

1. Тема работы: “Механизмы диффузии Si и Ge на поверхностях (111) кремния и германия, покрытых сурфактантами”.

2. Состав коллектива: Жачук Руслан Анатольевич, ИФП СО РАН, с. н. с., к.ф.-м.н.

3. Информация о гранте:

Название: “Рост, структура и свойства функциональных германий-кремниевых наноструктур на чистых и покрытых сурфактантами поверхностях Si(111)”

Номер: РФФИ N14-02-00181

Руководитель: Жачук Руслан Анатольевич, ИФП СО РАН

Срок действия: 2014-2016

4. Научное содержание работы.

4.1. Аннотация к работе.

Теоретически, на основе расчетов из первых принципов, исследована диффузия атомов Si и Ge на поверхностях (111) кремния и германия, покрытых сурфактантами (Bi, Sb). На основе теории функционала плотности (ТФП) были рассчитаны карты потенциальной энергии для адсорбции атомов Si и Ge на поверхностях Si(111) и Ge(111) со структурой $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$, формируемой тримерами сурфактантов. Определены главные пути диффузии и соответствующие им энергетические барьеры. Показано, что энергетический барьер для диффузии адатомов через тримеры (путем разрыва связей в тримере), образуемые сурфактантами Bi и Sb, близок к величине барьера для диффузии адатомов в обход тримеров. Было найдено также положение адатома с низкой энергией адсорбции на поверхности, которое может служить местом зарождения атомного кластера. Полученные результаты позволяют по-новому взглянуть на эпитаксию на поверхностях Si(111)-Bi(Sb) и Ge(111)-Bi(Sb), представляющую большой практический интерес.

4.2. Современное состояние проблемы.

Известно, что из-за большой разницы в параметрах кристаллических решеток Ge и Si (около 4%) трудно вырастить эпитаксиальную сплошную пленку Ge/Si: после формирования нескольких эпитаксиальных сплошных слоев, происходит спонтанное формирование островков. Использование сурфактантов позволяет изменять свойства поверхности таким образом, что становится возможным выращивать относительно толстые упруго напряженные эпитаксиальные слои Ge на подложке Si(111). Роль сурфактантов при этом двоякая: всплывая на поверхность слоёв во время роста, они подавляют как перемешивание атомов Ge и Si, так и формирование многослойных островков.

Одними из наиболее часто используемых сурфактантов при эпитаксии Si/Si и Ge/Si являются Sb и Bi. Атомы Sb и Bi на поверхностях Si(111) и Ge(111) образуют тримеры с центром в положениях T_4 поверхности (111).

Для контролируемого роста эпитаксиальных слоев и формирования нанокластеров требуется глубокое понимание механизмов миграции атомов Si и Ge по поверхностям Si(111) и Ge(111), покрытых сурфактантами. В литературе, однако, отсутствуют данные систематического изучения диффузии атомов Si и Ge по этим поверхностям.

4.3.-4.4 Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы; Полученные результаты.

Работа была выполнена с помощью расчетов на основе ТФП с использованием программного пакета Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta>). Была рассчитана карта потенциальной энергии для адсорбции атомов Si и Ge на поверхностях Si(111)-Bi(Sb) и Ge(111)-Bi(Sb) и определены основные пути миграции атомов и соответствующие им энергии активации (рис. 1).

Установлено, что наиболее глубокие минимумы энергии для адатомов расположены в местах H_3 и T_4 (между тримерами сурфактанта) поверхности (111). Установлены два механизма миграции адатомов по поверхностям Si(111) и Ge(111), покрытым сурфактантами:

- 1) вокруг тримеров сурфактанта, по пути $T_4 \rightarrow H_3 \dots$
- 2) непосредственно через тример сурфактанта, путем разрыва связей в нем, по пути $T_4 \rightarrow H_3 \rightarrow T'_4 \dots$

Показано, что энергия активации миграции атомов по второму механизму во многих случаях лишь незначительно (≈ 0.1 эВ) больше, чем при миграции по первому механизму. При увеличении напряжения сжатия слоев Ge, например, при росте Ge/Si(111), разница в величине энергии активации для этих двух механизмов снижается, так что общий вклад второго механизма в диффузию адатомов увеличивается.

4.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

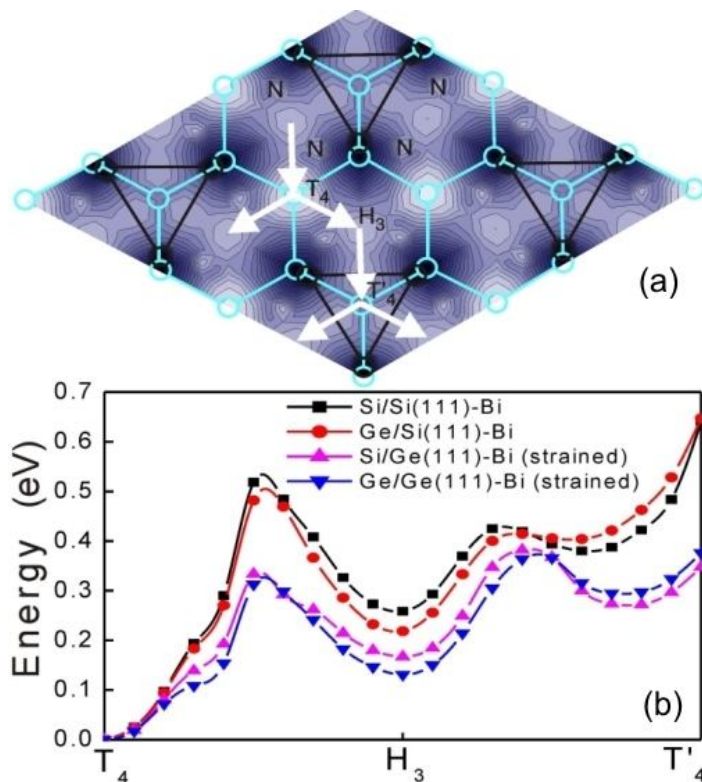


Рис. 1. Рис. (a) Карта потенциальной энергии атома Si на поверхности Si(111)- $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Bi (покрытие Bi составляет 1 монослой). Черные круги, соединенные треугольниками, представляют тримеры Bi. Бирюзовые круги и соединяющие их лучи представляют подложку Si. Показаны высокосимметричные места адсорбции T_4 и H_3 . T'_4 обозначает место адсорбции T_4 , занятое тримером сурфактанта. Стрелки указывают пути миграции атомов Si и Ge с наименьшими диффузионными барьерами. N обозначает место, с которого может начинаться зарождение кластера. Контуры проведены с интервалом 0.1 эВ. Светлые (темные) области соответствуют минимумам (максимумам) энергии. (b) Профили карты потенциальной энергии вдоль пути $T_4 \rightarrow H_3 \rightarrow T'_4$ (как указано стрелками на рис. (a)) для адатомов Si и Ge на поверхностях Si(111)-Bi и упруго напряженной Ge(111)-Bi.

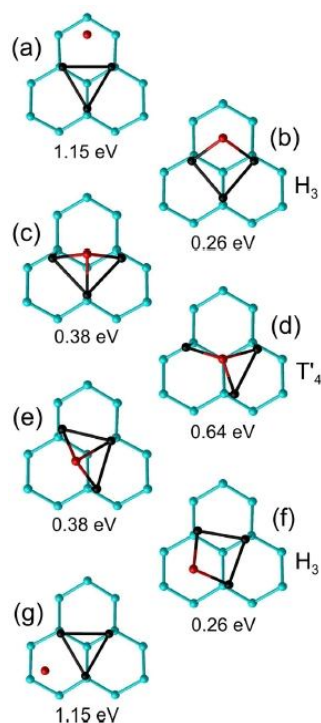


Рис. 2. Последовательность кадров, описывающая диффузию кремниевого адатома (красный шар) на поверхности Si(111)-Bi через тример Bi, путем разрыва связей в нем. Атомы Bi показаны черным, атомы подложки Si показаны бирюзовым.

5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Работа полностью выполнена с использованием кластера НГУ.

6. Перечень публикаций, содержащих результаты работы.

R. Zhachuk, J. Coutinho, “Mechanisms of Si and Ge diffusion on surfactant terminated (111) silicon and germanium surfaces”, Surface Science (Impact Factor: 1.931), 647, 12 (2016). DOI: 10.1016/j.susc.2015.11.014

7. Впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию.

Предоставленные вычислительные ресурсы кластера достаточны для решения большинства возникающих задач. В настоящее время для расчетов используется бесплатный пакет программ Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta>), который ограничен в некоторых своих возможностях. Приобретение коммерческого программного обеспечения VASP (<https://www.vasp.at>) позволило бы повысить качество получаемых результатов. Данный программный пакет наиболее широко используем научными группами и является своего рода стандартом качества получаемых результатов. При необходимости можно составить презентацию сравнительных характеристик пакетов VASP и Siesta.