

УДК 535.613: 621.9.047

К.Л.Сафонов (6 курс, каф. ФТТ), Ю.В.Трушин, д.ф.-м.н., проф.

К ТЕОРИИ РОСТА НАНОКЛАСТЕРОВ SiC НА Si

В данной работе исследовался возможный механизм образования трехмерных нанокластеров карбида кремния на кремнии. Получено критическое отношение среднего расстояния между двумерными нанокластерами к их среднему радиусу, при достижении которого начинается трехмерный рост. Представленные оценки согласуются с имеющимися экспериментальными данными и численными расчетами [1].

Для описания перехода от двумерного роста нанокластеров к трехмерному рассматривалась следующая физическая модель (рис. 1). Однослойные кластеры карбида кремния (области I) среднего размера R расположены на поверхности кремниевой подложки (области A) на среднем расстоянии L друг от друга (т.е. с концентрацией $C_{cl} = 1/L^2$). При заданной температуре T в образце содержатся межузельные атомы кремния при термодинамически равновесной концентрации. Релаксацию объема межузельного атома Si можно приблизительно оценить как объем, приходящийся на атом решетки в соответствующей области:

$$\Delta\Omega_i^A = a_{Si}^3, \Delta\Omega_i^I = a_{SiC}^3 \quad (1)$$

Вследствие несоответствия постоянных решетки двух материалов ($a_{Si} = 5,43 \text{ \AA}$, $a_{SiC} = 4,35 \text{ \AA}$) нанокластеры создают упругие напряжения во всем объеме образца (области A , I). Энергию взаимодействия межузлий кремния с полем упругих напряжений, описываемым тензором $\sigma^{A,I}$, можно записать как

$$E_i^{A,I} = \Delta\Omega_i^{A,I} \text{Sp} \sigma^{A,I} \quad (2)$$

Для величин $\sigma^{A,I}$ из [2-5] можно записать

$$\text{Sp} \sigma^A = -\frac{2E}{1-\nu} \eta_c (\varepsilon^A - \varepsilon^I), \quad \text{Sp} \sigma^I = \frac{2E}{1-\nu} (1-\eta_c) (\varepsilon^A - \varepsilon^I), \quad (3)$$

где E – модуль Юнга, ν – коэффициент Пуассона, ε^A и ε^I – относительные деформации вне и внутри нанокластеров, η_c – поверхностная доля нанокластеров.

В предположении, что трехмерный рост обусловлен наращиванием второго и последующих монослоев SiC за счет проникновения межузлий кремния из подложки в решетку нанокластеров (из областей A в области I), критерием начала трехмерного роста будет соотношение

$$|E_i^I| < |E_i^A| \quad (4)$$

Подставляя в (4) выражения (1)-(3), получаем:

$$\frac{L}{R} < \frac{L}{R_c} = 3,1 \quad (5)$$

Таким образом, в системе растущих нанокластеров трехмерный рост начнется при достижении отношением L/R критического значения 3,1.

Предложенный критерий подтверждается, в частности, результатами обработки ТЭМ изображения поверхности кремния [6,7], где системе плоских нанокластеров соответствует отношение $L/R = 3,56$ (рис. 2). Соответствующие численные расчеты показывают, что

критическое отношение L/R для приведенных в [6] экспериментальных условий будет достигнуто при временах порядка 70 с.

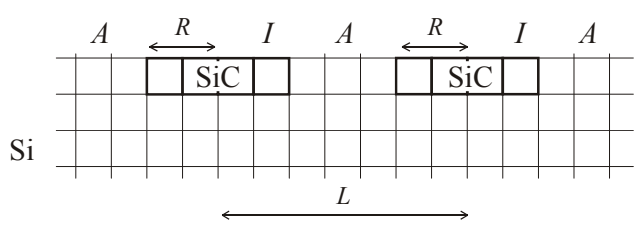


Рис.1. Схема расположения двумерных нанокластеров SiC (области I) на поверхности подложки Si (области A). R – средний радиус, L – среднее расстояние между нанокластерами.

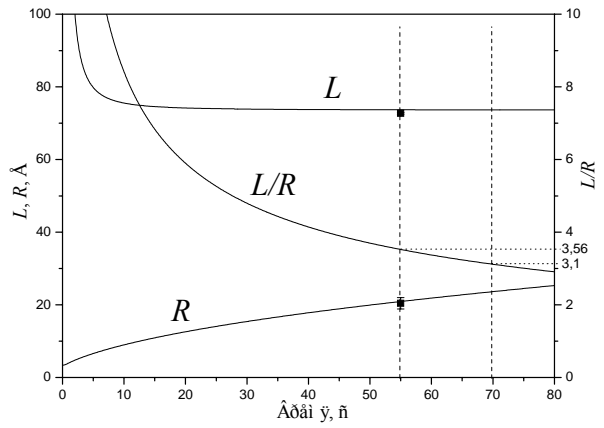


Рис.2. Расчётные зависимости от времени для L , R , L/R . Тёмными квадратами показаны экспериментальные значения $L^E = 72,7 \text{ \AA}$ и $R^E = 20,4 \text{ \AA}$ для момента времени 55 с.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Ю.В.Трушин, К.Л.Сафонов, О. Амбахер, Й. Пецольдт, Письма в ЖТФ, том 29, вып. 16, 2003, стр. 11-15.
2. Trushin Yu.V. Sov.Phys.Techn.Phys., 1987, v. 32(2), p.136.
3. Trushin Yu.V. Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. Nova Sci. Publishers, New York, 1986, 405 pp.
4. Trushin Yu.V. Radiation Processes in Polyatomic Materials. Theory and Computer Simulation. SPb: Ioffe-PTI Publishers, 2002, 384 pp. (in Russian).
5. Teodosiu C. Elastic models of crystal defects. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1982, 352 pp.
6. Kulikov D.V., Safonov K.L., Trushin Yu.V., Pezoldt J. In: Modern Condensed Matter Physics, Akademprint, M.,2001, p.299.
7. Safonov K.L., Kulikov D.V., Trushin Yu.V., Pezoldt J., Proc.of SPIE, 2002, N4627, p.165.