

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МОЛЕКУЛЯРНО-ПУЧКОВОЙ ЭПИТАКСИИ CdSe ОСТРОВКОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ZnSe

Н. Б. Бубнова

Санкт-Петербургский институт информатики и автоматизации РАН
199178, Санкт-Петербург, 14-я линия ВО, д. 39
<nb@vu.spb.ru>

УДК 658.012

Н. Б. Бубнова. **Моделирование процесса молекулярно-пучковой эпитаксии CdSe островков на поверхности ZnSe** // Труды СПИИРАН. Вып. 2, т. 2. — СПб.: Наука, 2005.

Аннотация. В статье рассматривается проблема прямого моделирования процесса формирования квантово-размерных nanoостровков CdSe на поверхности ZnSe в режиме реального времени. Так же предлагаются возможные методы моделирования, которые позволят решить поставленную задачу. — Библ. 5 назв.

UDC 658.012

N. B. Boubnova. **The simulation of CdSe islands formation on ZnSe surface by molecular beam epitaxy** // SPIIRAS Proceedings. Issue 2, vol. 2. — SPb.: Nauka, 2005.

Abstract. In this paper, the real-time simulation of CdSe quantum-size islands formation on ZnSe surface is considered. In addition, the possible modeling methods, which enable to solve this problem are suggested. — Bibl. 5 items.

1. Введение в область

Одним из важнейших и перспективных направлений микроэлектроники является оптоэлектроника — область науки и техники, исследующая и применяющая процессы взаимодействия оптического излучения с веществом для передачи, приема, преобразования, хранения и отображения информации. В последнее время наибольший интерес проявляется к полупроводниковым приборам оптоэлектроники, при этом основными объектами исследований все в большей степени становятся не объемные монокристаллы, а двухмерные и трехмерные объекты, а также их различные композиции, что способствует развитию миниатюризации элементов электронной аппаратуры. Последние достижения в этой области связаны, прежде всего, с развитием технологии молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ), которая обеспечивает высокую воспроизводимость параметров осаждаемых слоев и объектов пониженной размерности. Именно с помощью метода МПЭ стала возможной реализация низкопороговых инжекционных GaAs/InAs лазеров, где в качестве активной области используется упорядоченный массив квантово-размерных nanoостровков InAs в матрице GaAs. К настоящему моменту времени значительно расширился диапазон материалов, на основе которых могут быть сформированы подобные структуры, а, соответственно, резко возросло количество работ, посвященных вопросам получения и моделирования процесса МПЭ подобных структур. В частности, большим интересом пользуется система ZnSe/CdSe, которая представляет существенный интерес с точки зрения получения "зеленых" лазеров и приборов нового направления физики — спинтроники.

2. Постановка задачи

В настоящее время, опираясь на значительный экспериментальный опыт, построено большое количество моделей процесса формирования структур с активной областью на основе nanoостровков CdSe. Однако большинство из них представляют упрощенный вариант, прежде всего, за счет рассмотрения двухмерного случая, либо за счет уменьшения входных параметров моделирования. Это приводит к тому, что существующие модели сильно ограничены и хорошее соответствие между результатами моделирования и практикой наблюдения дается лишь в узком диапазоне условий.

Целью работы является трехмерное моделирование процесса формирования упорядоченных nanoостровков CdSe на поверхности ZnSe в режиме реального времени. Построение корректной модели для этой системы позволит, в конечном счете, применить ее к другим перспективным мало изученным системам материалов. В рамках моделирования предполагается визуализировать процесс роста трехмерных квантовых nanoостровков.

3. Эксперимент

Процесс МПЭ представляет собой осаждение химических элементов из молекулярных пучков на поверхность нагретой подложки в условиях сверхвысокого вакуума. В случае, когда различие параметров кристаллической решетки осаждаемого слоя и подложки составляет небольшую величину ($<1\%$), выращивание слоя осуществляется послойно, и при этом слой повторяет структуру подложки, т. е. рост проходит по псевдоморфному механизму. Картина кардинально меняется, когда параметры решетки сильно различаются. В этом случае рост начальных монослоев идет по двухмерному механизму, а по достижении толщины слоя некоторого критического значения (2–3 монослоя) происходит переход от двухмерного механизма роста к трехмерному. Это приводит к образованию напряженных nanoостровков, в которых проявляются эффекты размерного квантования.

Последний случай имеет место при осаждении CdSe на поверхности ZnSe, рассогласование параметров кристаллической решетки которых составляет 7%. Плотность и размеры nanoостровков CdSe зависят от многих параметров: входных потоков элементов, их соотношения, температуры подложки, режима осаждения.

Процесс формирования nanoостровка CdSe может быть промоделирован из первых принципов, предполагая, что он включает следующие стадии:

1. **Подача элементов Cd и Se к поверхности ZnSe.** Режим обычной МПЭ предполагает одновременную подачу химических элементов в виде молекулярных пучков к поверхности роста. В нашем случае рост CdSe осуществляется с использованием двух потоков — Cd и Se.
2. **Адсорбция Cd и Se на поверхность ZnSe.** В зависимости от распределения поверхностной энергии, зависящей от многих факторов, атомы локализуются в определенном месте ростовой поверхности.
3. **Миграция атомов Cd и Se по поверхности.** Атом перемещается по поверхности, с той целью, чтобы потенциальная энергия всей системы стала минимальной. Атом может осуществлять скачки по поверхности

ограниченное число раз, так как при каждом скачке энергия атома уменьшается. При этом, соответственно, уменьшается вероятность преодоления энергетического барьера при очередном скачке.

4. **Встраивание или десорбция атомов с поверхности.** После того, как атом совершит определенное количество скачков, возможна реализация двух ситуаций: атом встроится в ростовую поверхность, при этом достигается локальный минимум потенциальной энергии системы; либо атом десорбируется.

Главным условием, лежащим в основе построения модели, является то, что взаимодействие атомов Cd и Se на поверхности происходит таким образом, чтобы энергия поверхности роста, в конечном счете, оказалась минимальной.

4. Методы моделирования процесса

Для подобных процессов обычно применяются два различных по своей природе метода: метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло. Рассмотрим их подробнее.

4.1. Метод молекулярной динамики

Метод молекулярной динамики позволяет моделировать детальную микроскопическую картину внутренней подвижности макромолекулы. В его основе лежит расчет классических (ньютоновских) траекторий движения макромолекулы в фазовом пространстве координат и импульсов ее атомов, когда молекула рассматривается как система взаимодействующих классических частиц. Он успешно используется в теоретических исследованиях структуры и динамики биологических макромолекул, жидкостей, газов и других молекулярных систем.

В методе молекулярной динамики рассчитываются классические (ньютоновские) траектории движения атомов макромолекулы в силовом поле эмпирического атом-атомного потенциала, т. е. моделируется детальная микроскопическая картина внутренней тепловой подвижности макромолекулы в субнаносекундных интервалах времени. Основу метода составляет численное решение классических уравнений Ньютона для системы взаимодействующих частиц:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}), i = 1, 2, \dots, n,$$

где r — радиус-вектор i -го атома, m — его масса, F — суммарная сила, действующая на i -ый атом со стороны остальных частиц:

$$\vec{F}_i(\vec{r}) = -\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial r_i},$$

Здесь: U — потенциальная энергия, зависящая от взаимного расположения всех атомов, которая состоит из следующих составляющих:

$U = U$ (химических связей) + U (валентных углов) + U (торсионных углов) + U (плоских групп) + U (Ван-дер-ваальсовых контактов) + U (электростатики) + U (водородных связей)

4.2. Метод Монте-Карло

Метод Монте-Карло отличается от метода молекулярной динамики тем, что каждая следующая конформация определяется не путем решения уравнений Ньютона, а с использованием случайных процессов. Вместо оценки сил, определяющих возрастающие атомные движения, при моделировании методом Монте-Карло просто симулируют относительно большие движения системы и определяют, действительно ли измененная структура энергически возможна при моделируемой температуре. Этот метод позволяет перепрыгивать через энергетические барьеры без затрат времени на их преодоление. При этом рассматривается лишь соотношение энергий конформаций до и после скачка. Поскольку метод Монте-Карло сканирует конформационное пространство молекулы без построения настоящей временной "траектории", он не может давать информации о численных временных зависимостях. Однако, метод намного лучше метода молекулярной динамики для расчета термодинамических характеристик молекул, например для расчета спектра возможных конформаций и их энергий.

5. Предполагаемые результаты работы

Используя данный подход, с помощью метода Монте-Карло, для этой задачи, была построена упрощенная (для двумерного случая), но в то же время довольно таки громоздкая модель, которая дала удовлетворительный результат. Выполнение поставленной задачи, а именно моделирование трехмерного случая в режиме реального времени, требует более точных методов моделирования. Поэтому, для повышения точности результатов, планируется применить к системе методы прямого моделирования, а именно метод молекулярной динамики. Такая задача сводится к решению больших систем дифференциальных уравнений. Для обеспечения требуемой точности при приемлемом времени моделирования системы требуется привлечение больших вычислительных ресурсов, что может быть реализовано, используя распараллеливание или распределенные вычисления.

Выражаю благодарность Кайгородову В. А. и Солнышкову Д. за полезные дискуссии в области физики.

Литература

- [1] Иванов С. В., Торопов А. А., Сорокин С. В., Шубина Т. В., Седова И. В., Копьев П. С., Алферов Ж. И., Вааг А., Лугауэр Х. Д., Решер Г., Кайм М., Фишер Ф. Ф., Ландвер Г. Синезеленые лазеры на основе ZnSe с новым типом активной области // Физика и техника полупроводников, т.33, №9, 1999 — с.1115–1119.
- [2] Леденцов Н. Н., Устинов В. М., Щукин В.А., Копьев П. С., Алферов Ж. И., Бимберг Д. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры // Физика и техника полупроводников, т.32, №4, 1998 —с. 385–410.
- [3] Молекулярная динамика, <<http://www.moldyn.ru>>
- [4] Ченг Л., Плог К. Молекулярно-лучевая эпитаксия. М.: Мир, 1989.
- [5] Kaygorodov V. A., Sedova I. V., Sorokin S. V., Ivanov S. V., Kop'ev P. S., Lutsenko E. V., Pavlovskii V. N., Zubialevich V. Z., Gurskii A. L., and Yablonskii G. P. High Efficiency Green Lasers Based on Cd(Zn)Se/ZnSe Nanostructures // Proceedings of 11th Int.Symposium "Nanostructures: Physics and Technology", St. Petersburg, Russia, 11 (2003).