Моделирование атомной диффузии Ge на структурированных подложках Si методом молекулярной динамики

Новиков П.Л.^{1,2}, Павский К.В.^{1,2}, Насибулов И.А.^{1,2}, Двуреченский А.В.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2

DOI 10.34077/Semicond2019-120

Интерес к пространственно упорядоченным массивам квантовых точек (КТ) обусловлен как разнообразием их физических свойств, так и возможностью их применений в перспективных нанoeлектронных устройствах [1-3]. Такие массивы можно создавать ростом на структурированных подложках (pre-patterned substrates). Структурированными мы называем подложки, на поверхности которых с помощью литографии создан регулярный рисунок с ямками или траншеями. В настоящее время недостаточно изучены механизм атомной диффузии в углублениях на структурированных подложках, механизм зарождения трехмерных островков Ge, деформации в структурированных подложках и связанное с ними неравновесное распределение химического потенциала. Эти вопросы удобно исследовать методом молекулярной динамики (МД).

В данной работе методом МД исследован микроскопический механизм атомной диффузии Ge на структурированных подложках Si с траншеями. Построена карта потенциального рельефа в канавке, позволившая определить энергию активации поверхностной атомной диффузии, характерные маршруты миграции атомов по стенкам траншей, положение энергетических минимумов, выполняющих роль центров захвата адатомов. Выявлены условия, при которых термодинамически выгодной является морфология с нанooстровками в траншеях и между траншеями соответственно.

При моделировании методом МД наиболее затратным, до 95% от общего времени, является процедура поиска ближайших соседей для каждого атома гетероструктуры Ge/Si. Для вычислительных систем (ВС) с общей и распределенной памятью были разработаны и реализованы параллельные алгоритмы поиска ближайших соседей в атомном массиве с использованием списков Верле [4] в стандартах MPI и OpenMP. Показана эффективность их исполнения на ВС.

Работа выполнена при финансовой поддержке Президиума РАН (ГЗ 0306-2018-0012), РФФИ и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 18-41-540005_p_a.

[1] Zh. Zhong and G. Bauer, *Applied Physics Letters* **84**(11), 1922 (2004).

[2] M. S. Leite et al., *Phys. Rev. Lett.* **100**, 226101 (2008).

[3] V. Jovanović et al., *IEEE Electron Device Lett.* **31**, 1083 (2010).

[4] Verlet L., *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967).

Рис.1. — Карта потенциального рельефа в траншее, построенная методом молекулярной динамики.