

## КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ РАБОТЫ

### 1. Наименование работы

Рост плотных пространственно-упорядоченных массивов квантовых точек Ge на структурированных подложках Si

### 2. Состав коллектива исполнителей

Новиков Павел Леонидович

Смагина Жанна Викторовна

Зиновьев Владимир Анатольевич

Армбристер Владислав Андреевич

### 3. Контактное лицо

Новиков Павел Леонидович, novikov@isp.nsc.ru

### 4. Научное содержание работы

#### 4.1. Постановка задачи

В области создания массивов квантовых точек наибольший интерес представляет разработка методов, позволяющих формировать массивы с регулярным расположением квантовых точек в плоскости и в пространстве. Практика последнего десятилетия показывает, что прорыв в этом направлении может быть достигнут путем гетероэпитаксиального роста на подложках со специально подготовленным рельефом. Метод заключается в том, что сначала с помощью электронной или голографической литографии на поверхности подложки формируется система регулярно расположенных ямок. Затем, после специальной предростовой подготовки на структурированной подложке производится рост гетероэпитаксиальной пленки, в процессе которого формируется пространственно-упорядоченный массив квантовых точек. Эффект пространственного упорядочения ярко проявляется в случае не очень плотных массивов ямок (с периодом 250 нм и реже). Уменьшение шага массива ямок до 100 нм и меньше приводит к увеличению доли nanoостровков, образованных вне ямок, и к значительному разбросу по размерам nanoостровков. Несмотря на значительный объем исследований роста на структурированных подложках, остаются малоизученными аспекты, связанные с механизмом поверхностной диффузии и образования трехмерных островков в таких системах. Предлагаемый проект посвящен исследованию механизмов, определяющих миграцию адатомов, зарождение и рост nanoостровков германия на структурированных подложках кремния, и выяснению условий, обеспечивающих формирование плотных ( $10^{10}$  см<sup>-2</sup> и выше) пространственно-упорядоченных массивов квантовых точек. В рамках проекта предусматривается теоретически рассчитать потенциальный рельеф структурированной поверхности с учетом возникающих сверхструктурных поверхностных перестроек, выявить особенности поверхностной диффузии адатомов, установить места наиболее вероятного зарождения nanoостровков и их форму в зависимости от морфологии структурированной поверхности. Будут выяснены оптимальные условия для формирования плотных пространственно-упорядоченных массивов квантовых точек, проведены эксперименты по росту Ge на структурированных подложках Si и выполнен анализ полученных поверхностных структур.

#### 4.2. Современное состояние проблемы

Первые работы, в которых сообщалось о пространственно-упорядоченных массивах островков, выращенных на структурированных подложках, были выполнены в группе Бауэра в начале минувшего десятилетия (Zh. Zhong, A. Halilovic, T. Fromherz, F. Schäffler, and G. Bauer, Two-dimensional periodic positioning of self-assembled Ge islands on prepatterned Si (001) substrates, Appl. Phys. Lett. 82 (2003) 4779). На подложке Si(001) с помощью голографической литографии и последующего ионного реактивного травления был создан регулярный массив круглых ямок диаметром ~200 нм с периодом 400 нм. Перед помещением в ростовую камеру образец был подвергнут водородной защите

посредством операции химической очистки, включающей полоскание в растворе HF. В камере роста после десорбции водородного слоя в процессе быстрого термического отжига на структурированную поверхность был осажден буферный слой Si толщиной 130 нм. Затем осаждался слой Ge толщиной 4-10 нм при температуре, плавно растущей от 500 до 650 °C со скоростью 0.05 Å/с. Данные атомно-силовой микроскопии показали, что в области сканирования в центрах всех ямок сформировались трехмерные островки.

Затем появился ряд экспериментальных работ этих и других авторов, в которых схема Бауэра использовалась с некоторыми вариациями. В результате удалось получить эффект упорядочения на массивах островков с шагом 250 нм. С уменьшением размера ямок селективность роста к особенностям рельефа подложки падала.

В теоретических работах, посвященных росту на структурированных подложках, изучался эффект самоупорядочения при осаждении материала на рельефную поверхность; в приближении сплошной среды решалась упругая задача в системе Si/Ge(001) на структурированной подложке; исследовалась проблема термодинамической стабильности hut-кластеров Ge на Si(001) с учетом сверхструктурных перестроек.

#### **4.3. Ожидаемые результаты по окончании периода работы**

- для ориентации подложки Si(001) в рамках моделирования МД определить цепочку сверхструктурных переходов, происходящих на гранях ямки в процессе ее заполнения кремнием;
- с учетом поверхностных перестроек на стенках ямки построить карты потенциального рельефа структурированной поверхности;
- для различных стадий роста псевдоморфной пленки Ge определить основные маршруты поверхностной диффузии адатомов в ямках и величины энергетических барьеров, влияющих на частоту диффузионных прыжков;
- в рамках моделирования МК установить влияние температуры и количества осажденного Si на кинетику изменения формы ямки;
- экспериментально определить влияние процесса осаждения буферного слоя Si на форму ямок в случае расстояния между ямками меньше 100 нм.

#### **4.4. Основные результаты, полученные к настоящему времени**

- 1). В рамках моделирования методом молекулярной динамики рассчитан потенциальный рельеф структурированной поверхности Si(001).
- 2). На основе анализа полученного потенциального рельефа определены основные маршруты миграции адатомов Ge по структурированной поверхности Si(001)-(2x1). Определены энергетические барьеры, ограничивающие скорость диффузии вдоль основных маршрутов.
- 3). Результаты, аналогичные изложенным в пп. 1), 2), получены для той же системы после осаждения смачивающего слоя Ge толщиной 2 монослоя и для структурированной поверхности Si/Ge(111)-(5x5) с толщиной слоя Ge 4 монослоя. (См. Рис.1)
- 4). Методом молекулярной динамики рассчитаны добавки к энергии системы за счет заполнения ямки в подложке Si(001)-(2x1) германием.
- 5). Экспериментально получен плотный ( $10^{10}$  см<sup>-2</sup>) пространственно-упорядоченный массив островков при росте Ge на структурированной подложке Si(111).

#### **4.5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы**

По сравнению с типичным ПК, затраты машинного времени на кластере сокращаются на 4 порядка!

#### 4.6. Иллюстрации, визуализация результатов

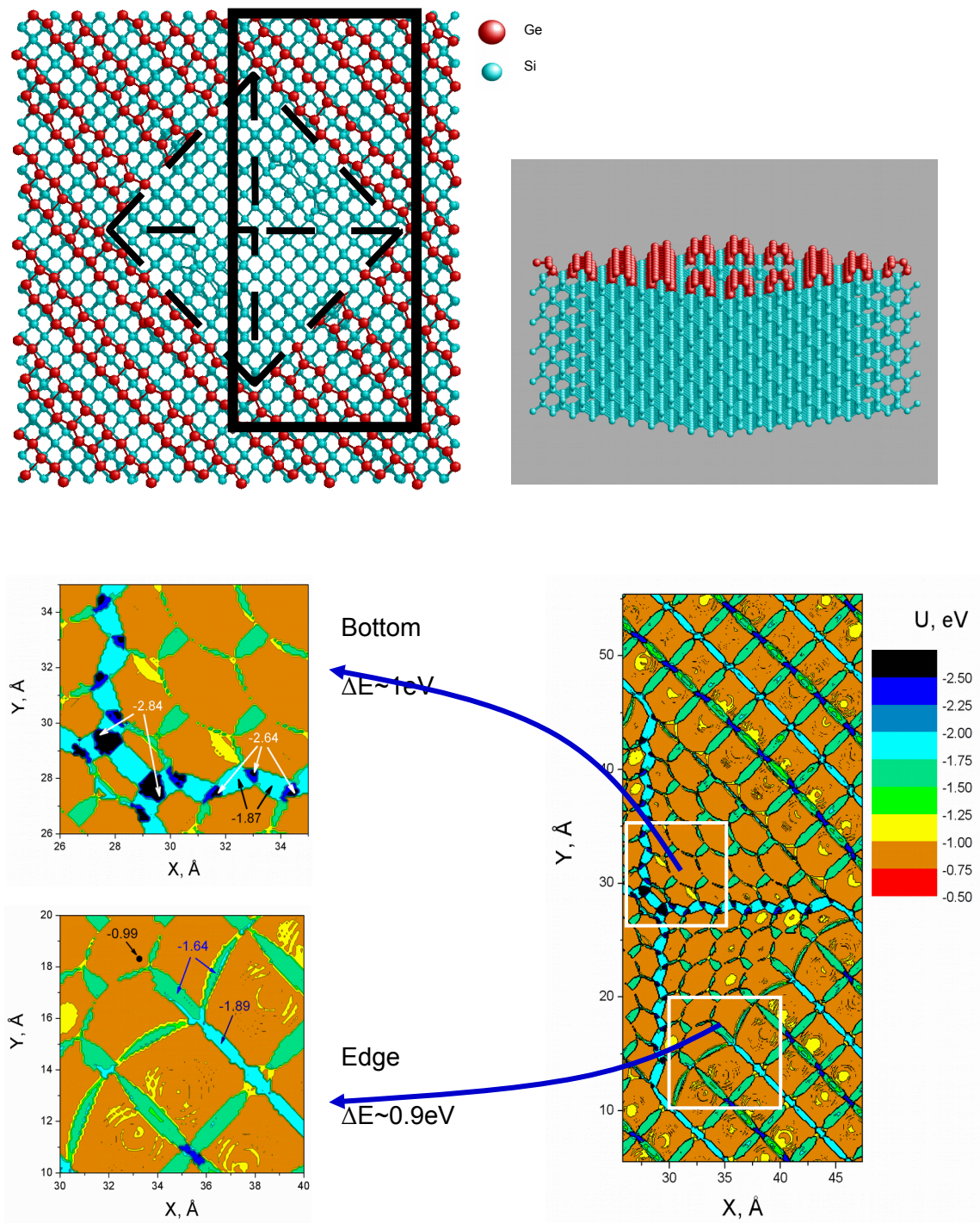


Рис. 1. Моделируемая структура и потенциальный рельеф для подложки Si(001) по данным работы [4] из п.5.

## **5. Перечень публикаций, содержащих результаты работы**

- 1). Zhanna Smagina, Pavel Novikov, Vladislav Zinoviev, Dmitriy Vlasov, Anatoliy Dvurechenskii, Dmitriy Nasimov, Aleksandr Deryabin, Anton Kozhukhov, "Space arrangement of Ge nanoislands during growth of Ge on pit-patterned Si substrates", 30th International Conference on the Physics of Semiconductors (COEX, Seoul, Korea, July 25-30, 2010), P2-019
- 2). P. L. Novikov, Zh. V. Smagina, V. A. Zinoviev, D.Yu. Vlasov, A. V. Dvurechenskii, D. A. Nasimov, A. S. Deryabin and A. S. Kozhukhov, "Nucleation of Ge nanoislands on pre-patterned Si substrates", Proc. 18th International Symposium "NANOSTRUCTURES: PHYSICS AND TECHNOLOGY" (Saint Petersburg, Russia, June 21–26, 2010) 177-178
- 3). П.Л. Новиков, Ж.В. Смагина, Д.Ю. Власов, А.В. Двуреченский, Д.А. Насимов, А.С. Дерябин, А.С. Кожухов, "Зарождение островков Ge на структурированных подложках Si", VII Международная конференция "КРЕМНИЙ-2010" (Нижний Новгород, 6-9 июля 2010) 6А-2
- 4). Pavel Novikov, Zhanna Smagina, Vladislav Zinoviev, Dmitriy Vlasov, Anatoliy Dvurechenskii, Dmitriy Nasimov, Aleksandr Deryabin, Anton Kozhukhov, "Space arrangement of Ge nanoislands during growth of Ge on pit-patterned Si substrates", 16-th International Conference on Molecular Beam Epitaxy (Berlin, Germany, August 22–27, 2010) P1.44
- 5). Pavel Novikov, Zhanna Smagina, Dmitry Vlasov, Alexandr Deryabin, Alexandr Kozhukhov, Anatoly Dvurechensky, "Space arrangement of Ge nanoislands formed by growth of Ge on pit-patterned Si substrates", Journal of Crystal Growth (in press)

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

У меня нет претензий к работе вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ.