

№ 634

**МИСиС**

---

Г.Д. Кузнецов

# **Технология материалов электронной техники**

Атомно-молекулярные процессы  
кристаллизации

Учебно-методическое пособие

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

№ 634

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ СТАЛИ и СПЛАВОВ**  
Технологический университет



Кафедра технологии материалов электроники

Г.Д. Кузнецов

# **Технология материалов электронной техники**

**Атомно-молекулярные процессы  
кристаллизации**

Учебно-методическое пособие

Допущено учебно-методическим объединением по образованию в области металлургии в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению Физическое материаловедение и специальности Наноматериалы

Москва Издательство «УЧЕБА» 2006

УДК 621.315.5  
К89

Рецензент  
д-р. физ.-мат. наук, проф. *В.В. Гераськин*

**Кузнецов Г.Д.**

К89      Технология материалов электронной техники. Атомно-молекулярные процессы кристаллизации: Учеб. метод. пособие. – М.: МИСиС, 2006. – 99 с.

Рассматриваются теоретические вопросы процессов роста объемных монокристаллов и пленок на атомно-молекулярном уровне. Анализируются существующие представления о механизме формирования кристалла с учетом начальных стадий его зарождения. Обсуждаются и анализируются особенности кристаллизации при различной движущей силе процесса.

Описаны особенности молекулярно-лучевой эпитаксии. По большинству рассматриваемых разделов приводятся примеры расчетов параметров процесса кристаллизации.

Для студентов обучающихся по направлениям 210100 «Электроника и микроэлектроника», 658300 «Нанотехнология», 150702 «Физика металлов» и специальностям 210104 «Микроэлектроника и твердотельная микроэлектроника» и 202100 «Нанотехнология в электронике».

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие.....	4
1. Атомная структура кристаллической поверхности.....	5
1.1. Кристаллографические соотношения.....	5
1.2. Плотность упаковки атомов.....	9
Вопросы и задачи.....	12
2. Поверхностная энергия и энергия связи атомов.....	14
2.1. Поверхностная энергия и периодические цепи связей.....	14
2.2. Анизотропия поверхностной энергии.....	19
2.3. Поверхностные конфигурации расположения атомов и их энергия.....	21
2.4. Определение шероховатости ступени.....	22
2.5. Оценка шероховатости поверхности.....	24
Вопросы и задачи.....	28
3. Адсорбция, диффузия и испарение на кристаллической поверхности.....	29
3.1. Атомный механизм процессов.....	29
3.2. Поверхностная диффузия.....	34
3.3. Примеры вопросы и задачи.....	37
4. Начальные стадии кристаллизации.....	42
4.1. Работа и скорость гомогенного образования зародышей.....	42
4.2. Гетерогенное образование зародышей.....	48
Вопросы и задачи.....	57
5. Молекулярно-лучевая эпитаксия.....	67
5.1. Особенности молекулярно-лучевой эпитаксии.....	67
5.2. Расчет скорости роста эпитаксиального слоя GaAs на кремниевой подложке при молекулярно-лучевой эпитаксии.....	79
Вопросы и задачи.....	83
Библиографический список.....	87
Приложение 1. Справочные данные.....	88
Приложение 2. Руководство для пользователя программой «Моделирование процессов молекулярно-лучевой эпитаксии».....	97

## ПРЕДИСЛОВИЕ

В разделе «Атомно-молекулярные процессы кристаллизации» рассматриваются фундаментальные аспекты процессов формирования монокристаллических пленочных и объемных материалов на атомном уровне. Излагаются основные теоретические представления о закономерностях роста кристаллов при различной величине движущей силы процесса, т.е. различной степени отклонения условий кристаллизации от равновесия. Основное внимание уделяется гетерогенной кристаллизации, влиянию атомной структуры фазовой границы на механизм и кинетику образования кристаллов.

Изучение атомно-молекулярных процессов позволяет уяснить теоретические подходы к анализу явлений кристаллизации и технологии выращивания пленочных и объемных монокристаллов. Выбранный метод, режим и вообще технология выращивания должны обеспечить получение кристаллов с заданными свойствами и степенью совершенства структуры. Достижение этой цели немыслимо без отработки технологии и, которая опирается на данные об атомном механизме и кинетике роста, а также об образовании дефектов в кристаллах.

Во многих случаях условия реальной кристаллизации отличаются от тех, которые рассматриваются в теории. Прежде всего это относится к влиянию примесей, учету образования, роста и взаимодействия ансамбля кристаллитов. Все «капризы» растущих кристаллов непредсказуемы, но некоторые из них уже становятся понятными.

# 1. АТОМНАЯ СТРУКТУРА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТИ

## 1.1. Кристаллографические соотношения

Атомная структура поверхности кристалла зависит от типа кристаллической решетки и типа рассматриваемой кристаллографической плоскости [1]. Кристаллические решетки систематизированы в семь кристаллических систем в соответствии с взаимным отношением между тремя осевыми трансляциями и тремя осевыми углами. Характерные параметры вещества приведены в табл. 1.1, а системы трансляции (решетка Браве) – в табл. 1.2.

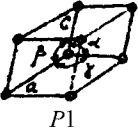
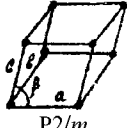
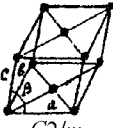

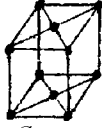



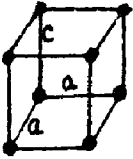
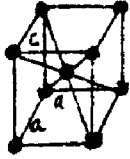
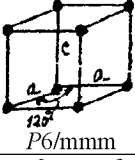
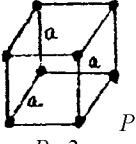
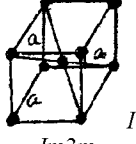
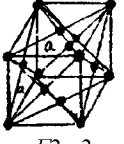
Таблица 1.1

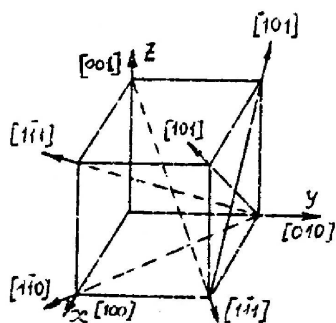
Характерные параметры кристаллической решетки

Категория кристалла	Система кристалла (сингония)	Форма элементарной ячейки	Оси координат	Параметры вещества
Низшая	Триклинная	Косоугольный параллелепипед	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma = 90^\circ$	$a, b, c$ $\alpha, \beta, \gamma$
	Моноклинная	Прямая призма; в ее основании параллелограмм	$a \neq b = c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$a, b, c$ $\alpha, \beta$
	Ромбическая	Прямоугольный параллелепипед	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a, b, c$
Средняя	Ромбоэдрическая (тригональная)	Призма с основанием в форме ромба с углом $120^\circ$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$c / a$
	Гексагональная			
	Тетрагональная	Призма с квадратным основанием	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a, c$
Высшая	Кубическая	Куб	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a$

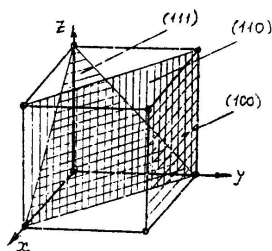
Плотность атомов на единице поверхности и единице длины различна для разных кристаллографических плоскостей [2]. Важнейшие плоскости и направления в кубической решетке представлены на рис. 1.1.

## Типы кристаллических решеток

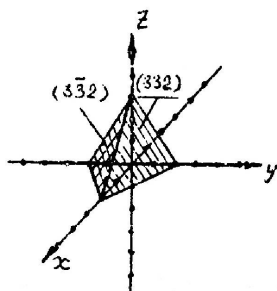
Сингония	Решетка Браве			
	примитивная $P$	базоцентрированная $C$	объемноцентрированная $I$	гранецентрированная $F$
Триклинная	 $P1$			
Моноклинная	 $P2/m$	 $C2/m$		
Ромбическая	 $Pmm$	 $Cmmm$	 $Immm$	 $Fmmm$
Ромбоэдрическая	 $R\bar{3}m$			
Тетрагональная	 $P4/mmm$		 $I4/mmm$	
Гексагональная	 $P6/mmm$			
Кубическая	 $Pm\bar{3}m$		 $I\bar{m}\bar{3}m$	 $F\bar{3}m\bar{3}$



a



б



в

Рис. 1.1. Важнейшие направления (а) и плоскости (б) в кубической решетке; определение индексов плоскости (в)

Расположение атомов на поверхности в различных плоскостях показано на рис 1.2. В случае кристаллов со структурой алмаза ближайшими к поверхности являются атомы, расположенные непосредственно под ней (рис. 1.3).



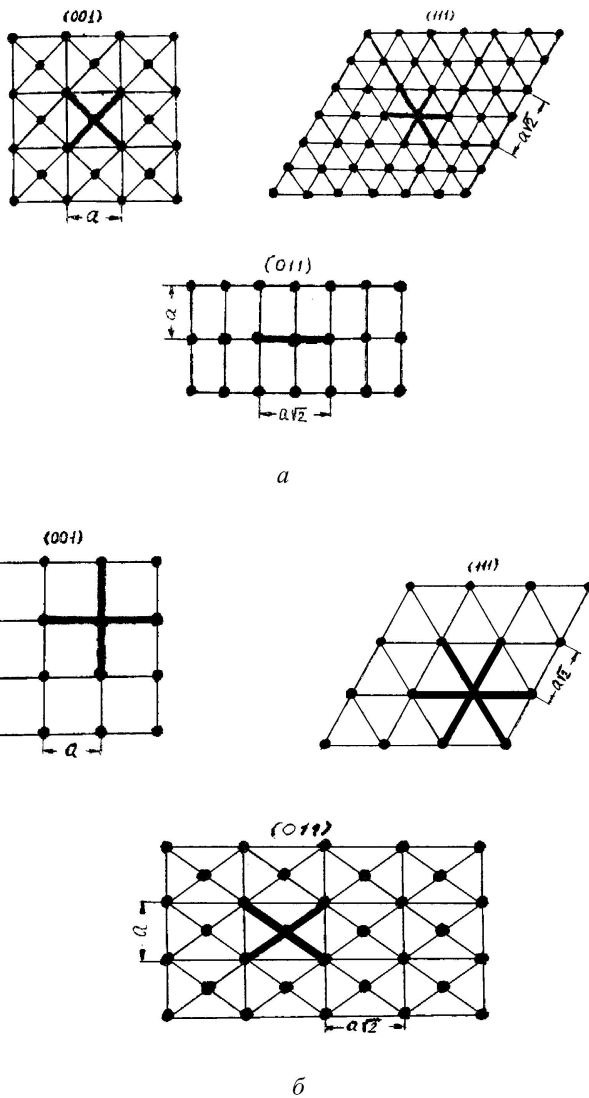


Рис. 1.2. Схема расположения атомов на различных плоскостях:  $a$  – г.ц.к.;  $b$  – о.ц.к

Специфическим свойством и основным структурным признаком поверхности является нарушение симметрии. На поверхности атом (или ион) имеет меньшее, чем в объеме, число ближайших соседей, и все они расположены по одну сторону от нее.

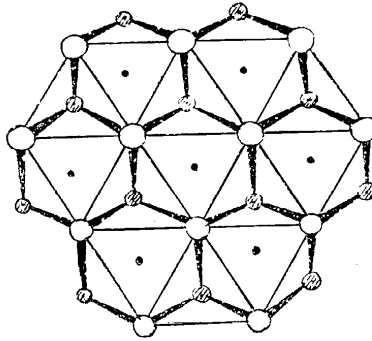


Рис. 1.3. Схема расположения атомов на поверхности (111) кристалла со структурой алмаза ○ – поверхностные атомы; ◐ – атомы под поверхностью

Частичная компенсация потери симметрии достигается искажением вблизи поверхности типа упаковки атомов, свойственного объему данного твердого тела. Восстановление симметрии, однако, не может быть полным и из-за этого поверхность представляет собой особую неравновесную область твердого тела. Атомы на такой поверхности сдвинуты на небольшие расстояния по сравнению с атомами на соответствующих плоскостях, параллельных поверхности в объеме кристалла. Однако связи между поверхностными атомами не нарушаются и остаются такими же, как в объеме кристалла [2].

Поверхность грани (111) решетки алмаза пересекает кристалл, разрывая по одной двухэлектронной связи на каждый атом. Разрыв этих связей обуславливает появление на поверхности (111) большого числа свободных ненасыщенных связей, направленных по нормали к ней.

## 1.2. Плотность упаковки атомов

В теории структур часто пользуются формальными геометрическими представлениями, характеризующими плотность упаковки атомов как отношение объема касающихся шароподобных атомов, входящих на одну элементарную ячейку, к объему всей ячейки [2].

Если  $R$  – расстояние между центрами двух одинаковых шаров в элементарной ячейке и радиус шара  $r = R/2$ , то объем шара  $V = \pi R^3/6$ , а объем  $n$  шаров, входящих в элементарную ячейку

$$V_n = \frac{\pi}{6} nR^3. \quad (1.1)$$