XXXI Неделя науки СПбГПУ. Материалы межвузовской научной конференции. Ч. IV: С.97-98, 2003.
© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2003.

УДК 535.613

Д. Д. Солнышков (6 курс, каф. ФТТ), С. В. Иванов д. ф.-м. н., ФТИ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

В физике твердого тела при моделировании различных процессов широко используется метод Монте-Карло во множестве модификаций. Большинство из них рассматривают диффузию атома (в частности, адатома) в конкретной решетке (например, поверхностной [1]), причем перемещение атома происходит скачками из одной ячейки в другую и определяется соотношением энергий различных конфигураций системы, а также высотой барьера между ячейками. К сожалению, при рассмотрении эпитаксиального роста в системе с сильным рассогласованием параметров такая модель неприменима, поскольку нельзя говорить о какой-то конкретной фиксированной поверхностной решетке: расстояния между атомами на основной поверхности и на поверхностях островков могут заметно отличаться.

В настоящей работе мы развили предложенную в работе [2] методику безрешеточного моделирования эпитаксиального роста структур. Для ускорения вычислений расчеты велись в двумерном приближении (1+1), то есть кристалл проецировался на поверхность (100). При этом из решетки цинковой обманки получается простая квадратная решетка. Двумерное приближение позволило использовать простую формулу межатомного потенциала — направленный потенциал Леннарда-Джонса:

$$E_{12}(r,\varphi_1,\varphi_2)=\begin{cases} E_0\dfrac{r^{-12}-(1-\beta)\alpha r^{-6}-\beta f(\varphi_1)f(\varphi_2)\alpha r^{-6}}{\alpha^2}, r<r_{cutoff} \\ 0, r>r_{cutoff} \end{cases},$$

где $f(\varphi)=\cos^2(2\varphi)$, $\alpha=2r_0^{1/6}$, $r_{cutoff}=2.5r_0$, r_0 — равновесное расстояние, β — степень ковалентности (направленности) связи.

В отличие от предложенных ранее алгоритмов (см., например, [3]), используемый в настоящей работе алгоритм позволяет моделировать рост многокомпонентных структур с решеткой цинковой обманки. Модель явно учитывает следующие параметры: межатомные расстояния, энергии связи, соотношение степеней ковалентности и потоков отдельных компонентов. Неявно учитываются и являются подгоночными такие параметры, как температура роста, конкретные значения потоков и степеней ковалентности. Реализация модели основывается на модификации Метрополиса [4] метода Монте-Карло.

После успешного предварительного тестирования модели на простейших схемах, таких как, например, гомоэпитаксиальный рост, она была применена к системе с сильным рассогласованием параметров (CdSe/BeTe). Изучалось влияние технологических параметров роста на формирование квантовых точек CdSe в матрице BeTe.

Выводы: разработанная схема моделирования эпитаксиального роста многокомпонентных структур подтвердила предположение о влиянии добавочного напряженного слоя CdTe на формирование квантовых точек CdSe[5], а также позволила изучить зависимость расстояния между квантовыми точками и их размеров от свойств компонентов. Полученные зависимости можно использовать для создания новых систем с заданными свойствами массивов квантовых точек.

ЛИТЕРАТУРА:

1. K. E. Khor, S. Das Sarma, Phys. Rev. B 62, 16 657 (2000)
2. W. M. Plotz et al, Phys. Reb. B 45, 12 122 (1992)
3. F. Much et al, Comp. Phys. Comm 147, 226 (2002)
4. N. Metropolis et al, J. Chem. Phys 21, 1087 (1953)

5. T. V. Shubina et al, Phys. Stat. Sol. (b) 229, 489 (2002)