

О.А. ГРИНЧУК, І.П. КОВАЛЬ, М.Г. НАХОДКИН

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка  
(Вул. Володимирська, 64, Київ 01601; e-mail: greenchuckaa@gmail.com)

## ПОВЕРХНЕВІ НАПРУЖЕННЯ НА ПОЧАТКОВИХ ЕТАПАХ ОКИСЛЕННЯ $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$

УДК 53.092

*За допомогою аналізу змін розмірів елементарних комірок, яке відбувається внаслідок утворення на їх поверхнях димерів або адсорбції атомів і молекул, якісно розглянуто пружні напруження чистої поверхні  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  та на початкових етапах її окислення. Вони мають майже однаковий характер, як для чистої поверхні  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ , так і після адсорбції на неї молекул  $O_2$  або 1-го, 2-х та 3-х атомів  $O$ . Напруження виявились анізотропними: вздовж димерних рядів вони були стискаючими та приблизно у 3 рази більшими від розтягуючих напружень у напрямку, перпендикулярному до димерних рядів (вздовж димерного зв'язку).*

*Ключові слова:* напруження, анізотропія напружень, окислення.

### 1. Вступ

У сучасній наноелектроніці приділяється велика увага гетероепітаксійному нарощуванню Ge на Si, бо рухливість дірок у шарі SiGe більша, ніж в Si, який здебільшого використовується в МОН-приладах [1]. У виготовленні МОН-приладів важливу роль відіграє ще й оксидний шар  $SiO_2$ , тому формування атомно-контрольованого тонкого шару  $SiO_2$  на кремнієвих поверхнях і процес окислення напружених SiGe-структур є важливим для формування і функціонування схем сучасної наноелектроніки.

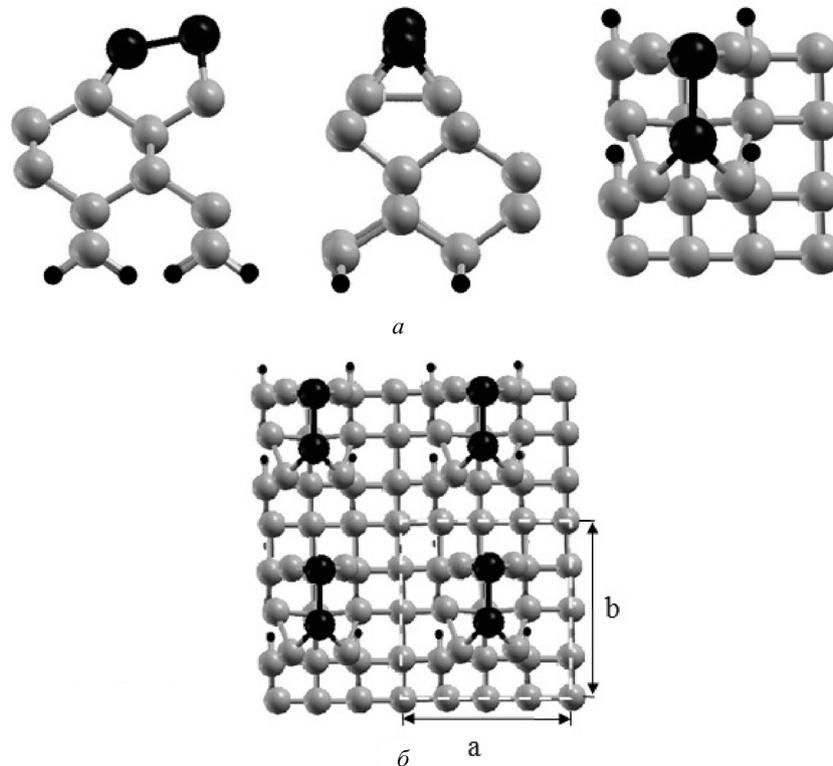
У роботах [2–5] було розглянуто процес окислення поверхонь Si(001) з 1 та 2 МШ атомів Ge. Було показано, що коефіцієнти прилипання кисню до чистої поверхні Si(001) на порядок величини більші ніж для поверхонь Ge/Si(001) з 1 та 2 МШ (моно шарів) адатомів Ge, виготовлених при 350 °С. Коли такі поверхні були виготовлені при 600 °С, то коефіцієнт прилипання збільшився, але він все ще залишався меншим за коефіцієнт прилипання до чистої поверхні Si(001) [3]. Зменшення ступеня покриття атомами Ge поверхні Si(001) до субмоношарового ( $\theta_{Ge} < 1$ ) збільшувало коефіцієнт прилипання кисню до такої поверхні [5]. На думку авторів [5], це може бути зумовленим присутністю додаткових поверхневих напружень завдяки різним сталим ґратки Si та Ge. Вплив поверхневих напру-

жень та їхньої анізотропії на структуру поверхні було встановлено у роботі [6]. Виявилось, що поверхневі напруження сильно впливають на перебудову поверхневих структур [7]. Але ще й до тепер не було визначено ані характеру цих напружень, ані їх величини на складних поверхнях напівпровідників після адсорбції кисню. Зважаючи на це, для того щоб зробити ріст тонких шарів оксиду на поверхні  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  більш контрольованим, необхідно розглянути характер напружень чистої поверхні та на початкових етапах її окислення, що й було метою цієї роботи.

### 2. Методика

#### 2.1. Техніка розрахунку

Поверхневі напруження, викликані утворенням аддимерів на поверхні  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ , адсорбцією на них молекул  $O_2$ , та окремих атомів  $O$ , ми аналізували за допомогою відношень  $\Delta a/c$  і  $\Delta b/c$  деформації латеральних розмірів елементарної комірки ( $\Delta a$  і  $\Delta b$ ) до аналогічних розмірів у об'ємному Si(001), які рівні між собою й становлять  $c$ . Електронна та геометрична структури  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  аналізувалися за допомогою *ab initio* розрахунків із періодичними граничними умовами [8], у наближенні теорії функціонала густини (DFT) [9], де для опису обмінно-кореляційної взаємодії використовувалося узагальнено градієнтне наближення (GGA) [8]. Взаємодія остовних та валентних електронів описувалася норм-конверсійним псевдопотен-



**Рис. 1.** Елементарна комірка (вигляд з одного і з другого боків та ще й в плані), яка була вибрана для моделювання поверхні  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  (а) та її характерні розміри, що використовувалися для аналізу поверхневих напружень (б): сірі кружки – атоми Si, чорні великі кружки – атоми аддимера, чорні маленькі кружки – атоми H

ціалом [8]. Розрахунки проводилися за допомогою програмного пакета Abinit [10].

Для моделювання поверхні застосовувалась модель плит, що повторюються. Плити мали чисті (Si–Si, Ge–Ge), або змішані (Si–Ge) аддимери (чорні кульки на рис. 1, а), адсорбовані на димерах поверхні Si(001) з одного боку, а з іншого, атомами H, що насичували обірвані зв'язки. Кількість атомних шарів Si, що містила плита, визначалась із розрахунку величин  $\Delta a/c$  і  $\Delta b/c$ . Для елементарних комірок із кількістю атомних шарів  $\text{Si} \geq 5$ , ці величини змінювалися менше ніж на  $0,1 \cdot 10^{-2}$ , тому для заощадження розрахункових витрат було вибрано елементарну комірку, що містила 5 атомних шарів Si. Отже, елементарна комірка, яка відтворювала шар, містила 30 атомів (рис. 1). Для виключення взаємодії між атомами різних плит товщину вакуумного проміжку між ними було вибрано рівною 15 Å. Положення атомів 5-ти приповерхневих ша-

рів оптимізувалось поки сили, що діють на атоми, не ставали меншими за 0,03 eV/Å. Покращення умов збіжності ітеративної процедури не змінювало розрахованих величин енергій систем, що досліджуються, та їх геометричних параметрів. Інтегрування в зоні Бріллюена проводилось за допомогою сітки  $2 \times 1 \times 1$  спеціальних  $k$ -точок за схемою Monkhorst-Pack [11]. Для визначення енергії відсікання розраховувались енергії зв'язку атомів Ge з поверхнею Si. Виявилось, що ця величина не змінюється, коли значення енергій відсікання  $\geq 217,7$  eV, тому всі розрахунки було проведено при цій енергії відсікання.

Величини  $\Delta a/c = a/c - 1$  та  $\Delta b/c = b/c - 1$  відображали зміну розмірів елементарної комірки  $a$  та  $b$  (рис. 1, б) відносно аналогічних розмірів для кристалічного Si, у якому ці відстані рівні  $c$ . Відносні деформації поверхні  $\Delta b/c$  розглядалися вздовж димерних рядів досліджуваної

поверхні, а  $\Delta a/c$  – у напрямку, перпендикулярно до них (рис. 1, б), тобто вздовж димерного зв'язку. В області пружних деформацій згідно з законом Гука  $\Delta a/c$  і  $\Delta b/c$  пропорційні відповідним напруженням. Знак “–” або “+” біля величин  $\Delta a/c$ ,  $\Delta b/c$  вказує на те, що напруження є розтягуючими, або стискаючими відповідно. Розглядалися зміни характерних розмірів  $\Delta a/c$ ,  $\Delta b/c$ , що виникали внаслідок: 1) утворення аддимерів на поверхні ( $\Delta a_{ad}/c$ ,  $\Delta b_{ad}/c$ ), 2) адсорбції молекул  $O_2$  ( $\Delta a_{O_2}/c$ ,  $\Delta b_{O_2}/c$ ), 3) адсорбції окремих одного, двох і трьох атомів О ( $\Delta a_O/c$ ,  $\Delta b_O/c$ ) та 4) дифузії одиночного атома О у приповерхневій шарі зразка ( $\Delta a_d/c$ ,  $\Delta b_d/c$ ).

Розраховані значення енергій систем на елементарну комірку для різних типів комірок (без атомів О, з молекулою  $O_2$  та із 1-м, 2-ма та 3-ма атомами О) порівнювалися за допомогою величин  $\Delta E = E - E_0$ . Тут  $E$  – енергія структури, що розглядається, а  $E_0$  – енергія найбільш енергетично вигідної структури кожного типу. Порівняння величин  $\Delta E$  здійснювалось лише для комірок із однаковою кількістю атомів Ge. Це зумовлюється тим, що атоми Ge мають більшу кількість електронів, ніж Si, й тому енергія комірки із атомів Si, має енергії менші, ніж комірки, у яких два атоми Si замінені атомами Ge.

## 2.2. Обґрунтування вибору підходу до аналізу напружень

У літературі була описана методика розрахунку поверхневих напружень, яка успішно застосовувалась для аналізу напружень систем Si(001)– $2 \times 1$  і Si(001)– $4 \times 2$  [12], Sb/Si(001), Sb/Ge(001) та As/Si(001) [13–15]. Вона передбачала, що рівноважне положення атомів її елементарної комірки та векторів трансляції у досліджуваних системах визначалось за допомогою мінімізації енергії системи. Положення атомів елементарної комірки могло змінюватися в усіх напрямках, але так, щоб при цьому величини 2-х векторів трансляції в площині поверхні залишалися сталими. Ці сталі значення вибирались такими, як і значення аналогічних величин у кристалічному Si. Положення атомів елементарної комірки та 3-го вектора трансляції із напрямком, перпендикулярним до поверхні, оптимізувалось поки відповідна діагональ-

на компонента тензора напружень системи не ставала рівною нулеві.

Як було показано в [16], атоми О на  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  зсувають основні рівні (2р та 3d) атомів поверхні, які знаходяться на відстані  $\sim 4 \text{ \AA}$  від нього. Це вказує на те, що взаємодія кисню з поверхнею може змінювати положення атомів на відстані, що майже збігається з величинами векторів трансляції елементарної комірки (5 Å). Отже, фіксація значень величин векторів трансляції так, як це було у [12–15], може внести суттєві похибки у визначені енергій системи і, як наслідок, приводити до некоректної оцінки напружень. У зв'язку з цим ми вважаємо, що методика [12–15] не повністю застосовна до визначення напруження на початкових етапах окислення  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ .

Оскільки в межах закону Гука наслідком дії поверхневих напружень є зміна положення атомів на поверхні, то їх можна аналізувати за допомогою відносних змін характерних розмірів елементарної комірки  $\Delta a/c$  і  $\Delta b/c$  (відносних деформацій), які відбуваються під дією аддимерів на поверхні та адсорбції атомів і молекул кисню на них.

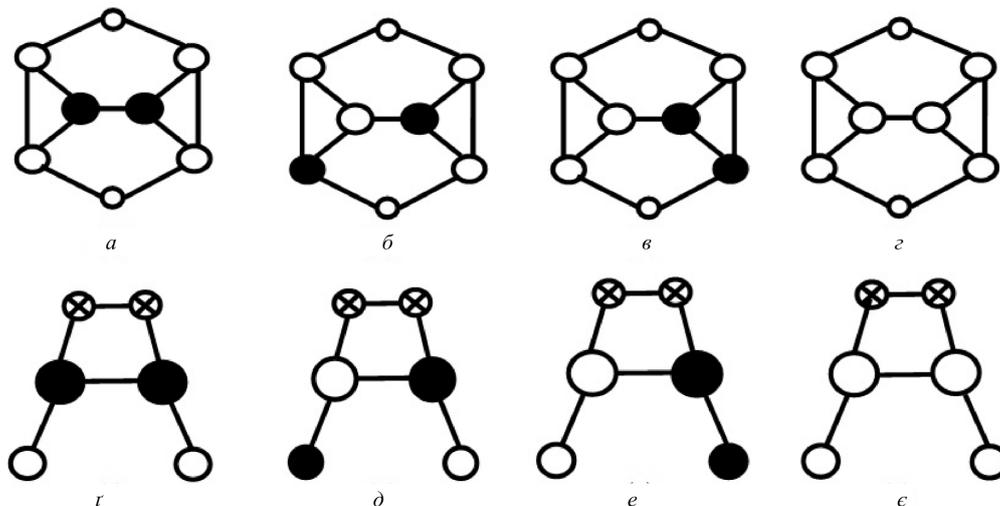
## 3. Результати розрахунків та їх обговорення

### 3.1. Напруження $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ та $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ з адсорбованою молекулою $O_2$

Найбільш імовірні адсорбційні конфігурації чистих (Si–Si і Ge–Ge) та змішаних (Si–Ge) аддимерів поверхні  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ , встановлені нами ще в [17], наведені на рис. 2, а, б, в. Розраховані величини  $\Delta E$  та  $\Delta a_{ad}/c$  і  $\Delta b_{ad}/c$  для поверхонь  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  та Si(001) ( $4 \times 2$ ) з найбільш

Таблиця 1.  $\Delta E$  структур а, б та в, рис. 2, та  $\Delta a_{ad}/c$  і  $\Delta b_{ad}/c$  – зміни характерних розмірів елементарної комірки після утворення аддимерів на поверхнях  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  та Si(001) ( $4 \times 2$ )

	$\Delta a_{ad}/c \cdot 10^{-2}$	$\Delta b_{ad}/c \cdot 10^{-2}$	$\Delta E$
Ge–Ge (рис. 2, а)	–0,71	2,67	0,0
Ge–Si (рис. 2, б)	–0,75	3,12	0,96
Ge–Si (рис. 2, в)	–0,74	3,12	1,02
Si–Si (рис. 2, в)	–0,77	2,89	–
Si(001) ( $4 \times 2$ )	–1,21	2,56	–



**Рис. 2.** Можливі конфігурації чистих (Si-Si і Ge-Ge) та змішаних (Si-Ge) аддимерів на  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  [17] (*a, б, в, г*) та стабільні адсорбційні конфігурації молекули  $\text{O}_2$  на них [18] (*р, е, д, є*) відповідно: чорні великі кружки – атоми Ge, чорні маленькі кружки – атоми O, білі великі та білі маленькі кружки – атоми Si 2-го та 3-го приповерхневого шару відповідно

імовірними конфігураціями аддимерів наведені в табл. 1 для структур *a, б* та *в*, рис. 2. Найбільш енергетично вигідною конфігурацією ( $\Delta E = 0$ ) на поверхні  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ , як і в [17], виявилась конфігурація з чистими Ge-Ge аддимерами.

Як видно з табл. 1, на поверхні систем  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  із чистими (Si-Si, Ge-Ge) та змішаними (Si-Ge) аддимерами виникають анізотропні поверхневі напруження ( $\Delta a_{ad}/c \neq \Delta b_{ad}/c$ ): стискаючі ( $\Delta b_{ad}/c > 0$ ) вздовж димерних рядів та розтягуючі ( $\Delta a_{ad}/c < 0$ ) приблизно у 3 рази менші в перпендикулярному до них напрямку (вздовж димерних зв'язків). Ці дані якісно узгоджуються з експериментальними даними [19], де досліджувалась зміна напружень на поверхні Si(001) з різними ступенями покриття (0-2МШ) Ge.

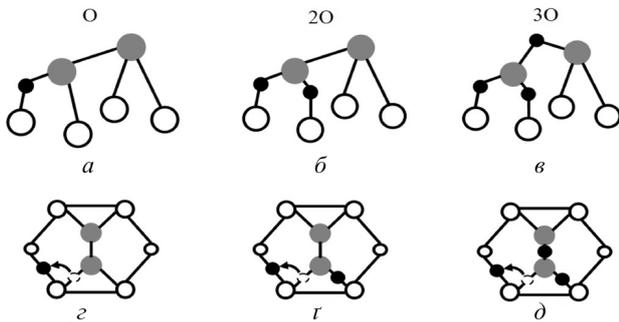
У роботі [12], де розраховувались напруження на поверхнях Si(001) ( $4 \times 2$ ) і Si(001) ( $2 \times 1$ ), було показано, що на них присутні тільки розтягуючі поверхневі напруження, як вздовж димерних рядів, так і в перпендикулярному до них напрямку, що не збігається з нашими даними. Для з'ясування причин цього розходження ми провели допоміжні розрахунки поверхневих напружень Si(001) ( $2 \times 1$ ) у рамках нашої моделі з більшими значеннями енергії відсічки та більшою кількістю точок при інтегруванні зони Бріллюена. Поверхневі напруження визначалися згідно з методикою [12–15].

Ці дані наведені у табл. 2 з відповідними знаками “+” або “-” для розтягуючих та стискаючих напружень.

Як видно з табл. 2, збільшення енергії відсікання від 136 еВ, як у [12], до 218 еВ суттєво змінює поверхневі напруження ( $\sigma_a$  і  $\sigma_p$ ), що дозволяє стверджувати, що енергія відсікання 136 еВ, яка використовувалась у [12], недостатня для коректної оцінки поверхневих напружень. Крім того, у роботі [12] використовувалась комірка у вигляді плити з 12-ти шарами атомів Si, верхня та нижня поверхня якої мали реконструкцію  $2 \times 1$ , а

**Таблиця 2.** Напруження ( $\sigma_a$  – вздовж і  $\sigma_p$  – перпендикулярно до димерного ряду) на поверхні Si(001)( $2 \times 1$ ) в еВ/( $1 \times 1$  комірку) та їх анізотропія ( $\sigma_p - \sigma_a$ ) розраховані згідно з моделлю поверхні [12] з різними енергіями відсікання ( $E$ ) та різною кількістю  $k$ -точок для інтегрування зони Бріллюена: *a* –  $k = 6$ ,  $E = 136$  еВ, *б* –  $k = 256$ ,  $E = 218$  еВ, *в* – розбиття зони Бріллюена за схемою Monkhorst-Pack з сіткою  $2 \times 1 \times 1$  та двома шарами фіксованих атомів у середині комірки

	$\sigma_a$	$\sigma_p$	$\sigma_a - \sigma_p$
<i>a</i> [12]	0,3	2,1	1,8
<i>б</i>	2,14	0,56	-1,58
<i>в</i>	-0,86	0,11	0,97
Експеримент [20]	–	–	1



**Рис. 3.** Стабільні адсорбційні конфігурації 1-го 2-х та 3-х атомів О (а, б, в), та структури, що утворюються після переходу одиночного атома О в проміжок між атомами 2-го та 3-го при поверхневого шару  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  – (z, r, d). Сірі кружки – атоми аддимера, чорні кружки – атоми О, білі великі та білі малі кружки – атоми Si 2-го та 3-го приповерхневого шару відповідно

розрахункова модель передбачала повну оптимізацію координат атомів плити, що виключає вплив реконструкції однієї частини плити на іншу її частину. Взнявши до уваги літературні дані [21], що реконструкція поверхні Si(001) змінює положення атомів навіть у 8-му шарі, можна вважати, що модель без врахування впливу реконструкції однієї її частини на іншу частину може спотворити її передбачення. У зв'язку з цим ми перерахували поверхневі напруження цієї системи з двома зафіксованими шарами атомів у її середині (табл. 2, в) й виявили, що поверхневі напруження вздовж димерних рядів стали стискаючими, а у перпендикулярному до них напрямку залишилися розтягуючими. Анізотропія цих напружень виявилась рівною  $\sigma_p - \sigma_a = 0,97 \text{ eV}/(1 \times 1 \text{ комірку})$ , що узгоджується з експериментальними даними [20]. У рамках цієї моделі ми оцінили ще й напруження для реконструйованої поверхні Si(001) ( $4 \times 2$ ) й виявили, що вони, як і в нашому розрахунку, стали стиска-

**Таблиця 3.** Значення  $\Delta E_{O_2}$  та зміни характерних розмірів елементарної комірки  $\Delta a_{O_2}/c$  і  $\Delta b_{O_2}/c$  структур r, e та d, рис. 1, після адсорбції  $O_2$  на поверхнях  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$

	$\Delta a_{O_2}/c \cdot 10^{-2}$	$\Delta b_{O_2}/c \cdot 10^{-2}$	$\Delta E_{O_2}$
Ge-Ge (рис. 2, r)	-0,46	2,84	0,44
Ge-Si (рис. 2, d)	-0,40	3,23	1,26
Ge-Si (рис. 2, e)	-0,44	3,31	0,0
Si-Si (рис. 2, e)	-0,47	2,60	-

ючими ( $\sigma_a < 0$ ) вздовж димерних рядів і залишилися розтягуючими ( $\sigma_p > 0$ ) у перпендикулярному напрямку (табл. 2). Усе це дозволяє стверджувати, що наша модель і розрахункове наближення здатні коректно оцінювати характер поверхневих напружень систем, що досліджуються у цій роботі.

У своїй попередній роботі [18] ми виявили адсорбційні предстани молекули  $O_2$ , схематично наведені на рис. 2, r, e, d, e. Розраховані значення змін характерних розмірів  $\Delta a_{O_2}/c$  та  $\Delta b_{O_2}/c$  внаслідок утворення предстанів та відносні енергії  $\Delta E_{O_2}$  наведені в табл. 3. Порівняння цих даних із даними для аддимерів, наведеними у табл. 1, показує, що адмолекули  $O_2$  на чистих (Si-Si, Ge-Ge) та змішаних (Si-Ge) аддимерах майже не змінюють значень  $\Delta a_{O_2}/c$  і  $\Delta b_{O_2}/c$  та їх анізотропії по відношенню до  $\Delta a_{ad}/c$  і  $\Delta b_{ad}/c$ , але змінюють значення  $\Delta E_{O_2}$ . При цьому для змішаних Si-Ge аддимерів  $\Delta E_{O_2} = 0$ .

Отже, адсорбція молекули  $O_2$  на аддимери  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  майже не змінює характеру напружень чистої поверхні, а найбільш енергетично вигідною, де  $\Delta E_{O_2}$ , виявилась адсорбція молекули  $O_2$  на змішаних Si-Ge аддимерах в конфігурації рис. 2, e, що збігається з результатами нашої попередньої роботи [18].

### 3.2. Напруження поверхні $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$ з 1-м, 2-ма та 3-ма адсорбованими атомами О

У нашій попередній роботі [16] було показано, що після розриву зв'язку між атомами О адмолекули  $O_2$  на досліджуваній поверхні утворюються нові стабільні адсорбційні конфігурації окремих атомів О. Ці стабільні адсорбційні конфігурації 1-го, 2-х та 3-х адатомів О на поверхні  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  наведені на рис. 3, а, б, в. На початкових етапах окислення  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  може відбуватися ще й дифузія окремих атомів О в приповерхневий шар [22]. Структури, які утворюються після такої дифузії для 1-го, 2-х та 3-х адатомів О у глибину під другий поверхневий шар зразка, наведені на рис. 3, z, r, d), на яких стрілкою вказано напрямком такої дифузії. Для всіх цих структур були розраховані зміни характерних розмірів елементарної комірки ( $\Delta a_a/c$ ,  $\Delta b_a/c$ ) з адатомами О на  $Ge_xSi_{1-x}/Si(001)$  та ще й відносні зміни характерних розмірів елементарної комірки ( $\Delta a_d/c$ ,  $\Delta b_d/c$ )

після дифузійного переходу атома О в проміжок між атомами 2-го та 3-го приповерхневого шару для 1-го, 2-х та 3-х атомів О, адсорбованих на досліджувану поверхню, котрі наведені в табл. 4.

Як видно з табл. 4, для структур *a*, *b* та *в*, рис. 3, для поверхні  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  з 1-м, 2-ма та 3-ма адатомами О,  $\Delta a_a/c < 0$ ,  $\Delta b_a/c > 0$ . Оскільки  $\Delta a_a/c < \Delta b_a/c$ , то можна стверджувати, що адсорбція 1-го, 2-х та 3-х атомів О на поверхню майже не змінює характеру напружень, притаманних чистій поверхні  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ . Значення величин  $\Delta a_d/c$  та  $\Delta b_d/c$  (табл. 4) вказують на те, що дифузійний перехід одиничного атома О в проміжок між атомами 2-го та 3-го приповерхневого шару для випадків 1-го 2-х та 3-х адсорбованих атомів О (рис. 3, *г*, *с*, *д*) також не змінює характеру напружень системи, що досліджується. Отже, схематично наведений на рис. 3 дифузійний перехід атома О не стимулює релаксації напружень у системі, тобто дифузія атомів О у приповерхневі шари  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  на початкових етапах її окислення не стимулюється власними напруженнями системи. Варто зауважити, що раніше ми показали, що такий перехід ще й енергетично не вигідний [22]. Отже, можна припустити, що дифузія атомів

Таблиця 4. Зміни характерних розмірів елементарної комірки ( $\Delta a_a/c$ ,  $\Delta b_a/c$ ), ( $\Delta a_d/c$ ,  $\Delta b_d/c$ ) для структур *a*, *b*, *в* з адатомом О та *г*, *с*, *д* після його дифузії в приповерхневу область відповідно (рис. 3)

	$\Delta a_a/c \times 10^{-2}$	$\Delta b_a/c \times 10^{-2}$	$\Delta a_d/c \times 10^{-2}$	$\Delta b_d/c \times 10^{-2}$
Ge-Ge (рис. 2, <i>a</i> )				
О	-0,69	2,80	-0,61	3,45
2О	-0,69	2,80	-0,64	3,74
3О	-0,41	2,49	-0,49	4,66
Ge-Si (рис. 2, <i>б</i> )				
О	-0,68	2,82	-0,23	3,34
2О	-0,68	2,82	-0,52	3,94
3О	-0,51	2,88	-0,27	3,18
Ge-Si (рис. 2, <i>в</i> )				
О	-0,68	2,82	-0,58	3,61
2О	-0,68	2,82	-0,58	3,70
3О	-0,56	2,61	-0,51	4,50
Si-Si (рис. 2, <i>г</i> )				
О	-0,73	2,73	-0,62	3,56
2О	-0,69	2,80	-0,54	3,74
3О	-0,48	2,50	-0,19	3,26

О у приповерхневі шари  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  на початкових етапах окислення ймовірніше зумовлена розвиненою морфологією поверхні.

#### 4. Висновки

Показано, що аналіз змін розмірів елементарної комірки (її деформації  $\Delta a/c$  і  $\Delta b/c$ ) під дією адсорбції та дифузії атомів і молекул, зокрема кисню, можна використовувати як метод аналізу характеру змін поверхневих напружень у системах  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  в області пружних деформацій.

Виявилась анізотропія поверхневих напружень, бо напруження вздовж димерних рядів  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  є стискаючими й приблизно у 3 рази більшими за величиною від розтягуючих напружень у перпендикулярному до них напрямку. Поверхневі напруження слабо залежали від дії адмолекул або адатомів кисню, бо адсорбція молекул  $\text{O}_2$  або одного, двох та трьох атомів О на поверхні  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  майже не змінює характеру поверхневих напружень.

Дифузія атома кисню в проміжок між атомами 2-го та 3-го приповерхневих шарів  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  на початкових етапах її окислення не змінює характеру її поверхневих напружень, тобто не стимулює релаксацію напружень.

1. F.K. LeGoues, R. Rosenberg *et al.*, J. Appl. Phys. **65**, 1724 (1989).
2. T. Fukuda and T. Ogino, Surf. Sci. **380**, 469 (1997).
3. T. Fukuda and T. Ogino, Surf. Sci. **357-358**, 748 (1996).
4. T. Fukuda, Jpn. J. Appl. Phys. **38**, 1450 (1999).
5. І.П. Коваль, Ю.А. Ленъ, М.Г. Находкін, Вісник Київського університету **1**, 275 (2006).
6. J.L. Alerharda, D. Vanderblit, R.D. Mende *et al.*, Phys. Rev. Lett. **61**, 1973 (1988).
7. J. Dabrowski, and H.-J. Müssing, *Silicon Surfaces and Formation of Interfaces. Basic Science in the Industrial World* (World Scientific, Singapore, 2000); H. Ibach, *Physics of Surfaces and Interfaces* (Springer, Berlin, 2006).
8. M.C. Payne, Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).
9. В. Кон. У.Ф.Н. **172** № 3. 336 (2000)
10. X. Gonze, B. Amadon, P.M. Anglade *et al.*, Comp. Mater. Sci. **25**, 478 (2002).
11. H.J. Monkhorst and J.D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
12. A. Garcia and J.E. Northrup, Phys. Rev. B **48**, 3156 (1993).
13. R. Shaltaf, M. Çakmak, E. Mete *et al.*, Surf. Sci. **566-568**, 956 (2004).

14. M. Çakmak, R. Shaltaf, G.P. Srivastava *et al.*, Surf. Sci. **532-535**, 661 (2003).
15. O.L. Alerhand, J. Wang, J.D. Joannopoulos *et al.*, Phys. Rev. B **44**, 6534 (1991).
16. Т.В. Афанас'ева, И.П. Коваль, М.Г. Находкин, та інші. Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат.науки. **2**, 207 (2007).
17. Т. Afanasieva, I. Koval, M. Nakhodkin *et al.*, Ukr. J. Phys. **56**, 240 (2011).
18. Т. Afanasieva, I. Koval, M. Nakhodkin *et al.*, Ukr. J. Phys. **57**, 355 (2012).
19. F. Liu and M.G. Lagally, Phys. Rev. Lett. **76**, 3156 (1995).
20. F. Wu and M.G. Lagally, Phys. Rev. Lett. **75**, 2534 (1995).
21. R. Felici, I.K. Robinson, C. Ottaviani *et al.*, Surf. Sci. **375**, 55 (1997).
22. Т. Afanasieva, I. Koval, M. Nakhodkin *et al.*, Ukr. J. Phys. **56**, 352 (2011).

Одержано 03.06.13

А.А. Гринчук, И.Ф. Коваль, Н.Г. Находкин

#### ПОВЕРХНОСТНЫЕ НАПРЯЖЕНИЯ $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ НА НАЧАЛЬНЫХ ЭТАПАХ ОКИСЛЕНИЯ

##### Резюме

С помощью анализа изменений размеров элементарных ячеек, вызванных образованием на их поверхностях ад-димеров или адсорбции на них атомов и молекул, качественно определен характер напряжений чистой поверх-

ности  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  и на начальных этапах её окисления. Они имеют одинаковый характер как для чистой  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ , так и для поверхности с адсорбированными 1-м, 2-мя и 3-мя атомами О или молекулой  $\text{O}_2$ . Эти напряжения были анизотропными, сдвливающие напряжения вдоль димерных рядов приблизительно в 3 раза преобладали растягивающие напряжения в перпендикулярном к ним направлении (вдоль димерной связи).

А.А. Гринчук, И.П. Коваль, М.Г. Находкин

#### SURFACE STRESSES AT THE INITIAL STEPS OF THE $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$ SURFACE OXIDATION

##### S u m m a r y

Elastic stresses arising at the clean  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  surface, as well as at the initial stages of its oxidation, are considered qualitatively by analyzing the changes of unit cell dimensions occurring owing to the ad-dimer formation or the atomic or molecular adsorption on the unit cell surfaces. The stress character is found to be almost identical for the clean  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  surface and the  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}(001)$  surface with adsorbed oxygen molecules or one to three adsorbed oxygen atoms. In addition, the surface stresses revealed a significant anisotropy: they turned out compressive along the dimer rows and three times as large as tensile stresses in the perpendicular direction (along the interdimer bonds).