

Отчет за период 2012-2014

- Тема работы: Моделирование поверхностной атомной диффузии методом молекулярной динамики.
- Состав коллектива: ФИО без сокращений, места работы/учёбы, должности, учёные степени и звания. Опционально контактный адрес электронной почты.
Новиков Павел Леонидович., с.н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н., novikov@isp.nsc.ru
Смагина Жанна Викторовна, н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н., smagina@isp.nsc.ru
Ненашев Алексей Владимирович, с.н.с. ИФП СО РАН, nenashev@g.nsu.ru
- Если работа выполняется по гранту - информация о гранте (название, номер, руководитель, срок действия, ...)
РНФ (грант No 14-12-00931) «Коллективные эффекты в усилении поглощения и излучения света ИК диапазона в наноструктурах на основе кремния», Двуреченский Анатолий Васильевич, 2012-2015
Программа Президиума РАН No 1 «Фундаментальные проблемы математического моделирования», Двуреченский Анатолий Васильевич, 2012-2015.
-
- Научное содержание работы:
 1. Постановка задачи.

Одной из приоритетных задач в области материаловедения является создание пространственно упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек (КТ). Эти квазиуменьшенные системы обладают замечательными физическими свойствами и могут получить применение в электронных приборах и устройствах, таких как светодиоды, лазеры на КТ, спинтронная память и логические элементы для квантовых вычислений. Одним из методов получения пространственно-упорядоченных массивов КТ является молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) на структурированных подложках, то есть на подложках, поверхность которых содержит систему регулярно расположенных ямок или канавок, сформированных с помощью литографии. Ямки служат местами преимущественного зарождения КТ при последующей гетероэпитаксии. Механизм роста на поверхности со сложным рельефом не достаточно изучен. Моделирование методом молекулярной динамики (МД) позволяет изучать элементарные процессы, обуславливающие рост поверхностных наноструктур. Как правило, эти процессы недоступны для непосредственного изучения в эксперименте. В данной работе методом МД рассчитан потенциальный рельеф ямки с плоским дном и определена удельная энергия различных морфологий островков германия, в ямке такой формы.

2. Современное состояние проблемы (на момент начала работы).

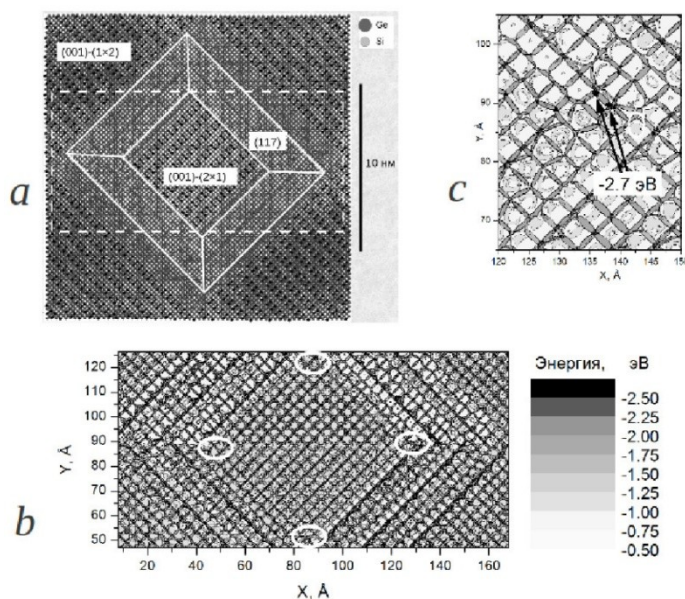
Нам известна единственная работа, посвященная созданию сверхплотных массивов квантовых точек (КТ) германия на структурированных подложках кремния. В работе Ch. Dais et al., «Ge quantum dot molecules and crystals: Preparation and properties», Surface Science v. 601 (2007) pp. 2787–2791 экспериментально были сформированы структурированные подложки кремния двух типов. В первом случае ямки имели квадратную форму (при виде сверху) и пересекались в вершинах квадратов. При осаждении германия на такие структурированные подложки наблюдалось формирование nanoостровков в вершинах квадратов. При этом в среднем формировалось по два островка на ямку. Во втором случае ямки также квадратной формы не имели пересечений, но в них специальным образом были сформированы донья плоской формы. При осаждении германия на такие структурированные подложки островки формировались внутри ямок в области вершин квадратов. При этом плотность островков в массиве повышалась за счет образования четырех

наноостровков на ямку.

3. Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы. Полученные результаты. Иллюстрации, визуализация результатов.

Метод МД состоит в численном решении уравнения движения системы с большим числом частиц (атомов), взаимодействие между которыми описывается функцией координат атомов (эмпирическим потенциалом). Моделируемая в нашей работе система представляет собой структуру Ge/Si(100), динамика которой задается эмпирическим потенциалом межатомного взаимодействия Терсоффа. 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. Сначала была построена энергетическая поверхность модельной структурированной подложки с ямками, имеющими форму перевернутых усеченных пирамид с квадратным основанием (Рис. 1а).

Рис.1. (а) Фрагмент моделируемой структуры с ямками в форме усеченных перевернутых пирамид (вид сверху). Атомы Si показаны светло-серым цветом, Ge – серым, димеры Ge – черным. Белый пунктирный контур обозначает границы области, для которой рассчитывалась энергетическая поверхность. (б) Энергетическая поверхность моделируемой структуры. Белые эллипсы в углах плоского дна ямки показывают четыре эквивалентные области локализации глубоких минимумов. (в) Детальная энергетическая поверхность для крайней правой области локализации глубоких минимумов. Используется та же шкала оттенков, что и на рис. 1б.



Стороны квадратов ориентированы вдоль направлений типа (110), а боковые стенки параллельны плоскостям типа (111). В начальном состоянии атомы располагаются в узлах алмазоподобной кристаллической решетки, а рельеф пленки сформирован в соответствии с размещением на ней в регулярном порядке ямок заданной формы и размера. Кроме того, атомы в поверхностном моноатомном слое искусственно были выстроены в димерные ряды. 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, чтобы атомы были способны преодолеть небольшие (≤ 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 решается уравнение движения на интервале времени $2 \cdot 10^{-12}$ с. 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.

Возможности метода МД не позволяют непосредственно имитировать процесс роста наностроек Ge. Однако подход, используемый в данной работе, способен предсказать морфологию гетеропленки на структурированной подложке. Идея предлагаемого 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 мы вычисляем удельную энергию W заданной морфологии по формуле

$$W = \frac{E_{Ge} - E_0}{N},$$

где N – число атомов Ge внутри ямок. Сравнивая величины удельной энергии для набора морфологий, мы можем оценить, какая конфигурация наностроек является энергетически выгодной. Погрешность вычисления удельной энергии не превышает 10^{-4} эВ/атом, что на три порядка ниже, чем фактор Больцмана kT при 600°C .

Фрагмент структуры с ямками в форме усеченных перевернутых пирамид и соответствующая энергетическая поверхность показаны на Рис. 1. Энергетическая поверхность вне ямок содержит параллельные диффузионные каналы с максимальными перепадами энергии ~ 0.6 эВ. По диффузионным каналам осуществляется основная миграция атомов. Диффузионные каналы прерываются на краях ямок барьером ~ 1 эВ. Атомы, достигшие ямки, вынуждены перемещаться вдоль ее края к уголкам и далее к доньшку ямки по линии пересечения наклонных стенок ямки. В окрестности каждой вершины 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. При дальнейшем росте Ge это способствует пересыщению материала и зарождению трехмерных островков.

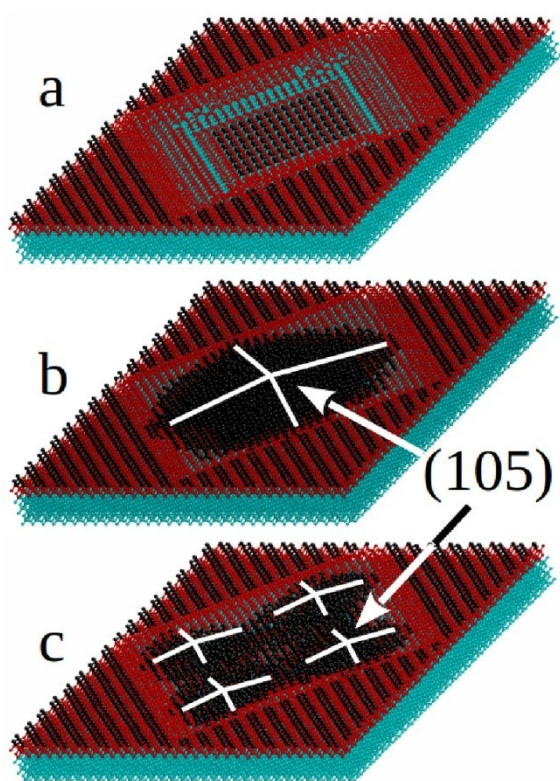


Рис. 2. Различные морфологии Ge на структурированных подложках Si с ямками в форме усеченных пирамид. Атомы Si показаны голубым, Ge в смачивающем слое – красным, Ge в димерах и наностройках – черным.

На Рис. 2 показаны структуры с пустой ямкой (a) в форме перевернутой усеченной пирамиды и с островками Ge, расположенными в центре (b) и в вершинах (c) плоского основания ямки соответственно. Расчеты удельной энергии показывают, что образование nanoостровков в вершинах основания ямки термодинамически выгоднее, нежели в центре.

- Эффект от использования кластера в достижении целей работы.
Расчеты потенциального рельефа требуют значительных затрат машинного времени. Практически эти расчеты были бы невозможны на отдельном персональном компьютере. Поэтому область, в которой рассчитывался потенциальный рельеф, делился на полосы, и расчет внутри каждой полосы запускался как отдельная задача. Одновременно на вычислительном кластере было возможно запускать до 50 задач. Затем по результатам, полученным на вычислительном кластере, полосы собирались в полную исходно заданную прямоугольную область и преобразовывался в контурную карту с помощью графического редактора.
- Перечень публикаций, содержащих результаты работы (если есть). Если имеется, указать импакт-фактор журнала (Thomson Reuters, РИНЦ,...).
 1. [Smagina, Z.V.](#) et al., «Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography», Journal of Applied Physics, 2018, 123(16), 165302 (impact factor 2.4)
 2. [Novikov, P.L.](#) et al., «Simulating the nucleation and growth of Ge quantum dots on Si using high-efficiency algorithms», Nanotechnologies in Russia, 2015, 10(3-4), pp. 192-204 (impact factor 1.0)
 3. [Novikov, P.L.](#), [Smagina, Z.V.](#), [Dvurechenskii, A.V.](#), «Formation of germanium nanoislands on pit-patterned silicon substrates by means of the molecular dynamics method», Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing, 2014, 50(3), pp. 247-251 (impact factor 0.6)
- Опционально: ваши впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию.

В настоящее время для решения задач, связанных с моделированием гетероэпитаксиального роста на структурированных подложках, ИВЦ НГУ является наиболее предпочтительной альтернативой по сравнению с вычислительными кластерами, имеющимися в ИФП СО РАН.