

Тема работы.

«Моделирование зарождения и роста трехмерных островков Ge на структурированной поверхности Si».

Состав коллектива.

- Рудин Сергей Алексеевич (инженер ИФП СО РАН, rudin@isp.nsc.ru);
- Ненашев Алексей Владимирович (с.н.с. ИФП СО РАН, НГУ, к.ф.-м.н.);
- Зиновьев Владимир Анатольевич (н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н.);
- Новиков Павел Леонидович (с.н.с. ИФН СО РАН, НГУ, к.ф.-м.н.);
- Смагина Жанна Викторовна (н.с. ИФН СО РАН, к.ф.-м.н.);
- Двуреченский Анатолий Васильевич (зав. лаб., д.ф.-м.н. ИФП СО РАН, НГУ, профессор).

Информация о гранте.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 18-41-540005_p_a.

Аннотация.

Разработан и реализован программно параллельный алгоритм моделирования гетероэпитаксиального роста методом Монте-Карло.

Разработан и реализован программно алгоритм расчета трехмерной Монте-Карло модели гетероэпитаксиального роста Ge на Si с использованием потенциалов Китинга и Терсоффа, учитывающий поверхностные перестройки на гранях наноструктур.

Научное содержание работы.

Постановка задачи.

Разработка и программная реализация параллельного алгоритма моделирования гетероэпитаксиального роста методом Монте-Карло.

Разработка и программная реализация алгоритма расчета трехмерной Монте-Карло модели гетероэпитаксиального роста Ge на Si с использованием потенциалов Китинга и Терсоффа, учитывающего поверхностные перестройки на гранях наноструктур.

Современное состояние проблемы.

Разработанный ранее алгоритм гетероэпитаксиального роста [1] является эффективным (по сравнению со стандартным методом учета упругой деформации в процессе роста), хорошо масштабируемым и подходящим для распараллеливания. Первое свойство вытекает из того, что в нашем алгоритме не требуется полного решения задачи теории упругости на каждом шаге Монте-Карло. Второе и третье свойства следуют из локальности всех входящих в алгоритм операций. Вычисление вероятности диффузионного прыжка требует обработки информации о состоянии лишь небольшого фрагмента кристалла, состоящего из 16 атомов или меньше (положение атома до прыжка + его 1-е и 2-е соседи). То же относится и к выбору положения атома после осаждения. Таким образом, затраты машинного времени на обработку одного элементарного события практически не зависят от размера моделируемой структуры.

Поверхность чистого кремния отличается по своей структуре от объемного кристалла. Это связано с явлением поверхностной реконструкции, затрагивающей несколько монослоев кристаллической решетки вблизи поверхности. Причиной таких изменений является наличие на поверхности большого числа атомов с оборванными связями: стремясь уменьшить поверхностную энергию, атомы смещаются относительно своих положений, замыкая свободные связи и образуя новую структуру. Дополнительный вклад в

уменьшение поверхностной энергии, связанной с реконструкцией, может оказывать значительное влияние на процессы зарождения и роста островков, меняя местоположение зародышей и огранку трехмерных островков. Таким образом, учет поверхностной реконструкции в процессе моделирования роста является важной задачей, как с теоретической, так и с практической точки зрения.

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Был разработан параллельный алгоритм моделирования гетероэпитаксиального роста методом Монте-Карло. В качестве основного подхода была выбрана геометрическая декомпозиция моделируемой области (domain decomposition) и ее распределение по параллельным процессам (ветвям). Данный подход широко применяется при численном решении задач, в частности методом Монте-Карло. Алгоритм включает в себя следующие шаги:

1. Каждая ветвь инициализирует свою часть моделируемой решетки путем заполнения первых уровней атомами кремния.
2. Каждая ветвь выполняет независимый пересчет смещений атомов в некотором подмножестве собственных узлов.
3. Ветви, являющиеся соседями в решетке, обмениваются обновленной информацией о смещениях атомов (этап синхронизации).
4. Рабочая ветвь вычисляет суммарную вероятность прыжка принадлежащих ей узлов.
5. Управляющая ветвь выполняет сбор суммарных вероятностей и вычисляет глобальную вероятность прыжка атомов в глобальной области.
6. Управляющая ветвь генерирует набор из $r \cdot ss$ случайных событий, где ss – параметр алгоритма, определяющий максимальное количество одновременных событий, а r – случайное число. Такой набор называется «черновым планом» очередного шага Монте-Карло. Каждое событие может быть либо прыжком, либо осаждением.
7. Управляющая ветвь рассылает сформированный план шага Монте-Карло рабочим ветвям.
8. Каждая рабочая ветвь получает черновик плана и осуществляет уточнение информации о событиях, затрагивающих его локальные узлы.
9. Рабочие ветви обмениваются информацией о локальных событиях с соседями по решетке. В результате каждая ветвь информирована о событиях, затрагивающих ее локальные узлы, а также локальные узлы всех ее соседей.
10. На каждой ветви выполняется очистка чистового плана от конфликтующих событий. Конфликтующими считаются события, в которых есть совпадающие узлы или узлы, имеющие общих соседей первого или второго порядка. Такое ограничение позволяет избежать ситуации, когда одновременный прыжок двух атомов нарушает допустимость конфигурации их общих соседей.

С целью учета поверхностной реконструкции был использован потенциал Терсоффа, а в качестве основы была взята разработанная ранее модель гетероэпитаксиального роста, в которой для описания взаимодействия между частицами использовался потенциал Китинга. Поскольку потенциал Китинга достаточно хорошо описывает упругие свойства идеальной алмазоподобной кристаллической решетки, а с помощью потенциала Терсоффа можно учесть реконструкцию в случае каких-либо нарушений кристаллической решетки, то гибридный алгоритм, использующий тот или иной потенциал в зависимости от текущего состояния кристаллической решетки, позволил получить преимущества упомянутых потенциалов и избежать их недостатков.

В идеальной кристаллической решетке каждый атом имеет 4 ближайших соседа и 12 вторых соседей. В исходном алгоритме для расчета упругой энергии каждого атома с помощью потенциала Китинга нужно знать положение 16 его соседей (если они есть). Для этого достаточно опросить соответствующие узлы идеальной кристаллической решетки на предмет наличия в их окрестности атома. Если же один или несколько атомов отсутствует,

то такая решетка считается не идеальной и упругую энергию следует рассчитывать с помощью потенциала Терсоффа. Однако, если в некоторой области количество атомов оказывается больше, чем в идеальной кристаллической решетке (например, при наличии междоузлия), то необходимо явно указать положение этих дополнительных атомов и рассчитывать упругую энергию с помощью потенциала Терсоффа. Аналогичным образом следует поступать в случае, когда атом оказывается значительно смещен относительно узлового положения идеальной кристаллической решетки, к которому он ранее принадлежал, освобождая тем самым этот узел для более близкого атома. Также необходимо периодически проверять соответствие атомов узлам идеальной кристаллической решетки, к которым они закреплены, на предмет выхода атомов из узловых положений, а также «особенные» атомы на предмет свободных узлов в их окрестности, и, при их наличии, менять статус «особенного» атома на узловой с очисткой соответствующих списков. Подобный подход открывает возможности для моделирования диффузии и различных структурных дефектов, в том числе и протяженных.

Полученные результаты.

Предложенный параллельный алгоритм был реализован программно и проведены тестовые расчеты на кластере Информационно-вычислительного центра Новосибирского государственного университета. Проводилось моделирование осаждения 0.1 МС Ge со скоростью 0.1 МС/с на подложку Si(100) с характерными размерами $L=192$ МС и $L=394$ МС при температурах 670 и 720 К, а также с различным максимальным количеством одновременных событий: $ss=1$ и $ss=2$. Во всех случаях наблюдался экспоненциальный рост коэффициента ускорения при увеличении количества используемых ядер (рис. 1). Замедление выполнения параллельной программы ($k < 1$) в случае использования 4 ядер обусловлено накладными расходами на обмены информацией между ветвями параллельной программы. Этим же объясняется значительное уменьшение коэффициента ускорения при увеличении температуры, поскольку при этом увеличивается подвижность атомов на поверхности подложки, а, следовательно, и количество необходимых операций обмена информацией между соседними областями, принадлежащими разным ветвям.

Данный гибридный алгоритм для учета поверхностной реконструкции был реализован программно и проведены тестовые расчеты на ресурсах распределенной вычислительной системы Информационно-вычислительного центра Новосибирского государственного университета. В качестве исходной структуры использовалась подложка Si (100) размерами 54x54x3 нм с нанесенным на нее смачивающим слоем Ge, поверх которого расположен nanoостровок Ge размерами 32x32x3 нм. Проводилось моделирование термического отжига при 450°C. Обнаружено, что потенциальная энергия, приходящаяся на каждый атом, для димеров на поверхности островка практически совпадает с энергией димеров на поверхности смачивающего слоя. Обнаружено, что на каждой грани nanoостровка на соседних террасах димеры повернуты на 90° в плоскости (100), образуя поверхность (105), являющейся характерным признаком hut-кластеров Ge в экспериментах.

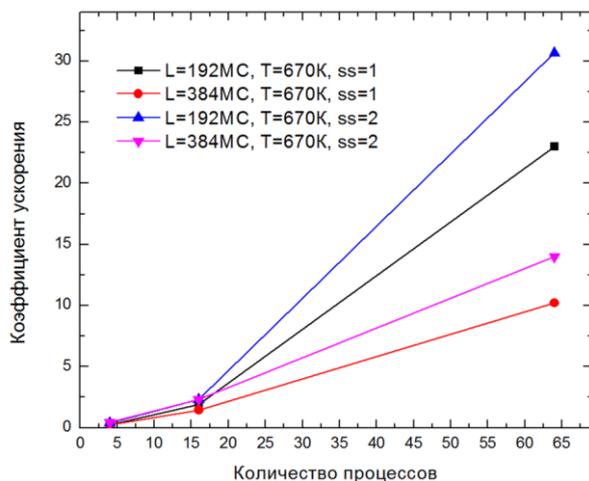
Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Использование высокопроизводительного вычислительного кластера при наличии соответствующих алгоритмов позволяет многократно ускорить процесс выполнения расчетов, а также увеличить размеры моделируемой системы.

Использование в расчетах достаточно сложных потенциалов взаимодействия частиц требует значительного машинного времени. Использование кластера позволяет проводить одновременно десятки модельных экспериментов, значительно сокращая время исследований.

Иллюстрации.

а)



б)

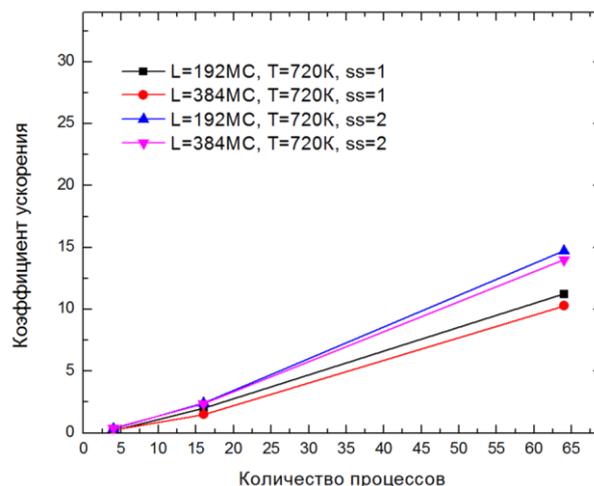


Рис. 1. Зависимости коэффициента ускорения параллельной программы от числа задействованных для расчета процессов и количества моделируемых событий каждым процессом ($ss=1$ или $ss=2$) за время между обходами информации с управляющим процессом. Моделировалось осаждение Ge со скоростью 0.1 МС/с на поверхность подложки Si (100) размером 192x192x40 МС и 384x384x40 МС при температуре: а) 670 К; б) 720 К.

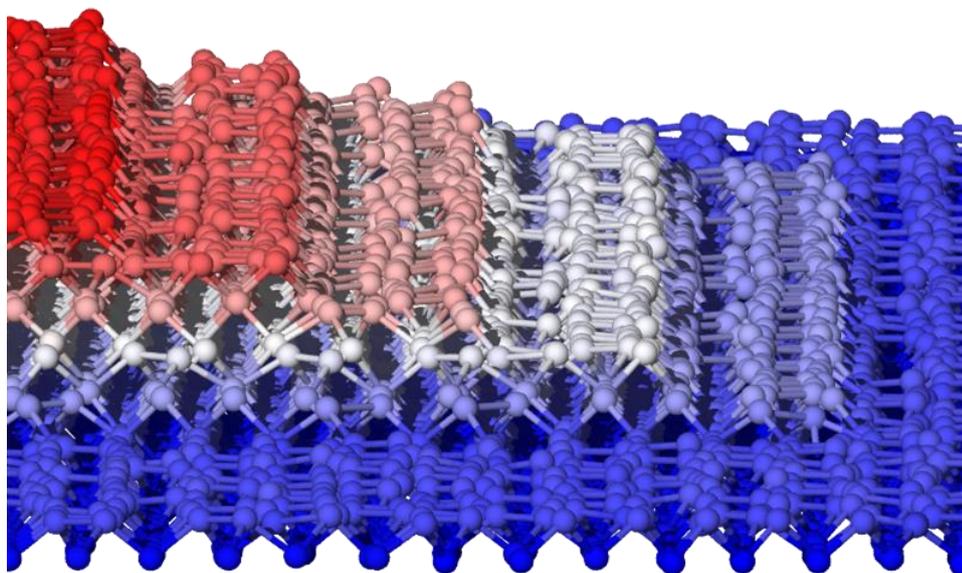


Рис. 2. Фрагмент грани островка Ge и ближайшей поверхности подложки Si(100), полученный в результате моделирования термического отжига при 450°C структуры, представляющей собой островок Ge на подложке Si(100). Цветом обозначены монослои структуры в зависимости от высоты рельефа. Каждая грань состоит из набора террас, образованных отдельными димерами.

Литература

[1] С.А. Рудин, В.А. Зиновьев, А.В. Ненашев, А.Ю. Поляков, Ж.В. Смагина, А.В. Двуреченский, «Трехмерная модель гетероэпитаксиального роста германия на кремнии». Автометрия, 49(5), 50-56 (2013).