

Studio computazionale di processi microscopici rilevanti per la crescita di film semiconduttori

Leo Miglio (*), Francesco Montalenti (*), Silvia Cereda(*), Dmitri B. Migas(*)

()Centro Inter-Universitario L-NESS e Dipartimento di Scienza dei Materiali dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca, Via Cozzi 53, 20125 Milano (Italia)*

(Received on December 14, 2006)

Abstract

Presentiamo uno studio dettagliato di alcuni processi su scala atomica fondamentali per la comprensione della crescita di film sottili costituiti da Ge, e Si. La ricerca è focalizzata su due sistemi diversi. In primo luogo abbiamo condotto un'indagine volta a comprendere la mobilità superficiale di atomi di Ge sulla superficie Ge(105). Tale superficie risulta di notevole importanza in quanto caratterizza le facce dei quantum dots di Ge che appaiono spontaneamente durante la crescita di Ge su Si(001). Due risultati fondamentali sono riportati: a) la diffusione avviene in modo sostanzialmente isotropo b) alle tipiche temperature di interesse sperimentale essa risulta estremamente rapida. Tali risultati sono stati utilizzati per modellizzare la transizione morfologica osservata sperimentalmente durante la crescita di isole tridimensionali di Ge.

Il secondo sistema considerato consiste nella superficie idrogenata Si(001)(1x2). Tramite simulazioni di dinamica molecolare Car-Parrinello, siamo andati a stimare la probabilità che un radicale SiH_3 , ovvero uno dei precursori chiave della crescita di film di silicio in reattori di tipo PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition), estragga un atomo di idrogeno dalla superficie durante l'impatto ad energia termica. I nostri risultati mostrano una forte occorrenza di tale meccanismo, che risulta chiave per determinare la velocità di crescita dei film dato che permette di creare sulla superficie nuovi siti reattivi, caratterizzati da legami mancanti.

We present a detailed study of some atomic-scale processes fundamental in understanding Si and Ge thin-film growth. Our research is focused on two different systems. First, we have investigated Ge atoms surface mobility on Ge(105). Such surface is of particular interest since it characterizes the lateral facets of the Ge quantum dots which are spontaneously formed during Ge growth on Si(001). Two fundamental results are reported: a) diffusion is basically isotropic b) at the typical experimental temperatures atoms move really fast.

Such results have been used to model the experimentally observed morphological transition of three-dimensional Ge islands.

The second system which we considered is the hydrogenated Si(001)(1x2) surface. By Car-Parrinello molecular dynamics simulations, we computed the probability that a SiH₃ radical, i.e. one of the key Si-film growth precursors in PECVD-like (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition) reactors, is able to extract a surface hydrogen during its thermal-energy impact with the surface. Our results show a strong occurrence of such a mechanism, which thus plays an important role in determining the film growth rate since it allows for the creation of new reactive sites, characterized by surface dangling bonds.

Keywords: silicon, germanium, diffusion, growth, kinetic barriers, VASP, CPMD

Introduzione

L-NESS (Laboratorio per Nanostrutture Epitassiali su Silicio e per Spintronica) è un centro inter-universitario del Politecnico di Milano e dell'Università degli Studi di Milano-Bicocca, di cui il nostro gruppo di ricerca fa parte, operando presso il Dipartimento di Scienza dei Materiali. Il nostro ruolo all'interno di L-NESS è di fornire costante supporto teorico-modellistico al gruppo sperimentale del Prof. H. Von Känel (Politecnico di Milano) all'interno del quale vengono cresciuti film semiconduttori di elevatissima qualità, di notevole interesse tecnologico per sviluppi inerenti all'industria microelettronica e per applicazioni in campo ottico. Uno degli approcci da noi maggiormente utilizzati per studiare i fenomeni di crescita di tali sistemi (principalmente composti da silicio e germanio, ma occorre anche tenere conto del ruolo giocato dall'idrogeno, presente nei reattori di crescita) consiste nel simulare i processi fondamentali da un punto di vista atomistico. La diffusione di atomi o piccoli aggregati su superficie, e l'effetto dell'impatto di ioni e radicali su substrati a base Si o SiGe, costituiscono argomenti di grande interesse. A seconda delle tipiche scale temporali e spaziali coinvolte, utilizziamo approcci puramente empirici (potenziali interatomici classici), o calcoli più raffinati, da primi principi. Questi ultimi richiedono un notevole sforzo computazionale, per cui l'utilizzo dei server CILEA ci è stato di grande aiuto. Su tali server utilizziamo principalmente due codici, il cosiddetto "Vienna Ab initio Simulation Package" (VASP), particolarmente adatto a fare conti statici (ottimizzazioni geometriche) e il codice CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics) che, sfruttando il metodo di Car e Parrinello permette di effettuare simulazioni dinamiche su scale di tempo del ps, sufficienti ad esempio a studiare l'impatto molecola-superficie. Entrambe i codici, compilati senza particolari problemi sui server CILEA, beneficiano di comunicazioni tra processori veloci, e scalano molto bene nel tipico range di processori da noi utilizzati (16-32) per ogni run. Descriviamo ora i principali risultati ottenuti sfruttando la potenza di calcolo offerta dal CILEA.

Diffusione di adatomi sulle facce (105) dei dots di Ge cresciuti su Si(001)

Questo progetto, cominciato alcuni anni fa, ha come scopo comprendere la mobilità superficiale (fattore determinante per controllare la morfologia di un film) su superfici di germanio. Risulta di particolare interesse la superficie (105), dato che, sotto opportune condizioni sperimentali, caratterizza le facce esterne delle isole nanometriche di Ge formate depositando Ge su Si(001). In un lungo lavoro, riportato in Ref.[1], abbiamo dapprima individuato i possibili minimi di adsorbimento per un atomo di Ge su Ge(105), e poi calcolato le tipiche barriere di diffusione incontrate da tale atomo lungo la superficie. Tali calcoli sono stati effettuati col codice VASP sui server CILEA. Alla fine del ciclo di simulazioni, utilizzando le sopra citate barriere come parametri di input all'interno di una modellizzazione di tipo Monte Carlo Cinetico, siamo stati in grado di simulare tipiche traiettorie atomiche di superficie. Un esempio è riportato in Fig. 1.

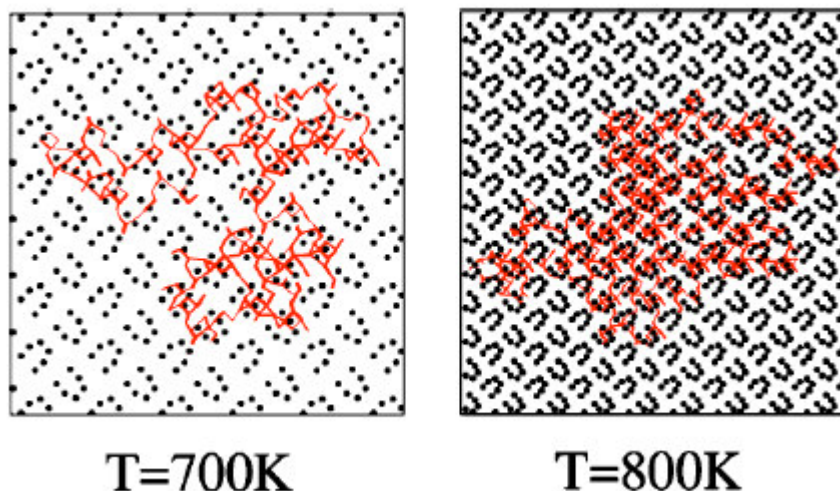


Fig.1 Tipiche traiettorie caratterizzanti la diffusione di un atomo di Ge su Ge(105) a due diverse temperature.

I risultati di Fig.1, assieme ad altri riportati in Ref.[1], hanno permesso di comprendere che la diffusione avviene in modo essenzialmente isotropo (come visibile anche ad occhio da Fig. 1), e che risulta molto rapida a tipiche temperature sperimentali ($T > 800\text{K}$). Tali osservazioni sono state utilizzate per la costruzione di un modello macroscopico in grado di prevedere l'evoluzione morfologica di isole di Ge osservata sperimentalmente [2].

Pulizia dell'idrogeno superficiale indotta da impatto con SiH_3 su $\text{Si}(001)(1 \times 2)$

Studiare il tipico comportamento in termini di diffusività superficiale costituisce solo un primo passo verso la modellizzazione dei processi di crescita. Un altro aspetto chiave è sicuramente l'urto delle molecole incidenti con la superficie del film. All'interno dei reattori di crescita LEPECVD (low-energy plasma-enhanced chemical vapor deposition) utilizzati all'interno dei laboratori L-NESS, le specie incidenti durante la crescita di film di silicio sono date da numerosi "radicali" quali SiH_3 , SiH_2 , e SiH , oltre a idrogeno atomico, molecolare, ioni ed elettroni. L'idrogeno gioca un ruolo chiave nel processo di crescita, dato che, se presente in grande quantità sulla superficie del film, ne rallenta la crescita andando a limitare il numero di siti reattivi in cui il silicio può incorporarsi dalla fase gas. E' quindi di estrema importanza comprendere quali meccanismi possano portare alla rimozione dell'idrogeno superficiale. Grazie ad una serie di simulazioni di dinamica molecolare Car-Parrinello (codice CPMD) completata sui server CILEA, abbiamo scoperto che i radicali SiH_3 sono in grado di effettuare una notevole opera di "pulizia" superficiale, creando un nuovo sito reattivo in superficie, e tornando in fase gas come molecole di silano (SiH_4).

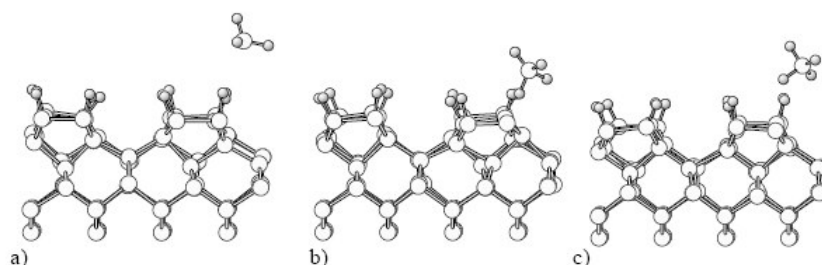


Fig.2 Il radicale SiH_3 si avvicina ad una superficie $\text{Si}(001)(1 \times 2)$ idrogenata (a), "cattura" un idrogeno superficiale (b), e torna in fase gas come silano (c) lasciando un sito reattivo sulla superficie.

Tale meccanismo, detto "alla Eley-Rideal" è mostrato in Fig. 2 dove viene riportata una tipica traiettoria ottenuta tramite simulazioni Car-Parrinello. Uno studio approfondito di tale meccanismo, condotto utilizzando anche un approccio classico meno pesante dal punto di vista computazionale, ci ha permesso di stimare una probabilità superiore al 50% [3] per il processo mostrato in figura, valore che lo rende fondamentale nel determinare la rimozione dell'idrogeno superficiale nella crescita LEPECVD.

Segnaliamo che lo studio riportato in questo paragrafo è stato effettuato in collaborazione con il Prof. Marco Bernasconi e con il Dott. Michele Ceriotti.

Bibliografia

Negli articoli qui sotto riportati è fatta menzione esplicita di avere utilizzato i server CILEA

- [1] F. Montalenti, D.B. Migas, F. Gamba, and Leo Miglio, *Fast isotropic adatom diffusion on Ge(105) dot facets*, Phys. Rev. B **70**, 245315 (2004).
- [2] F. Montalenti, P. Reiteri, D.B. Migas, H. von Känel, A. Rastelli, C. Manzano, G. Costantini, U. Denker, O.G. Schmidt, K. Kern, and Leo Miglio, *Atomic-scale pathway of the pyramid-to-dome transition during Ge growth on Si(001)*, Phys. Rev. Lett. **93**, 216102 (2004).
- [3] S. Cereda, M. Ceriotti, F. Montalenti, M. Bernasconi, and Leo Miglio, (2006, in preparazione)