

11,12

## Исследование методом молекулярной динамики адатомов Si и C и кластеров SiC на поверхности кремния

© В.С. Харламов,<sup>1,2</sup> Ю.В. Трушин,<sup>1,2</sup> Е.Е. Журкин,<sup>3</sup> М.Н. Лубов,<sup>2</sup> Й. Пецольдт<sup>4</sup><sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
194021 Санкт-Петербург, Россия<sup>2</sup> Санкт-Петербургский физико-технологический научно-образовательный центр РАН,  
195220 Санкт-Петербург, Россия<sup>3</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
195251 Санкт-Петербург, Россия<sup>4</sup> Center for Micro- and Nanotechnologies, Technical University Ilmenau,  
D-98684, Ilmenau, Germany  
e-mail: kharlamo@theory.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 28 ноября 2007 г.)

В рамках исследования начальных стадий формирования слоя карбида кремния на кремнии при молекулярно-лучевой эпитаксии проведено моделирование отдельных адатомов Si и C и кластеров SiC на поверхности Si методом молекулярной динамики. Рассчитаны и проанализированы поверхности потенциальной энергии для адатомов Si и C на  $(2 \times 1)$ -реконструированной поверхности Si(001) и на нереконструированной поверхности Si(111), а также на поверхности Si(111) с расположенным на ней кластером SiC. Получены значения барьеров миграции для адатомов на рассмотренных поверхностях. Исследовано влияние кластера SiC на деформацию приповерхностной области Si(111) и на миграцию адатомов. На поверхностях потенциальной энергии непосредственно над кластером и у его границ обнаружены глубокие минимумы, в которые могут захватываться диффундирующие адатомы. Исследованы и охарактеризованы распределения напряжений и деформаций в решетке кремния под кластером, находящимся на поверхности.

PACS: 68.43.-h, 68.55.Ac, 02.70.Ns, 68.35.Gy

### Введение

Использование углерода в кремниевой микро- и оптоэлектронике предоставляет новые перспективы для создания приборов благодаря возможностям по варьированию ширины запрещенной зоны, созданию напряженных слоев и контролю диффузионных процессов [1–3]. Изменение концентрации замещающего углерода позволяет модифицировать зонную структуру материала, а в случае гетероструктур — варьировать ее от слоя к слою [3–5]. В таких структурах преципитация углерода и образование карбида кремния (SiC) должны быть подавлены. В то же время упорядоченные когерентные преципитаты карбида кремния в кремниевой матрице представляют собой типичный пример наногетероструктур. SiC имеет большую ширину запрещенной зоны в сравнении с кремнием, и, таким образом, данный материал представляет собой систему с антиоточками, имеющую широкий круг применений [6–8]. Кроме того, SiC имеет ряд специфических свойств, таких как высокая термическая стабильность, высокий коэффициент теплопроводности, большое поле пробоя, устойчивость к высокомошным и высокочастотным воздействиям [9,10], позволяющих использовать этот материал в условиях, когда применение других материалов невозможно.

Большинство исследований, посвященных системе Si–C, касается формирования и модификации сплавов

$\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$ . Другая область исследований связана с формированием псевдоподложки для последующей гетероэпитаксии SiC, III–N материалов или алмаза. Этот процесс состоит в создании буферного слоя SiC на поверхности кремния посредством трансформации приповерхностного слоя кремния в карбид. Карбид кремния в этом методе формируется в ходе химической реакции углеродсодержащих агентов с поверхностью кремния. Образование сплава и преципитация SiC являются при этом ключевым этапом. Перечисленные процессы, так же как образование и рост нанометровых зародышей и их регулярность, исследовались экспериментально в [11–20]. Основное внимание в этих исследованиях было сфокусировано на формирование сплавов  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  [11–13] и их термической стабильности [14,15], а также на зарождении и самоупорядочении кластеров SiC на поверхностях кремния и твердых растворов [15–20].

Следует отметить, что возможности по созданию карбид-кремниевых приборов на кремниевой подложке ограничены вследствие формирования дефектов и напряжений, возникающих из-за значительного различия параметров решетки SiC и Si. Стандартными методами для выращивания эпитаксиальных слоев или эпитаксиальных наноразмерных объектов SiC являются химическое осаждение из газовой фазы (CVD) [21], молекулярно-лучевая эпитаксия (MBE) [22] и импульсное лазерное осаждение (PLD) [23].

Формирование наноразмерных островков и эпитаксиальных слоев SiC на подложке Si, происходящее при выращивании этими методами, является сложным процессом, который включает в себя поверхностную диффузию, диффузию из объема, зарождение и рост кластеров, химическое преобразование приповерхностного слоя и т. д.

На сегодняшний день нет полного понимания физических процессов, происходящих на растущей поверхности, и механизмов их протекания. Очевидно, что в ходе роста карбида кремния диффузия играет очень важную роль в формировании структуры материала. Таким образом, необходимо понимание диффузионных процессов и микроскопических механизмов, связанных с начальными стадиями роста. Экспериментальные исследования начальных стадий роста пленок SiC на Si, особенно на наноразмерном уровне, очень трудны, поэтому в большинстве экспериментов обычно ограничиваются исследованием структуры уже выращенных пленок [24–26].

Компьютерное моделирование, позволяющее изучать образец на атомарном уровне, может быть очень полезным инструментом для достижения детального понимания основных механизмов и моделирования основных стадий процесса роста карбида кремния. Наиболее подходящими методами для таких исследований являются методы „из первых принципов“ (*ab initio*) [27], классическая молекулярная динамика [28,29] и метод Монте-Карло [30,31], которые уже использовались как для моделирования реконструкций поверхностей Si и SiC [32–42], так и для моделирования процессов, связанных с эпитаксиальным ростом слоев SiC на кремниевой подложке [43–52].

Диффузионные процессы на поверхности подложки, а затем на растущей поверхности во многом определяются ориентацией и структурой поверхности. Обычно в качестве подложки для эпитаксиального роста SiC на Si используются поверхности кремния (001) и (111). Хорошо известно, что на обеих поверхностях могут происходить реконструкции. Наиболее типичные реконструкции для поверхности Si(001) симметричная  $p(2 \times 1)$  и асимметричная  $p(2 \times 2)$  и  $c(4 \times 4)$ , а для поверхности Si(111)  $(2 \times 1)$  и  $(7 \times 7)$  были смоделированы и изучены при помощи методов „из первых принципов“ [32–36] и метода Монте-Карло [37,38]. Поверхностные реконструкции SiC также изучались при помощи этих и других методов [39–42].

Для исследования диффузионных процессов на растущей поверхности необходимо знать значения микроскопических кинетических параметров (таких как энергии активации миграции адатомов). На сегодняшний день известны данные теоретических исследований адатомов Si и C на некоторых идеальных поверхностях кремния в рамках моделирования методами *ab initio* [43–49], а также некоторые экспериментальные значения, полученные методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) [53], однако эти данные не описывают всех

ситуаций, возникающих при росте наноструктурных пленок Si–C на полупроводниковых подложках. В частности, большинство опубликованных данных касается реконструкции  $(2 \times 1)$  поверхности Si(100), тогда как на практике при молекулярно-лучевой эпитаксии часто имеют дело с (111) ориентацией подложки кремния.

С другой стороны, в реальности диффузия адатомов большей частью происходит не на идеальной поверхности, а на поверхности с растущими нанокластерами. Насколько известно авторам, такая диффузия не изучалась при помощи моделирования. Таким образом, существующая информация о диффузии адатомов на поверхности кремния далеко не полна.

Следует отметить, что методы „из первых принципов“ сильно ограничены по общему количеству рассматриваемых атомов, так как время расчетов чрезвычайно быстро растет с ростом числа атомов. Как результат, в рамках этих методов могут быть рассмотрены только очень упрощенные модели (такие, как адсорбция отдельного атома на идеальную поверхность) и системы из не более чем нескольких сотен атомов. В действительности начальные стадии роста трехмерных гетероэпитаксиальных структур происходят под влиянием многих факторов, таких как зарождение и рост нанокластеров на поверхности, образование дефектов, деформация поверхностного рельефа и поля напряжений в приповерхностной области и т. д. Большинство из них не может быть адекватно учтено в методах „из первых принципов“.

Классическая молекулярная динамика (МД) гораздо больше подходит для исследования таких сложных процессов. Несмотря на то что длительные процессы, характерное время протекания которых превышает несколько сотен пикосекунд, не могут быть смоделированы с помощью метода МД, этот метод может быть полезным для изучения характеристик структуры на различных стадиях роста. В свою очередь, длительные процессы могут быть смоделированы при помощи различных вариантов метода Монте-Карло [30,31,54]. Однако для моделирования методом Монте-Карло необходим набор микроскопических входных параметров (таких, как величины барьеров диффузии). Значения этих параметров не могут быть получены при помощи самого метода Монте-Карло, но могут быть определены из расчетов методами *ab initio* или методом МД для конкретных конфигураций системы (обычно при  $T = 0$  К).

Целью настоящей работы является изучение диффузионных барьеров для адатомов Si и C на чистой поверхности кремния и поверхности с расположенными на ней небольшими, содержащими от нескольких десятков до нескольких сотен атомов, кластерами SiC (что соответствует начальным стадиям формирования эпитаксиального слоя SiC), а также исследование влияния таких кластеров на деформацию подложки и диффузию адатомов.

## 1. Методика моделирования

### 1.1. Потенциал межатомного взаимодействия

Хорошо известно, что для большинства металлов и полупроводников парные потенциалы (вне зависимости от их параметризации) не могут обеспечить реалистичных значений даже для таких простых величин, как энергии образования вакансий и межузельных атомов, не говоря уже о многих других характеристиках материала [55]. Для корректного описания равновесных свойств и микроскопических энергий твердого тела в большинстве случаев необходимо использовать многочастичные потенциалы. Для полупроводников были разработаны несколько видов таких эмпирических (или полуэмпирических) межатомных потенциалов. Однако практически все они имеют ограниченные возможности при описании объемных и поверхностных свойств материала.

Для моделирования кремния было разработано несколько различных потенциалов [56–59]. Известно, что ни один из существующих потенциалов не способен воспроизвести полный набор наиболее важных характеристик кремния с одинаково хорошей степенью точности. К примеру, некоторые потенциалы хорошо описывают объемные упругие свойства материала, другие — более пригодны для предсказания поверхностных свойств и т. д. Следовательно, выбор потенциала для моделирования — это всегда компромисс с точки зрения точности описания тех или иных характеристик материала.

Большинство эмпирических потенциалов параметризованы так, чтобы прежде всего хорошо описывать объемные свойства материалов. Тем не менее некоторые успешно используются и для описания поверхностных свойств кремния. В частности, диффузия на террасах Si(001) была смоделирована в работе [50] при помощи потенциала Стиллингера–Вебера [56]. Молекулярная динамика с потенциалом погруженного атома (EAM-potential) [59] была применена для моделирования отдельных кремниевых адатомов и аддимеров на поверхности Si(001) [51]. Наиболее часто используемыми потенциалами кремния являются потенциал Стиллингера–Вебера [56] и потенциал, разработанный Терсоффом [57,58]. Обзор и обширный тест различных потенциалов кремния, включая их возможности по описанию поверхностных свойств, можно найти в работе [60]. Несмотря на значительное количество потенциалов, созданных для однокомпонентных материалов, для бинарных полупроводников их существует лишь несколько. В частности, применительно к системе Si–C, насколько известно авторам, разработаны только потенциал Терсоффа [61] и модифицированный потенциал Бреннера [62].

В настоящей работе использован потенциал, разработанный Терсоффом [57,58,61]. Он принадлежит к группе так называемых „bond-order“ потенциалов (т. е. потенциалов, учитывающих направленный характер ковалентных связей). Потенциал такого типа представляет собой суперпозицию отталкивающей и притягивающей

частей потенциальной энергии (которые представляют собой парные слагаемые, аналогичные известному потенциалу Морзе), но при этом член, ответственный за притяжение, умножен на так называемый „bond-order“ коэффициент, который зависит от локального окружения рассматриваемой пары атомов.

Поскольку предметом рассмотрения данной работы являются адатомы Si и C и кластеры SiC на поверхности кремния, нами использована параметризация потенциала Терсоффа для системы Si–C, ранее предложенная в работе [61]. Параметризация подобрана таким образом, чтобы воспроизводить объемные свойства кремния и углерода (такие, как энергия когезии, длины связей, модуль упругости), а также теплоту образования SiC. Данный потенциал с хорошей точностью предсказывает значения параметров решетки, упругих констант и энергий образования точечных дефектов. Также он описывает энергетику и структуру поверхности Si(001) в хорошем согласии с расчетами „из первых принципов“ [60]. Кроме того, авторами работы было проверено, что этот потенциал удерживает так называемую DAS ( $7 \times 7$ ) реконструкцию [63] поверхности Si(111) вплоть до температур порядка 900 К. Ранее данный потенциал использовался для моделирования реконструкций поверхности карбида кремния [42] и моделирования углеродных покрытий на поверхности 6H-SiC(1000) [52].

### 1.2. Молекулярная динамика

В работе использован стандартный метод классической молекулярной динамики (МД) [28,29,55], заключающийся в численном решении системы ньютоновских уравнений движения для частиц, содержащихся в модельном образце:

$$M_i \mathbf{R}_i = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}_i} E_{\text{coh}}(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_k), \quad i = 1, \dots, k, \quad (1)$$

где  $M_i$  и  $\mathbf{R}_i$  — масса и радиус-вектор частицы с номером  $i$  в системе из  $k$  частиц,  $E_{\text{coh}}$  — энергия когезии системы ( $E_{\text{coh}} \equiv V$ ). Таким образом, выбранный алгоритм МД моделирует замкнутую систему частиц, что в условиях термодинамического равновесия соответствует микроканоническому статистическому ансамблю. Средние значения физических величин при этом получают усреднением по ансамблю для траектории системы в фазовом пространстве.

Основные характеристики использованной для расчетов компьютерной программы описаны в работах [64–66]. Приведем лишь краткое описание ее особенностей. Для интегрирования уравнений движения Ньютона применяется метод „скоростей“ Верле [28] с переменным шагом по времени. Для быстрого поиска соседей используется алгоритм связанных ячеек (linked cells algorithm) [28]. Также был разработан и тщательно протестирован эффективный алгоритм расчета сил для потенциала Терсоффа. Модельные образцы (кристаллиты), использованные в расчетах, содержали до несколь-

ких десятков тысяч атомов. При моделировании бесконечного кристалла применялись периодические граничные условия по всем 3 пространственным направлениям. Для исследования поверхностных эффектов такие условия применялись только в двух направлениях, тогда как в третьем направлении две поверхности оставались свободными.

Для установления в модельном образце желаемой температуры  $T$  проводилась процедура его термализации. Процедура быстрого охлаждения использовалась в случае, когда было необходимо достичь локального равновесия системы при  $T = 0$  К [66]. Данная процедура заключается в том, что на каждом временном шаге (при решении уравнений движения) принудительно приравниваются нулю скорости тех атомов, для которых угол между направлением скорости и действующей силой составляет более  $90^\circ$ . Это позволяет системе быстро достичь ближайшего локального минимума потенциальной энергии посредством удаления кинетической энергии тех частиц, которые движутся в направлении от своих равновесных положений. Для того чтобы контролировать гидростатическое давление в процессе моделирования, проводился расчет как величины полного давления во всей системе, так и значений индивидуальных локальных давлений  $P_k$ , приходящихся на каждый атом  $k$ . При этом применялся специальный метод вычисления вириала для потенциала Терсоффа, разработанный в [67,68].

### 1.3. Расчет поверхности потенциальной энергии и определение поверхностных диффузионных барьеров

Для того чтобы характеризовать места адсорбции для атомов и изучать предпочтительные пути миграции, вдоль которых осуществляется диффузия адатомов по подложке, были рассчитаны (при помощи МД-моделирования) и всесторонне исследованы поверхности потенциальной энергии для адсорбции атомов C и Si на  $(2 \times 1)$  реконструированной поверхности Si(001) и на нереконструированной поверхности Si(111), а также на поверхности Si(111) с кластерами SiC. Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) для адатома была получена посредством помещения адатома в большое количество положений с координатами  $(x, y)$  в пределах выбранной области поверхности. Такой областью в расчетах являлась прямоугольная элементарная ячейка периодичности (для свободных поверхностей) либо квадрат, окружающий кластер (для поверхности с кластером). При этом для позиций  $(x, y)$  применялась эквидистантная сетка.

Для каждой точки  $(x, y)$  расчеты выполнялись в два последовательных этапа. На первом, „статическом“, этапе адатом помещался в пределах выбранной поверхностной области в фиксированное положение  $(x, y, z)$  над поверхностью, но за пределами радиуса обрезания потенциала. Затем абсолютное значение его  $z$ -координаты уменьшалось маленькими шагами, т.е. адатом принудительно перемещался в сторону поверхности. При

этом его  $(x, y)$ -координаты, также как и положения всех других атомов, оставались фиксированными. Такое перемещение производилось до тех пор, пока не достигался минимум конфигурационной энергии. На втором, „динамическом“ этапе  $z$ -координате адатома было позволено свободно релаксировать, так же как и всем трем координатам остальных атомов системы. Релаксация проводилась с использованием процедуры быстрого охлаждения [66], обычно используемой в рамках МД-моделирования для поиска минимума конфигурационной энергии. Эта процедура позволяет достичь минимума конфигурационной энергии при  $T = 0$  К:  $E = \min E_{\text{coh}}(x, y)$ . Проведение вычислений для всех пар  $(x, y)$  позволяет получить энергетическую карту поверхности  $E = E(x, y)$ .

В качестве теста были проведены расчет и сравнение ППЭ для адатома Si на простой нереконструированной поверхности Si(001), рассчитанной только в статике (только 1-й этап) и с последующей релаксацией (оба этапа). Сравнение показало, что хотя положения минимумов на поверхностях практически совпадают, абсолютные их значения, а соответственно и значения барьеров между ними, могут отличаться более чем на  $0.5$  eV. Такие различия существенны при описании поверхностной диффузии. Следовательно, можно сделать вывод о том, что релаксация образца оказывает значительное влияние на величину полной энергии, и таким образом, релаксационные эффекты должны быть корректно учтены в расчетах.

Каждый локальный минимум на ППЭ может быть идентифицирован как связанное (устойчивое) положение (или мето адсорбции) адатома. Диффузия адатома по поверхности может рассматриваться как прыжки между такими положениями. Для того чтобы вычислить энергию активации миграции, необходимо рассчитать барьеры для прыжков между устойчивыми положениями. Для этого нужно определить максимум энергии вдоль каждого возможного пути, соединяющего два устойчивых положения. Для преимущественного диффузионного пути активационная энергия будет минимальна, и функция полной энергии будет иметь седловую точку в конфигурации, соответствующей максимуму для данного пути. При моделировании диффузии по идеальной поверхности часто рассматривается миграция адатома из некоторого устойчивого равновесия, принадлежащего одной периодической ячейке, в аналогичное устойчивое положение, принадлежащее соседней ячейке. В представленных в данной работе расчетах были отслежены возможные пути, лежащие на поверхности потенциальной энергии, и изучены барьеры вдоль этих путей.

Хотя миграция адатома возможна по различным путям, на практике для описания обычно выбирается путь с наименьшим барьером, т.е. наиболее вероятный путь. Величина соответствующего барьера используется для определения энергии активации миграции.

В литературе существуют различные определения энергии активации миграции ( $E_a$ ).

а) Когда рассматривается миграция между двумя соседними локальными минимумами, обычно используется (см. например [69,70]) следующая формула:

$$E_a = E_s - \frac{E_{\min 1} + E_{\min 2}}{2}, \quad (2)$$

где  $E_s$  — энергия в седловой точке, а  $E_{\min 1}$ ,  $E_{\min 2}$  — энергии в двух устойчивых положениях — до и после прыжка соответственно. Это выражение может быть обобщено на случай нескольких ( $n$ ) прыжков через промежуточные минимумы вдоль диффузионного пути, соединяющего два устойчивых положения:

$$E_a = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n E_{S_k} - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n E_{\min k}. \quad (3)$$

Здесь  $E_{\min k}$  — энергия в  $k$ -м минимуме, а  $E_{S_k}$  — энергия в  $k$ -й седловой точке при прыжке в следующий ( $k+1$ )-й минимум.

б) В рамках второго определения диффузионный барьер для каждого возможного диффузионного пути между двумя выбранными устойчивыми положениями (между которыми могут находиться и другие устойчивые положения) рассчитывается как  $E_{\max} - E_{\min}$ , где  $E_{\max}$  и  $E_{\min}$  — максимальное и минимальное значения полной энергии вдоль данного пути. Тогда энергия активации миграции определяется как минимальное значение диффузионного барьера среди барьеров, соответствующих возможным путям.

Несмотря на то что второе определение, которое дает наибольший барьер вдоль самого выгодного пути, обычно используется при изучении ППЭ, первое определение, по мнению авторов, лучше подходит для сравнения со значениями, полученными из экспериментов по сканирующей туннельной микроскопии, так как лучше описывает возможность нескольких последовательных прыжков с разными барьерами и разницу между прямым и обратным прыжком.

## 2. Результаты и их обсуждение

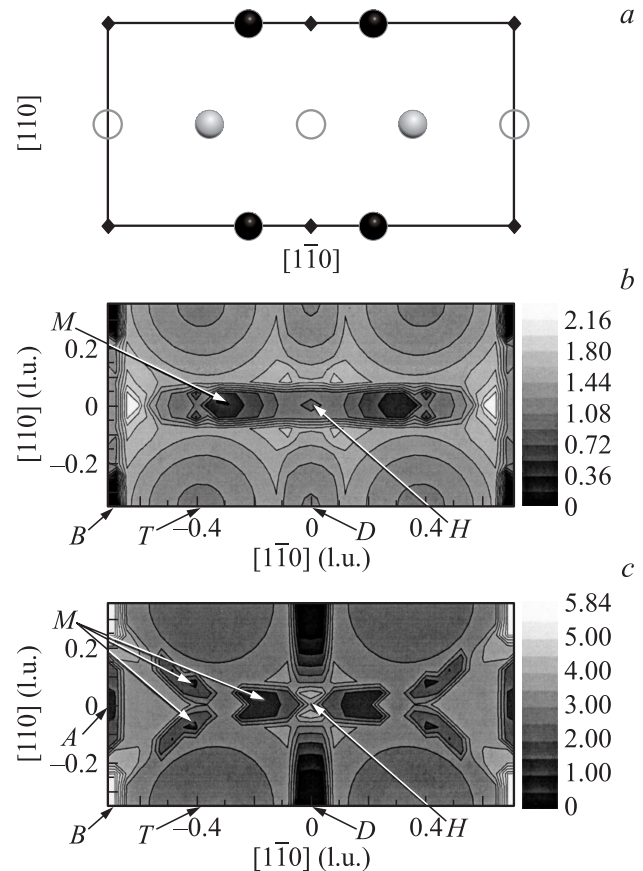
### 2.1. Моделирование адатомов Si и C на реконструированной поверхности Si(001)– $2 \times 1$ и поверхности Si(111)

#### 2.1.1. Подготовка модельного образца

Модельный образец представлял собой кремниевый кристаллит с алмазной структурой, периодическими граничными условиями вдоль двух пространственных направлений ( $x$  и  $y$ ), ограниченный двумя свободными поверхностями, перпендикулярными третьему направлению ( $z$ ). Для исследования поверхности (001) использовался модельный кристаллит, состоящий из 1728 атомов, с размерами  $6 \times 6 \times 6$  параметров решетки ( $a_0$ ), с боковыми гранями (100), (010) и (001).

Кристаллит, использовавшийся при исследовании поверхности (111) также содержал 1728 атомов, но имел размеры  $5.66 \times 7.35 \times 5.2$  параметров решетки и имел боковые грани ( $\bar{1}10$ ), (11 $\bar{2}$ ) и (111). Как известно [40], идеальная нереконструированная поверхность Si(100)–(1  $\times$  1) нестабильна, вследствие чего на ней имеют место реконструкции. В данной работе с целью тестовой проверки используемой методики моделирования была рассмотрена типичная симметричная реконструкция Si(001)–(2  $\times$  1), описанная, например, в работе [32], так как для нее в литературе имеются данные о поверхностях потенциальной энергии и о диффузионных барьерах.

На рис. 1, а представлен вид сверху минимальной ячейки периодичности для симметричной реконструированной поверхности Si(001)–(2  $\times$  1). Верхний слой такой поверхности формирует ряд димеров вдоль направления [110]. Кроме того, была также рассмотрена нереконструированная поверхность (111). Для расче-



**Рис. 1.** Проекция на плоскость (001) минимальной ячейки периодичности поверхности Si(001)–(2  $\times$  1) (а) и соответствующие контурные графики ППЭ для адатомов Si (б) и C (с) на этой поверхности. Черные и серые сферы, окружности и черные точки на рисунке (а) представляют первый (верхний), второй, третий и четвертый атомные слои соответственно. М, В, Т, D, H, А — основные минимумы ППЭ. Справа приведена шкала уровней энергии.

та ППЭ оба модельных образца были охлаждены до  $T = 0$  К при помощи процедуры быстрого охлаждения.

### 2.1.2. Поверхности потенциальной энергии и диффузионные барьеры для адатомов Si и C на идеальных поверхностях

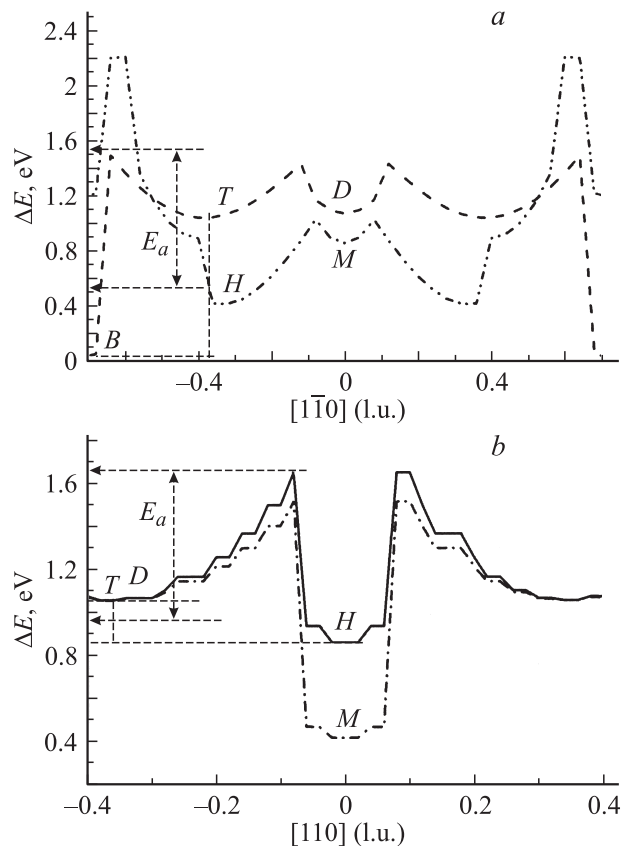
ППЭ  $E = E(x, y)$  для реконструированной поверхности Si(001)–(2 × 1) была рассчитана для области минимальной ячейки периодичности, показанной на рис. 1, *a*. При этом использовалась эквидистантная сетка с шагом  $0.04a_0$  по обоим направлениям (всего  $41 \times 21 = 861$  точка). Описанная ранее процедура минимизации энергии для каждого узла  $(x, y)$  сетки проводилась начиная с высоты расположения адатома над поверхностью в  $0.5a_0$ .

В качестве первого шага была рассчитана ППЭ для адатома Si на реконструированной поверхности Si(001)–(2 × 1). На рис. 1, *b* продемонстрирован экви-энергетический контурный график полученной ППЭ. Для удобства на графике (так же как и на последующих аналогичных графиках) представлены не абсолютные значения энергии когезии в выбранных точках, а эти значения за вычетом минимального значения на ППЭ. Таким образом, нулевому значению соответствует абсолютный минимум (или основное место адсорбции) ППЭ. На графике можно видеть также несколько локальных минимумов, которые соответствуют другим местам адсорбции для атома Si на поверхности в пределах области одной минимальной ячейки периодичности.

Можно видеть, что структура рассчитанной нами ППЭ воспроизводит основные особенности ППЭ, полученной при помощи расчетов *ab initio* [43]. Действительно, минимумы рассчитанной ППЭ могут быть легко идентифицированы с основными точками ППЭ, представленной в работе [43]. Для удобства эти минимумы обозначены на рис. 1, *b* с заглавными буквами (*M*, *H*, *B*, *D*, *A*, *T*) в соответствии с нотацией, принятой в работах [43,45]. Вместе с тем существуют и некоторые различия. В частности, абсолютный минимум расположен в точке *B*, тогда как в расчетах „из первых принципов“ он находится в точке *M*. Кроме того, точки *B* и *D* являются минимумами ППЭ, тогда как на ППЭ из работы [43] они являются седловыми точками.

В расчетах *ab initio* присутствует дополнительный локальный минимум *C*, расположенный около угла ячейки периодичности (точка *B*). Однако в ППЭ, представленной на рис. 1, *b* минимум находится непосредственно в точке *B*, так что можно считать, что в нашем случае точки *B* и *C* сливаются. Следует отметить, что упомянутые различия присущи и другим расчетам [49,50], выполненным на основе полумпирических потенциалов.

Для того чтобы описать диффузию адатома по поверхности, необходимо определить активационные энергии для прыжка между устойчивыми положениями. Все значения энергий, приведенные ниже, были рассчитаны для обоих определений энергии активации миграции



**Рис. 2.** Изменение потенциальной энергии системы при движении адатома Si по поверхности Si(100)–(2 × 1) в направлениях  $[1\bar{1}0]$  (*a*) и  $[110]$  (*b*) вдоль различных диффузионных путей. Обозначения те же, что на рис. 1.

(см. выше). Значения, полученные для второго определения, даны в круглых скобках. Как следует из предыдущих исследований, основные направления диффузии адатомов — вдоль и поперек рядов димеров. Анализ ППЭ, представленной на рис. 1, *b*, подтверждает этот вывод. Действительно, барьеры для диагональных прыжков между основными минимумами оказываются выше, чем для прыжков вдоль и поперек ряда димеров. Например, барьер для прыжка *B–M* выше, чем для прыжков *B–B* или *B–T*, а барьер для прыжка *M–D* выше, чем для *M–H* или *M–T*.

Несколько кривых потенциальной энергии для типичных путей вдоль и поперек ряда димеров показаны на рис. 2. Видно, что минимальный барьер в направлении оси *X*, т. е. поперек ряда димеров, соответствует пути через положения *B* и *D*. Соответствующая активационная энергия составляет  $E_a = 0.97$  eV (1.48 eV). В направлении вдоль оси *Y*, т. е. параллельно ряду димеров, минимальный барьер соответствует пути через положения *H* и *D*. Соответствующая активационная энергия составляет  $E_a = 0.68$  eV (0.79 eV). Заметная разница в значениях энергий активации миграции по двум направлениям демонстрирует существенную анизотропию диффузии. Наиболее выгодным направлениям для поверхностной

**Таблица 1.** Энергия активации миграции для адатомов Si и C на реконструированной поверхности Si(100)–(2 × 1) и поверхности Si(111)–(1 × 1)

Поверхность	Ададом	Энергия активации диффузии, eV		
		МД	ab initio	СТМ-эксперимент
Si(100)2 × 1	Si	0.68(0.79)	0.60 [43]	0.67 ± 0.08 [53]
	C	1.14(1.39)	1.0 [45]	
Si(111)1 × 1	Si	0.38(0.53)		
	C	1.09(1.09)		

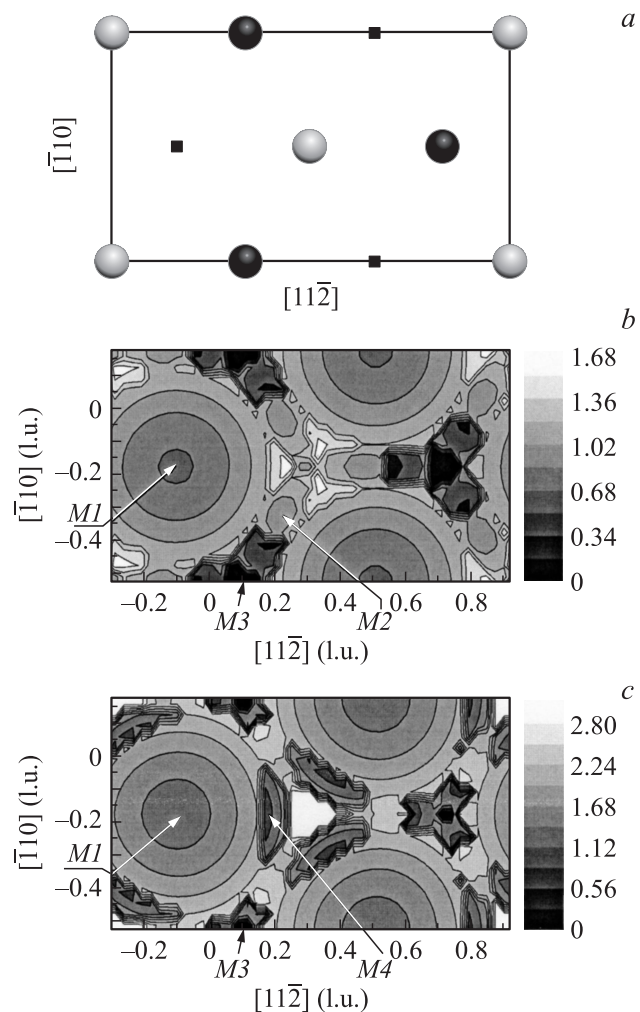
диффузии адатомов является направление вдоль ряда димеров. Этот вывод, так же как полученные значения энергий активации миграции, находится в хорошем согласии с данными расчетов „из первых принципов“ [43] и полученными из СТМ-экспериментов [53] (см. табл. 1).

Расчет ППЭ для адатома углерода на реконструированной поверхности Si(001)–(2 × 1), представленной на рис. 1, с был выполнен таким же образом, как и для адатома кремния. Сравнение его результатов с данными предыдущих расчетов „из первых принципов“ [45] может быть сделано лишь в некоторой степени, поскольку в работе [45] исследовалась поверхность с асимметричной реконструкцией (2 × 1). Тем не менее наиболее характерные особенности ППЭ могут быть идентифицированы. Точки *A* и *D* в обоих случаях являются минимумами. Точка *H*, в противоположность случаю с адатомом Si, является не минимумом, а локальным максимумом как в представленных расчетах, так и в расчетах работы [45].

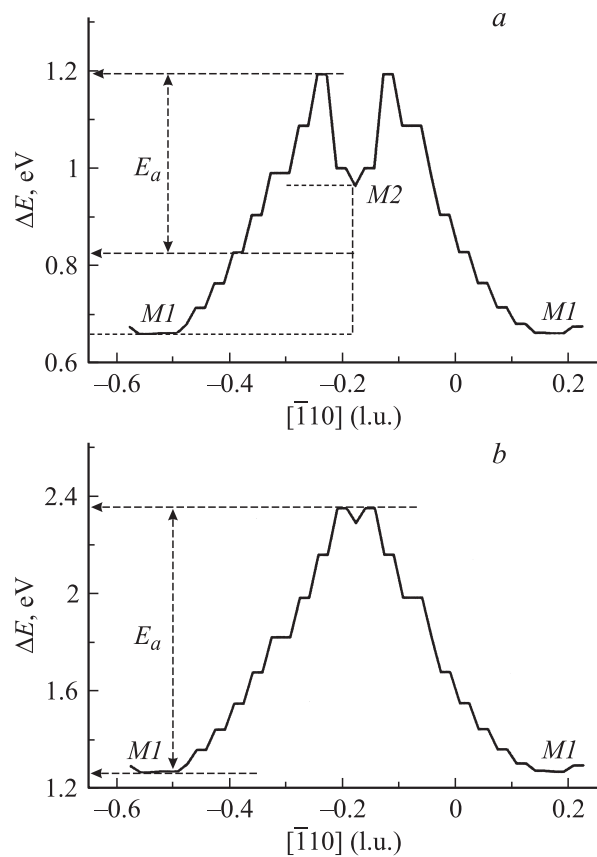
Группа близко расположенных минимумов, обозначенная *M* на рис. 1, с, по-видимому, может быть идентифицирована как минимумы *M1* или *M2* ППЭ, полученной „из первых принципов“. В то же время существуют и некоторые отличия, а именно позиция глобального минимума (точка *D* в нашем случае и точка *M1*, по данным работы [45]), а также статус точек *B* и *T*. Точка *T* — минимум, а точка *B* — максимум на рассчитанной нами ППЭ, тогда как обратная ситуация имеет место на ППЭ, полученной „из принципов принципов“. Проанализировав ППЭ и исследовав возможно диффузионные пути по двум основным направлениям — параллельно и перпендикулярно рядам димеров, можно заключить, что диффузия адатомов углерода анизотропна и что миграция перпендикулярно ряду димеров значительно менее выгодна из-за большей энергии активации миграции. Предпочтительной является диффузия вдоль ряда димеров, т.е. по оси *Y* (рис. 1, с). Энергия активации миграции вдоль этого направления составляет 1.14 eV (1.39 eV). Эти значения находятся в разумном согласии со значением 1 eV, полученным в расчетах ab initio [45], несмотря на отмеченные выше различия в соотношении минимумов на поверхностях потенциальной энергии.

Тот факт, что классическое рассмотрение в рамках МД с применением полумпирического потенциала не может обеспечить полного согласия формы ППЭ с результатами, полученными при помощи квантово-

механических методов расчета ППЭ „из первых принципов“, не является неожиданностью. Тем не менее, что касается описания поверхностной диффузии, гораздо более важно обеспечить корректные значения диффузионных барьеров, чем точное воспроизведение всей



**Рис. 3.** Проекция на плоскость (111) ячейки периодичности поверхности Si(111) (*a*) и соответствующие контурные графики ППЭ для адатомов Si (*b*) и C (*c*) на этой поверхности. Черные и серые сферы и черные точки на рисунке (*a*) представляют первый (верхний), второй и четвертый атомный слой соответственно. *M1*, *M2*, *M3*, *M4* — основные минимумы ППЭ.



**Рис. 4.** Изменение потенциальной энергии системы при движении адатома Si по поверхности Si(111) вдоль диффузионного пути с минимальным барьером. Обозначения те же, что на рис. 3.

формы и всех минимумов ППЭ. Энергии активации миграции, рассчитанные в настоящей работе, находятся в разумном согласии со значениями, полученными ранее как из расчетов „из первых принципов“, так и из экспериментов. Это означает, что поверхностная диффузия может быть адекватно описана в рамках классического рассмотрения, хотя классическая МД и не может точно воспроизвести весь набор минимумов на ППЭ.

Для расчетов ППЭ для адатомов Si и C на поверхности Si(111) была выбрана прямоугольная ячейка периодичности, показанная на рис. 3, *a*. Ось *X* ориентирована параллельно короткой стороне ячейки и соответствует направлению  $[\bar{1}10]$ . В свою очередь, ось *Y* параллельна длинной стороне ячейки и соответствует направлению  $[11\bar{2}]$ . Контурный график ППЭ для адатома Si представлен на рис. 3, *b*. Наиболее важные места адсорбции, обозначены на рисунке как *M1–M3*. Вследствие кристаллографической симметрии на рис. 3, *b* можно видеть несколько таких мест. Минимальный диффузионный барьер был найден на пути *M1–M2–M1*.

Изменение энергии для адатома кремния, диффундирующего вдоль пути *M1–M2–M1*, представлено на рис. 4, *a*. Соответствующая энергия активации миграции

составляет 0.38 eV (0.53 eV) для прыжка *M1–M2* и 0.53 eV (0.53 eV) для прыжка *M1–M1*. Положения мест адсорбции на ППЭ для адатома C (см. рис. 3, *c*) похожи на аналогичные для адатома Si, за исключением того, что положение *M2* для адатома углерода — не является локальным минимумом и что возникает новый локальный минимум *M4*. Изменение энергии для диффузии адатома C вдоль пути *M1–M1* показано на рис. 4, *b*. Соответствующая энергия активации миграции составляет 1.09 eV (1.09 eV). Это значение оказывается большим, чем минимальная энергия миграции для адатома Si.

Рассчитанные значения минимальной энергии миграции для адатомов Si и C на обеих исследуемых поверхностях кремния систематизированы в табл. 1. Там же для сравнения приведены литературные данные, полученные из расчетов методами *ab initio* и экспериментальных исследований.

## 2.2. Моделирование кластеров SiC на поверхности Si(111)

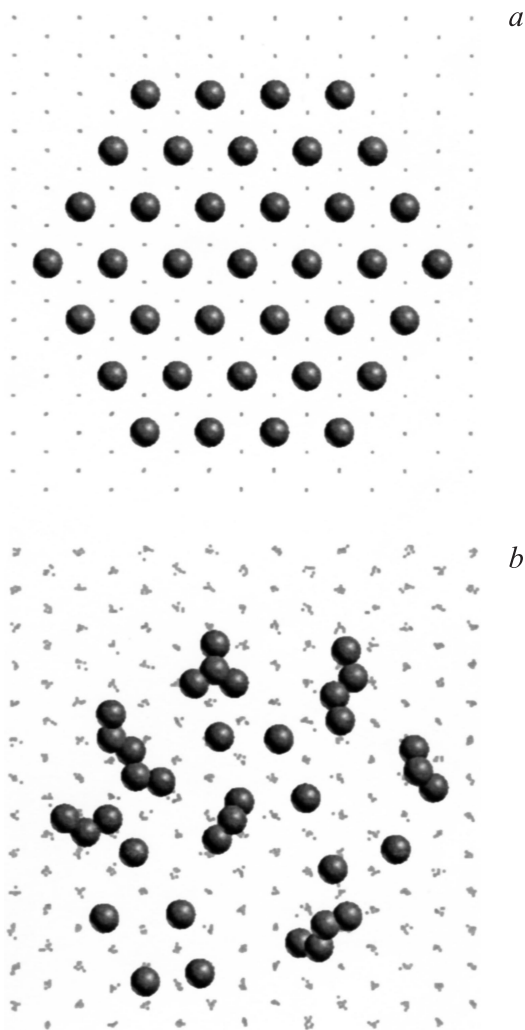
### 2.2.1. Приготовление кластера на поверхности

Метод молекулярной динамики не позволяет моделировать процесс формирования кластера, поскольку характерные времена протекания этого процесса существенно превышают возможности данного метода. Поэтому в рамках МД моделирования возможны только исследования уже сформированных кластеров. Такие исследования и представлены ниже.

Для исследования кластера, находящегося на поверхности (111) кремния, были использованы два модельных кристаллита с боковыми гранями (111),  $(\bar{1}10)$  и  $(11\bar{2})$ . Первый имел размеры  $7.07 \times 7.35 \times 6.93$  параметров решетки, содержал 2880 атомов и был использован для моделирования всех кластеров, исключая наибольший. Второй кристаллит имел в два раза большие размеры по всем направлениям и содержал 23 040 атомов. Он использовался для моделирования наибольшего кластера. Периодические граничные условия применялись к направлениям  $[\bar{1}10]$  и  $[11\bar{2}]$ . Каждый исследуемый кластер был когерентно помещен на одну из двух свободных поверхностей (111). Были исследованы простой плоский углеродный кластер и три трехмерных кластера SiC на поверхности.

На первом этапе была проверена стабильность простого двумерного (плоского) углеродного кластера. Кластер состоял из одной атомной плоскости атомов C. В латеральном направлении вследствие симметрии поверхности (111) была выбрана гексагональная форма кластера (рис. 5, *a*). В качестве типичного примера на рис. 5, *b* представлена форма кластера после эволюции в течение 30 ps при температуре  $T = 1200$  K. Можно видеть, что атомы углерода формируют цепочки. Аналогичное формирование цепочек уже было получено в работе [52] для случая одного монослоя углерода на поверхности карбида кремния при  $T = 1000$  и 2000 K.





**Рис. 5.** Эволюция при  $T = 1200$  К плоского углеродного кластера, расположенного на поверхности Si(111), имеющего гексагональную форму основания, высоту в одну атомную плоскость и состоящего из 37 атомов: (а) начальная структура, (б) через 30 ps.

Таким образом, плоский углеродный кластер является нестабильным. Для формирования стабильных кластеров SiC, в которых углеродные плоскости чередуются с кремниевыми, требуются атомы кремния. В реальности диффузия атомов из подложки является источником атомов кремния для построения кристаллического карбида кремния. При этом в результате утечки атомов кремния из приповерхностной области кремниевой подложки в ней образуются наноразмерные поры [24–26]. Микроскопические механизмы формирования таких пор еще недостаточно хорошо понятны. Тем не менее наиболее вероятно, что внутренние напряжения, создаваемые кластерами SiC, играют важную роль на начальных стадиях роста карбида кремния [71–75]. Распределение напряжений под кластерами проанализировано ниже (в разд. 2.2.3).

Для исследования трехмерных кластеров SiC на поверхности Si(111) были выбраны кластеры в виде усеченной пирамиды с гексагональной формой основания. Кластеры на поверхности были приготовлены следующим образом. Вначале на поверхности конструировался когерентный кремниевый кластер путем воспроизведения кристаллической структуры подложки в пределах выбранной формы кластера. Затем часть атомов кремния заменялась атомами углерода для того чтобы воспроизвести структуру кубического SiC. Эта процедура соответствует замещению в кластере всех кремниевых атомов углеродными в каждой нечетной атомной плоскости (111) (которые параллельны поверхности подложки). После этого производилась релаксация структуры с последующим охлаждением. Были исследованы три кластера, состоящие из 74, 164 и 479 атомов. Все кластеры содержали 6 атомных плоскостей, но имели разные латеральные размеры.

Для проверки стабильности приготовленных кластеров SiC на поверхности Si(111) были проведена процедура термализации данной системы при различных значениях температуры:  $T = 300, 600$  и  $1200$  К. Эти значения покрывают область типичных температур, применяемых в экспериментах по молекулярно-лучевой эпитаксии [19,22,76,77]. После термализации эволюция модельной системы отслеживалась в течение нескольких сотен пикосекунд. При этом контролировалась стабильность структуры кластера — как визуально, так и с помощью анализа функции парных корреляций. Было определено, что через 30–50 ps после термализации перестают происходить какие-либо изменения в структуре кластера и химическом порядке атомов в нем. После термализации система снова была охлаждена до  $T = 0$  К.

## 2.2.2. Поверхности потенциальной энергии и диффузионные барьеры для адатомов Si и C на поверхности Si(111) с кластером SiC

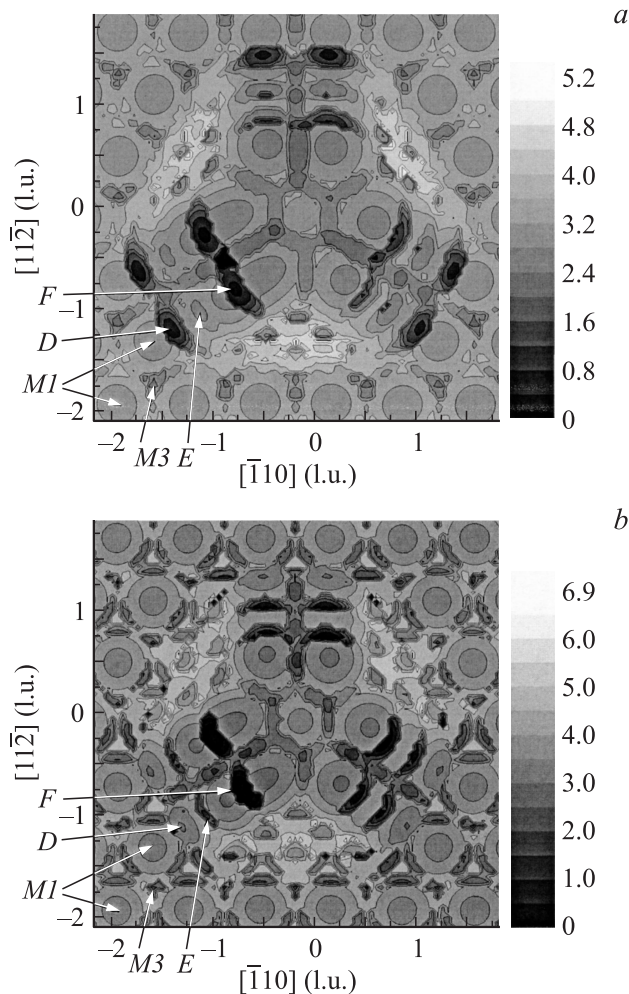
Кластеры SiC, формирующиеся на начальных стадиях роста карбида кремния при молекулярно-лучевой эпитаксии, изменяют как топографию, так и потенциальный рельеф поверхности, и следовательно, могут влиять на поверхностные диффузионные процессы. Для того чтобы изучить влияние кластеров SiC на миграцию адатомов, были исследованы диффузионные барьеры для адатомов Si и C на поверхности Si(111) с расположенным на ней кластером SiC. Для этих целей были рассмотрены два кластера, содержащие 74 и 164 атома.

Поскольку в случае поверхности с одиночным кластером ячейка периодичности не существует, в данном параграфе рассмотрены только диффузионные барьеры (не активационные энергии) для прыжков между соседними устойчивыми положениями. ППЭ были рассчитаны для области  $5 \times 5$  параметров решетки, в центр которой попадал кластер. ППЭ для адатома Si на поверхности Si(111) с 74-атомным кластером представлена на

**Таблица 2.** Диффузионные барьеры  $E_b$ , для адатомов Si и C на идеальной поверхности Si(111) и поверхности с расположенным на ней кластером SiC

Путь	$E_b$ для адатома Si, eV			$E_b$ для адатома C, eV		
	идеальная поверхность	с кластером (74 атома)	с кластером (164 атома)	идеальная поверхность	с кластером (74 атома)	с кластером (164 атома)
$M1-M1$	0.53	0.52	0.54	1.08	1.11	0.65
$M1-M3$	0.63	0.57	0.57	1.17	1.34	1.31
$M1-D$		0.12	0.38		0.63	0.77
$D-E$		2.17	1.59		0.81	0.66
$E-F$		0.34	1.73		1.56	2.65

рис. 6, а. Можно видеть глубокие минимумы, возникающие над самим кластером (такие как  $E$  и  $F$ , указанные на рисунке) и около его границ (такие как  $D$ ). Похожая картина наблюдается и для адатома C (см. рис. 6, б), и для обоих адатомов на поверхности с кластером из 164 атомов.

**Рис. 6.** Контурные графики ППЭ для адатомов Si (b) и C (c) на поверхности Si(111) с расположенным на ней кластером SiC, состоящим из 74 атомов.

Для случая поверхности Si(111) с расположенным на ней кластером можно условно ввести следующую „топографическую“ классификацию минимумов ППЭ:

а) удаленные от кластера (аналогичные минимумам на идеальной поверхности);

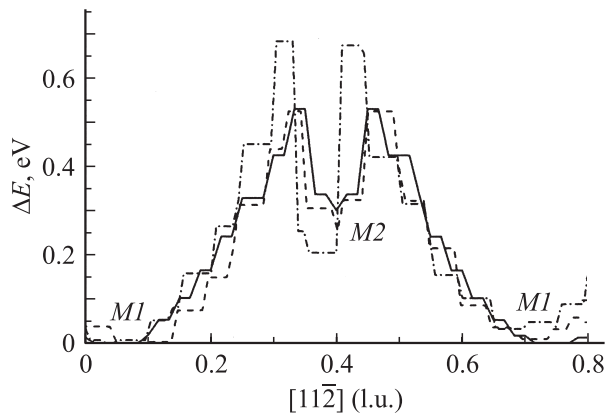
б) расположенные в окрестности кластера (слегка модифицированные из-за близости к нему);

с) расположенные на подложке непосредственно на границах кластера и на самом кластере (возникающие из-за его присутствия).

Для того чтобы исследовать влияние кластера на диффузию адатомов, были изучены диффузионные барьеры, связанные с перечисленными минимумами ППЭ. При помощи исследования барьеров для прыжков  $M1-M2$  и  $M1-M1$  вблизи кластера было обнаружено, что заметное воздействие кластера распространяется только на дистанции в 2–3 расстояния до ближайших поверхностных атомов. Изменение потенциальной энергии для адатома Si, диффундирующего в пределах такой области вдоль пути, соединяющего два конкретных соседних минимума  $M1$  (отмеченных на рис. 6, а), показана на рис. 7 (кривые  $b$  и  $c$  для кластеров из 74 и 164 атомов соответственно).

Соответствующие значения диффузионных барьеров представлены в табл. 2. Можно видеть, что только для случая 164-атомного кластера диффузионные барьеры заметно отличаются от аналогичных барьеров на идеальной поверхности. Таким образом, даже в узкой области вокруг кластера только относительно большой кластер способен влиять на диффузионные барьеры. Барьеры вне области оказываются равными (в пределах точности вычислений) аналогичным барьерам на идеальной поверхности.

Также были рассчитаны диффузионные барьеры, связанные с прыжками в минимумы, возникающие из-за присутствия кластера ( $D$ ,  $E$ ,  $F$ ). Эти данные также систематизированы в табл. 2. Из таблицы можно видеть, что барьеры, возникающие из-за кластера, в целом выше, чем барьеры на идеальной поверхности. Это означает, что диффундирующие адатомы могут захватываться в глубокие минимумы на кластере и его границах.



**Рис. 7.** Изменение потенциальной энергии системы при движении адатома Si по диффузионному пути  $M1-M2-M1$  на идеальной поверхности Si(111) (сплошная линия) и вблизи кластера SiC, состоящего из 74 (пунктир) и 164 (штрихпунктир) атомов, расположенного на такой же поверхности.

В целом, можно сделать вывод, что влияние формирующихся на поверхности кремния кластеров SiC на диффузию адатомов мало в области между кластерами. В то же время атомы, достигшие кластера, могут быть захвачены им и, следовательно, исключены из процесса диффузии. За счет таких захваченных атомов происходит рост кластеров.

### 2.2.3. Поля напряжений и деформаций под кластером SiC, расположенным на поверхности Si(111)

Очевидно, что формирование кластеров SiC в процессе роста наноструктурной пленки на кремниевой подложке может вызывать значительные деформации в приповерхностном слое подложки из-за существенной разницы параметров решетки Si и SiC. Эти деформации могут влиять на объемную и поверхностную диффузию. Следовательно, необходимо охарактеризовать поле деформаций под кластером. Такие данные могут быть полезны для моделирования диффузии в такого рода системах и их длительной эволюции (например, при помощи методов кинетического Монте-Карло или кинетических уравнений). Что касается молекулярной динамики, то этот метод не позволяет выполнить моделирование такого длительного процесса, как рост кластера на поверхности. Поэтому в данной работе представлены исследования напряжений и деформаций, производимых в подложке уже сформированным кластером, расположенным на поверхности (111) кремния.

Для моделирования были подготовлены три кластера SiC (содержащие 74, 164 и 479 атомов) на нереконструированной поверхности Si(111). Процедура подготовки описана выше.

В качестве примера на рис. 8 визуализированы результаты моделирования для кластера, содержащего 164

атома. Для лучшей презентативности модельный образец на рис. 8 повернут на угол порядка  $19^\circ$  вокруг оси [111]. Из рисунка ясно видно, что кластер вносит деформации в подложку кремния, что приводит к возникновению внутренних напряжений. Такие внутренние напряжения могут влиять на диффузионные процессы в ходе молекулярно-лучевой эпитаксии SiC на Si.

Для всех трех рассмотренных кластеров был выполнен количественный анализ полей напряжений и деформаций в подложке под кластером. Для характеристики внутренних напряжений и деформаций были использованы следующие параметры:

а) Для описания объемных (радиальных) локальных деформаций вокруг каждого атома  $k$  использовался параметр  $F$ , выражающий среднюю деформацию расстояний до ближайших соседей:

$$F = \frac{1}{n} \sum_i \frac{r_{0i} - r_i}{r_{0i}}, \quad (4)$$

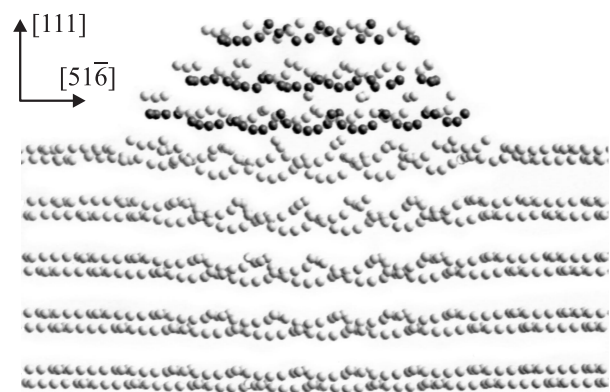
где  $n$  — число ближайших соседей атома  $k$ ,  $r_{0i}$  — расстояние до  $i$ -го ближайшего соседа в модельном кристаллите без кластера,  $r_i$  — расстояние до  $i$ -го ближайшего соседа в модельном кристаллите с кластером. Положительные значения параметра  $F$  означают напряжения растяжения, а отрицательные значения — напряжения сжатия.

б) Для описания локальных деформаций вокруг атома  $k$  использовался параметр

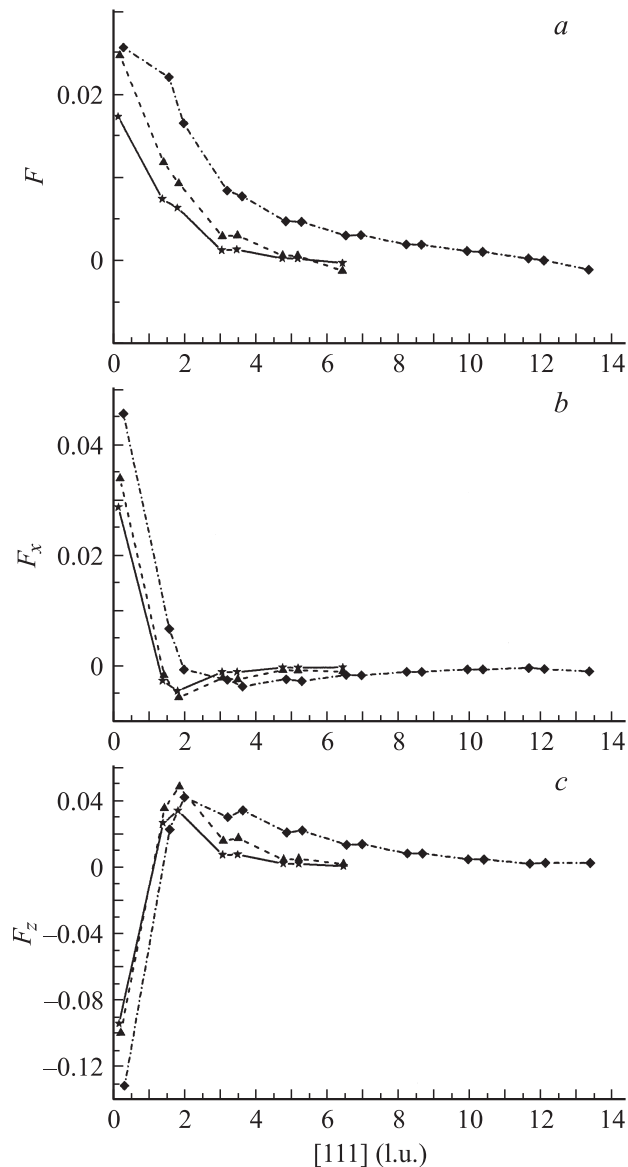
$$F_\xi = \frac{1}{n} \sum_i \frac{\xi_{0i} - \xi_i}{\xi_{0i}}, \quad (5)$$

где  $\xi$  — одна из декартовых координат  $x, y, z$ , так что  $\xi_{0i}$  — расстояние (вдоль данной оси координат) до  $i$ -го ближайшего соседа атома  $k$  в кристаллите без кластера; а  $\xi_i$  — аналогичное расстояние в кристаллите с кластером.

в) Для описания локальных напряжений использовалась величина локального давления  $p_k$ , которое может быть вычислено для каждого атома  $k$ , как упомянуто выше (разд. 1.2).



**Рис. 8.** Вид модельного кластера SiC, состоящего из 164 атомов, расположенного на поверхности Si(111).

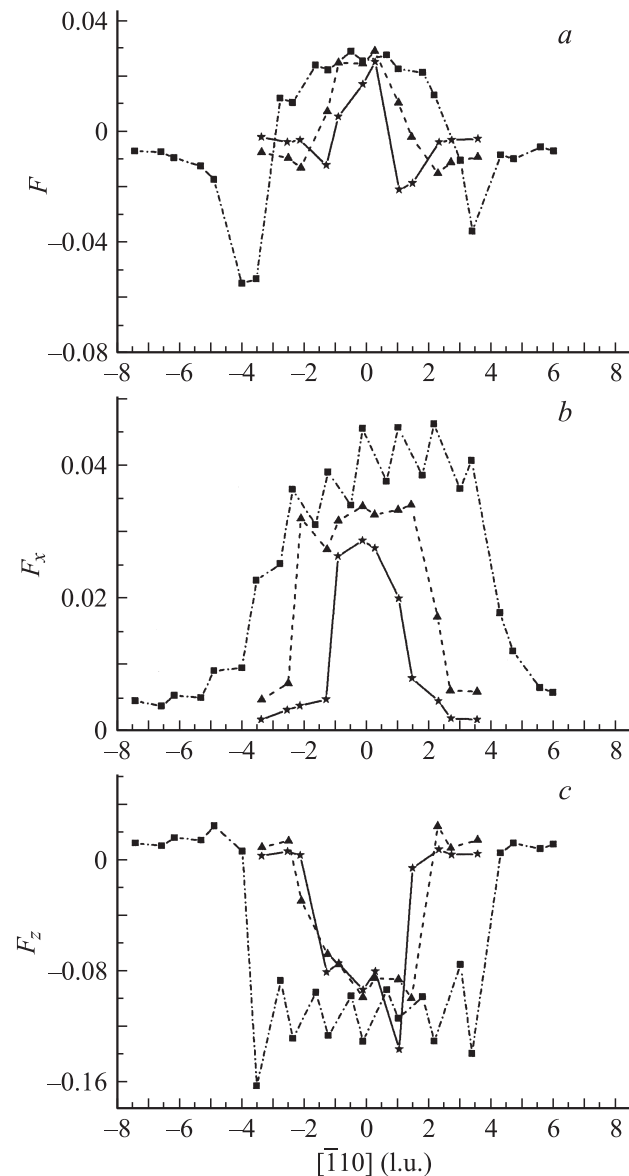


**Рис. 9.** Величина деформации  $F$  (a) и ее компоненты  $F_x$  (b) и  $F_z$  (c) для атомов подложки Si, расположенных под центром кластера SiC вдоль направления  $[111]$ . Сплошная, пунктирная и штрихпунктирная кривые соответствуют образцам с кластерами, состоящими из 74, 164 и 479 атомов соответственно.

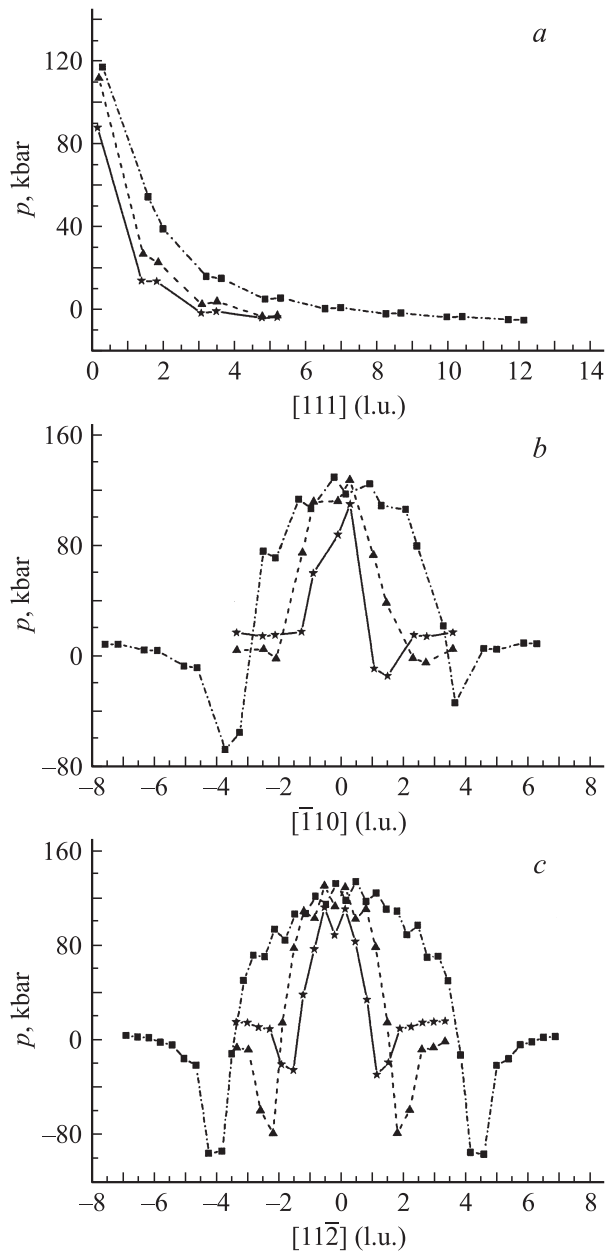
На рис. 9 представлена величина деформации под центром кластера в глубь образца (т.е. вдоль оси  $Z$ ). Можно видеть, что в целом под кластером SiC имеет место напряжение сжатия, которое, по всей видимости, вызвано разницей в параметрах решетки подложки кремния и кластера SiC. Кластер со структурой кубического карбида кремния, имеющий параметр решетки меньше, чем для чистого кремния, может сжимать решетку кремния в подложке под собой. На рис. 9, a и 9, b продемонстрирован спад объемной деформации  $F$  и компоненты деформации  $F_x$  под кластером в глубину. В то же время компонента  $F_z$  демонстрирует (рис. 9, c) де-

формацию растяжения непосредственно под кластером в направлении, перпендикулярном поверхности. Причиной этого растяжения является сильное сжатие в радиальном направлении, которое вызывает противоположную деформацию в более „свободном“ направлении (т.е. по оси  $Z$ ). Тем не менее эти деформации растяжения полностью не компенсируют деформаций сжатия существующих в радиальном направлении, так что полная объемная деформация под кластером остается деформацией сжатия.

На следующих графиках (рис. 10) показано распределение величины объемной деформации и ее компонент



**Рис. 10.** Параметр  $F$  (a) и его компоненты  $F_x$  (b) и  $F_z$  (c) для атомов, принадлежащих двум атомным рядам верхнего бислоя подложки Si, проходящим под центром кластера SiC в направлении  $[\bar{1}10]$ . Сплошная, пунктирная и штрихпунктирная кривые соответствуют образцам с кластерами, состоящими из 74, 164 и 479 атомов соответственно.



**Рис. 11.** Локальное давление для атомов подложки Si, расположенных под центром кластера SiC вдоль направления  $[111]$  (a) и для атомов, принадлежащих двум атомным рядам верхнего би-слоя подложки, проходящим под центром кластера в направлениях  $[\bar{1}10]$  (b) и  $[11\bar{2}]$  (c). Сплошная, пунктирная и штрихпунктирная кривые соответствуют образцам с кластерами, состоящими из 74, 164 и 479 атомов соответственно.

вдоль направления  $[\bar{1}10]$  (т.е. параллельно поверхности) в двух верхних монослоях подложки (т.е. прямо под кластером). Они демонстрируют тенденции, аналогичные описанным выше для распределений по глубине. Объемная деформация  $F$  и компонента  $F_x$  показывают деформацию сжатия под кластером. Очевидно, что под центром кластера деформация подложки должна быть боль-

ше, чем на периферии. Действительно, на рис. 10 можно видеть спадание деформации в слое под кластером от центра к периферии. Этот градиент может быть объяснен тем, что кристаллическая структура вблизи поверхности кластера менее жесткая, чем в его центре, и таким образом, искажения подложки оказываются меньше под краями кластера. При этом компонента  $F_z$  снова демонстрирует деформацию растяжения прямо под кластером в направлении, перпендикулярном к поверхности.

Похожие тенденции можно наблюдать, анализируя поле локальных напряжений в подложке под кластером. Рис. 11 демонстрирует распределение локального давления в глубину (т.е. вдоль направления  $[111]$ ) и в латеральном направлении (т.е. вдоль направлений  $[\bar{1}10]$  и  $[11\bar{2}]$ , параллельных поверхности). Как можно видеть, напряжения сжатия существуют в приповерхностном слое подложки непосредственно под центром кластера, и постепенно исчезают в более глубоких слоях. Из латеральных распределений локального давления можно видеть, что более сжатая область находится под центром кластера, и это напряжение исчезает за границами кластера. Также видно, что существует узкая область напряжений растяжения непосредственно под границами кластера. Эта область частично компенсирует сильные напряжения сжатия, вызываемые кластером.

## Заключение

В представленной работе при помощи моделирования методом молекулярной динамики были исследованы отдельные адатомы Si и C и кластеры SiC на поверхности кремния. Для выполнения моделирования в системе кремний–углерод была разработана и протестирована компьютерная программа, реализующая метод молекулярной динамики. При помощи расчета и анализа поверхностей потенциальной энергии были исследованы диффузионные процессы для адатомов Si и C на идеальных поверхностях кремния и около расположенного на поверхности кластера SiC. Были получены значения энергий активации миграции для адатомов Si и C. Эти значения находятся в разумном согласии с данными, имеющимися в литературе.

Продемонстрировано слабое влияние кластеров на диффузию адатомов в пространстве между кластерами. В то же время показано, что возможен захват адатомов, достигших кластера, что приводит к его росту. Исследованы и количественно охарактеризованы поля напряжений и деформаций под кластером SiC, расположенным на поверхности (111) кремния. Исследования показали наличие деформаций сжатия в матрице кремния под кластером, причем деформации больше под центром кластера и спадают к его границам. Такой градиент сжатия под кластером SiC может усиливать диффузию кремния и, таким образом, играть важную роль в формировании слоя SiC в процессе молекулярно-

лучевой эпитаксии с осаждением углерода на подложку кремния.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ (№ 05-02-16679, 07-02-01052), СПбНЦ РАН и программы поддержки ведущих научных школ.

## Список литературы

- [1] *Eberl K., Iyer S.S., Zollner S.* et al. // *Appl. Phys. Lett.* 1992. Vol. 60. P. 3033.
- [2] *Osten H.J., Rücker H., Liu J.P.* et al. // *Microelectronic Engineering*. 2001. Vol. 56. P. 209.
- [3] *Galdin S., Dollfus P., Aubry-Fortuna V.* et al. // *Semicond. Sci. Technol.* 2000. Vol. 15. P. 565.
- [4] *Brunner K., Eberl K., Winter W.* // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 76. P. 303.
- [5] *Kim M., Osten H.J.* // *Appl. Phys. Lett.* 1997. Vol. 70. P. 2702.
- [6] *Chakraborty T.* *Quantum dots: a survey of the properties of artificial atoms.* Amsterdam: Elsevier Science, 1999.
- [7] *Krestnikov I.L., Ledentsov N.N., Hoffmann A., Bimberg D.* // *Phys. Stat. Sol. A.* 2001. Vol. 183. P. 207.
- [8] *Tsu R., Lofgren J.C.* // *J. Cryst. Growth*. 2001. Vol. 227–228. P. 21.
- [9] *Morkoc H., Strite S., Gao G.B.* et al. // *Appl. Phys.* 1994. Vol. 76. P. 1363.
- [10] *Casady J.B., Johnson R.W.* // *Solid State Electron.* 1996. Vol. 39. P. 1409.
- [11] *Ruvimov S., Bugiel E., Osten H.J.* // *J. Appl. Phys.* 1995. Vol. 78. P. 2323.
- [12] *Claverie A., Faure J., Balladore J.L.* et al. // *J. Cryst. Growth*. 1995. Vol. 157. P. 420.
- [13] *Osten H.J., Bugiel E., Zaumseil P.* // *J. Appl. Phys.* 1997. Vol. 82. P. 231.
- [14] *Fischer G.G., Zaumseil P., Bugiel E.* et al. // *J. Appl. Phys.* 1995. Vol. 77. P. 1934.
- [15] *Simon L., Faure J., Kubler L.* et al. // *J. Cryst. Growth*. 1997. Vol. 180. P. 185.
- [16] *Guedj C., Dashiell M.W., Kulik L.* et al. // *J. Appl. Phys.* 1998. Vol. 84. P. 4631.
- [17] *Sun Y., Ayabe T., Miyasato T.* // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1999. Vol. 38. P. L1166.
- [18] *Yang J., Wang X., Zhai G.* et al. // *J. Cryst. Growth*. 2001. Vol. 224. P. 83.
- [19] *Scharmann F., Maslarski P., Attenberger W.* et al. // *Thin Solid Films*. 2000. Vol.380. P. 92.
- [20] *Cimalla V., Schmidt A.A., Stauden Th.* et al. // *J. Vac. Sci. Technol. B.* 2004. Vol. 22. P. L20.
- [21] *Bermudez V.M., Long J.P.* // *Appl. Phys. Lett.* 1995. Vol. 66. P. 475.
- [22] *Pezoldt J., Stauden Th., Cimalla V.* et al. // *Mater. Sci. Forum*. 1998. Vol. 264–268. P. 251.
- [23] *Craciun V., Lambers E., Bassim N.* // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 2001. Vol. 19. P. 2691.
- [24] *Kim K.C., Park C.I., Roth J.I.* et al. // *J. Vac. Sci. Technol. A.* 2001. Vol. 19. P. 2636.
- [25] *Zekentes K., Papaioannou V., Pecs B.* // *J. Cryst. Growth*. 1995. Vol. 157. P. 392.
- [26] *Bjoerketun L.-O., Hultman L., Ivanov I.P.* et al. // *J. Cryst. Growth*. 1997. Vol. 182. P. 379.
- [27] *Marx D., Hutter J.* *Modern methods and algorithms of quantum chemistry* / Ed. by J. Groendorst. Juelich: John von Neumann Institute for Computing, 2000. NIC Series. Vol. 1. P. 301.
- [28] *Allen M.P., Tildesley D.J.* *Computer Simulation of Liquids.* Oxford: Clarendon Press, 1987.
- [29] *Frenkel D., Smit B.* *Understanding molecular simulation.* San Diego–London–Boston–N.Y.–Sydney–Tokyo–Toronto: Academic Press., 1996.
- [30] *Kotrla M.* // *Computer Phys. Comm.* 1996. Vol. 97. P. 82.
- [31] *Levi A.C., Kotrla M.* // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1997. Vol. 9. P. 299.
- [32] *Batra I.* // *Phys. Rev. B.* 1990. Vol. 41. P. 5048.
- [33] *Shkrebtii A.I., Di Felice R., Bertoni C.M., del Sole R.* // *Phys. Rev. B.* 1995. Vol. 51. P. 11 201.
- [34] *Ramstad A., Brocks G., Kelly P.J.* // *Phys. Rev. B.* 1995. Vol. 51. P. 14 504.
- [35] *Bechstedt F., Stekolnikov A.A., Furthmueller J.* et al. // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 87. P. 016 103.
- [36] *Ke S.H., Uda T., Terakura K.* // *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 62. P. 15 319.
- [37] *Nurminen L., Tavazza F., Landau D.P.* et al. // *Phys. Rev. B.* 2003. Vol. 67. P. 035 405.
- [38] *Itoh M.* // *Phys. Rev. B.* 1998. Vol. 58. P. 3537.
- [39] *Catellani A., Galli G., Gygi F.* // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 77. P. 5090.
- [40] *Bermudez V.M.* // *Phys. Stat. Sol. B.* 1997. Vol. 202. P. 447.
- [41] *Gutierrez R., Haugk M., Elsner J.* et al. // *Phys. Rev. B.* 1999. Vol. 60. P. 1771.
- [42] *Luo X., Quian G., Fei W.* et al. // *Phys. Rev. B.* 1998. Vol. 57. P. 9234.
- [43] *Brocks G., Kelly P.J., Car R.* // *Phys. Rev. Lett.* 1991. Vol. 66. P. 1729.
- [44] *Liu C.-L., Borucki L.J., Merchant T.* et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2000. Vol. 76. P. 885.
- [45] *Cicero G., Catallani A.* // *Appl. Surf. Sci.* 2001. Vol. 184. P. 113.
- [46] *Cicero G., Catellani A.* // *Appl. Phys. Lett.* 2001. Vol. 78. P. 2312.
- [47] *Cho K., Kaxiras E.* // *Europhys. Lett.* 1997. Vol. 39. P. 287.
- [48] *Sonnet Ph., Stauffer L., Selloni A.* et al. // *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 62. P. 6881.
- [49] *Smith A.P., Wiggs J.K., Jonsson H.* et al. // *J. Chem. Phys.* 1995. Vol. 102(2). P. 1044.
- [50] *Roland C., Gilmer G.H.* // *Phys. Rev. B.* 1992. Vol. 46. P. 13 428.
- [51] *Cai J., Wang L.-S.* // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 64. P. 035402.
- [52] *Gogotsi Yu., Kamysenko V., Shevchenko V.* et al. // *Functional gradient materials and surface layers prepared by fine particles technologies* / Ed. by M.-I. Baraton and I. Uvarova. Dordrecht: Kluwer, 2001. P. 239.
- [53] *Mo Y.M., Kleiner J., Webb M.B., Lagally M.G.* // *Surf. Sci.* 1992. Vol. 268. P. 275.
- [54] *Russo G., Sander L.M., Smereka P.* // *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 69. P. 121 406.
- [55] *Ercolessi F.* *A molecular dynamics primer.* 1997. Spring College in Computational Physics, ICTO, Trieste, June 1997.
- [56] *Stillinger F.H., Weber T.A.* // *Phys. Rev. B.* 1985. Vol. 31. P. 5262.
- [57] *Tersoff J.* // *Phys. Rev. B.* 1988. Vol. 38. P. 9902.
- [58] *Tersoff J.* // *Phys. Rev. B.* 1988. Vol. 37. P. 6991.
- [59] *Cai J.* // *Phys. Stat. Sol. B.* 1999. Vol. 212. P. 9.

- [60] *Balamane H., Halicioglu T., Tiller W.A.* // Phys. Rev. B. 1992. Vol. 46. P. 2250.
- [61] *Tersoff J.* // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 39. P. 5566.
- [62] *Dyson A.J., Smith P.V.* // Surf. Sci. 1996. Vol. 355. P. 140.
- [63] *Takayanagi K., Tanishiro Y., Takahashi M., Takahashi S.* // J. Vac. Sci. Technol. A. 1985. Vol. 3. P. 1502.
- [64] *Kharlamov V.S., Zhurkin E.E., Hou M.* // Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. B. 2002. Vol. 193. P. 538.
- [65] *Zhuekin E.E., Kolesnikov A.S.* // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2003. Vol. 202. P. 269.
- [66] *Zhurkin E.E., Hou M.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2000. Vol. 12. P. 6735.
- [67] *Beardmore K.M., Gronbech-Jeansen N.* // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 12 610.
- [68] *Koster M., Urbassek H.* // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. P. 11 219.
- [69] *Liu C.L., Odette G.R., Wirth B.D., Lucas G.E.* // Mater. Sci. Eng. A. 1997. Vol. 238. P. 202.
- [70] *Khrushcheva O., Zhurkin E.E., Malerba L.* et al. // Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. B. 2003. Vol. 202. P. 68.
- [71] *Teodosiu C.* Elastic Models of Crystal Defects. Berlin-N.Y.: Springer, 1982.
- [72] *Trushin Yu.* Theory of Radiation Processes in Metal Solid Solutions. N.Y.: Nova Science Publishers Inc, 1996.
- [73] *Kulikov D.V., Trushin Yu.V., Rybin P.V., Kharlamov V.S.* // Tech. Phys. 1999. Vol. 44. P. 1168.
- [74] *Rybin P.V., Kulikov D.V., Trushin Yu.V.* et al. // Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B. 2001. Vol. 178. P. 269.
- [75] *Trushin Yu.V., Safonov K.L., Ambacher O., Pezoldt J.* // Tech. Phys. Lett. 2003. Vol. 29. P. 663.
- [76] *Pezoldt J., Cimalla V., Stauden Th.* et al. // Diamond and Rel. Mater. 1997. Vol. 6. P. 1311.
- [77] *Flores M., Fuenzalida V., Häberle P.* // Phys. Stat. Sol. A. 2005. Vol. 202. P. 1959.