

- Изучение морфологии стенок ямок на структурированных подложках кремния методом молекулярной динамики
- Состав коллектива:
Новиков Павел Леонидович, Институт физики полупроводников СО РАН, с.н.с., к.ф.-м.н, novikov@isp.nsc.ru
Чэнь Юйцзин, НГУ, магистрант, y.chen1@g.nsu.ru
У Цзяи, НГУ, магистрант, t.u1@g.nsu.ru
- Гос. контракт с ИФП СО РАН за 2019-2022 гг.
- Научное содержание работы:
 1. Постановка задачи.

Данная работа посвящена изучению роста гетероэпитаксиальных наноструктур германия на рельефных поверхностях кремния. Такие структуры включают пространственно-упорядоченные массивы квантовых точек, которые являются перспективными для создания электронных приборов и устройств будущего поколения, например, квантовых клеточных автоматов, МОП-структур на подвижных носителях и квантового компьютера.

С точки зрения фундаментальных вопросов малоизученным является механизм атомной диффузии по кристаллической поверхности, содержащей ямки. Для изучения вопросов такого рода удобным методом является метод молекулярной динамики.

Целью работы было выяснить строение поверхности на стенках ямок с учетом димеризации атомов, а также изучить процесс адсорбции атомов германия на начальном этапе гетероэпитаксии. В качестве инструмента исследования использовался метод молекулярной динамики.

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

Исследования поверхностных атомных перестроек, происходящих на стенках ямок структурированной поверхности, не проводились. Поэтому и подходы к решению поставленной цели, и полученные результаты являются оригинальными.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Модельная структура формировалась как массив атомов, каждый из которых характеризуется порядковым номером в массиве, типом (Si или Ge) и тремя декартовыми координатами. Первоначально компьютерной программой формировался фрагмент в форме прямоугольного параллелепипеда, внутри которого все атомы занимали положения узлов идеальной кристаллической алмазоподобной решетки кремния. Грани параллелепипеда имели ориентацию (100). Типичные размеры фрагмента $35 \times 35 \times 4$ нм³. Искусственным образом на поверхности фрагмента формировались димерные ряды. Для этого, с учетом номера поверхностного монослоя (четный/нечетный) определенные атомы смещались друг к другу, образуя пары димеров, выстроенные в ряды. В эксперименте димерные ряды формируются спонтанно на атомарно-чистой поверхности за время меньше или порядка секунды. Имитация процессов на поверхности (100), проводящаяся методом МД, воспроизводит образование димеров в течение нескольких пс. Однако димерные ряды в моделировании выстраиваются в виде коротких отрезков, с перескоком на соседние позиции. Такой процесс объясняется следующим образом. Отдельный димер возникает из-за того, что два соседних

атома замыкают между собой две ненасыщенные связи. Это энергетически выгодно, поскольку общее число ненасыщенных связей на поверхности сокращается вдвое. Однако выбор, какую из двух связей замкнуть, происходит случайно и с равной вероятностью. Поэтому на начальном этапе половина атомов димеризуется с левыми, половина — с правыми соседями, и единого димерного ряда не образуется. Энергетически выгодно, чтобы половина димеров «сменила партнера» так, чтобы все димеры были встроены в длинные ряды, формируя поверхностную сверхструктуру (100)-1×2. Однако для «смены партнера» атом должен разорвать связь с близко расположенным соседом и установить связь с атомом, находящимся на большем расстоянии. Такой процесс требует преодоления дополнительного энергетического барьера, то есть протекает по активационному механизму. Среднее время на образование длинных эквидистантно расположенных димерных рядов составляет миллисекунды и превышает верхний предел, доступный для моделирования методом МД. Поэтому мы «ускорили» этот процесс, искусственно сформировав димерные ряды на поверхности модельной структуры.

Затем на поверхности фрагмента формировались ямки в форме одинаковых перевернутых пирамид с квадратным основанием, в котором стороны квадратов ориентированы вдоль направлений типа [100]. С этой целью для каждой ямки задавались положения четырех кристаллических плоскостей, совпадающих со стенками ямки, и все атомы, находящиеся выше этих плоскостей, удалялись из массива атомов с перенумерацией оставшихся атомов в массиве. Пример модельной структуры представлен на Рис. 1. Атомы Si окрашены в голубой цвет, Ge – в красный, димеризованные атомы Ge на участках между ямками – в черный.

На латеральные границы накладывались периодические граничные условия. Благодаря этому объект дальнейшего исследования методом МД представлял собой квазибесконечную структуру с регулярным расположением ямок. Условие периодичности на границах накладывало дополнительные требования на положения центров ямок, которые всегда соблюдались.

Как следует из предыдущего изложения, в моделируемой структуре, приготовленной программными средствами, все атомы изначально находятся в узлах идеальной (недеформированной) кристаллической решетки кремния. И кремний и германий в такой решетке оказываются в неравновесном напряженном состоянии, поскольку постоянные их кристаллических решетки отличаются на 4%. Для того, чтобы объект исследования был адекватен реальным объектам, атомы структуры приводились в новые положения в ходе процедуры релаксации. Данная процедура представляет собой имитацию процесса релаксации упругих деформаций под действием межатомных сил, которая реализуется методом МД. Если имитировать процесс при комнатной температуре, то будет наблюдаться

взрыв структуры. Действительно, исходно атомы германия находятся в сильно неравновесных позициях, поэтому межатомные силы будут разгонять атомы до таких скоростей, что возникнут каскады столкновений, разрушающих связи в кристалле и приводящие к необратимым структурным нарушениям. Поэтому процесс релаксации начинается при низкой температуре (ниже 10 К). Опция низкотемпературного термостата в модели МД работает таким образом, что, когда в термостатированной системе возникают быстрые частицы, скорости этих и остальных частиц немедленно (на временном шаге в несколько десятых долей фемтосекунды) уменьшаются настолько, чтобы сохранить заданную термостатом температуру и больцмановское распределение частиц по скоростям. Фактически опция низкотемпературного термостата придает системе эффективную вязкость, препятствующую взрывообразному развитию процесса. С другой стороны, хотя и медленно, атомы кремния и германия меняют свои положения так, что система становится все более равновесной. В такой системе уже «не страшно» поднять температуру, и она постепенно повышается до значений, позволяющих атомам преодолевать небольшие энергетические барьеры для локальной димеризации. С другой стороны температура не поднимается слишком высоко, чтобы избежать разрушения уже сформированных димерных рядов на плоских горизонтальных участках поверхности. Максимальная температура в процессе релаксации составляет 300-450 °С. Структура, прошедшая процедуру релаксации, становится объектом дальнейшего анализа.

4. Полученные результаты.

Морфологические изменения на стенках ямок, возникшие в ходе процедуры релаксации, связаны с процессом образования атомных димеров. Димеризация происходит спонтанно. Для некоторых димеров трудно установить закономерности и корреляцию во взаимном расположении. В то же время, наблюдаются атомные конфигурации, составляющие фрагменты пространственно-упорядоченной структуры. Мы назвали их Н-образными конфигурациями. Они представлены на Рис. 2, где слева показан фрагмент исходной моделируемой структуры (на стенке ямки, вид сверху), справа – той же структуры после релаксации. Н-конфигурации выделены белыми кружками а также белыми отрезками, отмечающими соответствующие межатомные связи.

Далее, для нас представляли особый интерес морфологические изменения на стенках ямок в процессе эпитаксиального осаждения нового атомного слоя Ge. С одной стороны мы ожидали некоторое повторение рисунка, с другой – было не понятно, как атомы, входящие ранее в состав димеров, занимают узловые позиции в кристаллической решетке, оказываясь в объеме (под осажденным атомным слоем). В эксперименте осаждение атомного слоя занимает десятки секунд. Процессы с такой длительностью недоступны для прямого изучения методом МД. Однако нам удалось, имитируя довольно короткий (10 пс) процесс, последовательно наблюдать осаждение двух атомов Ge, их адсорбцию, формирование новой Н-конфигурации, сопровождающееся разрушением димера (и, соответственно, Н-конфигурации) в нижележащем атомном слое с занятием атомами бывшего димера узловых позиции в кристаллической решетке. Весь процесс представлен на Рис. 3, где желтым цветом

отмечены осаждаемые атомы Ge, зеленым – атомы Ge, изначально образующие димер, а в дальнейшем занимающие узловые позиции кристаллической решетки. Оценки показывают, что в среднем процесс от адсорбции атома до его поверхностной диффузии с образованием новой H-конфигурации должен занимать более мс. Мы “ускорили” этот процесс, осаждая одновременно два атома в достаточно близкие точки поверхности.

5. Иллюстрации, визуализация результатов.

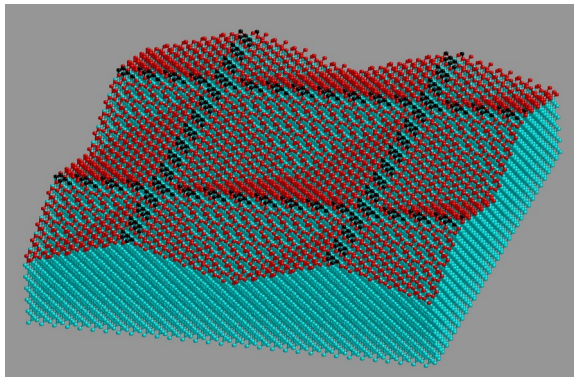


Рис. 1. Моделируемая структура (общий вид) с ямками, стенки которых имеют ориентацию (103). Красным цветом показаны атомы Ge, голубым – Si, черным – атомы Ge, образовавшие димеры.

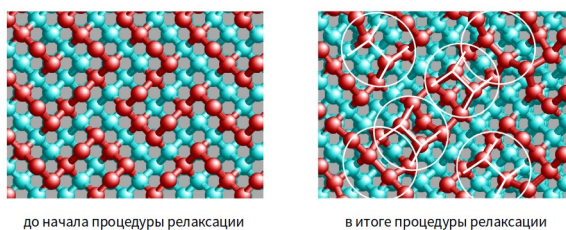


Рис. 2. Формирование H-образных атомных конфигураций на стенке (103) . Слева исходная структура с атомами в узлах кристаллической решетки, справа – та же структура после релаксации. Образовавшиеся в результате димеризации H-конфигурации выделены белыми кружками и отрезками вдоль соответствующих межатомных связей.

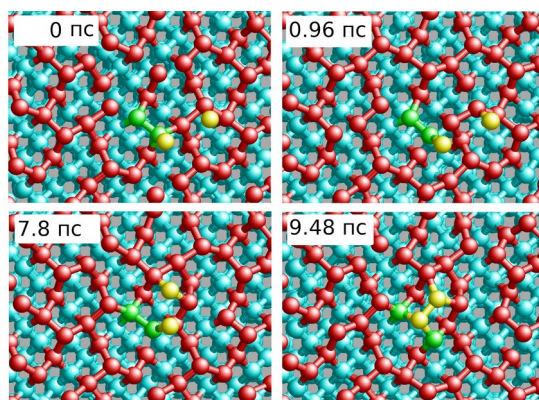


Рис. 3. Адсорбция германия на стенке ямки с ориентацией (103) на различных стадиях процесса. Желтым цветом показаны осаждаемые атомы Ge, зеленым – выделенные димерные атомы Ge в нижележащем атомном слое.

- Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Некоторые расчеты методом МД в принципе было бы невозможно выполнить на системном блоке ПК. В остальных случаях эти расчеты значительно ускорились благодаря возможности одновременной загрузки до 20 ядер на кластере.

- Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

1. У Цзяи, "Изучение роста гетероэпитаксиальных наноструктур германия на рельефных поверхностях кремния", Тезисы МНСК 2022 (Физика), 10-20 апреля 2022, НГУ, Новосибирск, с. 212.

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

Возможности ИВЦ НГУ значительно превосходят по практическим параметрам (скорость выполнения задач, надежность и сбоеустойчивость) аналогичные возможности вычислительного кластера ИФП.