

УДК 531.6:541.8

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ ЛОКАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУР С ПОМОЩЬЮ СФОКУСИРОВАННОГО АТОМНОГО ПУЧКА¹

М.Ю. Пушкарь, А.Г. Бембель

Тверской государственный университет,
кафедра теоретической физики

Разработана компьютерная программа, воспроизводящая новую технологию получения локальных наноструктур (островков) на твердых поверхностях путем конденсации атомов из сфокусированного молекулярного пучка наноразмерного сечения. На примере ленард-джонсовских систем исследовано влияние ряда управляющих параметров (энергии пучка, температуры подложки, и др.) на структуру и морфологию островков.

Введение. Последнее десятилетие ознаменовалось существенным возрастанием интереса к наноструктурам, в том числе к проблемам их получения и применения. Помимо термина «нанотехнология» входит в употребление термин «нанонаука» [1], отвечающий фундаментальным (физико-химическим) основам нанотехнологии. Одним из наиболее актуальных направлений нанотехнологии является наноэлектроника, отвечающая переходу от создания и применения микронных и субмикронных активных элементов к наноразмерным. Возможны различные пути развития наноэлектроники: переход полупроводниковой электроники на наномасштабы, развитие молекулярной электроники [2], создание квантового компьютера. В ближайшей перспективе наиболее реальным представляется дальнейшая миниатюризация и совершенствование традиционной полупроводниковой электроники. С одной стороны, возможности движения в этом направлении представляются весьма ограниченными, поскольку характерный размер атома (~0,1 нм) может рассматриваться в качестве естественного и абсолютного предела миниатюризации как активных, так и пассивных элементов электроники. Отсюда ясно, что эмпирический закон Мура, согласно которому размеры микроэлектронных устройств должны уменьшаться вдвое каждые четыре года, рано или поздно перестанет выполняться. С другой стороны, характерный размер транзистора в современном процессоре типа Pentium IV уже составляет 60 нм. Тогда, в соответствии с законом Мура, размеры рабочих элементов порядка 10 нм прогнозируются только на 2020 г. Примечательно, также, что указанный размер соответствует стороне германиевой пирамиды, получающейся

¹ Работа выполнена под руководством и при участии проф. В.М. Самсонова.

самосборкой 3000 атомов германия на поверхности кремния [1]. Островки в форме пирамиды представляют интерес и с фундаментальной точки зрения как паттерны самоорганизации, и с прикладной точки зрения как объекты, перспективные для создания квантовых точек, т.е. полупроводниковых элементов очень малого размера. Металлические, в частности никелевые пирамиды [3], перспективны для создания наноразмерных элементов памяти высокой емкости.

Германиевые пирамиды на поверхности кремния получают с помощью обычных установок для молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Однако в этих достаточно сложных и современных установках [4] использование узких пучков хотя бы микронного сечения не предусматривается, поэтому на монокристаллической пластине («вафле») кремния получается большое число германиевых пирамид, распределенных по подложке случайным образом. Однако для получения наносхем необходимо создавать заданные наноструктуры на заданных участках подложки. Традиционный путь решения указанной проблемы связан с распространением методов фотолитографии [5], а также рентгеновской литографии, на наноразмерный уровень. Перспективным представляется также метод печатной нанолитографии [1].

Вместе с тем, представляет интерес использование узконаправленных атомных пучков наноразмерного сечения для непосредственного создания локальных структур (рабочих элементов), а также для создания пассивных элементов типа проводящих дорожек наноразмерной ширины. Поскольку лабораторные и технологические эксперименты по получению наноструктур затруднительны, целесообразно предварительное воспроизведение наноструктур и явлений, представляющих интерес для нанотехнологии, на уровне компьютерного эксперимента.

В данной работе предпринята попытка осуществления на уровне компьютерного молекулярно-динамического эксперимента новой технологии получения наноструктур с помощью узконаправленного атомного пучка, сечение которого соответствует размеру формируемой наноструктуры.

Метод исследования. В качестве метода исследования процессов формирования наноструктур из атомного пучка в работе использован метод компьютерного молекулярно-динамического эксперимента. С формальной точки зрения, этот метод сводится к решению системы уравнений второго закона Ньютона для всех атомов, входящих в исследуемую систему. Однако фактически речь идет о создании программными средствами интересующего исследователя

виртуального мира, соответствующего, в той или иной степени, реальному и «оживающему» в процессе реализации программы.

Схема установки, воспроизведенной компьютерными средствами в данной работе, представлена на рис. 1. Из некоторого источника (трубки) испускаются атомы, формирующие пучок. Частота испускания и количество испущенных атомов выступают в роли контролируемых параметров. На данном этапе исследований предполагалось, что трубка ориентирована в нормальном к подложке направлении, хотя, при необходимости, угол между трубкой и подложкой может выступать в роли варьируемого параметра. Как видно из рис. 1, ростовая область ограничивается подложкой и полусферой, радиус которой соответствует расстоянию от источника до подложки. Эта область рассматривается как открытая термодинамическая система: атомы, отражающиеся от подложки и выходящие за пределы указанной полусферы исключаются из рассмотрения.



Рис. 1. Схематическое изображение установки, воспроизводимой в компьютерных экспериментах

В данной работе нами были использована модель потенциального межатомного взаимодействия: модель парных взаимодействий, отвечающая потенциалу Леннард-Джонса. Использование потенциала Леннард-Джонса обуславливается двумя причинами: 1) стремлением выяснить общие закономерности формирования структуры и морфологии островков, не связанные со спецификой межатомного взаимодействия; 2) существенным уменьшением (на порядок) времени счета по сравнению со случаем, когда применяются коллективные потенциалы. Использование потенциала Леннард-Джонса приводит к формированию плотноупакованных структур, наиболее адекватных островкам металлов, для которых характерна плотная упаковка атомов. Основной эффект коллективного взаимодействия в германии и кремнии сводится к переходу от плотной упаковки к структурам, характерным для элементов IV группы и обычно характеризующимся значением первого координационного числа, равным четырём.

Результаты моделирования формирования островков в леннард-джонсовских системах. Несмотря на кажущуюся простоту установки, схема которой показана на рис. 1, моделируемая система

характеризуется целым рядом параметров, в том числе управляющих параметров. К их числу относятся: энергия и диаметр пучка, температура подложки, число испущенных атомов, энергия подложки и др. В данной работе энергия подложки характеризовалась ее относительным энергетическим параметром $\varepsilon_s^* = \varepsilon_s / \varepsilon_b$, где ε_s и ε_b – энергетические параметры парного потенциала для атомов подложки и атомов пучка соответственно (энергетический параметр парного потенциала отвечает глубине потенциальной ямы). Отношение энергетических параметров $\varepsilon_s / \varepsilon_b$ в первом приближении равно отношению энергий связи элементов, отвечающих подложке и растущей наноструктуре.

Основным параметром атомного пучка является его энергия, т.е. средняя кинетическая энергия атомов. В реальных системах, в зависимости от энергии пучка материальных частиц, возможно протекание различных по физической природе процессов – от формирования нанокристаллов (энергии от 0,5 до 10 эВ) до ионной имплантации (энергии порядка 1 КэВ и выше) и ядерных реакций (энергии, превышающие 10 ГэВ). Если принять, что в существующих испарителях, применяющихся в МЛЭ и ТПТ температура испаряемого вещества не превышает (2000–5000) К, то данному интервалу будут соответствовать максимально достижимые энергии (0,3–0,7) эВ. В диссертации [6] был сделан вывод о том при энергиях пучка порядка 0,5 эВ может иметь место гомогенная конденсация, т.е. образование кластеров в самом пучке еще до достижения атомами подложки. Вместе с тем, при энергиях пучка порядка 0,5 КэВ, т.е. при высоких энергиях, проявляется другой «паразитный» эффект – существенно возрастает распыление формирующихся наноструктур. В результате проведенных компьютерных экспериментов было установлено, что оптимальным условиям формирования наноструктур отвечают энергии пучка порядка 5 эВ, на порядок превышающие энергию теплового движения атомов в формирующихся наноструктурах. Вместе с тем, максимально достижимые энергии пучка в обычных установках для МЛЭ составляют 0,5 эВ, что соответствует температурам испарителей порядка 2000 К. В связи с этим, в данной работе особое внимание уделено проверке сделанного ранее вывода о непригодности пучков с энергией порядка 0,5 эВ для формирования дискретных наноструктур.

Как видно из рис. 2, понижение температуры способствует формированию островков правильной пирамидоподобной формы (рис. 2, а). Приведенная температура $T^* = kT / \varepsilon_b$ определяется через глубину потенциальной ямы парного потенциала ε_b . Как показали предварительные компьютерные эксперименты и теоретические оценки, температуре плавления леннард-джонсовских наночастиц отвечает

$T^*=0,5$. Таким образом, приведенная температура $T^*=0,4$, отвечающая рис. 2, б, соответствует температуре, близкой к температуре плавления. Для количественной характеристики структуры островков нами использовались первое координационное число (рис. 3) и функция радиального распределения (ФРР) атомов (рис. 4). Как видно из рис. 3, в обоих случаях формируются плотноупакованные структуры (асимптотическое значение первого координационного числа равно 12), хотя вблизи температуры плавления выход на асимптотическое значение наблюдается значительно позже. Кроме того, существенно возрастают флуктуации z_1 , проявляющиеся и в отрелаксированных структурах. Более детальное исследование показало, что леннард-джонсовские островки характеризуются ГПУ-структурой.

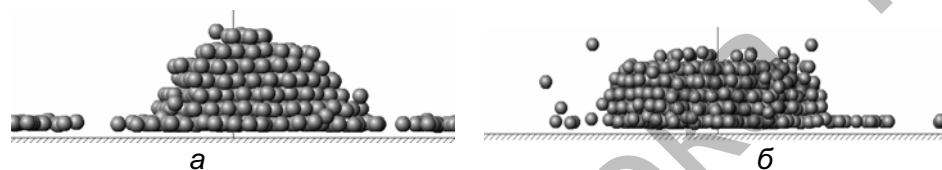


Рис. 2. Конечные конфигурации наноструктур $N=1000$ и энергии пучка 5 эВ:
а) $T^* = 0,2$; б) $T^* = 0,4$

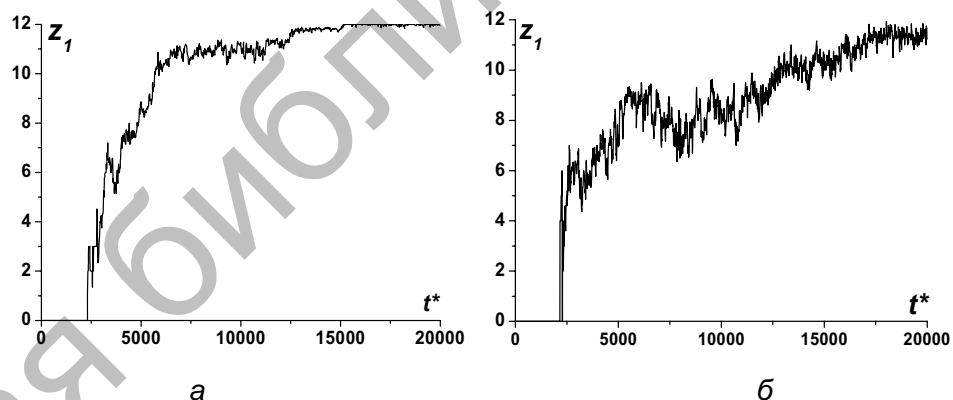


Рис. 3. Кинетические зависимости для первого координационного числа z_1 ($N=1000$, энергия пучка 5 эВ): а) $T^* = 0,2$; б) $T^* = 0,4$

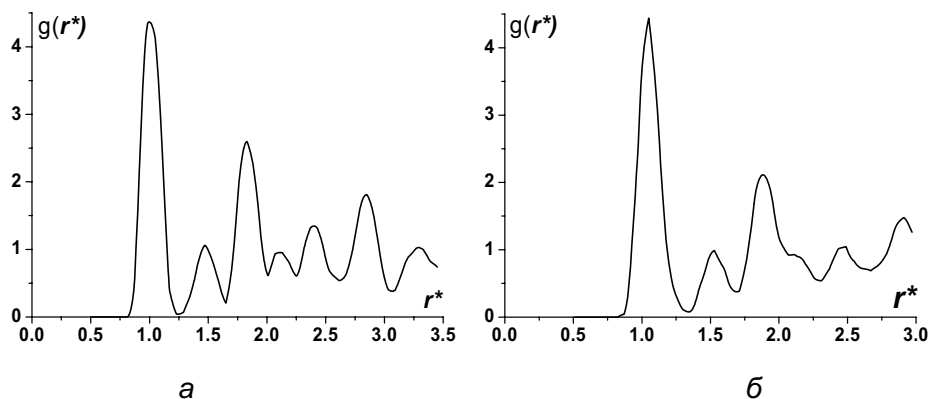


Рис. 4. Радиальная функция для случая непрерывной подложки ($N=1000$, энергия пучка 5 эВ): а) $T^*=0,2$; б) $T^*=0,4$

Следуя П.П. Кобеко [7], который предложил использовать ФРР для дифференциации кристаллического, аморфного и жидкого состояний вещества, мы использовали ФРР в качестве основной структурной характеристики островков, позволяющей идентифицировать их фазовое состояние. Как видно из рис. 4, а, при $T^*=0,2$ ФРР имеет два хорошо разрешенных максимума. Следовательно, фазовое состояние соответствующей наночастицы можно квалифицировать как нанокристаллическое. При $T^*=0,4$ третий минимум не доходит до нуля, хотя три первых максимума являются достаточно хорошо выраженными, причем высота третьего максимума превышает высоту второго. По формальному критерию Кобеко, фазовое состояние соответствующего островка следовало бы рассматривать как аморфное, однако выраженный характер нескольких максимумов позволяет заключить, что состояние островков при $T^*=0,4$ более адекватно соответствует дефектному кристаллу.

Результаты исследования процессов формирования островков на дискретных подложках оказались достаточно неожиданными: переход от непрерывного полупространства к дискретной модели практически не влияет на структуру и морфологию островков. Аналогичная ситуация обнаруживается и при варьировании энергии подложки: переход от случая, когда $\varepsilon_s^* = 1$ (условия автоэпитаксии) к высокоэнергетической поверхности ($\varepsilon_s^* = 5$) лишь незначительно увеличивает степень кристаллической упорядоченности, тогда как при температурах, превышающих температуру плавления, столь высокая энергия подложки привела бы к полному смачиванию поверхности соответствующей наноклапей.

По нашему мнению, причина слабого влияния энергии и структуры подложки на структуру и морфологию нанокристалла,

формирующегося из атомного пучка при низких температурах, заключается в следующем. Первоначально на твердой поверхности формируется нижний монослой островка, площадь которого, как правило, превышает площади верхних монослоев. В этом отношении, первый монослой ведет себя подобно прекурсионному слою растекающейся капли [8]. В связи с этим, нижний монослой, формирующийся при взаимодействии между подложкой и атомным пучком, также можно назвать прекурсионным. Рост второго и вышележащих монослоев происходит уже на прекурсоре. По-видимому, именно этим объясняется существование корреляции между углом, который формируется между боковыми гранями нанокристаллов и подложкой (20° – 40°) и краевыми углами, формирующимися при смачивании граней кристалла собственным расплавом [9].

На рис. 5 и рис. 6 представлены результаты, отвечающие дискретной наноструктуре, формирующейся из пучка с энергией 0,5 эВ. Видно, что формируется пирамида более правильной формы, а коэффициент распыления уменьшается по сравнению со случаем, когда энергия пучка равна 5 эВ. Таким образом, результаты данной работы не подтверждают сделанный ранее вывод о непригодности пучков с энергиями, отвечающими обычным условиям МЛЭ, для формирования дискретных наноструктур.

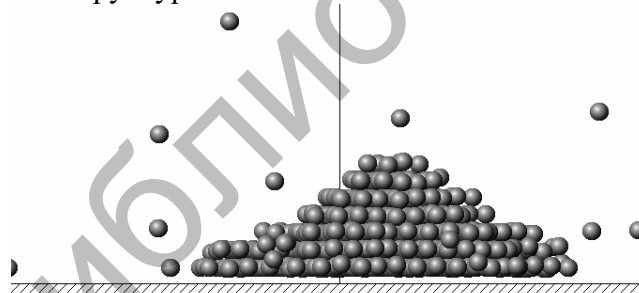


Рис. 5. Конечная конфигурация наноструктур $N=1000$ и энергии пучка 0.5 эВ: при $T^* = 0,2$

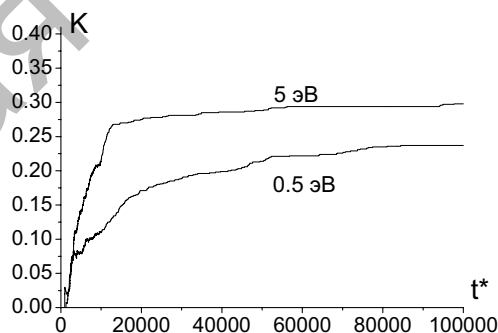


Рис. 6. Коэффициент распыления для двух значений энергии пучка

Заключение. Несмотря на наличие ряда открытых и дискуссионных вопросов, полученные в данной работе результаты свидетельствуют о возможности осуществления новой технологии получения наноструктур путем конденсации из узкосфокусированного пучка наноразмерного сечения.

Даже при температурах более низких, чем макроскопическая температура плавления материала, отвечающего островку, при формировании наноструктур из атомного пучка проявляется ряд капиллярных эффектов. В частности, нижний монослой островка (прекурсор) создает условия для формирования вышележащих слоев, аналогичные краевым условиям смачивания поверхности кристалла собственным расплавом. Островки, содержащие 500 атомов германия, и леннард-джонсовские островки, содержащие более 4000–5000 атомов, приобретают куполообразную форму, согласующуюся с основным уравнением капиллярности, предсказывающим, что в отсутствие внешнего силового поля форма свободной поверхности должна отвечать условию постоянства кривизны.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 05-03-32198-а).

Список литературы

1. Нанотехнология в ближайшем десятилетии. М.: Мир, 2002.
2. Balzani V., Credi A., Venturi M. Molecular Devices and Machines. Weinheim: WILEY-VCH Verlag, 2003.
3. Smith H.I., Carter D.J.D., Goodberlet J.G. et al. Nanostructures Technology, Research and Applications // RLE Progress Report. 1998. No. 141. P. 29–66.
4. Лойко Н.Н. Введение в молекулярно-лучевую эпитаксию: Учебно-исследовательское пособие. М.: Изд-во Физического института РАН, 1998.
5. Чистяков Ю.Д., Райнова Ю.П. Физико-химические основы технологии микроэлектроники. М.: Металлургия, 1979.
6. Пушкарь М.Ю. Молекулярно-динамическое моделирование процесса роста наноструктур из атомного пучка. Дисс... канд. физ.-мат. наук. Тверь, 2006.
7. Кобеко П.П. Аморфные вещества. М.-Л.: Изд-во Академии наук СССР, 1952.
8. Сумм Б.Д., Горюнов Ю.В. Физико-химические основы смачивания и растекания. М.: Химия, 1976.
9. Найдич Ю.В., Перевертайло В.М., Григоренко Н.Ф. Капиллярные явления в процессах роста и плавления кристаллов. Киев: Наук. думка, 1983.