому, при малых расстояниях между эшелонами пренебрегать упругим взаимодействием ступеней нельзя, и полученное нами выражение недействительно. Поскольку отрицательные величины $L - d$ не имеют физического смысла, можно предположить, что продолжение аппроксимирующей кривой имеет вид, показанный на графике штрих-пунктирной линией. Экспериментальные и теоретические оценки величин составили: $kn_{\text{eq}}a^2 = 1,7 \cdot 10^7$ нм/с [33], электрическое поле вдоль образца $E \sim 7$ В/см, kT (1 280 °С) = 0,13 эВ, экспериментально измеренная нами скорость сублимации 2 монослоя/с, что соответствует $\tau_e = 0,5$ с. Отсюда можно оценить эффективный заряд, который положителен и равен $q_{\text{eff}} \approx 0,07 \pm 0,01$, что по порядку величины не противоречит современным представлениям об эффективном заряде при данной температуре [22], однако в несколько раз меньше рассчитанной величины из среднего расстояния между ступенями в эшелонах [4; 5]. При этом если скорость сублимации и электрическое поле можно напрямую определить из экспериментальных данных при высокой температуре, то величина $kn_{\text{eq}}a^2$ оценивается из ее экстраполяции от полученной при 900 °С ($3,5 \cdot 10^4$ нм/с [34]) и может отличаться в несколько раз. Так, взяв величину $kn_{\text{eq}}a^2 = 7 \cdot 10^6$ нм/с [29], получим $q_{\text{eff}} \approx 0,17 \pm 0,02$, что в пределах погрешности совпадает с величиной, полученной в работе [22]. Необходимо отметить, что экспериментальная зависимость повторяется для любых расстояний между наклонными ступенями (от 3 до 15 мкм), подтверждая, что достаточно использовать одномерную модель, не учитывающую движение ступеней вдоль эшелона, по крайней мере при данных расстояниях.

Заключение

В работе исследовалось поведение атомных ступеней между эшелонами ступеней при повышенных температурах при различ-

ных величинах пересыщения (положительных и отрицательных) на поверхности кремния (111). На основе экспериментально наблюдаемого изгиба ступеней при сублимации, росте и квазиравновесии доказано существование градиента концентрации атомов на поверхности между эшелонами за счет влияния электрического тока. Сделан вывод о появлении у адатомов на поверхности образца, нагреваемого электрическим током, отрицательного (при температуре 1 100 °С) и положительного (при температуре выше 1 250 °С) эффективного заряда. Показано, что величина пересыщения не изменяет знака эффективного заряда адатомов. Впервые обнаружено формирование антиэшелонов ступеней при квазиравновесии и росте. Положение антиэшелонов относительно соседних эшелонов зависит от пересыщения на поверхности. Показано, что методом эшелонирования поверхности кремния в условиях, близких к равновесным, можно создавать террасы шириной более 100 мкм. Предложено модельное описание поведения ступеней при различных пересыщениях. Для случая сублимации оценка эффективного заряда адатома при 1 280 °С составила от $0,07 \pm 0,01$ до $0,17 \pm 0,02$ в зависимости от значения кинетического коэффициента встраивания адатома в ступень, представленного различными авторами.

Список литературы

1. Jeong H.-C., Williams E. D. Step on Surfaces: Experiment and Theory // Surf. Sci. Rep. 1999. Vol. 34. P. 171–294.
2. Stoyanov S. New Type of Step Bunching Instability at Vicinal Surfaces in Crystal Evaporation Affected by Electromigration // Surf. Sci. 1998. Vol. 416. No. 1–2. P. 200–213.
3. Piere-Louis O. Step Bunching with General Step Kinetics: Stability Analysis and Macroscopic Models // Surf. Sci. 2003. Vol. 529. No. 1–2. P. 114–134.
4. Fujita K., Ichikawa M., Stoyanov S. Size-Scaling Exponents Current-Induced Step Bunching on Silicon Surfaces // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. No. 23. P. 16006–16012.
5. Gibbons B. J., Schaepe S., Pelz J. P. Evidence for Diffusion-Limited Kinetics During Electromigration-Induced Step Bunching

- on Si(111) // Surf. Sci. 2006. Vol. 600. No. 12. P. 2417–2424.
6. Degawa M., Minoda H., Tanishiro Y. et al. Direct Current Induced Drift Direction of Silicon Adatoms on Si(111)(1x1) Surfaces // Surf. Sci. 2000. Vol. 461. No. 1–3. P. L528–L536.
7. Sato M., Uwaha M., Saito Y. Growth of Permeable Step Bunches Formed by Drift of Adatoms // Surf. Sci. 2001. Vol. 493. No. 1–3. P. 480–486.
8. Stoyanov S. Heating Current Induced Conversion between 2x1 and 1x2 Domains at Vicinal (001) Si Surfaces – Can It Be Explained by Electromigration of Si Adatoms? // J. Appl. Phys. 1990 Vol. 29. P. L659–L662.
9. Latyshev A. V., Aseev A. L., Krasilnikov A. B. et al. Transformations on Clean Si(111) Stepped Surface during Sublimation // Surf. Sci. 1989. Vol. 213. No. 1. P. 157–169.
10. Degawa M., Minoda H., Tanishiro Y. et al. DC-Heating-Induced Antiband Formation and Subsequent Step Wandering on Si(111) Studied by in-situ REM // Surf. Rev. Lett. 1999. Vol. 6. No. 6. P. 977–984.
11. Degawa M., Minoda H., Tanishiro Y. et al. In-Phase Step Wandering on Si(111) Vicinal Surfaces: Effect of Direct Current Heating Tilted from the Step-Down Direction // Phys. Rev. B. 2001 Vol. 63. No. 4. P. 045309.
12. Minoda H. Direct Current Heating Effects on Si(111) Vicinal Surface // J. Phys. Condens. Matter. 2003. Vol. 15. P. 3255–3280.
13. Pierre-Louis O., Metois J.-J. Kinetic Step Pairing // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93. No. 16. P. 165901.
14. Leroy F., Karashanova D., Dufay M. et al. Step Bunching to Step-Meandering Transition Induced by Electromigration on Si(111) Vicinal // Surf. Sci. 2009. Vol. 603. No. 3. P. 507–512.
15. Misbah C., Pierre-Louis O., Saito Y. Crystal Surfaces in and out of Equilibrium: A Modern View // Rev. Mod. Phys. 2010. Vol. 82. No. 1. P. 981–1040.
16. Latyshev A. V., Krasilnikov A. B., Aseev A. L. Application of Ultrahigh Vacuum Reflection Electron Microscopy for the Study of Clean Silicon Surfaces in Sublimation, Epitaxy, and Phase Transitions // Microsc. Res. Technique. 1992. Vol. 20. P. 341–351.
17. Sheglov D., Kosolobov S., Rodyakina E. et al. Application of Atomic Force Microscopy in Epitaxial Nanotechnology // Microscopy and Analysis. 2005. Vol. 19. No. 5. P. 9–11.
18. Бартон В., Кабрепа Н., Франк Ф. Элементарные процессы роста кристаллов. М.: Иностран. лит., 1959. 109 с.
19. Müller P., Saúl A. Elastic Effects on Surface Physics // Surf. Sci. Rep. Vol. 54. No. 5–8. P. 157–258.
20. Homma Y., Aizawa N. Electric-Current-Induced Step Bunching on Si(111) // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. No. 12. P. 8323–8329.
21. Yang Y. N., Fu E., Williams E. D. An STM Study of Current-Induced Step Bunching on Si(111) // Surf. Sci. 1996. Vol. 356. No. 1–3. P. 101–111.
22. Thurme K., Liu D. J., Williams E. D. et al. Onset of Step Antibanding Instability Due to Surface Electromigration // Phys. Rev. Lett. 1999. Vol. 83. No. 26. P. 5531–5534.
23. Latyshev A. V., Krasilnikov A. B., Aseev A. L. UHV REM Study of Anti-Band Structure on the Vicinal Si(111) Surface under Heating by Direct Electric Current // Surf. Sci. 1994. Vol. 311. No. 3. P. 395–403.
24. Homma Y., Hibino H., Ogino T. et al. Sublimation of the Si(111) Surface in Ultrahigh Vacuum // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 55. No. 16. P. 10237–10240.
25. Latyshev A. V., Krasilnikov A. B., Aseev A. L. Self-Diffusion on Si(111) Surfaces // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 54. No. 4. P. 2586–2589.
26. Stoyanov S., Metois J.-J., Tonchev V. Current-Induced Bunches of Steps on the Si(111) Surface – A Key to Measuring the Temperature Dependence of the step interaction coefficient // Surf. Sci. 2000. Vol. 465. No. 3. P. 227–242.
27. Metois J.-J., Heyraud J.C., Stoyanov S. Step Flow Growth of Vicinal (1 1 1)Si Surface at High Temperatures: Step Kinetics or Surface Diffusion Control // Surf. Sci. 2001. Vol. 486. No. 1–2. P. 95–102.
28. Schroll R. D., Cohen S. D., Einstein T. L. et al. Si(1 1 1) Step Fluctuations in Reflection Electron Microscopy at 1100 °C: Anomalous Step–Step Repulsion // Appl. Surf. Sci. 2003. Vol. 212–213. P. 219–223.
29. Liu D. J., Weeks J. D., Kandel D. Velocity Function Models of Step Dynamics: Theory of Current-Induced Step Bunching on Si(111) Surfaces // Surf. Rev. Lett. 1997. Vol. 4. No. 1. P. 107–113.
30. Uwaha M. Kinematical Binding Transition of Steps in a Surface Diffusion Field //

Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46. No. 7. P. 4364–4366.

31. *Ozdemir M., Zangwill A.* Morphological Equilibration of a Corrugated Crystalline Surface // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. No. 8. P. 5013–5024.

32. *Krug J.* Introduction to Step Dynamics and Step Instabilities // Cond. Matt. 2004. Vol. 1. P. 0405066.

33. *Fu E. S., Liu D.-J., Johnson M. D. et al.* The Effective Charge in Surface Electromigration // Surf. Sci. 1997. Vol. 385. No. 2–3. P. 259–269.

34. *Bartelt N. C., Goldberg J. L., Einstein T. L. et al.* Brownian Motion of Steps on Si(111) // Phys. Rev. B. 1993. Vol. 48. No. 20. P. 15453–15456.

Материал поступил в редколлегию 18.04.2011

E. E. Rodyakina, S. S. Kosolobov, A. V. Latyshev

ELECTROMIGRATION OF SILICON ADATOMS ON SILICON (111) SURFACE

Existence of adatom gradient concentration on surface between step bunches was shown under sublimation, homoepitaxial growth and near equilibrium conditions on silicon (111) surface at above 900 °C by means of *in situ* ultrahigh vacuum reflection electron microscopy and *ex situ* atomic force microscopy. It is experimentally confirmed that adatom have negative (at 1 100 °C) and positive (at 1 300 °C) effective charge. We found out the sign of adatom effective charge independent on the supersaturation volume on the surface. On the hasement of experimental data we evaluated the effective charge of adatom at 1 280°C; this quantity is placed between $0,07 \pm 0,01$ and $0,17 \pm 0,02$ of electron unit.

Keywords: atomic steps, silicon surface, electromigration, effective charge of adatom.