ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

УДК 621.315.592

DOI: 10.17223/00213411/68/7/11

**Моделирование димеризации атомов
на поверхности структурированных подложек Si***П.Л. Новиков^{1,2}, К.В. Павский^{1,3}, П.Н. Цынк^{1,2}¹ *Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, Россия*² *Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск, Россия*³ *Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики, г. Новосибирск, Россия*

Методом молекулярной динамики проведено моделирование процесса димеризации атомов на стенках ямок в структурированных подложках Si. Обнаружено, что микроскопический механизм эпитаксиального роста Ge на структурированных подложках Si обусловлен образованием H-образных атомных конфигураций, включающих 2 атома димера и 4 атома в подлежащем атомном слое.

Ключевые слова: моделирование, метод молекулярной динамики, димеризация, структурированные подложки.

Введение

Гетероэпитаксиальный рост массивов 3-мерных nanoостровков привлекает интерес исследователей из-за возможности применений в электронных и оптоэлектронных приборах и устройствах следующего поколения [1–3]. Дополнительные возможности представляют пространственно-упорядоченные массивы квантовых точек (КТ), на основе которых могут быть созданы светодиодные матрицы, спинтронная память и логические элементы для квантового компьютера [4]. Для формирования таких массивов были предложены структурированные подложки с периодическим рисунком из мелких ямок, полученных с помощью литографии [5]. Ямки действуют как ловушки для осаждаемых атомов, в результате 3-мерные nanoостровки зарождаются в заданных позициях.

Несмотря на длительное время, прошедшее после появления концепции структурированных подложек, механизмы атомной диффузии и зарождения 3-мерных nanoостровков в ямках недостаточно полно изучены. В частности, затруднен контролируемый рост nanoостровков в ямках размером менее 50 нм, что ограничивает возможность создания сверхплотных массивов КТ. Элементарные процессы, сопровождающие рост в ямках, невозможно непосредственно наблюдать экспериментальными методами. В этом отношении исключительную роль приобретают методы моделирования [6, 7], позволяющие дать научное знание о механизме роста на микроскопическом уровне и на временных интервалах от единиц до сотен пикосекунд.

В данной работе методом молекулярной динамики (МД) исследуются процессы димеризации на поверхности структурированных подложек Si на стадии осаждения смачивающего слоя Ge. Особое внимание уделено выявлению тех атомных конфигураций на димеризованной поверхности стенок ямок, которые воспроизводятся при осаждении каждого нового атомного слоя, обуславливая эпитаксиальный характер роста.

1. Методы и подходы

Моделирование, применяемое в данной работе для исследования процессов на стенках ямок, проводилось методом МД. Этот метод состоит в численном решении классической динамической задачи в системе, содержащей большое ($\sim 100 \cdot 10^3$) число атомов. Взаимодействие между атомами описывается эмпирическим потенциалом Терсоффа [8], представляющим собой функцию координат атомов. Результаты моделирования МД формируют наборы конфигураций, подчиняющиеся статистическому распределению в микроканоническом ансамбле. Метод МД предоставляет детальную информацию о свойствах системы на микроскопическом уровне и в пикосекундных вре-

* Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FWGW-2022-0011).