

Тема работы.

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

Состав коллектива.

- Рудин Сергей Алексеевич (инженер ИФП СО РАН, rudin@isp.nsc.ru);
- Ненашев Алексей Владимирович (с.н.с. ИФП СО РАН, НГУ, к.ф.-м.н.);
- Зиновьев Владимир Анатольевич (н.с. ИФП СО РАН, к.ф.-м.н.);
- Новиков Павел Леонидович (с.н.с. ИФН СО РАН, НГУ, к.ф.-м.н.);
- Смагина Жанна Викторовна (н.с. ИФН СО РАН, к.ф.-м.н.);
- Двуреченский Анатолий Васильевич (зав. лаб., д.ф.-м.н. ИФП СО РАН, НГУ, профессор).

Информация о гранте.

Исследование выполнено за счет средств Российского научного фонда (грант 14-12-00931 П).

Аннотация.

Проведено теоретическое исследование зарождения и роста трехмерных островков Ge, формируемых на структурированной поверхности Si(100) в виде массива ямок округлой формы. Результаты моделирования роста показали, что для ямок с острым дном наиболее релаксированная область находится по центру дна ямки, где и происходит зарождение островков. Тогда как для ямок с плоским дном наиболее релаксированные области в процессе осаждения Ge смещаются со дна ямок к их краям, что приводит к зарождению островков по их периметру.

Научное содержание работы.

Постановка задачи.

Экспериментально было обнаружено, что при осаждении Ge на структурированную поверхность Si в виде массива ямок округлой формы зарождение наноостровков может происходить как внутри ямок, так и по их периметру. Причины данного эффекта, а так же механизм, по которому происходит упорядочение наноостровков, оставались неизвестными. Предлагается, с помощью разработанной ранее трехмерной модели гетероэпитаксиального роста Ge на Si(100), провести моделирование осаждения Ge на структурированную поверхность Si(100) в виде массива ямок округлой формы и исследовать зависимость расположения островков от геометрической формы ямок.

Современное состояние проблемы.

Рост Ge/Si-структур на поверхности с предварительно созданными местами для зарождения трехмерных островков включает в себя сложные механизмы, не принимаемые во внимание в упрощенной модели роста по механизму Странского–Крастанова. Эти механизмы включают в себя зависимость релаксации механических напряжений от геометрической формы ямок, поверхностную анизотропию, различные реконструкции на стенках ямок. В литературе имеется ряд работ, посвященных зарождению и росту трехмерных наноостровков Ge на структурированных подложках Si. В частности, исследовались зависимости положения островков от угла наклона боковых стенок ямок и зарождение групп островков, как в ямке, так и по ее периметру. Было выдвинуто предположение, что изломы на боковых стенках ямок могут служить местами преимущественного зарождения наноостровков. В одной из работ с помощью численного моделирования наблюдались значительные изменения в морфологии поверхности, такие как поворот ямки в процессе осаждения Ge. Было обнаружено, что упругие эффекты

могут приводить к образованию дополнительных граней на боковой поверхности ямок, влияющих на зарождение островков.

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. 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.

Полученные результаты.

В качестве модельной структуры использовался участок кристалла Si размерами $27 \times 27 \times 13.5$ нм с периодическими граничными условиями. Поверхность подложки имела ориентацию (100). В центре подложки располагалась ямка с треугольным или трапециевидным профилем. Диаметр ямок составлял 13.5 нм, глубина — 5 и 4 нм для треугольного и трапециевидного профиля соответственно. Угол наклона боковых стенок составлял 45° . Хотя линейные размеры модельных структур примерно на порядок меньше, чем в эксперименте, распределение механических напряжений остается адекватным в силу самоподобного поведения упругих полей. Моделирование осаждения Ge проводилось при температуре 450°C 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 ямок. Количество осажденного Ge составляло 4 МС.

На рис. 1 приведены расчетные распределения упругой энергии в слое Ge, расположенного поверх ямки с различным профилем дна на различных стадиях роста по количеству осажденного Ge. Цветом обозначена величина энергии, приходящейся на 1 атом Ge. Атомы Si окрашены в серый цвет. Рост островков наиболее энергетически выгоден там, где упругая энергия атомов Ge минимальна. Распределение упругой энергии меняется с увеличением количества осажденного Ge. В случае ямки с треугольным профилем (рис. 1, a-d) наиболее релаксированной областью в течение всего процесса осаждения остается дно ямки. После осаждения 3 МС Ge зарождается трехмерный островок внутри ямки (рис. 1, c-d). В случае ямок с трапециевидным профилем ситуация кардинально меняется (рис. 1, e-h). На начальных стадиях осаждения (осаждено менее 3 МС) наиболее релаксированные области расположены на границе плоского дна и стенок

ямки (рис. 1, f). В процессе дальнейшего осаждения эти области смещаются вверх вдоль стенок ямки по направлению к ее внешним границам. При 3.5 МС Ge зарождаются трехмерные островки на краях ямки (рис. 1, h). Таким образом, смещение наиболее релаксированных областей на стадии роста смачивающего слоя Ge определяет места зарождения трехмерных островков. Отметим, что на начальных стадиях роста Ge эти области находятся около дна ямки. Увеличение количества осажденного Ge приводит не только к огранке ямок, но и изменяет распределение напряжений в смачивающем слое Ge. Расчетная морфология поверхности, полученная при осаждении 4 МС Ge на структурированную поверхность Si с треугольным и трапециевидным профилем ямок, изображена рис. 2, а и 2, b соответственно. Цветом обозначена высота рельефа поверхности. В случае ямки с треугольным профилем одиночный трехмерный островок Ge зарождается в центре ямки (рис. 2, а). В случае ямки с плоским дном (рис. 2, b) моделирование роста Ge при тех же условиях приводит к формированию группы трехмерных наностроек Ge, расположенных вне ямки по ее периметру, в то время как по центру ямки островок не зарождается.

Результаты МК моделирования позволяют нам объяснить различие в положении трехмерных островков Ge, наблюдаемое в эксперименте. Острое дно вносит вклад в эффективную релаксацию слоя Ge внутри ямки. В данной области зарождение трехмерных островков Ge энергетически более выгодно, чем снаружи. Увеличение ширины дна ямки приводит к появлению специфического процесса, который изменяет положение мест зарождения трехмерных островков. Наиболее релаксированные области изначально располагаются на дне ямки и с увеличением количества осажденного Ge смещаются к внешней границе ямки. Данный эффект обусловлен изменением морфологии смачивающего слоя Ge, покрывающего стенки ямки, в процессе роста. Таким образом, формирование островков Ge на границе ямок оказывается энергетически выгодным по сравнению с зарождением внутри ямок.

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.

С.А. Рудин, Ж.В. Смагина, В.А. Зиновьев, П.Л. Новиков, А.В. Ненашев, Е.Е. Родякина, А.В. Двуреченский. Зарождение трехмерных островков Ge на структурированной поверхности Si(100). ФТП, т. 52, № 11, с. 1346-1350, (2018). DOI: 10.21883/FTP.2018.11.46596.18.

Zh.V. Smagina, V.A.Zinovyev, S.A. Rudin, P.L. Novikov, E.E. Rodyakina, and A.V. Dvurechenskii. "Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography", J.Appl.Phys., 123, 165302 (2018). DOI: 10.1063/1.5009154.

Иллюстрации, визуализация результатов.

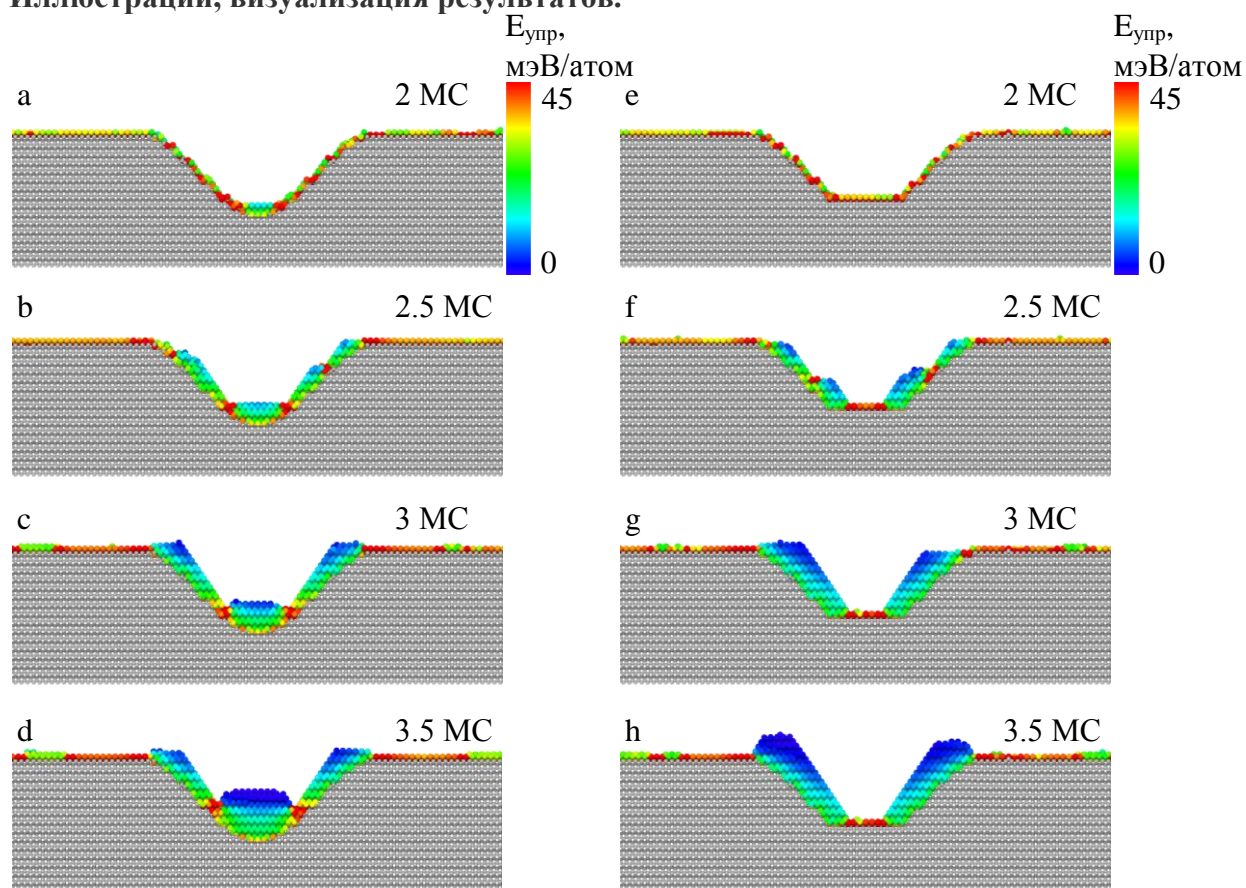


Рис. 1. Расчетные распределения упругой энергии в слое Ge, расположенного поверх ямки с различным профилем дна на различных стадиях роста по количеству осажденного Ge. Цветом обозначена величина энергии, приходящейся на 1 атом Ge. Атомы Si окрашены в серый цвет.

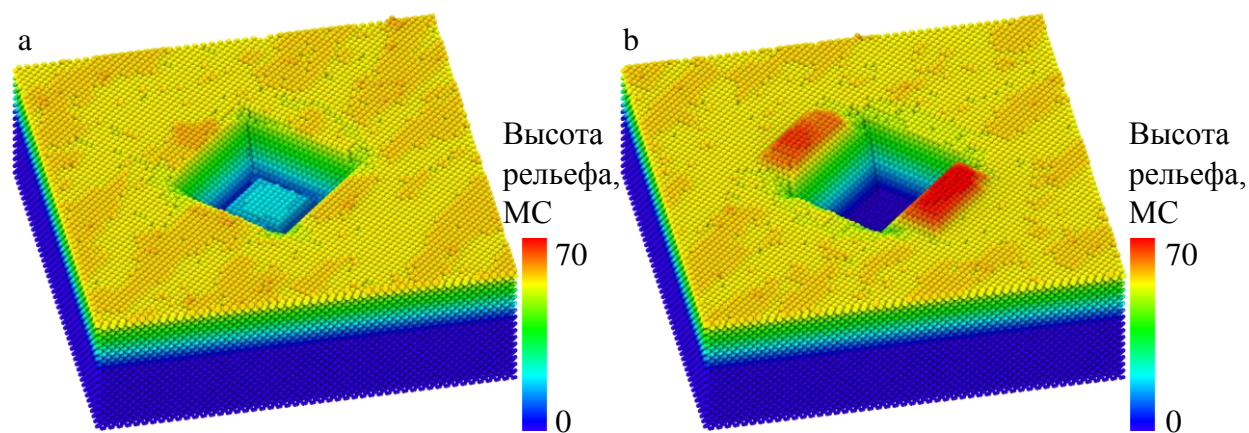


Рис. 2. Расчетная морфология поверхности, полученная при осаждении 4 МС Ge на структурированную поверхность Si с треугольным (а) и трапециевидным (б) профилем ямок. Цветом обозначена высота рельефа поверхности.