

1. Наименование работы.

Пространственное упорядочение квантовых точек Ge на Si(100).

2. Состав коллектива исполнителей.

Рудин Сергей Алексеевич, Ненашев Алексей Владимирович, Смагина Жанна Викторовна.

3. Контактное лицо.

Рудин С. А., almasy@ngs.ru

4. Научное содержание работы.

1. Постановка задачи.

Моделирование эпитаксиального роста Ge на Si(100) с учетом упругой деформации.

В основе модели лежит трехмерная кристаллическая решетка типа алмаза с периодическими граничными условиями. В качестве узлов решетки служат атомы Si или Ge. Рост Ge из молекулярного пучка рассматривается на основе модели, разработанной Vvedenskii et al. [1] и Hunson et al. [2] для численного моделирования методом Монте-Карло кристаллов с решеткой типа алмаза. Согласно этой модели, эволюция системы Ge/Si состоит из последовательности элементарных процессов поверхностной диффузии и осаждения атомов.

Предполагается, что энергия активации диффузионного прыжка адатома зависит от числа его ближайших соседей в первой и второй координационной сфере (n_{i1} и n_{i2} соответственно) и упругой энергии (E_{idef}):

$$E_{ia} = n_{i1}E_1 + n_{i2}E_2 - E_{idef},$$

где

E_1 и E_2 – константы с размерностью энергии (параметры модели).

Энергия деформации для i -го атома рассчитывается по аналогии с моделью Китинга [3], в расчет берутся только первые и вторые соседи атома:

где

r_i — радиус-вектор i -го узла;

α_{ij} , β_{ijk} и d_{ij} — параметры, зависящие от сорта атомов i , j и k ;

d_{ij} — равновесная длина связи между атомами;

θ_{ijk} - угол между связями i - j и i - k .

С целью выполнения принципа детального равновесия введены отклонения атома от его равновесного положения, основанные на распределении Больцмана.

При наличии междоузельных атомов Ge в решетке, они вызывают смещение окружающих атомов от их равновесного положения, которое в нашей модели также описывается потенциалом Китинга.

II. Современное состояние проблемы

При моделировании роста Ge на Si ключевыми факторами, влияющими на процесс зарождения и формирования островков, являются геометрия кристалла и упругая деформация, что подразумевает использование атомистической модели, а это в свою очередь требует немалых вычислительных мощностей или существенного упрощения моделей. Так, относительно простой потенциал Китинга достаточно точно описывает деформации на расстояниях, больших по сравнению с постоянной решетки, при этом учитывая положения отдельных атомов. И если для двумерных моделей еще можно получить [4,5] достаточно точный результат за приемлемое время расчета, то при вводе третьего измерения количество требуемых вычислений возрастает на порядки, делая прежние подходы невозможными. Поэтому в существующих трехмерных моделях гетероэпитаксиального роста [6,7] в основном используются различные эмпирические потенциалы, которые, однако, не могут в полной мере показать влияние распределения упругой деформации во всей структуре на зарождение и рост островков.

III. Полученные результаты..

Проведено моделирование эпитаксиального роста Ge на Si(100) с учетом упругих деформаций (рис. 1). Обнаружено, что рост островков происходит на смачивающем слое, что соответствует росту по механизму Странского-Крастанова. При росте многослойных структур наблюдается эффект вертикального упорядочения островков (рис. 2). Расчет показал, что кластеры междоузельных атомов в подложке могут служить центрами зарождения островков (рис. 3).

IV. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

С помощью вычислительного кластера удалось сократить время расчета до приемлемых значений. Возможность одновременного запуска нескольких задач позволяет моделировать сразу ряд структур с различными параметрами.

V. Иллюстрации, визуализация результатов.

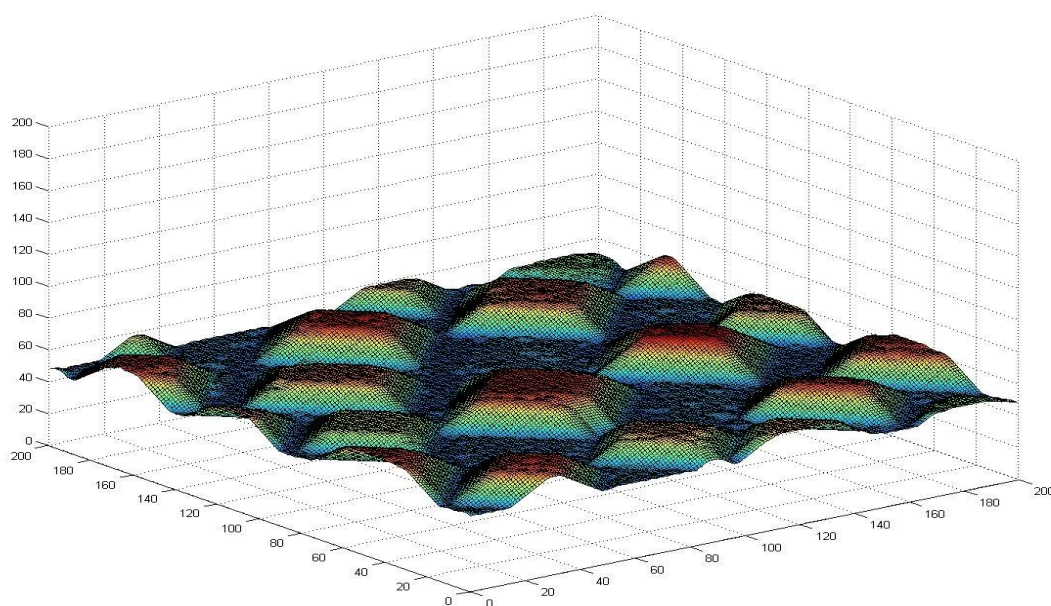


Рис. 1. Первый слой островков Ge на Si(100). Размеры подложки 200x200 монослоев ($\sim 25 \times 25$ нм). Координаты указаны в единицах монослоев (1 монослой ≈ 0.144 нм).

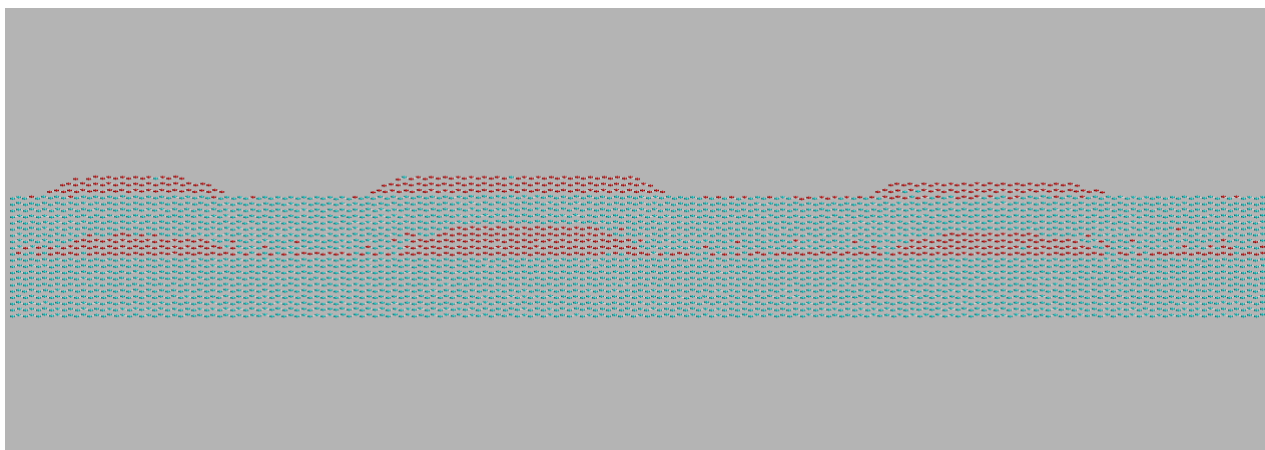


Рис. 2. Эффект вертикального упорядочения островков Ge в многослойных структурах Ge/Si(100). Поперечный срез в плоскости (110). Красным цветом обозначены атомы Ge, голубым - атомы Si.

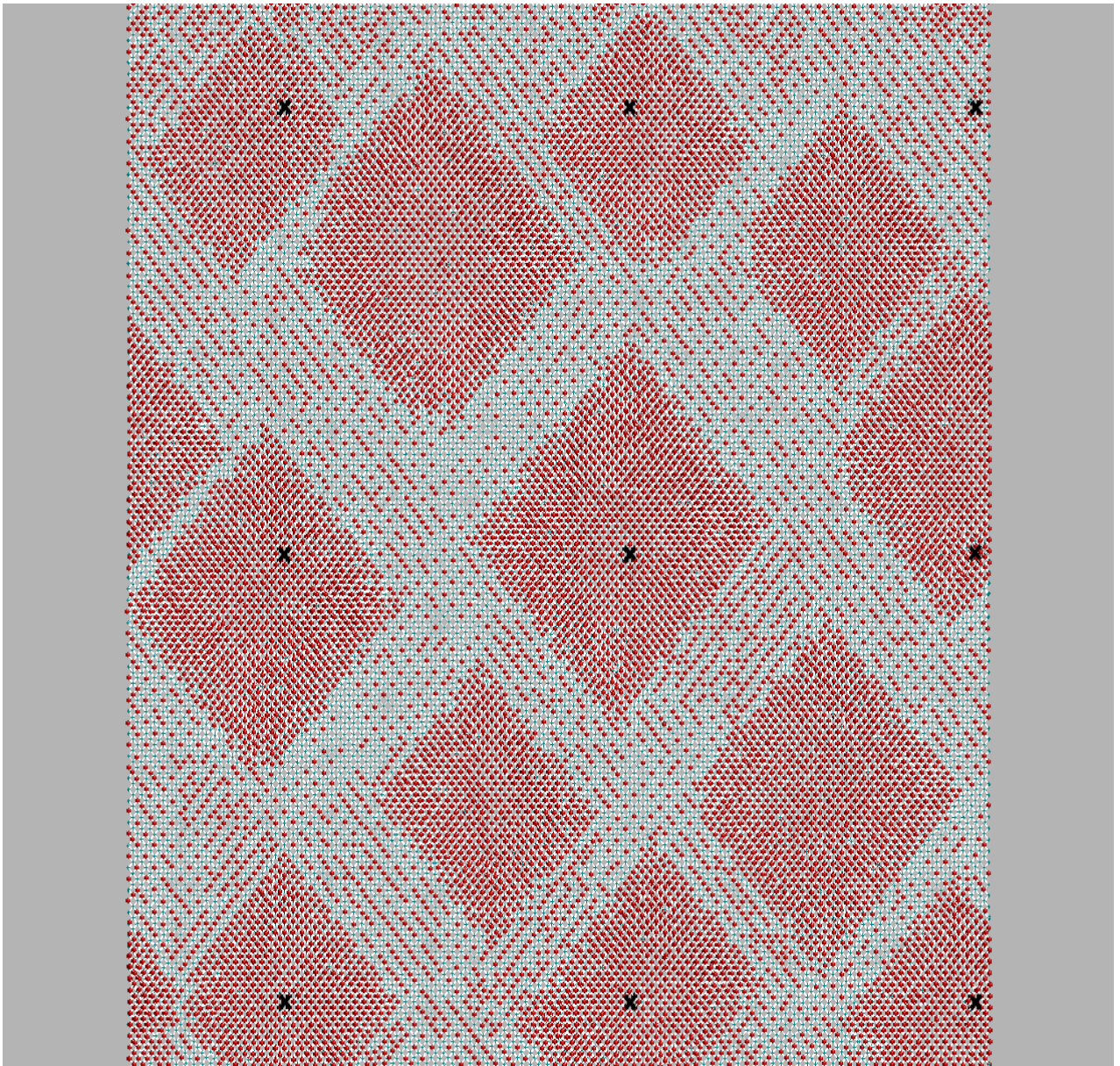


Рис. 3. Рост островков над дефектами в подложке. Крестиками обозначены кластеры междоузельных атомов. Красным цветом обозначены атомы Ge, голубым - атомы Si.

5. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

Ж. В. Смагина, П.Л. Новиков, А.В. Ненашев, С.А. Рудин, В.А. Зиновьев, С.А. Тийс, А.В. Мудрый, А.В. Двуреченский. «Процессы формирования квантовых точек в многослойных Ge/Si структурах при эпитаксии из ионно-молекулярных пучков» - X Российская конференция по физике полупроводников. Нижний Новгород, 19-23 сентября, с. 39, 2011.

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

Работа вычислительного кластера способствует получению новых результатов.

Литература

- [1] Vvedensky D. D., Clarke S. Recovery kinetics during interrupted epitaxial growth. - Surf. Sci., 1990, v. 225, p. 373-389.
- [2] Hansson G. V., Larson M. I. Initial stages of Si molecular beam epitaxy on Si(111) studied with reflection high-energy electron-diffraction intensity measurements and Monte Carlo simulation. - Surf. Sci., 1994, v. 321, p. 1255-1260.
- [3] Keating P. N. Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure. – Phys. Rev., 1966, v. 145, № 2, p. 637–645.
- [4] Смагина Ж.В., Зиновьев В.А., Ненашев А.В., Двуреченский А.В. Армбристер В.А., Тийс С.А. Самоорганизация наноструктур германия при импульсном облучении пучком низкоэнергетических ионов в процессе гетероэпитаксии структур Ge/Si(100). – ЖЭТФ, 2008, т. 133, вып. 3.
- [5] Arvin Baskaran, Jason Devita, Peter Smereka. Kinetic Monte Carlo Simulation of Strained Heteroepitaxial Growth with Intermixing. PACS 68.43.Jk · 68.65.Hb · 68.55.-a · 81.16Dn · 81.15.Aa
- [6] Д. В. Брунев, И. Г. Неизвестных, Н. Л. Шварц, З. Ш. Яновицкая. Моделирование влияния межслоевого атомного обмена на рост трехмерных эпитаксиальных островков. - Известия Академии Наук. Серия Физическая, 2001, т. 65, № 2, с. 196-200.
- [7] C. Ratsch, J.A. Venables. Nucleation theory and the early stages of thin film growth. J. Vac. Sci. Technol. A 21.5., Sep/Oct 2003, p. 96-109.