

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РОСТА, ПОЛЕЙ ДЕФОРМАЦИЙ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР

УДК 621.315.592 : 519.245

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ НАНООСТРОВКОВ ГЕРМАНИЯ НА СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПОДЛОЖКАХ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ*

П. Л. Новиков^{1,2}, Ж. В. Смагина¹, А. В. Двуреченский^{1,2}

¹*Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13*

²*Новосибирский государственный университет,
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2
E-mail: novikov@isp.nsc.ru*

Методом молекулярной динамики исследовано формирование наностроек Ge на структурированных подложках Si(100). Для подложек с перекрывающимися ямками и ямками в форме усечённых перевёрнутых пирамид рассчитана энергетическая поверхность. На основе её анализа описан механизм атомной поверхностной диффузии на структурированной поверхности. Вычислена удельная энергия гетероструктур Ge/Si с различной морфологией наностроек в ямках. Показано, что конфигурация с несколькими наностройками в ямке может быть термодинамически выгодной.

Ключевые слова: кремний, германий, структурированные подложки, наностройки, метод молекулярной динамики.

Введение. Одной из приоритетных задач для исследователей, работающих в области материаловедения, является создание пространственно упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек (КТ). Эти квазинульмерные системы обладают замечательными физическими свойствами и открывают возможность их широкого применения в электронных приборах и устройствах, таких как светодиоды, лазеры на КТ, спинтронная память и даже квантовый компьютер. Эффективным способом решения проблемы неоднородного распределения КТ по размерам и их случайного пространственного расположения является использование литографии для приготовления подложек с заданным рисунком ямок (структурированных подложек) [1–3]. Ямки служат местами преимущественного зарождения КТ при последующей гетероэпитаксии. Несмотря на широкие исследования роста КТ на структурированных подложках, ощущается недостаток знания о механизме их формирования и фундаментальных ограничениях на размер ямок, способствующий пространственному упорядочению [3]. В работе [4] методом молекулярной динамики (МД) выявлены некоторые особенности механизма поверхностной атомной диффузии Ge на структурированных подложках Si.

Задача данной работы — теоретическое исследование условий, при которых на структурированной подложке Si формируется более одного наностройка Ge на ямку.

Модель, используемые методы и подходы. Метод молекулярной динамики состоит в численном решении уравнения движения системы с большим числом частиц (ато-

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 13-02-01181 и № 12-02-90036), Сибирского отделения РАН (программа ОНИТ) и Министерства образования и науки РФ (программа «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», соглашение № 8228).

мов), взаимодействие между ними описывается функцией координат атомов (эмпирическим потенциалом). Моделируемая в предлагаемой работе система представляет собой структуру Ge/Si(100), динамика которой задаётся эмпирическим потенциалом межатомного взаимодействия Терсоффа [5]. Уникальным свойством потенциала Терсоффа является уменьшение силы взаимодействия с увеличением числа насыщенных связей, что особенно существенно для атомных конфигураций, возникающих на наклонных стенках ямок и на стыках граней островков. В начальном состоянии атомы располагаются в узлах алмазоподобной кристаллической решётки, а рельеф плёнки сформирован в соответствии с размещением на ней в регулярном порядке ямок с заданными формой и размером. Кроме того, атомы в поверхностном моноатомном слое искусственно выстраиваются в димерные ряды. В данной работе анализируются структурированные подложки двух типов. К первому типу относится массив ямок, имеющих форму перевёрнутых пирамид с квадратным основанием. Стороны квадратов ориентированы вдоль направлений типа (110), а боковые стенки параллельны плоскостям типа (117). Ямки первого типа перекрываются по уголкам. Массив второго типа включает неперекрывающиеся ямки в форме перевёрнутых усечённых пирамид. Ориентации сторон и наклонных граней те же, что и в структурах первого типа. В процессе специальной процедуры релаксации атомы в системе получают возможность менять свои положения под действием сил межатомного взаимодействия. Температура в процессе релаксации плавно повышается до такого значения, при котором атомы были бы способны преодолевать небольшие ($\leq 0,1$ эВ) энергетические барьеры, сохраняя при этом структуру димерных рядов. После релаксации температура снижается до нуля. «Замороженная» система является объектом дальнейшего исследования.

Построение энергетической поверхности моделируемой структуры осуществляется посредством добавления к системе зондового атома германия, который исходно располагается над поверхностью структуры и обладает единственной степенью свободы вдоль нормали к подложке. В начальном положении взаимодействие зондового атома с системой пренебрежимо мало. Затем зондовый атом приближается к подложке на расстояние характерного межатомного взаимодействия и для полной системы на временном интервале $2 \cdot 10^{-12}$ с решается уравнение движения. За это время зондовый атом занимает равновесное положение. Поверхностная энергия в данной точке определяется как разность энергий системы при начальном и конечном (равновесном) положениях зондового атома. Энергетическая поверхность строится с помощью зондового атома сканированием поверхности структуры в пределах исследуемой области. Описанная процедура аналогична изложенной в [6].

Возможности метода МД не позволяют непосредственно имитировать процесс роста nanoостровков Ge. Обычно для этого используют метод Монте-Карло [7]. Однако подход, предлагаемый в данной работе, способен предсказать морфологию гетероплёнки на структурированной подложке. Идея такого подхода состоит в том, что с помощью потенциала Терсоффа можно точно рассчитать энергию заданной структуры. В частности, мы вычисляем энергию E_0 опорной структуры с пустыми ямками и энергию E_{Ge} той же структуры с ямками, заполненными островками Ge. Затем находим удельную энергию W заданной морфологии по формуле $W = (E_{Ge} - E_0)/N$, где N — число атомов Ge внутри ямок. Сравнивая величины удельной энергии для набора морфологий, можно оценить, какая конфигурация nanoостровков является энергетически выгодной. Погрешность вычисления удельной энергии не превышает 10^{-4} эВ/атом, что на три порядка ниже, чем фактор Больцмана kT при температуре 600 °С.

Результаты эксперимента и обсуждение. Моделируемая структура Ge/Si(100) с перекрывающимися ямками и её энергетическая поверхность представлены на рис. 1. Энергетическая поверхность вне ямок содержит параллельные диффузионные каналы с максимальными перепадами энергии $\sim 0,6$ эВ. По диффузионным каналам осуществляется основная миграция атомов. Диффузионные каналы прерываются на краях ямок барьером

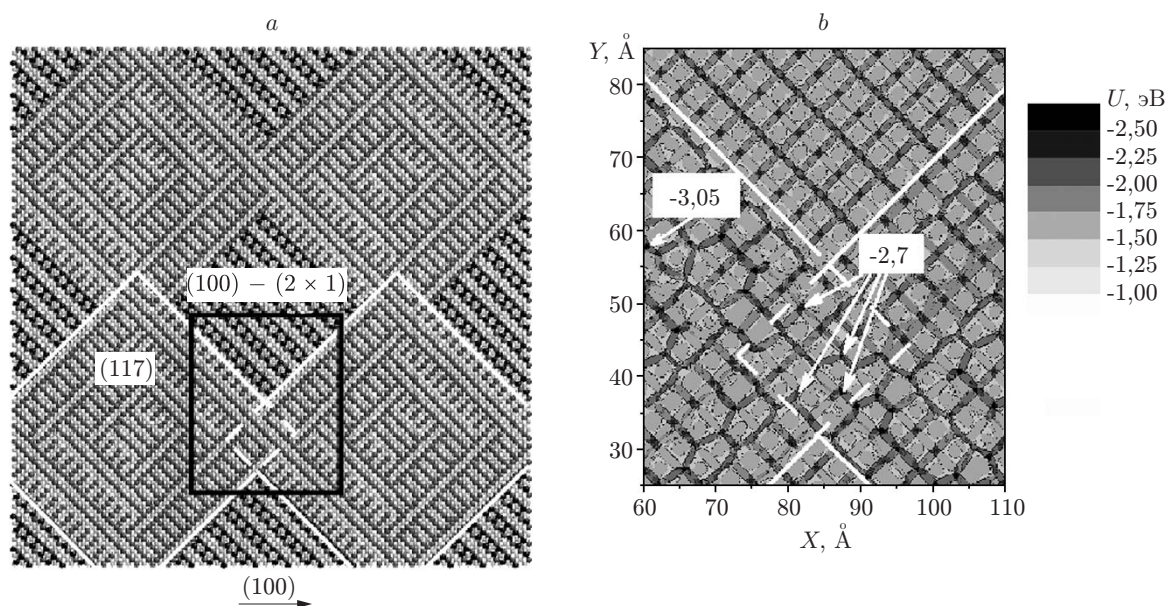


Рис. 1. Результаты, полученные методом МД для структурированной подложки Si: *a* — фрагмент моделируемой структуры с ямками, перекрывающимися по уголкам (вид сверху) (атомы Si показаны светло-серым цветом, Ge — тёмно-серым, димеры Ge — чёрным; чёрным прямоугольником обозначены границы области, для которой рассчитывалась энергетическая поверхность); *b* — энергетическая поверхность моделируемой структуры (края двух соседних ямок обозначены белыми линиями; величина энергии отображается с использованием шкалы оттенков серого; стрелками указаны положения наиболее глубоких минимумов)

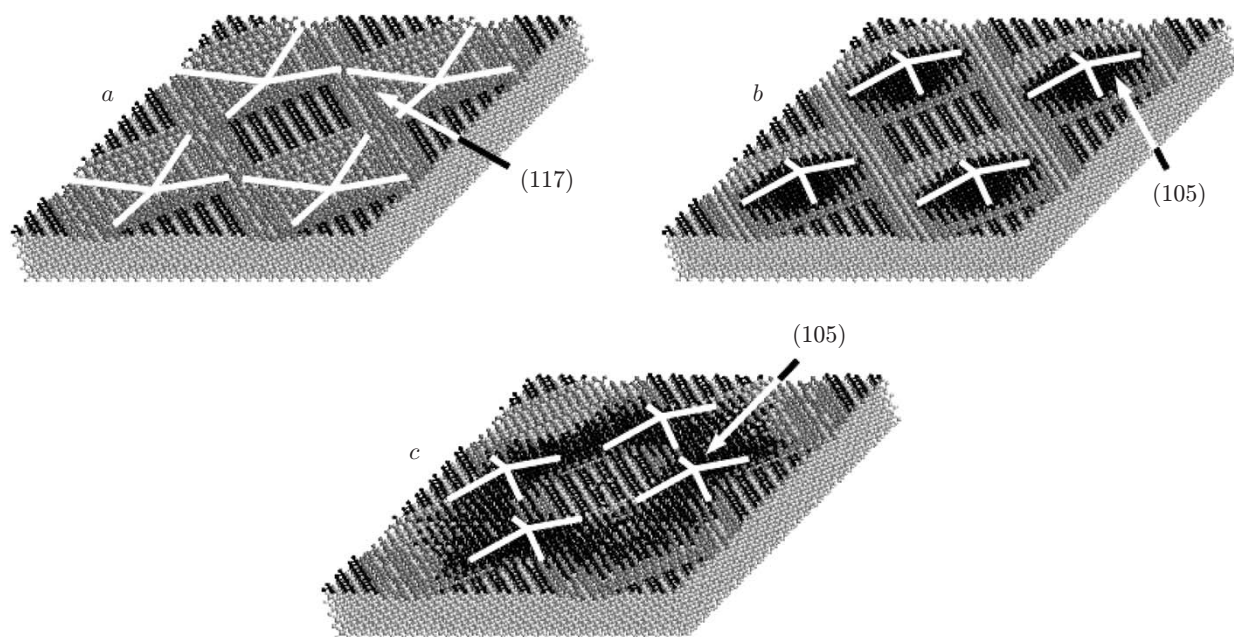


Рис. 2. Различные морфологии Ge на структурированных подложках Si с перекрывающимися ямками: *a* — опорная структура (пустые ямки); *b* — наноостровки (hut-кластеры) Ge на доньшках ямок; *c* — наноостровки Ge в уголках ямок. Атомы Si показаны светло-серым цветом, Ge — тёмно-серым, Ge в димерных рядах и островках — чёрным; белыми линиями отмечены рёбра ямок и hut-кластеров

Таблица 1

Перекрывающиеся ямки	
Расположение островка в ямке	Удельная энергия, эВ/атом
на дне	-3,77
в уголках	-3,81

Таблица 2

Ямка в форме усечённой пирамиды	
Число островков в ямке	Удельная энергия, эВ/атом
1	-3,75
4	-3,82

~ 1 эВ. Атомы, достигшие ямки, вынуждены далее перемещаться вдоль её края к уголкам, где в области перекрытия ямок имеется ряд глубоких (порядка $-2,7$ эВ) минимумов. Поэтому там, где ямки перекрываются, атомная поверхностная диффузия должна замедляться, а германий накапливаться. При дальнейшем росте Ge это способствует зарождению трёхмерных островков.

На рис. 2 показаны структуры с пустыми ямками (a) и с островками Ge (hut-кластерами), расположенными в центре (b) и в уголках (c) ямок. Минимальное значение удельной энергии (табл. 1) соответствует островкам, зародившимся на перекрытиях ямок, и составляет $-3,81$ эВ/атом. При этом в среднем на одну ямку приходится два наноструктура. Такая морфология наноструктур наблюдалась экспериментально в работе [2].

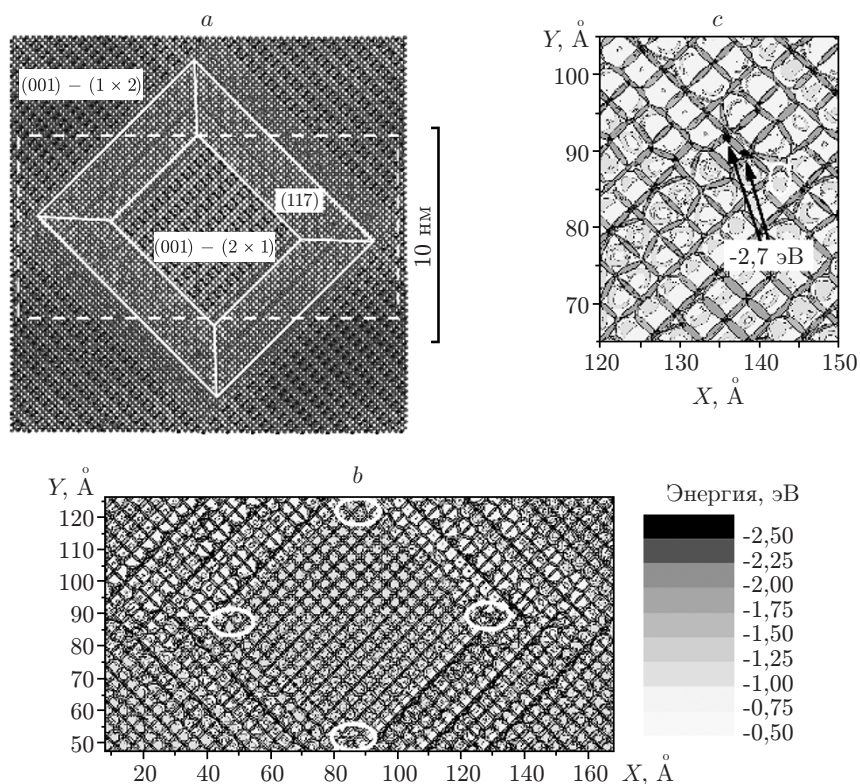


Рис. 3. Результаты, полученные методом МД для структурированной подложки Si: a — фрагмент моделируемой структуры с ямками в форме усечённых перевернутых пирамид (вид сверху) (атомы Si показаны светло-серым цветом, Ge — тёмно-серым, димеры Ge — чёрным; белый пунктирный контур обозначает границы области, для которой рассчитывалась энергетическая поверхность); b — энергетическая поверхность моделируемой структуры (используется та же шкала оттенков серого, что и на рис. 1, b; белые эллипсы в углах плоского дна ямки показывают четыре эквивалентные области локализации глубоких минимумов); c — детальная энергетическая поверхность для крайней правой области локализации глубоких минимумов

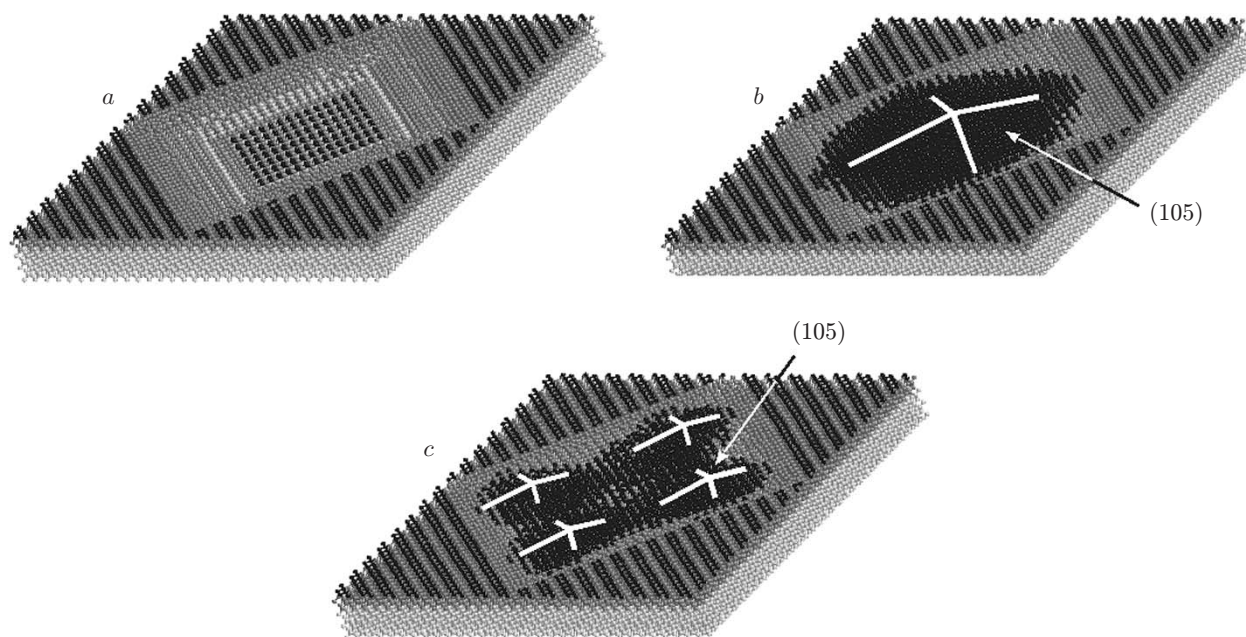


Рис. 4. Различные морфологии Ge на структурированных подложках Si с ямками в форме усечённых пирамид: *a* — опорная структура (пустые ямки); *b* — наноструктуры Ge в центрах ямок; *c* — наноструктуры Ge в уголках ямок. Атомы Si показаны светло-серым цветом, Ge в смачивающем слое — тёмно-серым, Ge в димерах и наноструктурах — чёрным; белыми линиями отмечены рёбра hut-кластеров

Фрагмент структуры с ямками в форме усечённых перевернутых пирамид и соответствующая энергетическая поверхность показаны на рис. 3. В окрестности вершин плоского основания ямки локализованы два глубоких ($-2,7$ эВ) минимума. С точки зрения атомной диффузии в этих областях должен накапливаться германий на начальной стадии гетероэпитаксии.

На рис. 4 приведены структуры с ямкой в форме перевернутой усечённой пирамиды: пустая (*a*), с островками Ge, расположенными в центре (*b*) и в вершинах (*c*) плоского основания ямки. Расчёты удельной энергии показывают, что образование наноструктур в вершинах основания ямки термодинамически выгоднее, нежели в центре (см. рис. 2 и табл. 2). Образование четырёх островков в ямке экспериментально наблюдалось в [1].

Заключение. Методом МД в данной работе исследован механизм формирования трёхмерных наноструктур при росте Ge на структурированных подложках Si. Показано, что в случае массивов с перекрывающимися ямками и ямками в форме перевернутых усечённых пирамид термодинамически выгодной является морфология гетероструктуры в виде нескольких островков в ямке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bauer G., Schäffler P. Self-assembled Si and SiGe nanostructures: New growth concepts and structural analysis // Phys. Status Solidi. 2006. **203**, N 14. P. 3496–3505.
2. Dais C., Solak H. H., Ekinici Ya. et al. Ge quantum dot molecules and crystals: Preparation and properties // Surf. Sci. 2007. **601**, N 13. P. 2787–2791.
3. Pascale A., Berbezier I., Ronda A. et al. Self-assembly and ordering mechanisms of Ge islands on prepatterned Si(001) // Phys. Rev. B. 2008. **77**, N 7. 075311.

4. **Novikov P., Smagina J., Vlasov D. et al.** Space arrangement of Ge nanoislands formed by growth of Ge on pit-patterned Si substrates // Journ. Cryst. Growth. 2008. **323**, N 1. P. 198–200.
5. **Tersoff J.** New empirical approach for the structure and energy of covalent systems // Phys. Rev. B. 1988. **37**, N 12. P. 6991–7000.
6. **Roland C., Gilmer G. H.** Epitaxy on surfaces vicinal to Si(001). II. Growth properties of Si(001) steps // Phys. Rev. B. 1992. **46**, N 20. P. 13428–13451.
7. **Рудин С. А., Зиновьев В. А., Ненашев А. В. и др.** Трёхмерная модель гетероэпитаксиального роста германия на кремнии // Автометрия. 2013. **49**, № 5. С. 50–56.

Поступила в редакцию 24 июня 2013 г.
