

Отчет за период 2018-2019

- Тема работы: Расчет методом молекулярной динамики упругих деформаций в структурированных подложках Si, возникающих под действием междоузельных атомов Ge, введенных ионным облучением.
- Состав коллектива: ФИО без сокращений, места работы/учёбы, должности, учёные степени и звания. Опционально контактный адрес электронной почты:
Новиков Павел Леонидович, с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н., novikov@isp.nsc.ru
Павский Кирилл Валерьевич, зав. Лаб. ИФП СОРАН, д.т.н., pkv@isp.nsc.ru
Насибулов Илья Андреевич, студент НГУ, i.nasibulov@g.nsu.ru
- Если работа выполняется по гранту - информация о гранте (название, номер, руководитель, срок действия, ...)

РФФИ (грант № 18-41-540005 р-а), “Моделирование поверхностной атомной диффузии и роста германиевых квантовых точек на структурированных подложках кремния и разработка алгоритмических и программных средств оптимизации вычислений на вычислительных системах”, Павский Кирилл Валерьевич, 2018-2019

Программа фундаментальных исследований Президиума РАН (ГЗ 0306-2018-0012) “Наноструктуры и физические принципы приборов на их основе для электроники, фотоники и магнитных систем”, Двуреченский Анатолий Васильевич, 2018-2019.

- Научное содержание работы:
 1. Постановка задачи.

В ИФП СО РАН предложен метод создания структурированных подложек Si с канавками, использующий комбинацию наноимпринт-литографии и облучения ионами Ge. Ионы Ge, внедренные в Si, могут создавать дополнительные деформации, коррелирующие с рельефом подложки, и при последующем росте Ge влиять на зарождение nanoостровков. Данный метод обеспечивает дополнительный контроль над местами образования nanoостровков.

В работе Смагиной и др. (Zh. V. Smagina, N. P. Stepina, V. A. Zinovyev, P. L. Novikov, P. A. Kuchinskaya, and A. V. Dvurechenskii, Chains of quantum dot molecules grown on Si surface pre-patterned by ion-assisted nanoimprint lithography // Appl. Phys. Lett. 105. 2014. 153106) исследовалось влияние «захороненных дефектов» на зарождение островков. Для создания структурированной подложки использовалась комбинация наноимпринт-литографии и ионного облучения. Сначала штампом в фоторезисте продавливалась система канавок шириной 100 нм с периодом 180 нм. Далее проводилось облучение ионами Ge⁺ при комнатной температуре и при температуре 400 °С. Энергия ионов была подобрана так, что они попадали в подложку только под «окнами», нарушая кристаллическую структуру Si и создавая дефектную область в подложке. Глубина дефектной области по данным ВРЭМ составляла 55 нм в случае облучения при комнатной температуре и 40 нм при температуре 400 °С. Далее фоторезист был удален и было произведено несколько циклов окисления в растворе NH₄OH + H₂O + H₂O₂ с последующим удалением оксида в HF. Поскольку дефектные области больше подвержены окислению, то, изменяя количество циклов, можно менять глубину канавок структурированной подложки. Затем на структурированную подложку при температурах от 550 °С до 700 °С осаждался 1 нм Ge. Было выяснено, что при глубине канавки менее 30 нм островки растут только между канавками, а при глубине травления более 30 нм – только в канавках. В данной работе методом молекулярной динамики исследуется механизм влияния кластеров междоузлий на места зарождения островков при гетероэпитаксии на структурированных подложках.

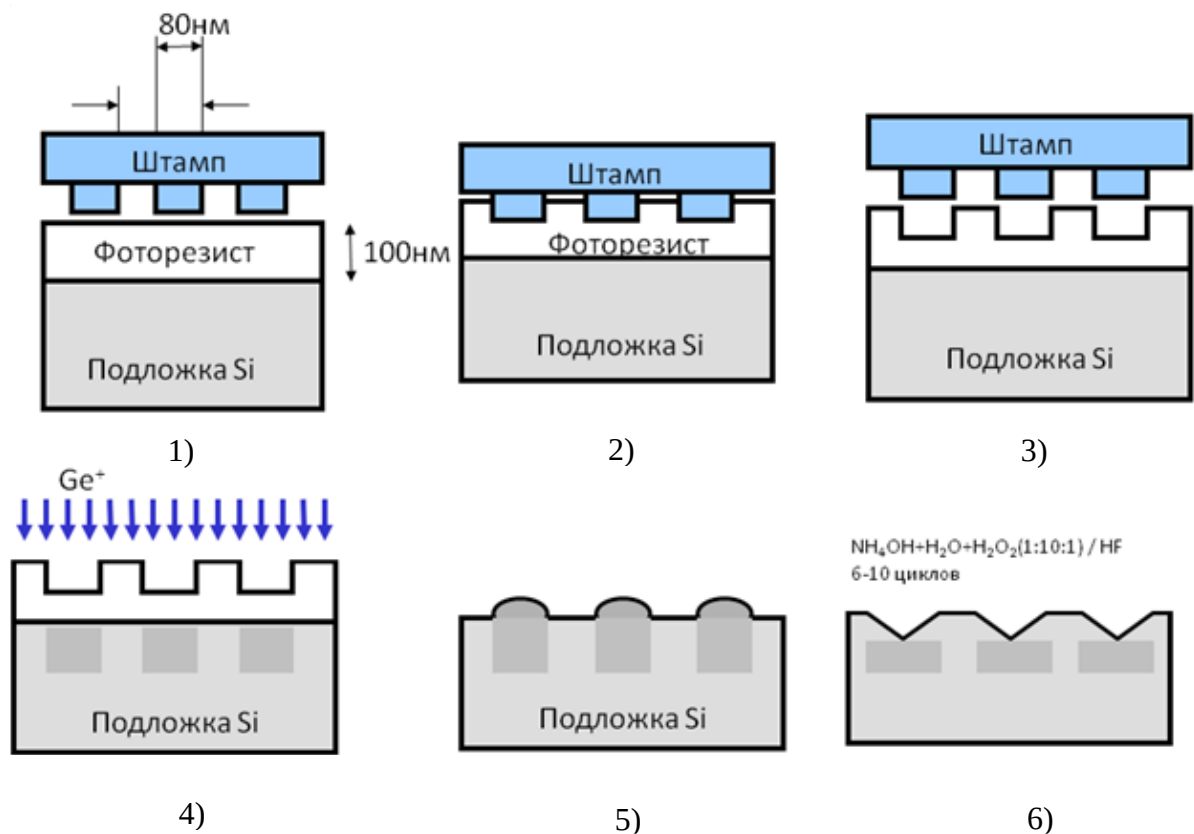


Рис. 1. Схема метода создания структурированной подложки, включающего комбинацию наноимпринт-литографии и ионного облучения подложки.

2. Современное состояние проблемы (на момент начала работы).

Поскольку метод получения структурированных подложек с использованием ионного облучения является оригинальным, то исследования свойств этих подложек до сих пор не проводилось. Однако теоретические работы, в которых зарождение наноостровков связывается с распределением упругих деформаций на поверхности, известны. Среди них можно отметить теоретическую работу 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 которой в приближении сплошной среды решалась упругая задача в системе Si/Ge(001) на структурированной подложке. Были рассмотрены две альтернативные морфологии пленки Ge, заполняющей в кремнии ямку в форме перевернутой пирамиды с тангенсом угла наклона 0.2 ("обратный hut-кластер"). В одном случае германий заполнял ямку равномерно от доньшка, в другом - принимал форму hut-кластера (прямого, т.е. вершиной вверх). Для обеих морфологий была рассчитана энергия гетерозепитаксиальной системы как функция объема германия. Было показано, что при объеме Ge, превышающем 200 нм³, hut-кластер оказывается энергетически выгодным. В случае 50%-ого перемешивания Si и Ge критический объем увеличивается до 8000 нм³. Удельная энергия поверхности, заложенная в расчеты, была взята из результатов другой работы, без учета ориентации граней и сверхструктурных перестроек. Поэтому полученные значения критического объема могут содержать большую погрешность.

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. Авторы работы изучали энергетику гетеросистемы с помощью моделирования методами *ab initio* и молекулярной динамики. Расчеты показали, что сверхструктурные перестройки на плоских участках поверхности и расположение атомов на наклонных гранях островков играют ключевую роль в вопросе о стабильности германиевого наноостровка и о размере критического hut-кластера.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы. Полученные результаты. Иллюстрации, визуализация результатов.

Чтобы выяснить количественный эффект межузельных атомов, введенных в подложку Si на стадии ионного облучения, на поверхностные деформации в канавках структурированной подложки, были проведены расчеты методом молекулярной динамики (МД).

Структура была подвергнута процедуре релаксации, состоящей в следующем. Первоначально все атомы помещаются в узловые положения идеальной решетки кремния. Поскольку постоянная решетки германия превышает постоянную решетки кремния на 4%, то германий в исходной структуре напряжен. Переход из напряженного состояния в равновесное имитируется методом молекулярной динамики. Поскольку в начальном состоянии германий чрезвычайно напряжен, то при комнатной температуре моделирование симитирует взрыв с необратимыми изменениями структуры. Поэтому на начальной стадии процедуры релаксации процесс искусственно замедляется понижением температуры до 10 К. Затем, спустя 2 пс, температура в течение 5-10 пс постепенно повышается до 700 К и, наконец, постепенно, в течение 5-10 пс, снижается до 10 К. На стадии релаксации атомы системы занимают равновесные положения, соответствующие решению уравнения движения с заданным потенциалом межатомного взаимодействия. Для системы Si/Ge использовался эмпирический потенциал Терсоффа. Полученная структура является объектом дальнейшего исследования.

На Рис. 2 показано типичное поперечное сечение моделируемых структур. Атомы Si окрашены в голубой цвет, атомы Ge - в красный.

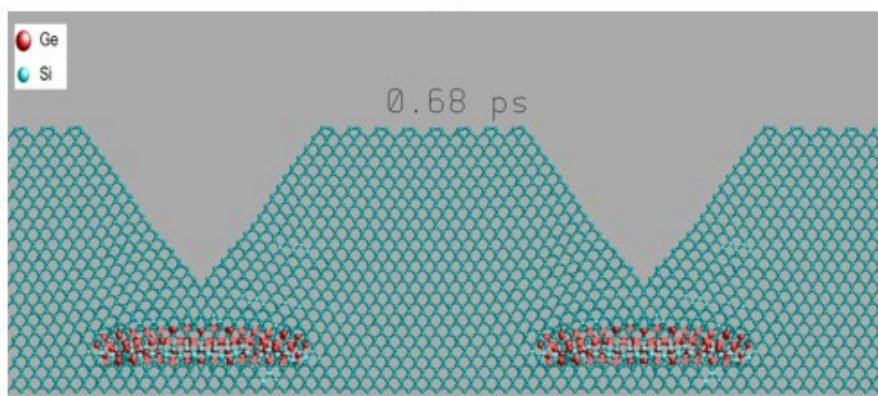


Рис. 2. Моделируемая структура с кластером междоузлий под канавками.

Деформации вдоль стенок канавки рассчитывались как относительное растяжение:

$$\delta = \frac{D - D_0}{D_0}$$

где D_0 расстояние между выбранными атомами в недеформированной решетке кремния, D - фактическое расстояние между выбранными атомами. Для деформаций в канавке один атом выбирался на краю канавки, другой - на доньшке. Для определения деформаций в области между канавками выбирались ближайшие атомы на краях соседних канавок. Результаты расчетов представлены в таблице 1. Отрицательная величина деформации соответствует сжатию, положительная - растяжению. Результаты показывают, что в глубоких канавках возникает сжатие, в мелких - растяжение. Между канавками во всех случаях возникает сжатие. Наиболее благоприятными местами для зарождения островков Ge служат те, в которых деформация составляет +4.2% (относительное рассогласование постоянных решеток германия и кремния). Соответственно в случае стенок с ориентацией (111) островкам выгоднее расти между канавками, в остальных случаях - внутри канавок.

Ориентация стенок канавки	Деформация канавки (%)	Деформация между канавками (%)
(111)	-3.99	-2.52
(112)	0.60	-4.75
(113)	0.92	-3.66
(114)	1.34	-3.59

Таб. 1. Упругие деформации, возникающие в структурированной подложке Si под действием междоузлий Ge, для канавок с различным наклоном стенок канавок (результаты расчетов методом МД).

Учитывая, что при ионном облучении образуются также междоузлия кремния, мы провели аналогичные расчеты для такой же серии структур, но с междоузлиями Si (Таб. 2). Количественно деформации получились меньшей величины, но, как и в случае междоузлий Ge, моделирование показало, что благоприятными местами для зарождения островков являются мелкие канавки.

Ориентация стенок канавки	Деформация канавки (%)	Деформация между канавками (%)
(111)	-3.45	-2.43
(112)	0.49	-4.68
(113)	0.86	-3.62
(114)	0.93	-2.85

Таб. 2. Упругие деформации, возникающие в структурированной подложке Si под действием междоузлий Si, для канавок с различным наклоном стенок канавок (результаты расчетов методом МД).

- Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

-

Расчеты потенциального рельефа требуют значительных затрат машинного времени. Практически эти расчеты были бы невозможны на отдельном персональном компьютере. Поэтому область, в которой рассчитывался потенциальный рельеф, делилась на полосы, и расчет внутри каждой полосы запускался как отдельная задача. Одновременно на вычислительном кластере было возможно запускать до 50 задач. Затем по результатам, полученным на вычислительном кластере, полосы собирались в полную исходно заданную прямоугольную область и преобразовывалась в контурную карту с помощью графического редактора.

- Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть). Если имеется, указать импакт-фактор журнала (Thomson Reuters, РИНЦ,...).

1. [Smagina et al.](#), «Chains of quantum dot molecules grown on Si surface pre-patterned by ion-assisted nanoimprint lithography», Applied Physics Letters, 2014, 105(15), 153106 (impact factor 3.1)

2. [Novikov, P.L.](#) et al., «Effect of Interstitials Embedded in Pre-Patterned Si Substrate on Location of Ge Nanoislands», Physica Status Solidi (C) Current Topics in Solid State Physics, 2017, 14(12), 1700200 (impact factor 1.7)

3. [Novikov, P.L.](#), [Dvurechenskii, A.V.](#), [Pavsky, K.V.](#), «Energy Surface of Pit-Patterned Templates for Growth of Space-Arranged Arrays of Quantum Dots - Molecular Dynamics Calculations Using High-Efficiency Algorithms», 2019 International Multi-Conference on Industrial Engineering and Modern Technologies, FarEastCon 2019, 2019, 8934013

- Опционально: ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию.

В настоящее время для решения задач, связанных с моделированием гетероэпитаксиального роста на структурированных подложках, ИВЦ НГУ является наиболее предпочтительной альтернативой по сравнению с вычислительными кластерами, имеющимися в ИФП СО РАН.