

Тема работы.

«Исследование зарождения и роста трехмерных островков Ge на структурированной поверхности Si(100)».

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 (грант №19-42-540002-p_a) и Госзадания №0306-2019-0019.

Аннотация.

Проведено теоретическое исследование роста упорядоченных групп GeSi наноструктур (квантовых точек) на структурированных подложках Si(100), представляющих собой квадратную решетку из ямок округлой формы с различным углом наклона боковых стенок и периодом между ямками. Результаты моделирования показали, что в зависимости от периода между ямками меняется характер распределения островков: от полного их отсутствия для малых периодов до зарождения островков как вблизи ямок, так и между ними для больших периодов. С увеличением угла наклона боковых стенок ямки зарождение островков вблизи ямок происходит на более поздних стадиях осаждения Ge.

Научное содержание работы.

Постановка задачи.

Экспериментально было обнаружено, что при осаждении Ge на структурированную поверхность Si в виде массива ямок округлой формы зарождение наноструктур может происходить как внутри ямок, так и по их периметру, а также на гладкой поверхности между ямками. Предлагается, с помощью разработанной ранее трехмерной модели гетероэпитаксиального роста Ge на Si(100), провести моделирование осаждения Ge на структурированную поверхность Si(100) в виде массива ямок округлой формы и исследовать зависимость расположения островков от угла наклона боковых стенок ямки и периода между ямками.

Современное состояние проблемы.

Рост Ge/Si-структур на поверхности с предварительно созданными местами для зарождения трехмерных островков включает в себя сложные механизмы, не принимаемые во внимание в упрощенной модели роста по механизму Странского–Крастанова. Эти механизмы включают в себя зависимость релаксации механических напряжений от геометрической формы ямок, поверхностную анизотропию, различные реконструкции на стенках ямок. В литературе имеется ряд работ, посвященных зарождению и росту трехмерных наноструктур Ge на структурированных подложках Si. В частности, исследовались зависимости положения островков от угла наклона боковых стенок ямок [1] и зарождение групп островков, как в ямке, так и по ее периметру [2]. В нашей предыдущей работе [3] было показано, что зарождение островков внутри и вблизи ямок определяется формой дна ямки: островки всегда зарождаются на дне ямки с V-образным дном и вокруг ямки с U-образным дном.

Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Для выявления механизмов зарождения трехмерных островков Ge на структурированной поверхности Si было проведено моделирование процесса роста методом Монте-Карло (МК). Использовалась разработанная ранее модель гетероэпитаксии [4]. В основе модели лежит трехмерная алмазоподобная кристаллическая решетка. Каждый узел решетки может быть занят атомами Si, Ge или быть пустым. Для учета упругой деформации каждому атому присвоена дополнительная характеристика, меняющаяся во времени, — вектор смещения относительно радиус-вектора идеальной кристаллической решетки Si. Рост моделируется как последовательность элементарных событий осаждения и диффузионных прыжков, случайно выбираемых согласно их вероятностям. Алгоритм содержит три типа событий: добавление нового атома (осаждение), диффузионный прыжок атома по поверхности (перенос атома из одного узлового положения в другое) и случайные смещения атома вблизи его равновесного положения (новый тип событий, предложенный в модели, который позволяет избежать вычисления полной упругой энергии всей системы). Вероятность осаждения определяется требуемой скоростью роста. Вероятность диффузионного прыжка выбирается таким образом, чтобы удовлетворять двум условиям: 1) вероятность прыжка зависит только от положений ближайших соседей прыгающего атома (в пределах второй координационной сферы); 2) вероятности прямого и обратного прыжков удовлетворяют принципу детального равновесия. Энергия активации диффузионного перехода в нашей модели содержит отрицательное слагаемое, пропорциональное числу межатомных связей и числу пар вторых соседей, и положительное слагаемое, равное упругой энергии, выраженной в форме потенциала Китинга. Величины случайных смещений подчиняются распределению Больцмана.

В качестве модельной структуры использовался участок кристалла Si размерами от $100 \times 100 \times 60$ МС до $200 \times 200 \times 100$ МС с периодическими граничными условиями. Поверхность подложки имела ориентацию (100). На подложке располагалась ямка с V- или U-образным профилем. Диаметр ямок составлял 100 МС.

Проводилось несколько серий экспериментов с различными параметрами исходных структур. Для V-образного профиля ямки изменялся угол наклона боковых стенок от 30° до 60° . Для U-образного профиля угол наклона боковых стенок так же изменялся от 30° до 60° , моделирование при этом проводилось для различных глубин ямок от 20 до 50 МС. Диаметр ямок во всех случаях оставался неизменным. Также менялся период между ямками от 100 до 200 МС для всех вышеописанных типов модельных структур.

Моделирование осаждения Ge проводилось при температуре 450°C со скоростью 0.1 МС/с. Температура моделирования МК была выбрана более низкой, чем в эксперименте, для того, чтобы обеспечить соответствующее экспериментальным условиям поведение поверхностной атомной диффузии в системе с уменьшенными геометрическими размерами ямок. Количество осажденного Ge составляло от 3.5 до 5 МС.

Полученные результаты.

Показано, что при периодах 100 – 125 МС (рис. 1, а, рис. 2, а) зарождение островков не происходит независимо от формы дна ямки, поскольку весь поступающий материал уходит на огранку ямок. С увеличением периода до 150 МС положение островков определяется формой дна ямки: в случае V-образного дна островки зарождаются по центру ямок, в случае U-образного – по их периметру. Причем чем больше угол наклона боковых стенок ямки (и, соответственно, глубина ямки), тем большего размера зарождаются островки вблизи ямки (рис. 1, б, рис. 2, б). С увеличением периода между ямками до 200 МС материала между островками становится достаточно для зарождения дополнительных островков вокруг ямок V-образной формы (рис. 1, в). В случае ямок с большим углом наклона боковых стенок большой островок по центру ямки стягивает на себя весь материал в области ямки и препятствует зарождению островков по ее периметру (рис. 2, в).

Таким образом, формирование островков вблизи ямок и между ними определяется не только формой и размером самих ямок, но и периодом между ямками.

Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Исследование зависимости расположения островков от какого-либо параметра подразумевает проведение большого количества модельных экспериментов. В нашем случае на один эксперимент может уходить от одного до нескольких месяцев машинного времени. Использование кластера позволяет проводить одновременно десятки модельных экспериментов, значительно сокращая время исследований.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

Ж.В. Смагина, В.А. Зиновьев, М.В. Степихова, С.А. Рудин, Е.Е. Родякина, А.В. Новиков, А.В. Двуреченский, Упорядоченные группы Ge(Si) квантовых точек на КНИ-подложках, встроенные в фотонные кристаллы, Международный форум Микроэлектроника-2020, XIII Международная конференция "Кремний-2020", Республика Крым, г. Ялта, пгт Гурзуф, 21-25 сентября, 164-166 (2020). DOI: 10.29003/m1601.Silicon-2020/205-208.

Zh.V. Smagina, V.A. Zinoviev, S.A. Rudin, E.E. Rodyakina, P.L. Novikov, A.V. Nenashev, V.A. Armbrister, A.V. Dvurechenskii, Self-organization of Ge(Si) nanoisland groups on pit-patterned Si(100) substrates, 28th International symposium Nanostructures: Physics and Technology, Minsk, Belarus, September 28-October 2, 113-114 (2020). ISBN 978-5-93634-066-6.

Иллюстрации, визуализация результатов.

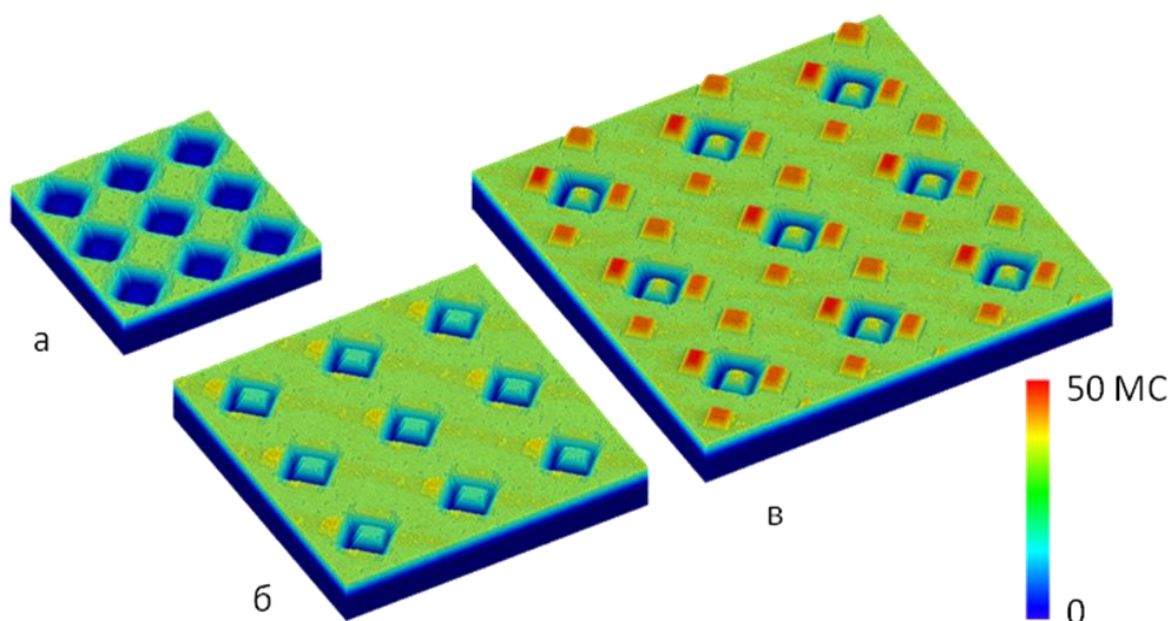


Рис. 1. Модельная Ge/Si структура. Различное положение островков в зависимости от расстояния между ямками: а – 100 MC, б – 150 MC, в – 200 MC. Угол наклона боковых стенок 45°. Скорость осаждения Ge 0.1 MC/с, температура 720 К, осаждено 5 MC.

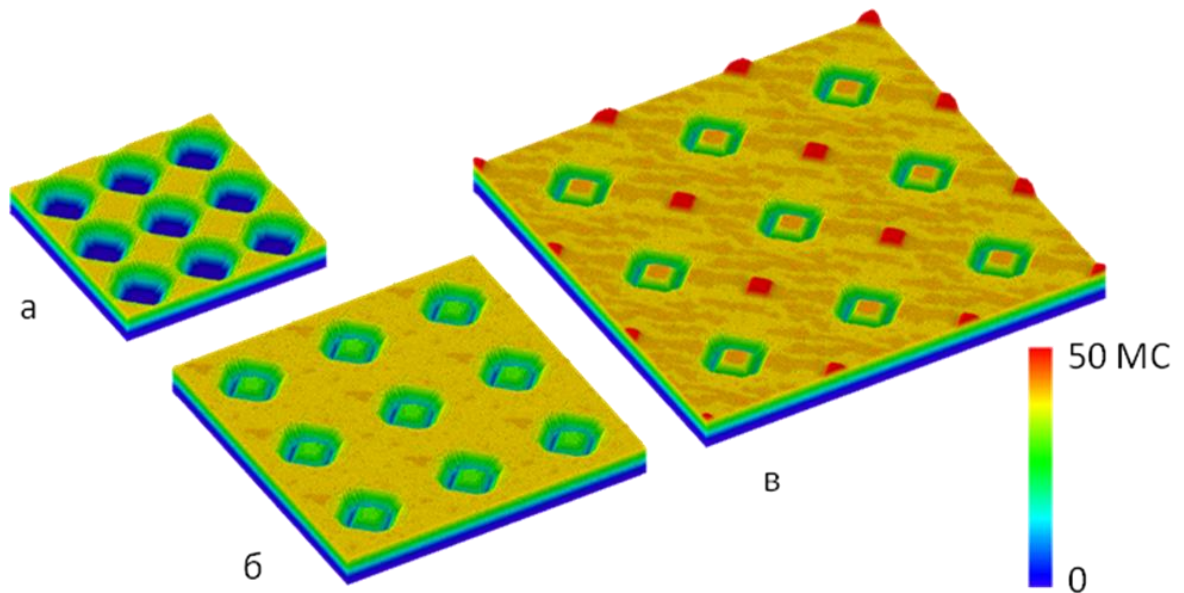


Рис. 2. Модельная Ge/Si структура. Различное положение островков в зависимости от расстояния между ямками: а – 100 МС, б – 150 МС, в – 200 МС. Угол наклона боковых стенок 54° . Скорость осаждения Ge 0.1 МС/с, температура 720 К, осаждено 5 МС.

Литература

- [1] G. Vastola, M. Grydlik, M. Brehm, T. Fromherz, G. Bauer, F. Boioli, L. Miglio, and F. Montalenti, *Phys. Rev. B*, 84, 155415 (2011).
- [2] Z. Zhong, O. G. Schmidt, G. Bauer, *Appl. Phys. Lett.* 87, 133111 (2005).
- [3] Zh. V. Smagina, V. A. Zinovyev, S. A. Rudin, P. L. Novikov, E. E. Rodyakina, and A.V. Dvurechenskii, *J. Appl. Phys.* 123, 165302 (2018).
- [4] С.А. Рудин, В.А. Зиновьев, А.В. Ненашев, А.Ю. Поляков, Ж.В. Смагина, А.В. Двуреченский, «Трёхмерная модель гетероэпитаксиального роста германия на кремнии». *Автометрия*, 49(5), 50-56 (2013).