

УДК 538.91

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ В СТРУКТУРАХ Ge/Si**

© 2014 г.

**П.А. Шиляев, П.А. Белоножкин, А.Е. Алешин**

Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского

belonozhkin\_p@phys.unn.ru

*Поступила в редакцию 24.09.2013*

Методами молекулярной динамики моделируются поля упругих напряжений в структурах с одной и двумя квантовыми точками  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  в матрице кремния. Обнаружены периодически изменяющиеся напряжения по контуру квантовых точек и несимметричное распределение напряжений.

*Ключевые слова:* моделирование, механические напряжения, гетероструктуры.

**Введение**

Гетеронаноструктуры на основе германия на кремнии привлекают внимание исследователей ввиду больших успехов в создании новых перспективных приборов с использованием квантовых эффектов [1]. Используя эффекты размерного квантования спектра носителей, можно создавать светоизлучающие и фотоприёмные устройства, позволяющие кремниевой технологии успешно конкурировать с традиционно оптоэлектронными материалами, такими как  $\text{A}_3\text{B}_5$ . Особый интерес исследователей прикован к направлению, связанному с использованием полупроводниковых материалов на основе твердых растворов  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ , содержащих кластеры Ge нанометровых размеров (квантовые точки), встроенные в матрицу кремния.

Вследствие разницы в параметрах решётки Si и Ge (0.543 нм и 0.565 нм соответственно) в SiGe-гетероструктурах возникают механические напряжения, и их пространственное распределение влияет на оптические и электронные свойства данных систем. Релаксация упругих напряжений в зависимости от параметров структур и условий их роста может происходить либо за счет образования дефектов кристаллической решетки (пластическая релаксация), либо за счет развития шероховатости поверхности (упругая релаксация) [2]. Использование механизма упругой релаксации позволяет создавать такие низкоразмерные объекты, как самоформирующиеся наноостровки или квантовые точки. При создании многослойных приборных структур или сверхрешеток, содержащих самоформирующиеся наноостровки  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ , механические напряжения будут сильно влиять на процессы роста, структуру и свойства таких структур. По этой причине исследо-

вание и прогнозирование механических напряжений в структурах данного типа является важной практической и теоретической задачей.

Целями данной работы являлись разработка методики моделирования напряжений в гетероэпитаксиальных структурах Ge/Si методом молекулярной динамики и изучение особенностей распределения напряжений в системе с одной и двумя квантовыми точками  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  в матрице Si.

**Методика эксперимента**

Для моделирования механических напряжений в данной работе использовался метод молекулярной динамики. Расчеты проводились на высокопроизводительном кластере ННГУ с пиковой производительностью 3 Тфлопс с использованием свободно распространяемого программного пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Программный пакет LAMMPS был перекомпилирован под ОС Windows для использования Microsoft Messaging Passing Interface (Microsoft MPI) с оптимизацией под архитектуру Intel 64 путем применения компилятора Intel (icc). Это позволило увеличить производительность почти в 2 раза. Размер моделируемой системы достигал  $10^7$  атомов, моделируемый период времени до 1 нс.

Для описания динамики системы использовались трехчастичные потенциалы Стиллинджера–Вебера [3] и Терсоффа [4], которые наиболее правильно описывают динамику молекул (или, как в данном случае, — атомов) внутри твердого тела. Применялись циклические граничные условия. Контроль температуры проводился методом Нозе–Хувера [5], минимизация энергии описывалась методом сопряженных градиентов Полака–Рибьера [6].

Расчёт механических напряжений проводился исходя из вириального представления. В пакете LAMMPS компоненты тензора напряжений  $S_{ab}$  для  $i$ -го атома рассчитываются следующим образом ( $a, b$  пробегает значения  $x, y, z$ ):

$$\begin{aligned}
 S_{ab} = & - \left[ m v_a v_b + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_p} (r_{1a} F_{1b} + \right. \\
 & + r_{2a} F_{2b}) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_b} (r_{1a} F_{1b} + \\
 & + r_{2a} F_{2b}) + \frac{1}{3} \sum_{n=1}^{N_d} (r_{1a} F_{1b} + r_{2a} F_{2b} + \\
 & + r_{3a} F_{3b}) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{N_d} (r_{1a} F_{1b} + r_{2a} F_{2b} + \\
 & + r_{3a} F_{3b} + r_{4a} F_{4b}) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{N_d} (r_{1a} F_{1b} + \\
 & \left. + r_{2a} F_{2b} + r_{3a} F_{3b} + r_{4a} F_{4b}) \right].
 \end{aligned} \quad (1)$$

Первый член формулы соответствует кинетической энергии, второй член – энергия парного взаимодействия с  $N_p$  ближайшими соседями ( $r_1, r_2$  – координаты атомов,  $F_1, F_2$  – силы взаимодействия) атома  $i$ . Третий член в выражении описывает силу связей атома с ближайшими соседями; в следующих членах учитываются угловые зависимости взаимодействия. В данном случае размерностью компонент тензора напряжений будет «давление, умноженное на объем». Для перехода к единицам давления использовалось деление на объем рассматриваемой области. Для простоты анализа брались лишь диагональные компоненты, которые соответствуют величинам давлений в направлениях  $x, y, z$ .

Для обработки результатов была разработана и реализована специальная программа, работающая с выходными файлами программы LAMMPS (в них содержится информация о каждом атоме: координаты и механические напряжения в каждом направлении). Для устранения дискретности распределения напряжений программа производит усреднение в малых объемах моделируемого кристалла (линейные размеры от 1 нм до 30 нм) по следующей формуле:

$$p = \sum_{i=1}^n \frac{p_{ix} + p_{iy} + p_{iz}}{3}, \quad (2)$$

где  $p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}$  –  $x$ -,  $y$ -,  $z$ -компоненты напряжений  $i$ -го атома, входящего в объем. Суммирование осуществляется по всем атомам, попавшим в усредняемый объем.

Положения атомов визуализировались при помощи свободно распространяемого программного пакета VMD (Visual Molecular Dynamic).

## Результаты и их обсуждение

### 1. Моделирование процесса молекулярно-лучевой эпитаксии

Для проверки правильности выбора потенциалов сначала было проведено моделирование молекулярно-лучевой гомоэпитаксии кремния на кремнии. Моделирование проводилось с потенциалами Стиллинджера–Вебера [3] и Терсоффа [4]. Процесс молекулярно-лучевого осаждения моделировался путем добавления в систему атомов кремния, летящих в направлении кремниевой подложки, имеющей температуру 700°C. Полученные конфигурации приповерхностных и поверхностных атомов показаны на рис. 1.

Как видно из рис. 1, при использовании потенциала Стиллинджера–Вебера четко видно правильное упорядочивание атомов и формирование димеров, которые формируют ряды. Данная структура соответствует экспериментально наблюдаемой поверхностной реконструкции Si (рис. 2), что подтверждает правильность работы модели и правильность выбора потенциала.

Таким образом, можно сделать вывод: потенциал Стиллинджера–Вебера описывает поверхностные процессы, происходящие во время молекулярно-лучевой эпитаксии кремния, лучше, чем потенциал Терсоффа. Это может быть связано с тем, что данный потенциал был специально изменён для лучшего описания объёмных эффектов, что негативно отразилось на поверхностном поведении атомов.

### 2. Моделирование механических напряжений

Однако в проведенных в работе многочисленных экспериментах по моделированию процесса молекулярно-лучевой эпитаксии Ge на Si нам не удалось зафиксировать формирования островков Ge на поверхности Si, возникающих за счет релаксации упругих напряжений. Это мы связываем с малым размером моделируемой области и недостаточным временем осаждения. Однако увеличение размера системы или времени осаждения ведет к многократному увеличению мощности вычислительного кластера и требуемого на расчеты времени. Ввиду отсутствия необходимых вычислительных мощностей решено было использовать подход, описанный в работе [9]. Суть данного подхода заключается в том, что создается начальная конфигурация атомов, близкая к конечному состо-

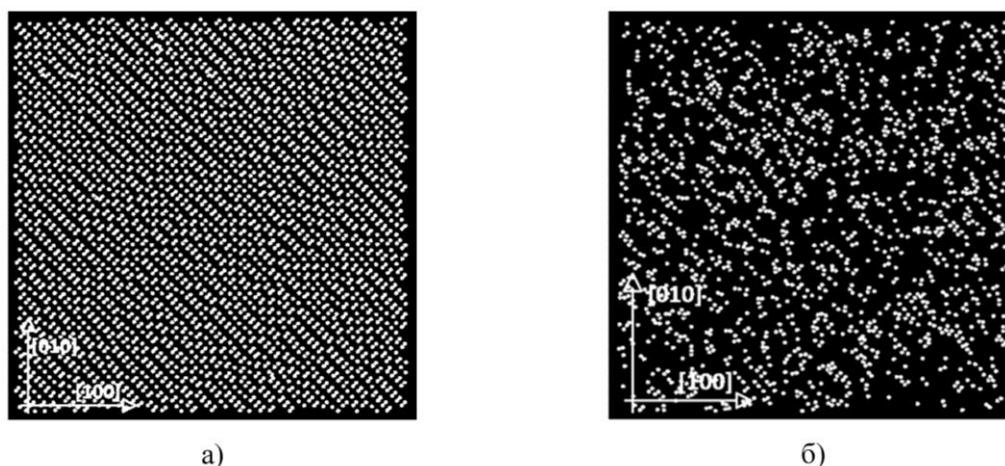


Рис. 1. Вид поверхности при моделировании процесса гомоэпитаксии кремния при помощи потенциала Стиллергера–Вебера (а) и Терсоффа (б). Изображение получено в программе VMD

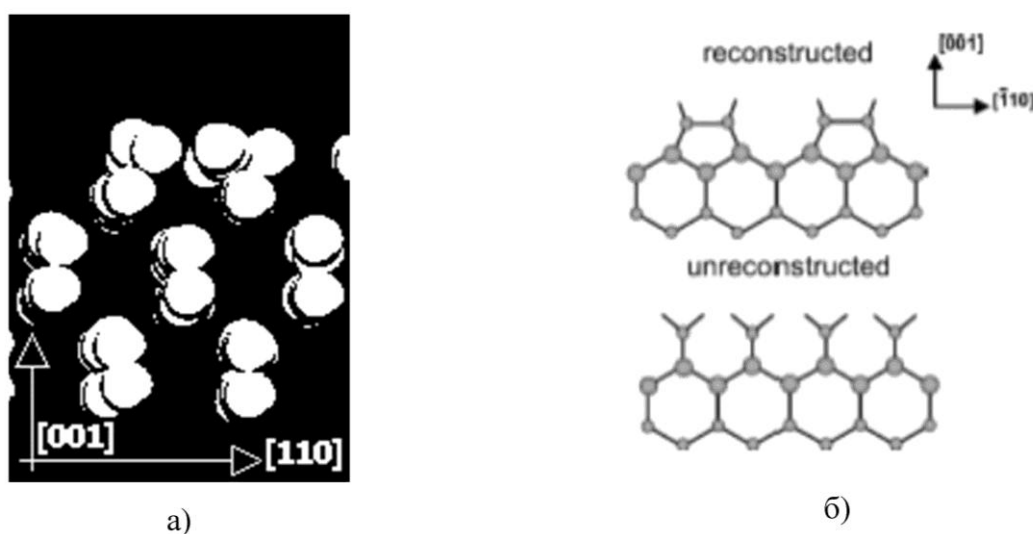


Рис. 2. Сравнение расположения приповерхностных атомов, полученного при помощи моделирования (а), с литературными данными из работы [8] (б)

янию моделируемой системы. Далее система «отжигается» при высокой температуре (температура обычно соответствует реальным температурам выращивания исследуемых структур – в нашем случае это  $700^{\circ}\text{C}$ ), что заставляет релаксировать энергию системы и побуждает атомы занимать наиболее энергетически выгодное положение.

Первым опытным вариантом была конфигурация с одной квантовой точкой (КТ)  $\text{Si}_{0.625}\text{Ge}_{0.375}$  в матрице кремния. Проекция системы на плоскость  $Y\text{O}Z$  представлена на рис. 3. В объеме же она выглядела как часть шара, ограниченного снизу плоскостью, параллельной плоскости  $X\text{O}Y$ . Размеры моделируемой области: высота  $h = 52$  нм, ширина  $y = 62$  нм. Доля Ge регулировалась в модели путем замещения нужного количества атомов Si в элементарной ячейке атомами Ge с одновременной модифи-

кацией параметра решетки согласно закону Вегарда. Размеры КТ выбраны исходя из размеров реальных гетероструктур, исследуемых на физическом факультете ННГУ.

После 70000 фс получается картина распределения напряжений, представленная на рис. 4.

Видно, что большая часть напряжений сжатия и растяжения скоплены на границе раздела германия и кремния, что соответствует физическим представлениям. Также видно, что напряжения распределены симметрично по горизонтальной оси, что следует из симметрии самой системы.

Отдельный интерес представляет исследование системы, состоящей из нескольких КТ. В ходе исследований системы, состоящей из двух вертикально связанных квантовых точек  $\text{Si}_{0.625}\text{Ge}_{0.375}$  (основания КТ смещены на 33 нм друг от друга по вертикали), была замечена

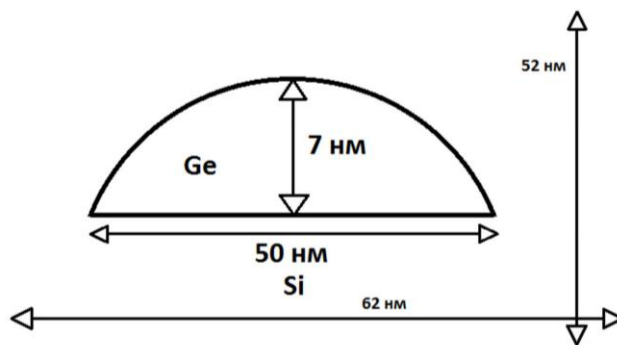


Рис. 3. Модель системы с одной квантовой точкой  $\text{Si}_{0.625}\text{Ge}_{0.375}$  в матрице Si

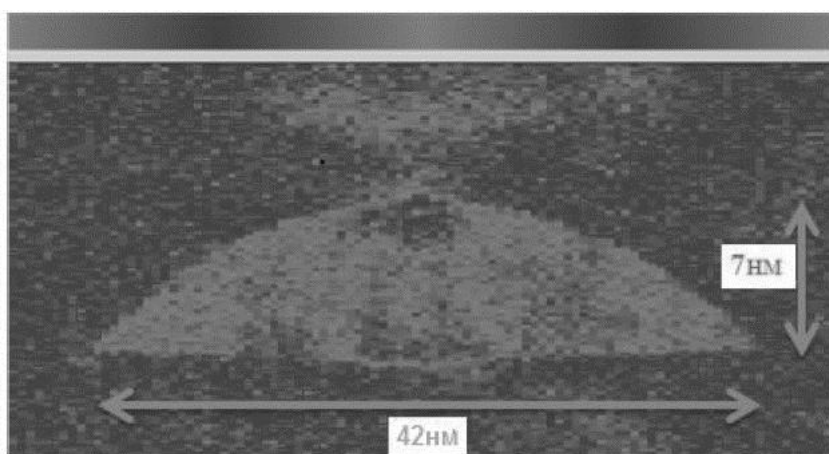


Рис. 4. Распределение усредненных напряжений в системе с квантовой точкой  $\text{Si}_{0.625}\text{Ge}_{0.375}$  в матрице Si через 70000 фс. Минимальное напряжение обозначено белым цветом, максимальное – черным

периодичность напряжений, возникающих по периметру квантовой точки (см. рис. 5). Период напряжений составлял примерно 11 нм. Аналогичная периодичность наблюдается по всему периметру обеих квантовых точек.

Другой интересной особенностью стало то, что механические напряжения распределены несимметрично относительно вертикальной оси системы (это хорошо видно на нижнем графике рисунка 5). На наш взгляд, данная несимметричность связана с кристаллографическими особенностями положений атомов в кристаллической решетке (по разным направлениям у атома в элементарной ячейке имеется разное число ближайших соседей). Сходные данные приводятся в работе [10].

Напряжения, рассчитанные в моделируемой структуре, варьировались от  $0.8 \pm 0.5$  до  $1.1 \pm 0.5$  ГПа, что соответствует по порядку величины экспериментально измеренным напряжениям в структурах подобного типа.

В системе из двух КТ напряжения в КТ  $\text{Si}_{0.625}\text{Ge}_{0.375}$  в направлении [001] росли от островка к островку. В самом окружающем слое Si период решетки практически не изменяется, однако на границе претерпевает серьезную деформацию, которая проявляется в растяжении параметра решетки. В объеме КТ  $\text{Si}_{0.625}\text{Ge}_{0.375}$  наблюдается уменьшение параметра решетки в латеральном направлении и остаётся практически неизменным параметр решетки в перпендикулярном направлении (направлении роста).

Это объясняется тем, что в месте контакта двух материалов с разным параметром решетки они начинают подстраиваться друг под друга. Кристаллическая решетка материала с меньшим параметром решетки «старается» латерально его увеличить, а так как объем решетки должен оставаться постоянным, то получается, что в вертикальном направлении решетка должна сжаться. Материал же с большим параметром решетки ведет себя с точностью до наоборот:

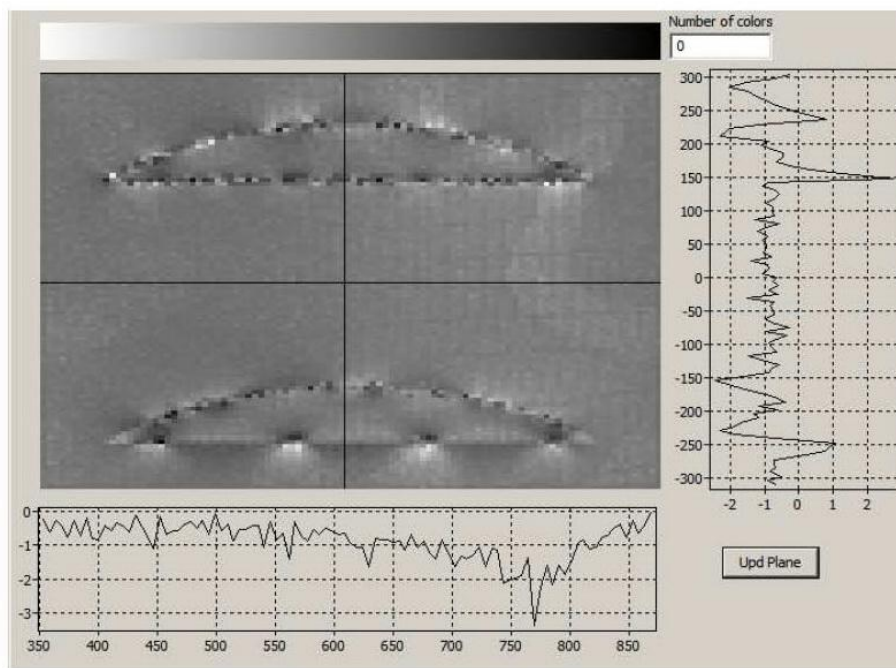


Рис. 5. Механические напряжения (Y-компонента) в системе из двух КТ  $\text{Si}_{0.625}\text{Ge}_{0.375}$  в матрице Si. Размер моделируемой области  $62 \times 62 \times 52 \text{ nm}^3$

сжимается латерально и растягивается в перпендикулярном направлении.

### Заключение

Проведенное в работе моделирование распределения механических напряжений в готовой структуре, без моделирования самого процесса роста структур, позволяет получать качественные данные о пространственном распределении механических напряжений. Несомненным достоинством такого подхода является возможность проведения расчётов на небольших вычислительных мощностях. Однако для учета всех возможных особенностей моделируемых систем желательно проведение моделирования самого ростового процесса, что планируется сделать в следующих работах.

### Список литературы

1. Grimmeiss H.G. Silicon-germanium – a promise into the future // Физика и техника полупроводников. 1999. Т. 33. С. 1032–1034.
2. Paul D.J. Si/SiGe heterostructures: from material and physics to devices and circuits // Semiconductor Science Technology. 2004. V. 19. P. R75–R108.
3. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phase of silicon // Physical Review B. 1984. V. 31. P. 5262–5270.
4. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // Physical Review B. 1988. V. 39. P. 5566–5568.
5. Hunenberger P.H. Thermostat algorithms for molecular dynamics simulations // Adv. Polymer. Sci. 2005. V. 173. P. 105–149.
6. Sheppard D., Terrell R., Henkelman G. Optimization methods for finding minimum energy paths // The Journal of Chemical Physics. 2008. V. 128. P. 1–10.
7. Tsai D.H. The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics // J. Chem. Phys. 1979. V. 70. P. 1375–1382.
8. Voigtlander B. Fundamental process in Si/Si and Ge/Si epitaxy studied by scanning tunneling microscopy during growth // Surface Science Reports. 2001. V. 43. P. 127–254.
9. Raiteri P., Miglio L. Strain maps at the atomic scale below Ge pyramids and domes on a Si substrate // Applied Physics Letters. 2002. V. 80. P. 3736–3738.
10. Pryor C., Kim J., Wang L.W. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots // Journal of Applied Physics. 1997. V. 83. P. 2548–2554.

## SIMULATION OF MECHANICAL STRAINS IN Ge/Si HETEROSTRUCTURES

*P.A. Shilyaev, P.A. Belonozhkin, A.E. Aleshin*

Elastic strain fields in structures with one and two  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  quantum dots in silicon matrix are simulated using molecular dynamics methods. Periodically varying strains over the contour of quantum dots and an asymmetric strain distribution have been discovered.

*Keywords:* simulation, mechanical strains, heterostructures.

*References*

1. Grimmeiss H.G. Silicon-germanium – a promise into the future // *Fizika i tehnika poluprovodnikov*. 1999. T. 33. S. 1032–1034.
2. Paul D.J. Si/SiGe heterostructures: from material and physics to devices and circuits // *Semiconductor Science Technology*. 2004. V. 19. P. R75–R108.
3. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phase of silicon // *Physical Review B*. 1984. V. 31. P. 5262–5270.
4. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // *Physical Review B*. 1988. V. 39. P. 5566–5568.
5. Hunenberger P.H. Thermostat algorithms for molecular dynamics simulations // *Adv. Polymer. Sci.* 2005. V. 173. P. 105–149.
6. Sheppard D., Terrell R., Henkelman G. Optimization methods for finding minimum energy paths // *The Journal of Chemical Physics*. 2008. V. 128. P. 1–10.
7. Tsai D.H. The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics // *J. Chem. Phys.* 1979. V. 70. P. 1375–1382.
8. Voigtlander B. Fundamental process in Si/Si and Ge/Si epitaxy studied by scanning tunneling microscopy during growth // *Surface Science Reports*. 2001. V. 43. P. 127–254.
9. Raiteri P., Miglio L. Strain maps at the atomic scale below Ge pyramids and domes on a Si substrate // *Applied Physics Letters*. 2002. V. 80. P. 3736–3738.
10. Pryor C., Kim J., Wang L.W. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots // *Journal of Applied Physics*. 1997. V. 83. P. 2548–2554.