

1. **Наименование работы:** Моделирование диффузии по структурированной поверхности.
2. **Состав коллектива исполнителей:** Новиков П.Л., Смагина Ж.В., Двуреченский А.В.
3. **Контактное лицо:** Новиков Павел Леонидович, [novikov@isp.nsc.ru](mailto:novikov@isp.nsc.ru)
4. **Научное содержание работы:**

Работа посвящена определению микроскопического механизма зарождения и роста островков германия на структурированных подложках кремния. Структурированной мы называем подложку, на поверхности которой с помощью электронной или голографической литографии сформирована система регулярно расположенных ямок (в зарубежной литературе используется термин "pit-patterned"). При определенных условиях гетероэпитаксиальный рост на структурированной поверхности приводит к зарождению трехмерных островков в ямках и в итоге - к формированию массива пространственно-упорядоченных наноструктур. В случае системы Si/Ge можно говорить о росте по механизму Странского-Крастанова при наличии непланарной границы раздела. В области фундаментального научного знания имеется ряд нерешенных проблем, тормозящих создание плотных пространственно-упорядоченных массивов квантовых точек. Мало изучены аспекты, связанные с микроскопическим механизмом атомной диффузии на непланарных поверхностях, распределением упругих деформаций в гетеросистеме, сформированной на структурированной подложке, зависимостью энергии зародыша от его геометрии и размеров, от морфологии подлежащей поверхности, от взаимного расположения зародыша и ямки.

Целью данной работы являлась разработка физических основ метода для формирования плотных пространственно-упорядоченных массивов квантовых точек германия на структурированных подложках кремния.

#### 4.1. Постановка задачи

В число основных задач работы входило определение микроскопического механизма диффузии на структурированной поверхности; выявление особенностей перехода от двумерно-слоевого роста к трехмерному, обусловленных наличием ямок; нахождение оптимальных условий для проявления эффекта пространственного упорядочения. Для определения механизма поверхностной диффузии планировалось методом молекулярной динамики (МД) определить потенциальный рельеф (энергетическую поверхность) структурированной поверхности. Для выявления особенностей перехода от двумерно-слоевого роста к трехмерному при гетероэпитаксии на структурированной поверхности методом молекулярной динамики была поставлена задача определить энергию гетеросистемы в зависимости от морфологии и размера трехмерных островков, их расположения относительно центров ямок, химического состава, при различных температурах. При этом требовалось учитывать структуру атомных ступеней на плоских гранях островков и на стенках ямок. В рамках данного подхода предполагалось установить места вероятного зарождения островка, критический размер и форма островка, оптимальные геометрические характеристики ямки для усиления эффекта селективного роста.

#### 4.2. Современное состояние проблемы

Число теоретических работ, посвященных росту на структурированных подложках, сравнительно невелико. Эффект самоупорядочения при осаждении материала на рельефную поверхность изучался в работе Капона с коллегами (G. Biasiol, A. Gustafsson,

K. Leifer, and E. Kapon, Mechanisms of self-ordering in nonplanar epitaxy of semiconductor nanostructures, Phys. Rev. B 65 (2002) 205306). В теоретической работе Вастолы с коллегами (G. Vastola, F. Montalenti and Leo Miglio, "Understanding the elastic relaxation mechanisms of strain in Ge islands on pit-patterned Si(001) substrates", J. Phys: Condens. Matter 20 (2008) 454217) в приближении сплошной среды решалась упругая задача в системе Si/Ge(001) на структурированной подложке. Было показано, что при объеме Ge, превышающем 200 нм<sup>3</sup>, *hut*-кластер оказывается энергетически выгодной морфологией германия в ямке. В работе Райтери (P. Raiteri, D.B. Migas, and Leo Miglio, "Critical Role of the Surface Reconstruction in the Thermodynamic Stability of {105} Ge Pyramids on Si(001)", Phys. Rev. B 88 (2002) 256103) была исследована проблема термодинамической стабильности *hut*-кластеров Ge на Si(001) с учетом сверхструктурных перестроек. Расчеты показали, что сверхструктурные перестройки на плоских участках поверхности и расположение атомов на наклонных гранях островков играют ключевую роль в вопросе о стабильности германиевого наноструктура и о размере критического *hut*-кластера.

### 4.3. Полученные результаты

Для изучения свойств поверхности гетероэпитаксиальной пленки Ge на структурированной подложке Si использовался метод молекулярной динамики (МД). Изучаемая система включала атомы Si и Ge, составляющие фрагмент структурированной подложки Si с пленкой Ge толщиной 2 монослоя (МС). Ямка имела форму перевернутой пирамиды. Основная моделируемая структура соответствовала подложке Si(001). Дополнительно исследовалась структура на подложке Si(111). Для обеих модельных структур была рассчитана энергетическая поверхность, характеризующая энергию адатома Ge, осажденного на поверхность в произвольной точке. Эти результаты представлены на рис. 1 и 2, соответственно.

Методом молекулярной динамики с использованием эмпирического потенциала Терсоффа рассчитана энергия германия в ямке на поверхности Si(001)-2×1. Ямка имела форму перевернутой пирамиды с квадратным основанием. В расчетах рассматривались две альтернативные морфологии германия в ямке: *hut*-кластер и структура с планарной поверхностью. Объем германия варьировался от 50 до 500 нм<sup>3</sup>. Для каждого объема вычислялась удельная энергия  $W$  германия в ямке:

$$W = \frac{E_{Ge} - E_0}{N_{Ge}},$$

где  $N_{Ge}$  – число атомов Ge в ямке,  $E_{Ge}$  – энергия всей структуры с ямкой, заполненной германием,  $E_0$  – энергия всей структуры с незаполненной ямкой (рис.10 а). Результаты расчетов представлены в таблице 1. Из полученных результатов следует, что критический размер *hut*-кластера в ямке составляет ~20 нм. В ямках меньшего размера энергетически выгоднее формироваться 2D-островкам, нежели *hut*-кластерам.

Методом молекулярной динамики была также изучена зависимость энергии германиевого островка в ямке от ориентации граней островка. Островок в ямке имел форму *hut*-кластера и располагался соосно с ямкой. Ориентация граней варьировалась поворотом вокруг общей оси. На рис. 3 показан вид сверху для четырех ориентаций островка Ge в ямке на поверхности смоделированной структуры SiGe(001)-2×1 (толщина смачивающего слоя Ge в ямке и на планарном участке поверхности составляла 2 монослоя). Белой пунктирной линией на рис. 3 показаны ребра *hut*-кластера. Рассчитанные для каждой ориентации значения  $W$  приведены внизу на рис. 3. Наименьшее значение  $W = -3.88$  эВ/атом было получено для ориентации граней {105} и соответствует термодинамически выгодной морфологии островков. Хотя различия в величине  $W$  для разных ориентаций невелики (<0.1 эВ), они значительно превышают погрешность вычислений. Кроме того, как показывают оценки, соответствующая разница в полной энергии островка примерно

на порядок выше разброса, обусловленного термическими флуктуациями. Отметим, что *hut*-кластеры с ориентацией грани {105} наблюдались в экспериментах по росту на структурированных подложках.

#### 4.4. Эффект от использования кластера в достижении целей

Расчет энергетической поверхности требует значительных затрат машинного времени. Использование кластера позволило разбить исследуемую структуру на полосы и проводить расчеты на каждой полоске параллельно, с задействованием нескольких десятков ядер одновременно. За счет этого удалось качественно увеличить размер моделируемой структуры при сохранении информации о межатомных взаимодействиях в ней.

#### 4.5. Иллюстрации, визуализация результатов

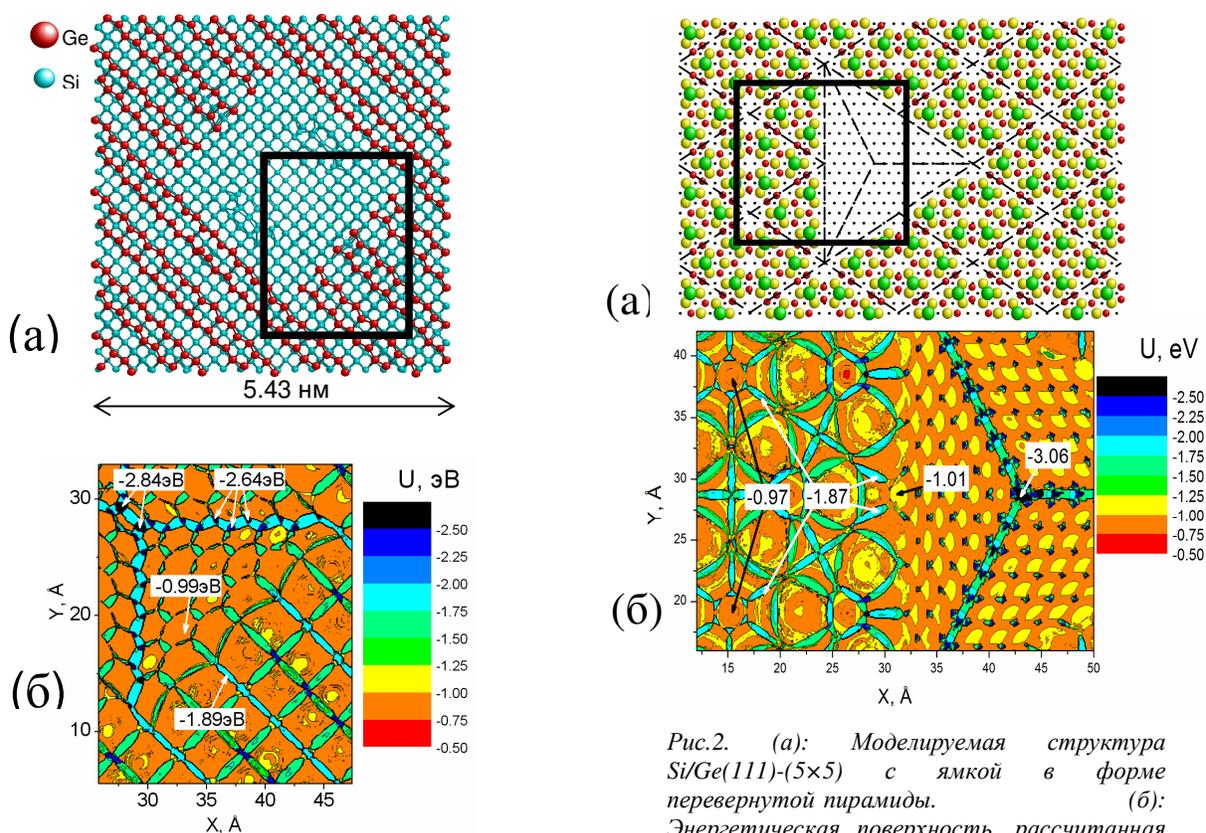


Рис.1 (а): Моделируемая структура Si/Ge(001)-(2x1) с ямкой в форме перевернутой пирамиды. Для наглядности атомы Ge на стенках ямки не показаны. (б): Энергетическая поверхность, рассчитанная методом МД в пределах области, помеченной прямоугольником на рис. (а).

Рис.2. (а): Моделируемая структура Si/Ge(111)-(5x5) с ямкой в форме перевернутой пирамиды. (б): Энергетическая поверхность, рассчитанная методом МД в пределах области, помеченной прямоугольником на рис. (а).

Объем, нм <sup>3</sup>	W, эВ/атом	
	<i>Hut</i> -кластер	2D
70	-3.68	-3.70
180	-3.75	-3.75
260	-3.82	-3.80
530	-3.78	-3.77

Таблица 1. Значения удельной энергии островков Ge в ямке для различных объемов и морфологий островков.

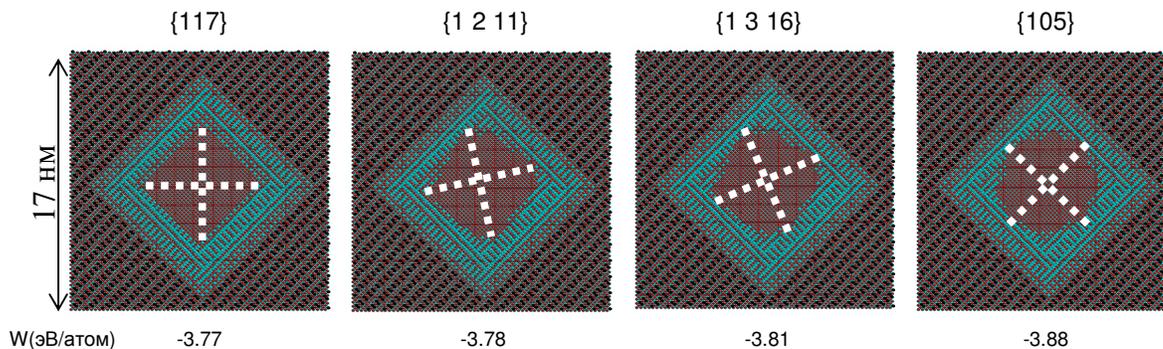


Рис. 3. Моделируемая структура с *hut*-кластерами Ge в ямке (вид сверху). Атомы Ge в ямке показаны красным цветом, встроенные в димерные ряды вне ямки – черным, атомы Si – голубым. Белые пунктирные линии проведены по ребрам *hut*-кластеров. Ориентация граней островков указана в верхней части рисунка. Внизу приведены значения удельной энергии W островка в ямке, рассчитанные методом молекулярной динамики.

## 5. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. P. Novikov, Zh. Smagina, D. Vlasov, A. Deryabin, A. Kozhukhov, A. Dvurechensky, "Space arrangement of Ge nanoislands formed by growth of Ge on pit-patterned Si substrates", Journal of Crystal Growth, Vol. 323, Issue 1 (2011) pp. 198-200.
2. Zh.V. Smagina, P.L. Novikov, V.A. Zinovyev, V.A. Armbrister, S.A. Teys, A.V. Dvurechenskii, "Molecular-beam epitaxial growth of Ge/Si nanostructures under low-energy ion irradiation", Journal of Crystal Growth, Vol. 323, Issue 1 (2011) pp. 244-246.
3. P.L. Novikov, J.V. Smagina, D.Yu. Vlasov, A.S. Deryabin, A.S. Kozhukhov, A.V. Dvurechenskii, "Nucleation Of Ge 3D-islands On Pit-patterned Si Substrates", AIP Conf. Proceedings, v. 1399 (2011) pp. 221-222.
4. P. Novikov Zh. Smagina A. Dvurechenskii, "Formation of Ge nanoislands on pit-patterned Si substrates studied by molecular dynamics simulations", Proceedings of 19th International Symposium "Nanostructures: Physics and Technology" (Ekateringurg, Russia, June 20-25, 2011) pp. 201-202.

## 6. Впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию.

Вычислительная система работает надежно. Критических замечаний к деятельности ИВЦ НГУ нет.