

Тема работы.

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

Состав коллектива.

- Рудин Сергей Алексеевич (м.н.с ИФП СО РАН, rudin@isp.nsc.ru);
- 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 РФФИ (грант 21-72-20184).

Аннотация.

С помощью Монте-Карло моделирования исследованы процессы зарождения и последующего эпитаксиального роста групп трехмерных наноструктур Ge, формируемых на структурированной поверхности Si(100) в виде массива ямок воронкообразной формы в узлах квадратной решетки. Количество и расположение наноструктур Ge зависит от периода между ямками и может быть объяснено с точки зрения конкуренции процесса зарождения островков Ge под действием упругих напряжений и потоком материала в ямки, которые служат стоками для атомов Ge. В случае близко расположенных ямок зарождение островков не наблюдается, поскольку увеличивается эффективность стока в ямки.

Научное содержание работы.

Постановка задачи.

Предлагается, с помощью разработанной ранее трехмерной модели гетероэпитаксиального роста Ge на Si(100) [1], провести моделирование осаждения Ge на структурированную поверхность Si(100) в виде массива ямок воронкообразной формы в узлах квадратной решетки и исследовать зависимость морфологии растущего слоя Ge от периода между ямками.

Современное состояние проблемы.

Одним из подходов повышения эффективности излучательной рекомбинации носителей заряда в Ge/Si структурах является встраивание квантовых точек (КТ) в микрорезонаторы на основе фотонных кристаллов [2, 3]. Фотонные кристаллы представляют собой набор упорядоченных в пространстве глубоких ямок. При осаждении Ge на подобную поверхность Si наблюдается упорядочение островков в плоскости роста и уменьшение разброса наноструктур по размерам по сравнению с гетероэпитаксией на гладкой поверхности [4]. Однако механизм пространственной самоорганизации КТ в процессе роста на таких подложках остается недостаточно изученным.

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 от $100 \times 100 \times 100$ до $200 \times 200 \times 100$ МС с периодическими граничными условиями. Поверхность подложки имела ориентацию (100). Затем в подложке создавались ямки воронкообразной формы с плавным выходом на поверхность. Ямки располагались в узлах квадратной решетки с различным периодом от 13.5 до 27 нм. Получившаяся структура использовалась в качестве подложки для моделирования осаждения Ge.

Моделирование осаждения Ge проводилось при температурах от 400 до 450 °С 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 15 МС.

Полученные результаты.

Моделирование методом Монте-Карло позволило установить, что места зарождения трехмерных nanoостровков Ge определяются балансом между потоком адатомов Ge в ямки и их диффузией по поверхности. В случае близкого расположения ямок (16.3 нм) потребовалось осадить ≈ 8 МС Ge, чтобы зародились трехмерные островки (рис. 1, а). С увеличением расстояния между ямками (20.6 и 23.9 нм) для зарождения nanoостровков достаточно ≈ 5 МС Ge (рис. 1, б и в соответственно). В первом случае островки расположены на максимальном удалении от ямок; во втором – образуется больше островков на одну ямку и в третьем – образуется группа островков. Таким образом, ямки являются стоком для поступающего материала и «сила» этого стока определяет места зарождения nanoостровков. С помощью моделирования показано, что на стенках ямки образуются области с минимальной упругой энергией, препятствующие потоку адатомов как в ямки, так и из них (рис. 2).

Результаты моделирования показывают, что КТ зарождаются в областях минимальной упругой энергии по внешнему периметру ямок. Эволюция поля упругой деформации обусловлена изменением огранки поверхности в области ямок в процессе роста, что способствует накоплению Ge по периметру ямок. Этот процесс конкурирует с процессом миграции Ge вглубь ямки. Эффективность такого стока увеличивается с увеличением плотности ямок. Поэтому в случае близкорасположенных ямок зарождения островков не наблюдается.

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.V. Nenashev, K.V. Pavsky. «Groups of Ge nanoislands grown outside pits on pit-patterned Si substrates». - Journal of Crystal Growth, v. 593, p. 126763 (2022).

Рудин С.А., Зиновьев В.А., Смагина Ж.В., Новиков П.Л., Ненашев А.В., Павский К.В., Двуреченский А.В. «Зарождение и рост квантовых точек Ge на структурированных подложках Si». - XV Российская конференция по физике полупроводников, с. 87 (2022).

Иллюстрации, визуализация результатов.

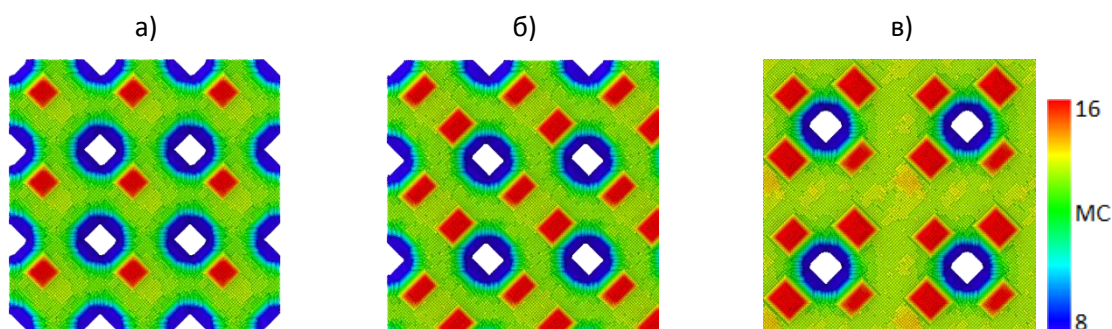


Рис. 1. Результат моделирования осаждения Ge на поверхность подложки Si (100), содержащей воронкообразные ямки. Период между ямками: а) 15.2 нм; б) 16.8 нм; в) 23.9 нм. Осаждено Ge: а) 13.5 МС; б) 10 МС; в) 6.5 МС. Скорость осаждения Ge 0.1 МС/с, температура 707 К. Цветом обозначена высота рельефа.

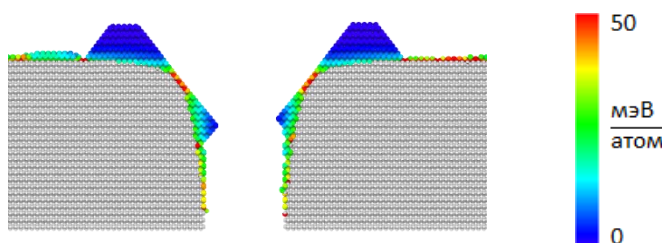


Рис. 2. Упругая энергия в Ge, приходящаяся на атом (поперечное сечение ямки). Период между ямками 23.9 нм, осаждено 6.5 МС Ge со скоростью 0.1 МС/с при температуре 707 К. Цветом обозначена величина упругой энергии, серым – атомы Si.

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] M. Schatz, F. Hackl, M. Glaser et al. // ACS Photonics, v. 4 (3), 665 (2017).
- [3] M.V. Stepikhova, A.V. Novikov, A.N. Yablonskiy et al. // Semicond. Sci. Technol., v. 34, 024003 (2019).
- [4] M. Grydlik, G. Langer, T. Fromherz, F. Schäffler, and M. Brehm. // Nanotechnology, 24, 105601 (2013).