

05;06

Исследование методом молекулярной динамики барьеров диффузии адатомов кремния и углерода на поверхности (111) кремния

© В.С. Харламов, М.Н. Лубов, Е.Е. Журкин, Ю.В. Трушин

Научно-образовательный комплекс „Санкт-Петербургский физико-технический научно-образовательный центр“ РАН
E-mail: trushin@edu.ioffe.ru

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Поступило в Редакцию 26 февраля 2006 г.

При помощи метода молекулярной динамики с использованием многочастичного потенциала Терсова произведены расчеты барьеров диффузии адатомов кремния и углерода как на идеальной нереконструированной поверхности (111) кремния, так и вблизи расположенных на такой поверхности кластеров SiC разного размера.

PACS: 68.35.Fx

Карбид кремния, благодаря ряду своих уникальных свойств, является привлекательным материалом для различных применений в современной микро- и оптоэлектронике [1–4]. Обнаруженные и исследованные в InAs/GaAs квантовые точки [5,6] играют важную роль и в карбиде кремния [7,8]. Перспективным на сегодняшний день способом получения карбида кремния считается его выращивание на высококачественных подложках кремния эпитаксиальными методами (например, [9,10]). В ходе такого роста важную роль играют диффузионные процессы. Также известно, что на начальных стадиях роста карбида кремния при молекулярно-лучевой эпитаксии на поверхности подложки образуются кластеры SiC. Их присутствие может оказывать влияние на дальнейшие процессы, происходящие на растущей поверхности [11,12]. Кроме того, вследствие разных параметров решетки и коэффициентов теплового расширения подложки кремния и карбида кремния, возникают упругие напряжения, которые могут оказывать влияние на

формирование структуры. Таким образом, общая картина процесса эпитаксиального роста довольно сложна, и многие ее аспекты изучены не полностью, поэтому в данной работе исследуются барьеры диффузии для адатомов кремния и углерода на идеальной нереконструированной поверхности (111) кремния, а также в области расположенного на такой поверхности кластера карбида кремния.

Исследования проводились при помощи компьютерного моделирования методом классической молекулярной динамики [13–16]. Детали используемого в представленной работе алгоритма описаны в [17–19]. Для вычисления сил межатомного взаимодействия используется многочастичный потенциал Терсова [20], хорошо зарекомендовавший себя для описания свойств материалов в системе кремний–углерод. Применимость этого потенциала для адекватного описания поверхностных свойств кремния и, в частности, диффузионных барьеров, была продемонстрирована авторами данной работы в [21] для случая (2×1)-реконструированной поверхности (100) кремния. Для этой поверхности в литературе имеются величины барьеров, определенные из экспериментов [22] или компьютерных расчетов „из первых принципов“ [23,24]. Хорошее согласие полученных значений барьеров для этой поверхности позволяет рассчитывать на то, что потенциал Терсова будет достаточно точно описывать барьеры и на других поверхностях, например (111) в Si.

Для проведения расчетов используется модельный кристаллит кремния с гранями (111), ($\bar{1}10$) и (112), размером около $7 \times 7 \times 7$ параметров решетки, состоящий из 2880 атомов. Для рассмотрения бесконечной поверхности (111) вдоль направлений, перпендикулярных к остальным двум граням, применяются периодические граничные условия. Для подготовки такого модельного образца к последующему расчету диффузионных барьеров производилась его релаксация при помощи процедуры быстрого охлаждения (демпинга) [17]. Она заключается в том, что на каждом временном шаге при решении системы уравнений движения обнуляются скорости тех атомов, для которых угол между векторами скорости и силы составляет более чем $\pi/2$. В результате этого система быстро достигает локального равновесия при температуре, близкой к 0 К.

При рассмотрении диффузии адатома вблизи расположенного на поверхности кластера процедура подготовки модельного образца является более сложной. Физическое время эволюции системы при расчетах ме-

тодом молекулярной динамики пропорционально затраченному машинному времени. Несмотря на быстрый прогресс вычислительной техники, интервалы физического времени, которые на сегодняшний день могут быть рассмотрены методом молекулярной динамики при приемлемом машинном времени, лежат в наносекундном диапазоне. Это значительно меньше длительности процесса формирования кластера, вследствие чего моделирование этого процесса таким методом невозможно. Поэтому для оценки диффузионных барьеров вблизи кластера готовый кластер SiC заданного размера искусственно помещался на одну из граней (111) идеального кристаллита. Вследствие симметрии рассматриваемой поверхности была выбрана шестиугольная форма основания кластера, а сам он представлял собой усеченную пирамиду. В целом подготовка модельного образца с кластером состояла из следующих этапов:

1) искусственное размещение кластера на поверхности (при этом атомы кластера первоначально помещаются в узлы воображаемой решетки, продолжающей решетку кремниевой подложки);

2) релаксация образца при помощи процедуры демпинга (при этом происходит уменьшение межатомных расстояний в кластере, поскольку параметр решетки карбида кремния меньше, чем у кремния);

3) разогрев образца до температуры 900 К, характерной для экспериментального эпитаксиального роста (при этом проверяется устойчивость полученной конфигурации);

4) повторный демпинг образца (при этом система оказывается в состоянии с устойчивой конфигурацией и температурой, близкой к 0 К).

Подготовленный описанным выше способом модельный образец (с идеальной поверхностью или с кластером) использовался для определения барьеров, диффундирующих по поверхности атомов кремния или углерода. Для этого при помощи метода молекулярной динамики рассчитывалась так называемая поверхность потенциальной энергии для адатомов. Методика ее определения описана в [21]. Минимумы такой поверхности являются энергетически выгодными местами для адатомов. Барьеры диффузии — это минимальные энергии, необходимые для перехода между двумя минимумами. Они определяются путем анализа построенной энергетической поверхности.

Поверхность потенциальной энергии для адатома кремния на идеальной нереконструированной поверхности (111) кремния представлена на рис. 1, *a*. Наиболее существенные минимумы данной поверхности потенциальной энергии — глубокий минимум в окрестности точки *C*

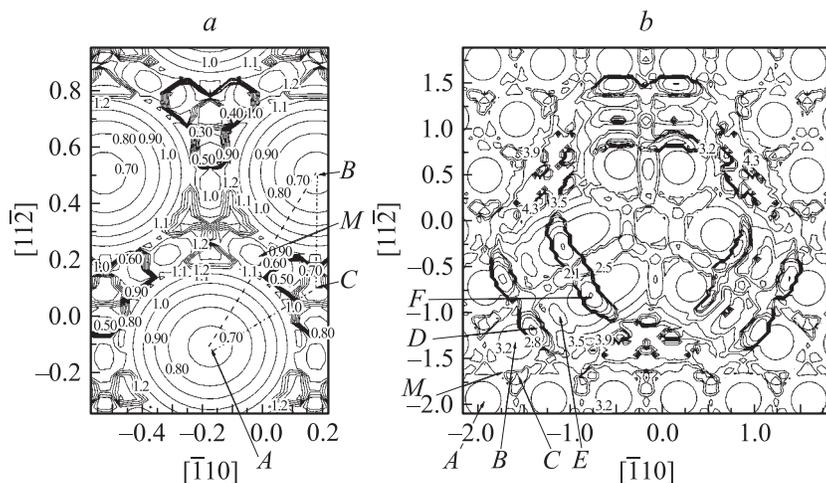


Рис. 1. Поверхности потенциальной энергии для адатома кремния на: *a* — идеальной поверхности (111) кремния; *b* — такой же поверхности с кластером SiC из 74 атомов.

(и эквивалентных ей) и минимум в точке *A* (или *B* и эквивалентных им). Анализ полученной поверхности потенциальной энергии показывает, что наиболее выгодной является диффузия между минимумами *A* и *B* или другими, эквивалентными им. При этом наиболее выгодный путь лежит почти по прямой через промежуточный минимум *M*. Количественное изменение потенциальной энергии при движении из *A* в *B* через *M* представлено на рис. 2 (кривая *I*). При этом для всех кривых за нулевой уровень условно принято значение потенциальной энергии на дне минимума *A*. Соответствующий энергетический барьер составляет 0.53 eV. В то же время барьер при движении из *A* в *B* через минимум *C* составляет уже 0.95 eV.

Для модельного образца с кластером SiC из 74 атомов рассчитанная поверхность потенциальной энергии для адатома кремния изображена на рис. 1, *b*. Наличие кластера приводит к возникновению глубоких минимумов на подложке на границе кластера (таких, как обозначенный на рисунке минимум *D*), а также на самом кластере (таких, как *E* и *F*). В целом минимумы на такой поверхности можно условно разделить на четыре группы: 1) удаленные от кластера и типичные для иде-

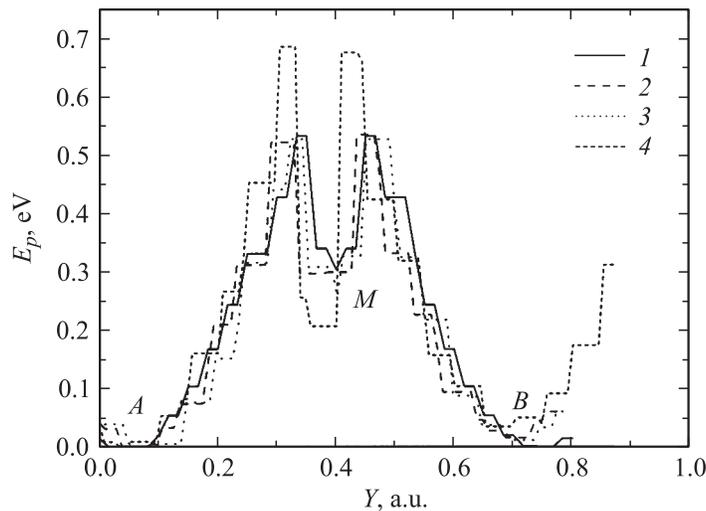


Рис. 2. Изменение потенциальной энергии системы E_p при движении адатома кремния вдоль пути $A-M-B$: 1 — на идеальной поверхности (111) кремния; 2 — вблизи кластера SiC из 56 атомов; 3 — вблизи кластера SiC из 74 атомов; 4 — вблизи кластера SiC из 164 атомов.

альной поверхности; 2) такие же, несколько модифицированные из-за близкого расположения к кластеру; 3) на подложке непосредственно вблизи границ кластера; 4) на самом кластере. Для изучения влияния кластера на диффузию адатомов рассчитывались величины барьеров при переходах между минимумами A и B , а также A и C , характерными для идеальной поверхности, но расположенными вблизи кластера (см. рис. 1, b). Изменение потенциальной энергии на пути $A-B$ рядом с кластером из 56, 74 или 164 атомов представлено на рис. 2 (кривые 2, 3, 4 соответственно). Также были получены величины барьеров для диффузионных прыжков адатомов в энергетические минимумы, возникающие из-за наличия кластера. Некоторые из значений барьеров приведены в таблице, из которой видно, что для переходов ($B-D$, $D-E$, $E-F$) в минимумы, связанные с наличием кластера, величины барьеров значительно больше, чем для переходов вне кластера ($A-B$ и $A-C$). Это означает, что на границах кластера и на нем самом диффундирующие или осаждающиеся атомы будут захватываться в глубокие минимумы

Диффузионные барьеры E_a для атомов Si и C на идеальной поверхности Si(111) и вблизи кластера SiC

	Адатом Si				Адатом C		
	E_a, eV				E_a, eV		
Образец	Si(111)	Si(111) с клас- тером SiC (56 at.)	Si(111) с клас- тером SiC (74 at.)	Si(111) с клас- тером SiC (164 at.)	Si(111)	Si(111) с клас- тером SiC (74 at.)	Si(111) с клас- тером SiC (164 at.)
Переход							
A–B	0.53	0.52	0.53	0.63	1.08	1.11	0.64
A–C	0.95	0.88	0.90	1.28	1.75	1.95	1.37
B–D			1.1	2.01		0.74	1.6
D–E			1.23	1.51		1.31	1.58
E–F			1.3	1.65		2.55	2.23

типа *D*, *E*, *F*. Следовательно, кластер будет замедлять диффузию адатомов вокруг себя и может расти за счет захваченных атомов. Также из рис. 2 и таблицы видно, что присутствие кластера заметно сказывается на барьерах диффузии в близлежащих областях подложки (см. переходы A–B и A–C) только для наибольшего из кластеров.

Аналогичные расчеты проведены для адатома углерода на идеальной поверхности кремния и поверхности с кластерами карбида кремния из 74 и 164 атомов. Данные по барьерам также приведены в таблице.

Таким образом, проведен расчет величин барьеров диффузии для адатомов кремния и углерода на идеальной поверхности (111) кремния и такой же поверхности с расположенными на ней кластерами SiC разных размеров. Получено, что на рассмотренных кластерах и их границах имеются глубокие минимумы энергии, в которые будут захватываться диффундирующие атомы, замедляя тем самым диффузию вблизи кластера и приводя к его росту.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ 05-02-16679, федеральной программы поддержки ведущих научных школ (РИ-112.0/001/171) и инициативного проекта Научной программы СПбНЦ РАН за 2006 г.

Список литературы

- [1] *Silicon carbide and related materials.* / Ed. by M.G. Spencer. et al. Inst. Phys. Conf. Ser. N 137. Bristol and Philadelphia, 1993.
- [2] *Morkoc H., Strite S., Gao M.E.* et al. // J. Appl. Phys. 1994. V. 76. P. 1363.
- [3] *Иванов П.А., Челноков В.Е.* // ФТП. 1995. Т. 29. В. 11. С. 1921.
- [4] *Casady J.B., Johnson R.W.* // Sol. State Electr. 1996. V. 39. N 10. P. 1409.
- [5] *Ledentsov N.N., Ustinov V.M., Alferov Zh.I.* et al. // Proc 22nd Int. Conf. Phys. Semicond. Vancouver, Canada, August 1994. V. 3. P. 1855.
- [6] *Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Алферов Ж.И.* и др. // ФТП. 1998. Т. 32. В. 4. С. 385.
- [7] *Brunner K., Eberl K., Winter W.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. P. 303.
- [8] *Chakraborty T.* Quantum dots: A survey of the properties of artificial atoms. Amsterdam: Elsevier Science, 1999.
- [9] *Fissel A., Pfennighaus K., Kaiser U.* et al. // Mater. Sci. Forum. 1998. V. 264–268. P. 255–258.
- [10] *Pezoldt J., Stauden Th., Cimalla V.* et al. // Mater. Sci. Forum. 1998. V. 264–268. P. 251.
- [11] *Safonov K.L., Kulikov D.V., Trushin Yu.V.* et al. // Proc. of SPIE. 2002. V. 4627. P. 165.
- [12] *Safonov K.L., Schmidt A.A., Trushin Yu.V.* et al. // Mater. Sci. Forum. 2003. V. 433–436. P. 591.
- [13] *Gibson J.B., Goland A.N., Milgram M., Vineyard G.H.* // Phys. Rev. 1960. V. 120. P. 1229.
- [14] *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- [15] *Курсанов В.В.* ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении. М.: Энергоатомиздат, 1990. 302 с.
- [16] *Frenkel D., Smit B.* Understanding molecular simulation. San-Diego–London–Boston–New-York–Sydney–Tokyo–Toronto: Academic Press, 1996. 444 p.
- [17] *Zhurkin E.E., Hou M.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2000. V. 12. P. 6735.
- [18] *Kharlamov V.S., Zhurkin E.E., Hou M.* // Nucl. Instr. and Meth. B. 2002. V. 193. P. 538.
- [19] *Zhurkin E.E., Kolesnikov A.S.* // Nucl. Instr. And Meth. B. 2003. V. 202. P. 269.
- [21] *Трушин Ю.В., Журкин Е.Е., Харламов В.С.* и др. // Письма в ЖТФ. 2004. Т. 30. В. 15. С. 48.
- [22] *Mo Y.M., Kleiner J., Webb M.B., Lagally M.G.* // Surf. Sci. 1992. V. 268. P. 275.
- [23] *Brock G., Kelly P.J., Car R.* // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. P. 1729.
- [24] *Cicero G., Catellani A.* // Appl. Surf. Sci. 2001. V. 184. P. 113.