

УДК 621.382

Ю.Н. Мороков, М.П. Федорук, А.Ф. Зиновьева, А.В. Ненашев

Моделирование полей упругих деформаций для упорядоченных массивов нанокластеров германия в кремнии

Yu.N. Morokov, M.P. Fedoruk, A.F. Zinovjeva, A.V. Nenashev

Modeling Fields of Elastic Deformation for Ordered Arrays of Germanium Nanoclusters in Silicon

Разработана программа для численного моделирования полей упругих деформаций для упорядоченных массивов нанокластеров германия в кремнии с использованием кластерного приближения и чисто атомистической модели на основе потенциала Китинга. Для минимизации энергии системы применяется метод сопряженных градиентов.

Ключевые слова: численное моделирование, упругие деформации, нанокластеры.

При эпитаксиальном росте германия на кристаллическом кремнии на гетерогранице возникают упругие напряжения из-за различия длин связей в кристаллах германия и кремния. В начале роста формируется напряженный смачивающий слой, состоящий из нескольких атомарных слоев германия. При последующем росте на грани {001} на поверхности смачивающего слоя формируются пирамидальные островки с прямоугольным основанием. Эти структуры обычно снова покрываются кремнием. Ключевую роль в процессах самоорганизации получающихся наноструктур играют неоднородные упругие деформации в системе [1].

Образующиеся островки размерами в десятки нанометров могут рассматриваться как квантовые точки, поскольку они могут захватывать дырки и электроны на локализованные квантовые состояния. Дырки локализуются в объеме германиевых пирамидок на квантовых состояниях, возникающих из-за размерного квантования. Захваченные электроны локализуются преимущественно в кремнии, и потенциальные ямы для них формируются за счет упругой деформации слоев кремния, окружающих пирамидки.

Для моделирования полей упругих деформаций внутри пирамидок и в их окрестности нами ранее применялась дискретно-континуальная модель [2], использующая потенциал Китинга. Часть атомов в этой модели рассматривалась в явном виде, а влияние остальных атомов учитывалось через численно рассчитываемую функцию Грина. В дан-

The program for numerical modeling fields of elastic deformations for the ordered arrays of germanium nanoclusters in silicon was developed. The study use cluster approximation and a purely atomistic model on the basis of the Keating potential. The conjugate gradient method is applied to minimize system energy.

Key words: numerical modeling, elastic deformations, nanoclusters.

ной работе используется более точная, чисто атомистическая модель и кластерное приближение.

При упругой релаксации системы минимизируется функционал энергии системы, который имеет вид (потенциал Китинга):

$$E_{\text{упр}} = \frac{3}{16} \sum_i \sum_j \frac{\alpha_{ij}}{l_{ij}^2} \cdot \left[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 - l_{ij}^2 \right]^2 + \frac{3}{8} \sum_i \sum_{j>k} \frac{\beta_{ijk}}{l_{ij} \cdot l_{ik}} \cdot \left[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k) + \frac{1}{3} l_{ij} \cdot l_{ik} \right]^2, \quad (1)$$

где \mathbf{r}_i – радиус-вектор i -го атома; α_{ij} , β_{ijk} и l_{ij} – параметры, зависящие от сорта атомов i , j и k ; индекс i нумерует все атомы кластера, а индексы j и k ближайших соседей i -го атома. Параметры α_{ij} и β_{ijk} играют роль силовых констант, а l_{ij} – равновесные длины связей между атомами. Значения параметров потенциала взяты такими же, как и в [2].

Полную энергию (1) системы можно представить в виде суммы величин E_i , соответствующих вкладам отдельных атомов системы. Величину E_i можно интерпретировать как долю упругой энергии, связанную с i -м атомом.

Для минимизации энергии системы нами применен метод сопряженных градиентов. Численный расчет заканчивается, когда величина изменения полной энергии кластера на одном шаге сопряженных градиентов становится на 14 порядков меньше, чем полная энергия кластера.

Кластеры строятся путем последовательного наращивания числа координационных сфер, начиная

с некоторого центрального атома. Основные расчеты проводились для кластеров, содержащих атомы 150 координационных сфер. Такой кластер содержит 2 840 951 атом. Использование данных кластеров позволило существенно точнее, по сравнению с предыдущими работами, рассчитывать упругие деформации в кремнии, окружающем квантовые точки, и, соответственно, получать более точную информацию о возможности локализации электронов на таких квантовых точках.

Используются следующие граничные условия. Для атомов двух внешних координационных фиксируются x и y координаты (в плоскости смачивающего слоя), но полностью освобождаются для релаксации z координаты всех атомов (вдоль направления роста).

Первоначально перед релаксацией все атомы располагаются в узлах идеальной алмазоподобной решетки кремния. При этом расстояние между соседними атомными слоями в направлении [001] равно 0.135768 нм. Замена отдельных атомов кремния на атомы германия в этой решетке приводит к возникновению локальных напряжений. Предполагается, что упругая релаксация в системе сохраняет топологию межатомных связей алмазоподобной структуры. В последующих задачах мы рассматриваем смачивающие слои, состоящие только из 5 атомарных слоев. Пирамидки имеют квадратное основание и отношение высоты к ширине 1:10.

Эффективную потенциальную энергию электрона для каждой точки пространства можно представить как сумму потенциальной энергии без учета деформации решетки и потенциальной энергии, связанной с упругой деформацией. Используя эмпирические константы деформационного потенциала для Si и Ge, вклад упругой деформации можно записать в виде линейного разложения по компонентам тензора деформации [2].

Релаксированные координаты атомов в кластерах использованы для оценки компонент тензора деформации во всех узлах атомарной сетки.

Для расчета тензора деформации используется следующий алгоритм [2]. Поместим начало координат декартовой системы координат (x, y, z) в узел, для которого будет рассчитываться тензор деформации. Центры четырех ближайших к этому узлу атомов образуют вершины четырехгранника. В качестве вершин недеформированного четырехгранника рассматриваются четыре точки с координатами

$$\mathbf{r}^{(1)} = \pm \frac{d_1}{\sqrt{3}}(1, 1, 1), \quad \mathbf{r}^{(2)} = \pm \frac{d_2}{\sqrt{3}}(1, -1, -1),$$

$$\mathbf{r}^{(3)} = \pm \frac{d_3}{\sqrt{3}}(-1, 1, -1), \quad \mathbf{r}^{(4)} = \pm \frac{d_4}{\sqrt{3}}(-1, -1, 1),$$

где d_1, \dots, d_4 – равновесные длины соответствующих межатомных связей, знак «+» или «-» выбирается в зависимости от подрешетки.

Пусть $\mathbf{r}'^{(1)}, \mathbf{r}'^{(2)}, \mathbf{r}'^{(3)}, \mathbf{r}'^{(4)}$ обозначают радиус-векторы соответствующих вершин в деформиро-

ванной решетке. Рассчитываются вектора смещений атомов $\mathbf{u}^{(i)} = \mathbf{r}'^{(i)} - \mathbf{r}^{(i)}$, $1 \leq i \leq 4$. Далее определяются девять величин $w_{\alpha\beta}$ по формулам:

$$w_{\alpha x} = (u_{\alpha}^{(1)} + u_{\alpha}^{(2)} - u_{\alpha}^{(3)} - u_{\alpha}^{(4)}) / a,$$

$$w_{\alpha y} = (u_{\alpha}^{(1)} + u_{\alpha}^{(3)} - u_{\alpha}^{(2)} - u_{\alpha}^{(4)}) / a,$$

$$w_{\alpha z} = (u_{\alpha}^{(1)} + u_{\alpha}^{(4)} - u_{\alpha}^{(2)} - u_{\alpha}^{(3)}) / a,$$

где a – постоянная решетки.

Величины $w_{\alpha\beta}$ соответствуют производным $\partial u_{\alpha} / \partial r_{\beta}$ в приближении сплошной среды. Тензор деформации $u_{\alpha\beta}$, согласно [3], рассчитывается как

$$u_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (w_{\alpha\beta} + w_{\beta\alpha} + w_{\gamma\alpha} w_{\gamma\beta}).$$

Этот алгоритм оценки значений компонент тензора деформации прост и экономичен в реализации. Хотя алгоритм имеет всего лишь первый порядок аппроксимации с точки зрения сплошнородного подхода, но в данном случае изначально рассматривается дискретная атомистическая модель на атомарных масштабах. В такой ситуации сам по себе континуальный сплошнородный подход является лишь грубым приближением к дискретной реальности. Поэтому речь может идти лишь о разумной оценке значений компонент тензора деформации. Кроме того, рассчитываемые нами значения компонент тензора деформации обычно не превышают величины 0,05.

Проведены расчеты для нескольких десятков структур, содержащих до 12 пирамидок разных размеров. Для всех структур были рассчитаны и визуализированы распределения плотности энергии деформации, распределения компонент тензора деформации и распределения в приближении эффективных масс потенциальной энергии электронов для шести долин, образующих дно зоны проводимости кремния.

На рисунках 1–4 в качестве примеров представлены некоторые результаты проведенных расчетов.

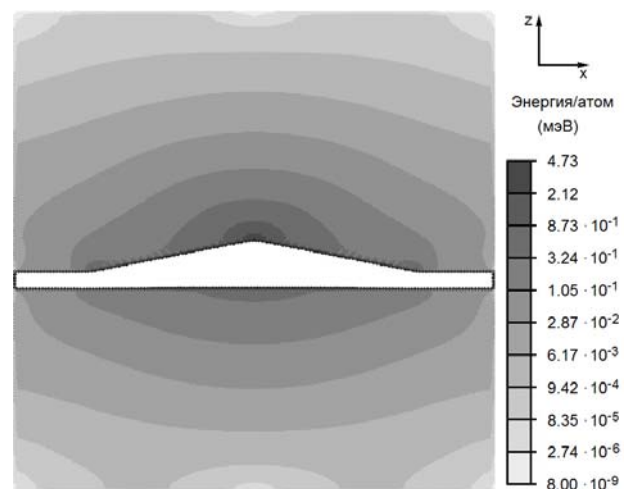


Рис. 1. Распределение объемной плотности энергии деформации в кремнии для случая одиночной пирамидки

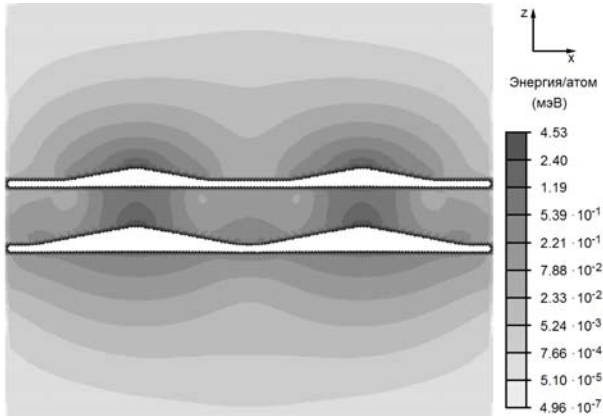


Рис. 2. Распределение плотности энергии деформации для двухслойной системы, содержащей четыре пирамидки разных размеров

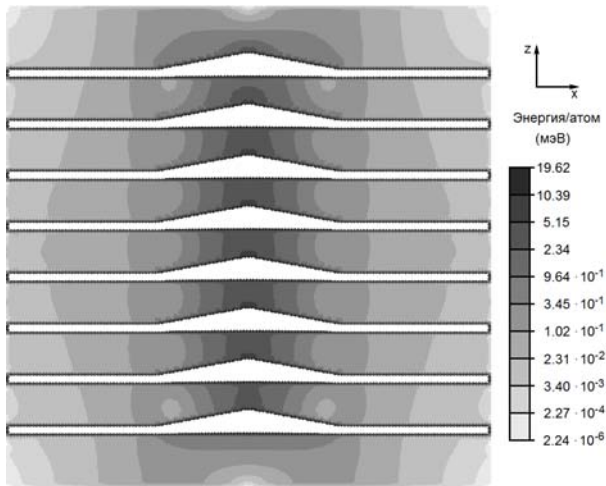


Рис. 3. Распределение плотности энергии деформации для сечения $y = 0$ для стека из восьми пирамидок с полушириной основания в 55 атомарных слоев и расстоянием между центрами соседних пирамидок в 32 атомарных слоя

Для более информативного отображения энергии цветами используется неравномерная шкала. Соответствие между величиной энергии и цветами устанавливается палитрой, приведенной на рисунке 1.

Здесь же приведено рассчитанное распределение объемной плотности энергии деформации в кремнии в центральном сечении ($y = 0$) кластера, содержащего одиночную пирамидку с полушириной основания в 100 атомарных слоев. Максимальное по величине значение энергии деформации 35.97 мЭВ достигается на внутренних атомах смачивающего слоя вблизи периметра основания пирамидки.

В процессе эпитаксиального роста в эксперименте наблюдается тенденция спонтанного форми-

рования вертикальных (вдоль направления роста) структур из германиевых пирамидок. Деформационное поле, создаваемое в кремнии какой-либо пирамидкой очередного слоя, создает благоприятные условия для формирования новой пирамидки именно над этой пирамидкой в следующем выращиваемом слое.

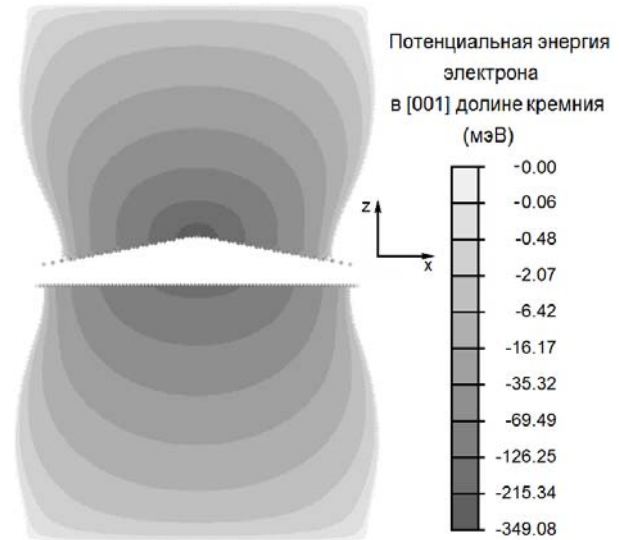


Рис. 4. Распределение потенциальной энергии электрона в кремнии для Δ^{001} и $\Delta^{00\bar{1}}$ долин в центральном сечении ($y = 0$) кластера, содержащего одиночную пирамидку с полушириной основания в 100 атомарных слоев

На рисунке 2 изображено распределение плотности энергии деформации для центрального сечения ($y = 0$) двухслойной системы, где две пирамидки нижнего слоя имеют полуширину в 60 атомарных слоев, а пирамидки верхнего слоя – в 40 атомарных слоев. Расстояние между центрами пирамидок в направлении оси x равно 140 атомарным слоям, а в направлении оси z – 40 атомарным слоям.

Вертикальную структуру из пирамидок, естественно формирующуюся в процессе роста, мы рассматриваем в качестве возможного прототипа последовательного квантового регистра для квантового компьютера. На рисунке 3 представлены результаты для подобной восьмиразрядной структуры.

На рисунках 2 и 3 четко видно перекрытие деформационных полей соседних пирамидок, что в итоге ведет к углублению потенциальных ям для электронов.

Примером расчета распределения потенциальной энергии электрона является результат, представленный на рисунке 4 и полученный для той же пирамидки, что и на рисунке 1.

Библиографический список

1. Двуреченский А.В., Якимов А.И. Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками // УФН. – 2001. – №12(171).
2. Ненашев А.В., Двуреченский А.В. Пространственное распределение упругих деформаций в структурах Ge/Si с квантовыми точками // ЖЭТФ. – 2000. – №9(118).
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. – М., 1965.