

## **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 (с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н.);
- Новиков Павел Леонидович (с.н.с. ИФП СО РАН, НГУ, к.ф.-м.н.);
- Смагина Жанна Викторовна (с.н.с. ИФП 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 Госзадания FWGW-2021-0011.

## **Аннотация.**

Методом Монте-Карло был исследован процесс зарождения и роста упорядоченных групп nanoостровков Ge на подложках Si (100) со встроенным источником упругих деформаций в форме GeSi диска, закрытого слоем Si. В зависимости от толщины закрывающего слоя Si меняются параметры Ge островков и групп, состоящих из них: чем толще закрывающий слой Si, тем меньше островки Ge, меньше их количество в группе и меньше расстояние между ними. Механизм образования таких конфигураций и их изменение в зависимости от толщины закрывающего слоя Si объясняется с точки зрения распределения упругой деформации.

## **Научное содержание работы.**

### **Постановка задачи.**

Предлагается, с помощью разработанной ранее трехмерной модели гетероэпитаксиального роста Ge на Si [1], провести моделирование осаждения Ge на структурированную поверхность Si (100) со встроенным источником упругих деформаций в форме Ge диска, закрытого слоем Si различной толщины, и выявить механизм, отвечающий за экспериментально наблюдаемые изменения морфологии островков Ge и их групп в зависимости от толщины закрывающего слоя Si.

### **Современное состояние проблемы.**

Гетероэпитаксия напряженных слоев является мощным инструментом для создания самоорганизующихся полупроводниковых наноструктур. Один из эффективных способов создания таких структур - формирование трехмерных nanoостровков при росте в режиме Странского-Крастанова. Образование трехмерных nanoостровков обусловлено эффективной релаксацией упругих напряжений внутри островков, возникающих вследствие бокового растяжения или

сжатия в направлении боковых граней. Минусом такого подхода является неоднородность в распределении островков по размерам и положению в плоскости роста.

Рост многослойных структур с трехмерными квантовыми точками оказался наиболее эффективным методом контроля вертикального и латерального положения трехмерных наноструктур. Таким способом были получены молекулы из квантовых точек, которые представляют практический интерес для приборов для квантовых вычислений. Ge островок, захороненный под закрывающим слоем Si, может создавать на его поверхности места для преимущественного зарождения сразу нескольких Ge наноструктур. Такие группы островков обладают уникальными свойствами и могут стать кандидатами для использования в новых устройствах, например, квантовых клеточных автоматах. Известно, что ключевой механизм зарождения островков связан с упругими деформациями, возникающими на поверхности закрывающего слоя. Однако, детальное распределение поля деформаций зависит от различных факторов, включая размер и форму захороненного слоя Ge, толщину закрывающего слоя Si, условий роста и других. В результате, при использовании одинаковых методик, могут быть получены различные конфигурации из квантовых точек.

Экспериментально было обнаружено, что при осаждении Ge на структурированную поверхность Si (100) со встроенным источником упругих деформаций в форме GeSi диска, закрытого слоем Si, зарождаются группы островков Ge, расположенных по 4 направлениям [001] и [010] относительно центра диска [2]. Данный эффект объяснялся анизотропным характером распределения энергии упругой деформации в системе Ge/Si на поверхности захороненного диска Ge. Также было обнаружено, что с увеличением толщины закрывающего Ge диск слоя Si уменьшается размер островков Ge, островков в группе становится меньше и они располагаются ближе друг к другу.

### **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 [1]. 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  $200 \times 200 \times 20$  МС с периодическими граничными условиями. Поверхность подложки имела ориентацию (100). На подложке располагался Ge диск в форме усеченного конуса с диаметром основания 160 МС, высотой 8 МС и углом наклона боковых стенок  $30^\circ$  (рис. 1, а). Затем этот островок закрывался Si таким образом, чтобы над его поверхностью было от 2 до 56 МС Si (рис. 1, б). Получившаяся структура использовалась в качестве подложки для моделирования осаждения Ge.

Моделирование осаждения Ge проводилось при температуре  $450^\circ\text{C}$  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. Количество осажденного Ge составляло до 5 МС.

### **Полученные результаты.**

Получено распределение плотности упругой энергии, приходящейся на атом, в смачивающем слое Ge над захороненным Ge диском для различной толщины закрывающего слоя Si (рис. 2). Показано, что положения минимумов упругой энергии зависят от толщины закрывающего слоя Si. Наиболее удаленные от центра Ge диска минимумы соответствуют случаю с минимальной толщиной закрывающего слоя Si. С увеличением толщины слоя Si минимумы сближаются к центру Ge диска. Данный эффект наблюдается до толщины 24 МС. Дальнейшее увеличение толщины слоя Si приводит к перекрытию минимумов в результате чего образуется один широкий минимум по центру Ge диска. Области с минимумами энергии деформации являются центрами для преимущественного зарождения трехмерных островков в процессе осаждения Ge.

Результаты моделирования осаждения Ge на структурированную поверхность Si (100) со встроенным источником упругих деформаций в форме Ge диска, закрытого слоем Si различной толщины, представлены на рис. 3. В случае тонкого слоя Si толщиной 2 МС Ge островки начинают зарождаться в 4 направлениях относительно центра Ge диска, которые характеризуются минимумом энергии деформации (рис. 3, а). Эти направления обусловлены упругой анизотропией Ge/Si гетероэпитаксиальной системы. Дальнейшее увеличение количества осажденного Ge приводит к увеличению уже зародившихся островков, а затем и к появлению новых островков за пределами Ge диска. В случае большой толщины закрывающего слоя Si (40 МС) островки Ge располагаются ближе к центру Ge

диска (рис. 3, б), что коррелирует с распределением деформации на поверхности. При этом уменьшается количество островков Ge в группе и их размер, а сами островки располагаются ближе к центру Ge диска, что наблюдается и в эксперименте.

Таким образом, с помощью Монте-Карло моделирования показано, что зарождение групп квантовых точек определяется процессами релаксации упругих напряжений в структуре и на ее поверхности. Предложен механизм, объясняющий экспериментально наблюдаемые изменения морфологии островков Ge и их групп в зависимости от толщины закрывающего слоя Si.

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.**

S.A. Rudin, V.A. Zinovyev, Zh.V. Smagina, P.L. Novikov, A.A. Shklyayev, and A.V. Dvurechenskii. «Tuning the configuration of quantum dot molecules grown on stacked multilayers of heteroepitaxial islands». – J. Appl. Phys., 131, 035302 (2022).

## Иллюстрации, визуализация результатов.

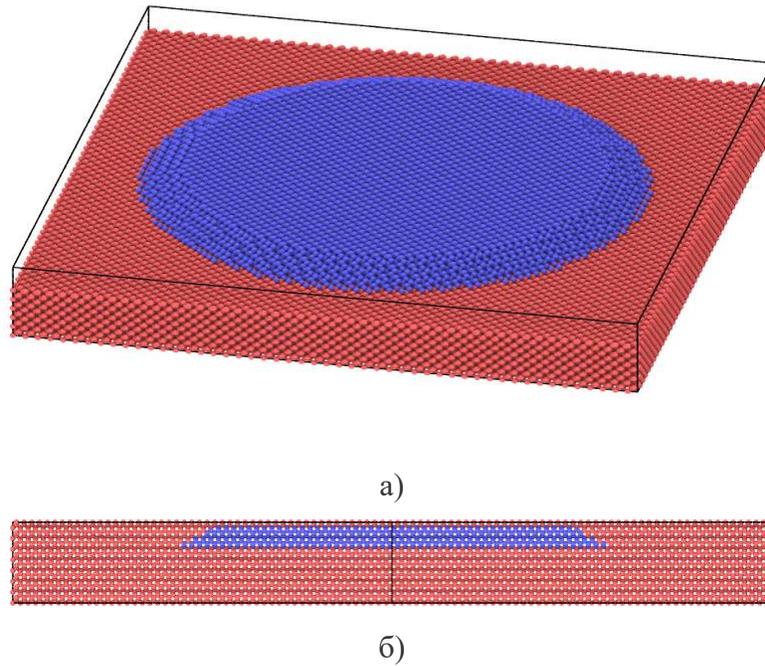


Рис. 1. Модельная Ge/Si структура до начала осаждения Ge: а) - диск Ge на поверхности подложки Si (100); б) - поперечное сечение подложки с захороненным диском Ge закрытым 2 слоями Si.

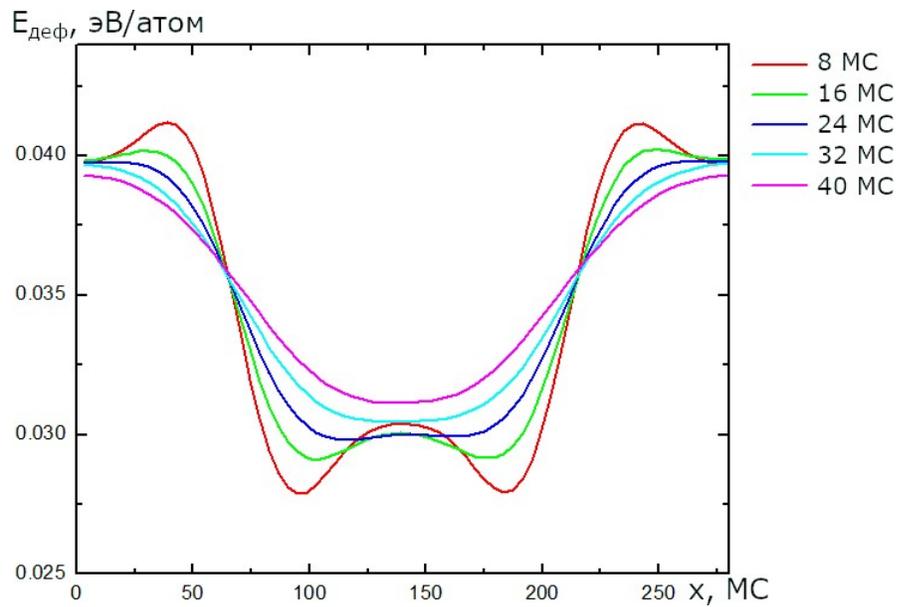


Рис. 2. Плотность упругой энергии, приходящейся на атом, в смачивающем слое Ge над захороненным Ge диском в зависимости от толщины закрывающего его слоя Si (моделирование). Толщина слоя Si обозначена цветом линий.

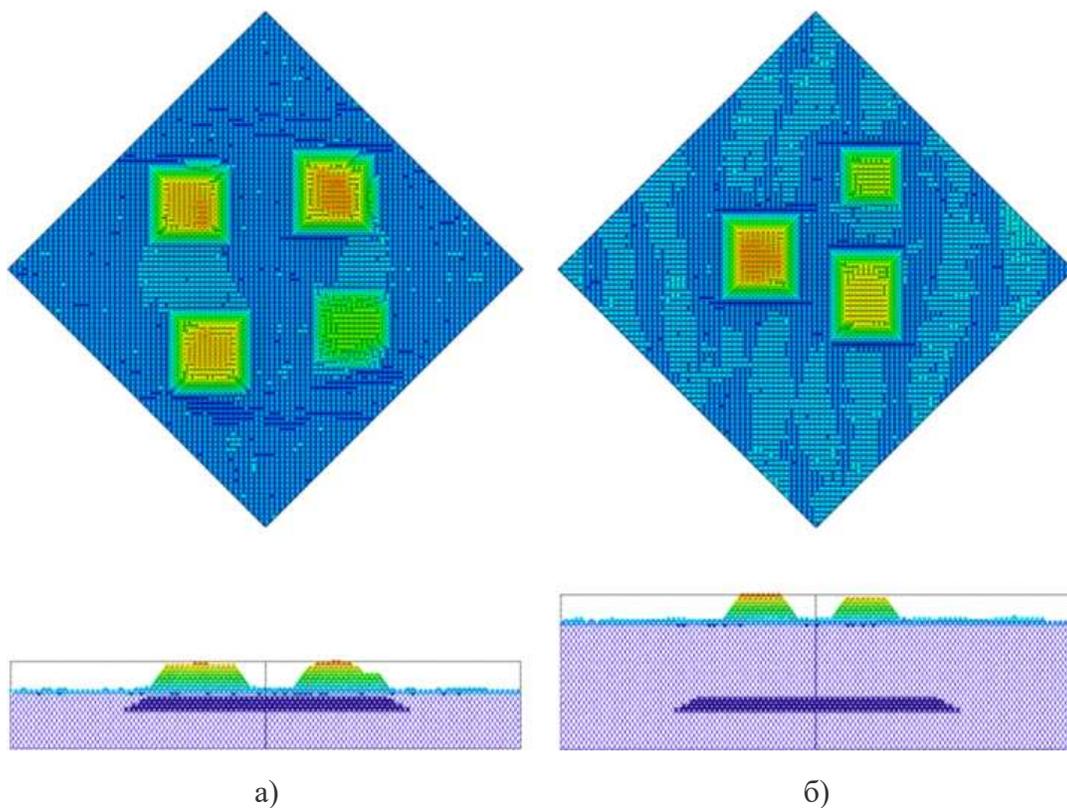


Рис. 3. Вид сверху и поперечное сечение структур после моделирования осаждения Ge на поверхность подложки Si (100) с захороненным Ge диском. Толщина закрывающего слоя Si: а) - 2 МС; б) - 40 МС. Скорость осаждения Ge 0.1 МС/с, температура 720 К, осаждено 4 МС. Цветом обозначена высота рельефа.

### Литература

- [1] П.Л. Новиков, А.В. Ненашев, С.А. Рудин, А.С. Поляков, А.В. Двуреченский. «Зарождение и рост квантовых точек Ge на Si – моделирование с использованием высокоэффективных алгоритмов». – Журнал «Российские нанотехнологии», т. 10, №3-4, с. 26-34 (2015).
- [2] V. Zinovyev, A. Dvurechenskii, P. Kuchinskaya, and V. Armbrister, Phys. Rev. Lett. 111, 265501 (2013).