DOI: 10.55648/1998-6920-2024-18-1-16-28 УДК 29.19:004.272.02

Моделирование гетероэпитаксиального роста Ge на структурированной подложке Si(100) методом Монте-Карло и распараллеливание вычислений *

С. А. Рудин[1], К. В. Павский[1,2], А. Л. Ревун[1,2], А. В. Двуреченский[1,3]

[1] Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (ИФП СО РАН)
[2] Сибирский гос. унив. телекоммуникаций и информатики (СибГУТИ)
[3] Новосибирский государственный университет (НГУ)

Аннотация: Рассмотрены методы и алгоритмы моделирования гетероэпитаксиального роста Ge на Si(100) методом Монте-Карло. Проведен анализ вычислительной сложности составляющих алгоритмы блоков моделирования и предложено распараллеливание трудоемких циклов с использованием директив открытого стандарта OpenMP. Проведено моделирование роста Ge на структурированной подложке Si(100), содержащей упорядоченный массив ямок. Анализ результатов моделирования показал, что расположение наноостровков Ge определяется конкуренцией между процессом зарождения трехмерных островков вследствие накопления упругой деформации в растущем слое и процессом диффузии Ge в ямки, которые служат для них стоком.

Ключевые слова: моделирование методом Монте-Карло, гетероэпитаксия, германий, кремний, структурированные подложки, пространственное упорядочение, OpenMP.

Для цитирования: Рудин С. А., Павский К. В., Ревун А. Л., Двуреченский А. В. Моделирование гетероэпитаксиального роста Ge на структурированной подложке Si(100) методом Монте-Карло и распараллеливание вычислений // Вестник СибГУТИ. 2024. Т. 18, № 1. С. 16–28. https://doi.org/10.55648/1998-6920-2024-18-1-16-28.

Контент доступен под лицензией Creative Commons Attribution 4.0 License

© Рудин С. А., Павский К. В., Ревун А. Л., Двуреченский А. В., 2024

Статья поступила в редакцию 07.07.2023;
принята к публикации 18.08.2023.

1. Введение

Квантовые точки (КТ) GeSi привлекают значительное внимание из-за возможности их практического применения в электронных и электронно-оптических приборах нового поколения, создаваемых на базе существующей кремниевой технологии [1–3]. Наиболее распространенный способ синтеза подобных структур – эпитаксия, представляющая собой рост одного кристаллического материала на другом с сохранением кристаллической ориентации. Несоответствие кристаллических решеток осаждаемого материала и материала подложки приводит к росту напряженных слоев и накоплению деформации в них. При достижении критической толщины пленки формируются трехмерные наноостровки. Такой рост называется ростом по механизму Странского–Крастанова [4–5]. Однако при осаждении Ge на гладкую подложку Si места зарождения наноостровков Ge располагаются хаотично и не подда-

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФП СО РАН (ГЗ FWGW-2022-0011).

ются точному контролю, что сильно ограничивает область возможных применений. Упорядоченные ансамбли КТ обладают более однородным химическим составом и энергетическим спектром, а точный контроль расположения КТ в пространстве открывает возможность адресного обращения к каждой КТ. В последнее десятилетие было предложено использовать мелкие ямки, периодически расположенные на поверхности подложки [6–9], для создания мест преимущественного зарождения островков. Эти ямки служат ловушками для осажденных атомов Ge, что приводит к образованию трехмерных островков в определенных местах относительно ямок. В зависимости от условий роста и формы ямок можно получать различные конфигурации КТ: одна или несколько КТ внутри ямок [10–12], КТ на границе или вне ямок [10, 13–14].

Рост SiGe-пленок включает в себя достаточно сложные механизмы, не принимаемые во внимание в упрощенной модели роста по механизму Странского–Крастанова. Эти механизмы включают в себя комбинацию процессов осаждения, диффузии, перераспределения упругой энергии, морфологической нестабильности, поверхностной анизотропии, различных реконструкций на стенках ямок и траншей. Для изучения роста таких пленок была разработана атомистическая трехмерная модель Монте-Карло (МК) гетероэпитаксиального роста [15, 16]. С помощью данной модели были выявлены механизмы роста Ge на подложках Si(100) с созданными в условиях ионного облучения траншеями [17], массивами ямок, образующих фотонный кристалл [18], и зависимость положения КТ от формы дна ямок [19]. Одной из проблем использованной программной реализации модели является трудоемкость вычислений. Например, моделирование осаждения Ge на гладкую подожку Si(100) размерами 27x27x5.4 нм (200 тыс. атомов) при температуре 720 К со скоростью осаждения 0.0136 нм/с может занимать более двух недель. Поэтому актуальной задачей является поиск путей оптимизации вычислений, а также разработка параллельных алгоритмов для многоядерных вычислительных систем. В настоящей работе представлены первые результаты оптимизации алгоритмов расчета этой модели для систем с общей памятью.

2. Физическая модель МК-моделирования гетероэпитаксиального роста

В основе модели лежит трехмерная кристаллическая решетка типа алмаза с периодическими граничными условиями вдоль поверхности подложки. Каждый узел решетки может быть занят атомом или быть пустым. Каждый атом может смещаться относительно положения узла идеальной решетки. Эти смещения позволяют учитывать упругую деформацию в кристалле. Моделирование роста производится методом Монте-Карло как последовательность элементарных событий, выбираемых случайным образом в соответствии с их вероятностями. В модели возможны следующие элементарные события: осаждение (добавление нового атома) и диффузионный прыжок атома по поверхности. Вероятность осаждения атома вычисляется исходя из требуемой скорости роста. Вероятность диффузионного прыжка i-го атома зависит от энергии активации ε_i :

$$\varepsilon_i = n_{i1}E_1 + n_{i2}E_2 ,$$

где n_{i1}, n_{i2} – число первых и вторых соседей i-го атома; E_1, E_2 – численные константы. В данной модели к энергии активации добавляется энергия упругой деформации E_{el}, выражаемая в виде потенциала Китинга [20]:

$$E_{el} = A\sum_{i,\ j}\left(\left(\vec{r_i} - \vec{r_j}\right)^2 - d_{ij}^2\right)^2 + B\sum_{i,j,k>j}\left(\left(\vec{r_i} - \vec{r_j}\right)\left(\vec{r_i} - \vec{r_k}\right) + \frac{1}{3}d_{ij}d_{ik}\right)^2 ,$$

где $r_i = r_i^{(0)} + u_i$ – радиус-вектор i-го атома (u_i – смещение атома относительно положения узла идеальной решетки); d_{ij}, d_{ik} – равновесные длины атомных связей i–j, i–k (зависит от типа атомов); A и B – численные параметры.

Тогда вероятность прыжка атома из узла i в узел j:

$$p_{i\to j} = v_0 exp\left(\frac{-\varepsilon_i + min\left[\varepsilon_{el,\,i}\left(r_i\right)\right]}{k_\beta T}\right),$$

где v_0 – частота попыток (параметр); $\varepsilon_{el,\,i}\left(r_i\right)$ – часть упругой энергии кристалла, относящаяся к i-му атому; k_β – постоянная Больцмана; T – температура. Минимизация производится по положению i-го атома r_i, в то время как положения остальных атомов фиксированы.

Разрешены любые прыжки из заполненного узла в пустой в пределах второй координационной сферы, не приводящие к «отрыву» атома от кристалла. Критерием отсутствия отрыва считается наличие хотя бы двух вторых соседей у каждого атома.

После прыжка $i \to j$ (или осаждения нового атома в узел j) положение атома r_j выбирается случайно в соответствии с распределением Больцмана: плотность распределения имеет вид:

$$f\left(r_j\right) = Fexp\left(-\frac{\varepsilon_{el,\,j}\left(r_j\right)}{k_\beta T}\right),$$

где F – нормировочный множитель.

Периодический (например, после каждого элементарного события, параметр модели) повтор случайного выбора положения атома в соответствии с распределением Больцмана для N (параметр модели) атомов кристалла приводит к перераспределению упругой деформации в кристалле, что является аналогом термического отжига и служит для минимизации полной упругой энергии.

Таким образом, моделирование состоит из следующих шагов:

1. Создание начальной конфигурации атомов и вычисление вероятностей всех возможных элементарных событий (осаждения или прыжка атома).
2. Случайный выбор одного из событий (исходя из найденных вероятностей) и его выполнение.
3. Смещение N атомов кристалла из равновесных положений в соответствии с распределением Больцмана.
4. Обновление вероятностей элементарных событий и возврат к п. 2.

Более детальную информацию о физической модели можно найти в [18].

3. Программная реализация модели

Предложенные алгоритмы моделирования гетероэпитаксиального роста были реализованы в программе, написанной на языке C++. На рис. 1 изображена блок-схема моделирования гетероэпитаксиального роста методом Монте-Карло.

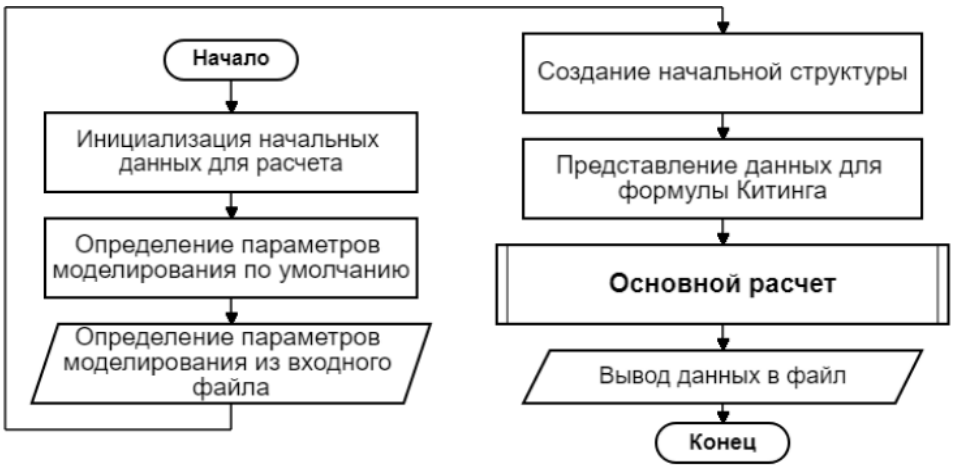

Рис. 1. Блок-схема моделирования гетероэпитаксии методом МК

На рис. 2 изображена блок-схема основного цикла и соотношение времени выполнения в процентах от общего времени счета двух основных блоков – «Шаг Монте-Карло» и «Термический отжиг» на структуре 5.4x5.4x5.4 нм. Для других размеров структур соотношение между этими блоками практически не меняется – на каждый приходится около половины времени выполнения программы.

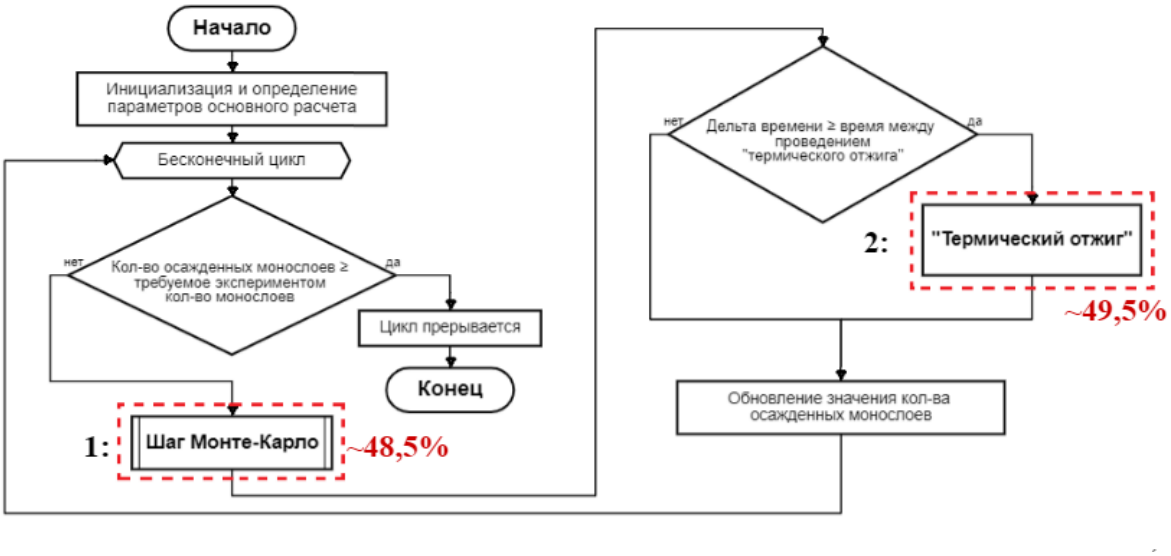

Рис. 2. Блок-схема «Основной расчет»

В блоке «Шаг Монте-Карло» происходит расчет вероятностей элементарных событий, случайный выбор и выполнение одного из них. В блоке «Термический отжиг» выполняется смещение N атомов кристалла из равновесных положений в соответствии с распределением Больцмана. На рис. 3 представлена блок-схема блока «Шаг Монте-Карло» с соответствующим соотношением в процентах от общего времени счета выполнения входящих в него блоков.

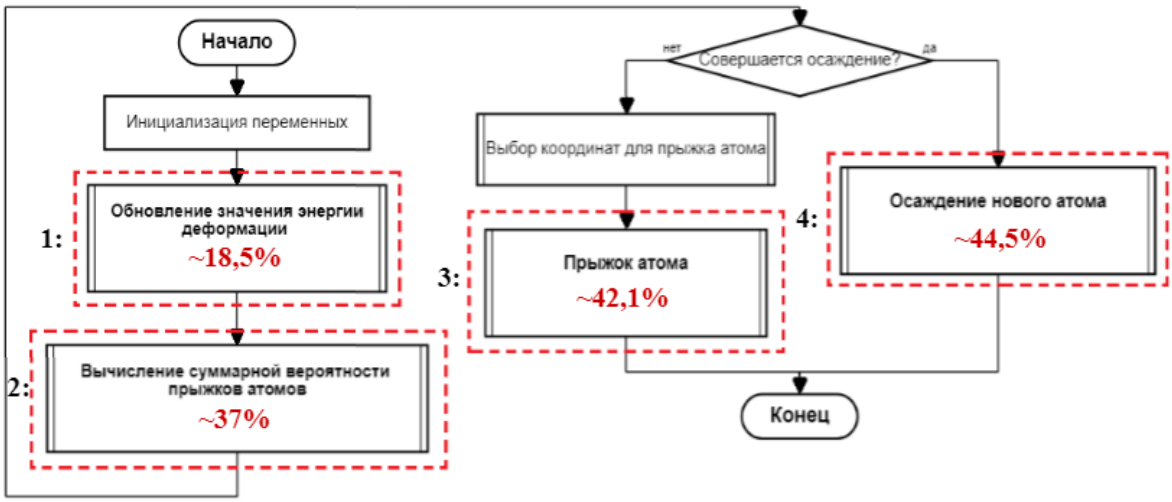

Рис. 3. Блок-схема «Шаг Монте-Карло»

Поэтому в данной работе основной акцент по распараллеливанию был сделан на блок «Термический отжиг» и блоки 1–4 «Шага Монте-Карло».

В каждом из выбранных блоков предложено распараллеливание трудоемких циклов с использованием директив открытого стандарта OpenMP [21] на системах с общей памятью.

3.1. Блок обновления значения энергии деформации

```
void calc_Edef(int x, int y, int z) {
/*инициализация переменных*/
/*проверка корректности входных параметров*/
/*определение соседей атома*/
/* Цикл (1) */
#pragma omp parallel for private(dir) reduction(+: Bx, By, Bz)
for (dir=0; dir<dir_number; dir++) {
  /*определение дополнительных параметров*/
  Bx+=Bxx*ax2+Bxy*ay2+Bxz*az2;
By+=Byx*ax2+Byy*ay2+Byz*az2;
Bx+=Bzx*ax2+Bzy*ay2+Bzz*az2;
}
/* Цикл (2) */
#pragma omp parallel for private(dir)
for (dir=0; dir<dir_number; dir++) {
/*инициализация и определение значения элементов массива*/
}
/*вычисление значения энергии деформации*/
/*обновление значения энергии деформации*/
}
```

В данном блоке были выделены два цикла, подходящих для распараллеливания.

В первом цикле (1) по соседям атома происходит редуцирование параметров `Bx`, `By` и `Bz`. Для его параллельного вычисления в цикле была применена директива «`pragma omp parallel for`». Условие «`private(dir)`» используется для ограничения целостности переменной итерирования. «`reduction(+: Bx, By, Bz)`» добавлено для корректного подсчета редуцированных параметров в теле параллельного блока.

В цикле (2) производится инициализация и определение значения элементов массива. Его распараллеливание аналогично циклу (1), кроме добавления параметра редукции переменной.

3.2. Блок вычисления суммарной вероятности прыжков атомов

```
   double calc_P_jump_sum(void) {
   /*инициализация переменных*/
   #pragma omp parallel for private(x, y, z)reduction(+: real_sum)
   for (z=2; z<Lz-2; z++) {
     for (y=((int)z%2; y<Ly; y+=2) {
   for (x=((int)z%2)+2*(((int)z/2+(int)y/2)%2); x<Lx; x+=4) {
        real_sum += jump_probability(x, y, z);
      }
     }
   }
   return real_sum;
   }
```

Блок вычисления суммарной вероятности содержит один векторизуемый вложенный цикл. В нем проводится суммирование параметра `real_sum` по всем атомам решетки. Для параллельного исполнения цикла применяется прагма «`pragma omp parallel for`», а для ограничения одновременного доступа к переменным итерирования был добавлен параметр «`private(x, y, z)`». Корректный подсчет переменной `real_sum` обеспечивается с помощью условия «`reduction(+: real_sum)`».

3.3. Блок прыжка атома

```
int jump(int x,int y, int z, int dir, int* x2_, int* y2_, int*
z2_) {
   /*инициализация переменных*/
   /*определение координаты для совершения прыжка*/
   /*поиск соседей атома*/
   #pragma omp parallel for private(n)shared(bad_jump)
   for (n=0; n<n_spisok; n++) {
     if (bad_jump == 1) continue;
     x2=spisok[n][0]; y2=spisok[n][1]; z2=spisok[n][2];
     set_config(x2, y2, z2);
   if (atoms(x2, y2, z2).type > 0 && !good_config[atoms(x2, y2,
z2).config]) {
       bad_jump = 1;
     }
   }
   return real_sum;
   }
```

Данный блок содержит единственный цикл, подходящий для параллельного исполнения. В нем происходит проверка координат, найденных для прыжка. Для распараллеливания цикла была применена директива «`pragma omp parallel for`», «`private(n)`» – для ограничения целостности переменной итерирования. Для корректного одновременного выхода из цикла всех потоков (при обнаружении «плохого» прыжка) использовался параметр «`shared(bad_jump)`».

4. Результаты распараллеливания

Для оценки эффективности распараллеливания по блокам было выполнено моделирование структуры размером 13×13×4 нм с осаждением 0.136 нм. На рис. 4–7 представлен график зависимости коэффициента ускорения K_n от количества рабочих потоков, исполняющихся на соответствующем числе вычислительных ядер системы:

$$K_n = \frac{T_1}{T_n},$$

где T_n – время исполнения блока на n ядрах.

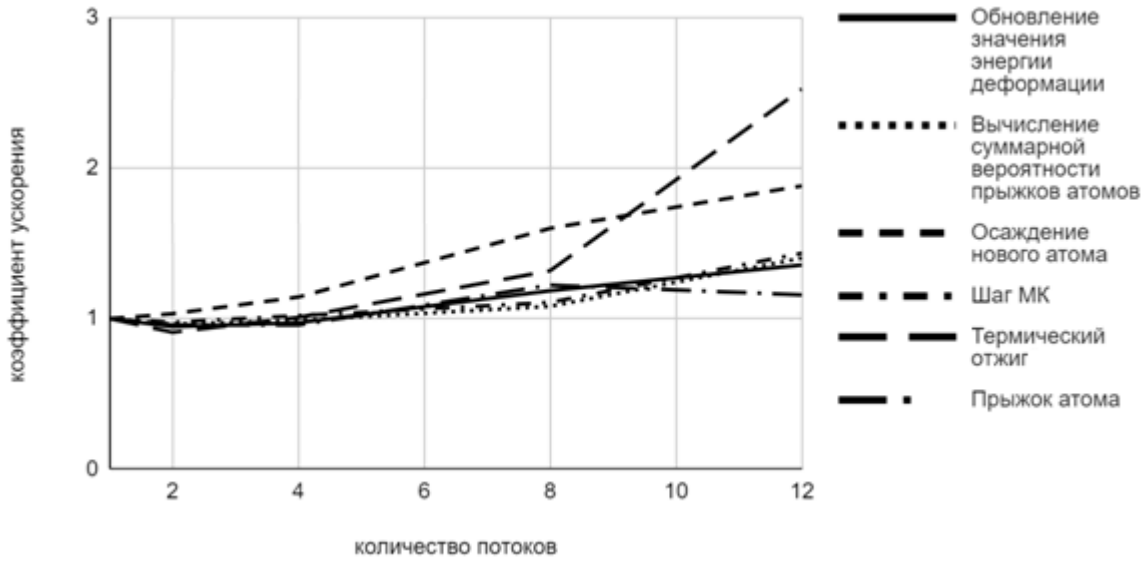

Рис. 4. График коэффициентов ускорения блоков

По графику видно, что наиболее эффективным оказалось распараллеливание блоков «Термический отжиг» и «Осаждение нового атома». Также можно заметить, что с ростом количества используемых потоков в подавляющем большинстве случаев коэффициент ускорения увеличивается.

Эффективность распараллеливания всей программы оценивалась для трех стадий осаждения Ge: 0.136 нм, 0.407 нм и 0.815 нм соответственно. Размеры подложки: 13×13×4 нм. Время моделирования вычислялось по среднему времени за 10 запусков программы.

В первом случае было выполнено осаждение 0.136 нм. На рис. 5 изображен график зависимости коэффициента ускорения от количества используемых потоков. При использовании 12 потоков ускорение вычислений составило около 3 раз.

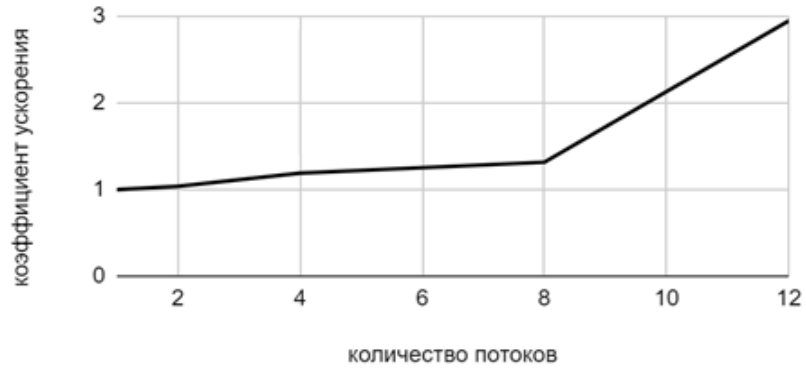

Рис. 5. График зависимости коэффициента ускорения от количества используемых потоков при осаждении 0.136 нм

Во втором случае было выполнено осаждение 0.407 нм (рис. 6). Максимальное полученное ускорение – 1.28 раза – было достигнуто при использовании 12 потоков.

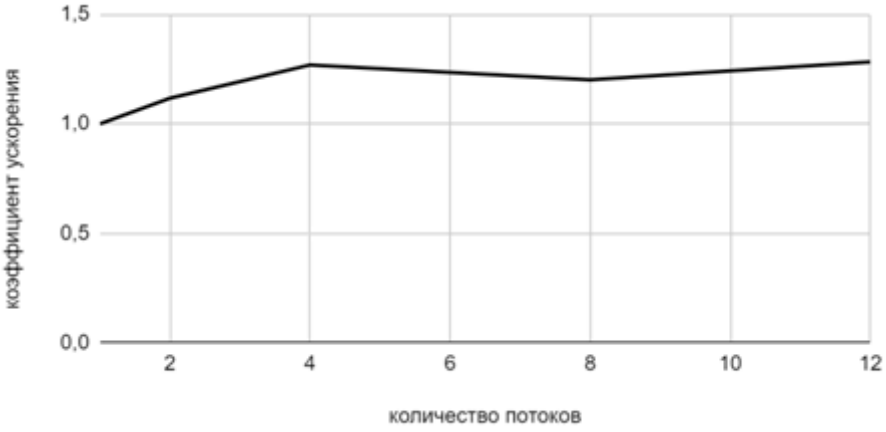

Рис. 6. График зависимости коэффициента ускорения от количества используемых потоков при осаждении 0.407 нм

В третьем случае было выполнено осаждение 0.815 нм (рис. 7). Максимальное полученное ускорение – 1.136 раза.

При увеличении количества осажденного материала увеличивается количество прыжков и, соответственно, количество событий «термического отжига». Это отражается на увеличении доли последовательных вычислений и, следовательно, приводит к падению коэффициента ускорения.

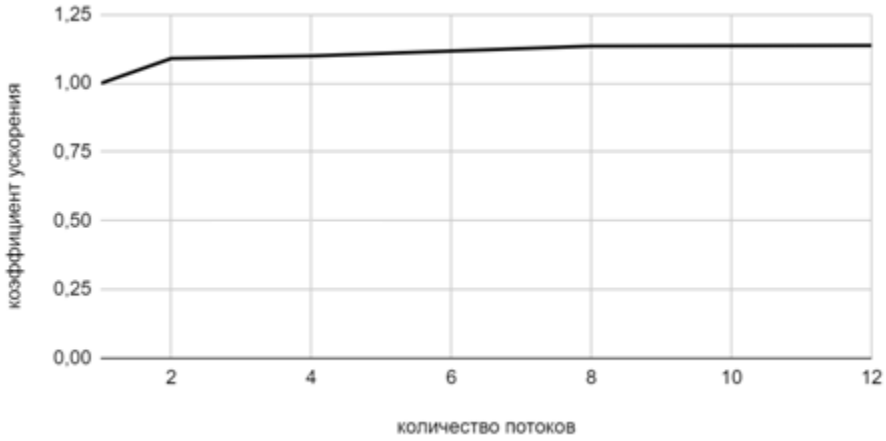

Рис. 7. График зависимости коэффициента ускорения от количества используемых потоков при осаждении 0.815 нм

5. Результаты моделирования

С целью изучения взаимосвязи эволюции Ge-слоя и поверхностной диффузии, а также выявления механизмов зарождения наноостровков была проведена серия экспериментов по МК-моделированию осаждения Ge на подложку Si, содержащую упорядоченный массив ямок. В качестве модельной структуры использовались участки кристалла Si размерами от 10x10x13.5 нм до 27x27x13.5 нм. Поверхность подложки имела ориентацию (100), использовались периодические граничные условия. На поверхности подложки был создан массив ямок воронкообразной формы диаметром от 5.4 нм. Период между ямками менялся от 10 до 27 нм. Глубина ямок считалась бесконечной. И хотя линейные размеры модельных структур примерно на порядок меньше, чем в эксперименте, распределение механических

напряжений остается адекватным в силу самоподобного поведения упругих полей. Скорость осаждения Ge составляла 0.0136 нм/с, температура осаждения – 707 К, осаждено до 1.5 нм. Расчеты выполнялись на высокопроизводительном вычислительном комплексе Информационно-вычислительного центра Новосибирского государственного университета [22].

Моделирование методом Монте-Карло позволило установить, что места зарождения трехмерных нановстрвоков Ge определяются балансом между потоком адатомов Ge в ямки и их диффузией по поверхности. В случае близкого расположения ямок (10 – 13.5 нм) островки не зарождаются. При большем периоде (16.3 нм) потребовалось осадить ≈ 8 МС Ge, чтобы зародились трехмерные островки. С увеличением расстояния между ямками (20.6 и 23.9 нм) для зарождения нановстровков достаточно ≈ 5 МС Ge (рис. 8). В первом случае островки расположены на максимальном удалении от ямок, во втором – образуется больше островков на одну ямку и в третьем – образуется группа островков. Таким образом, ямки являются стоком для поступающего материала, и «сила» этого стока определяет места зарождения нановстровков.

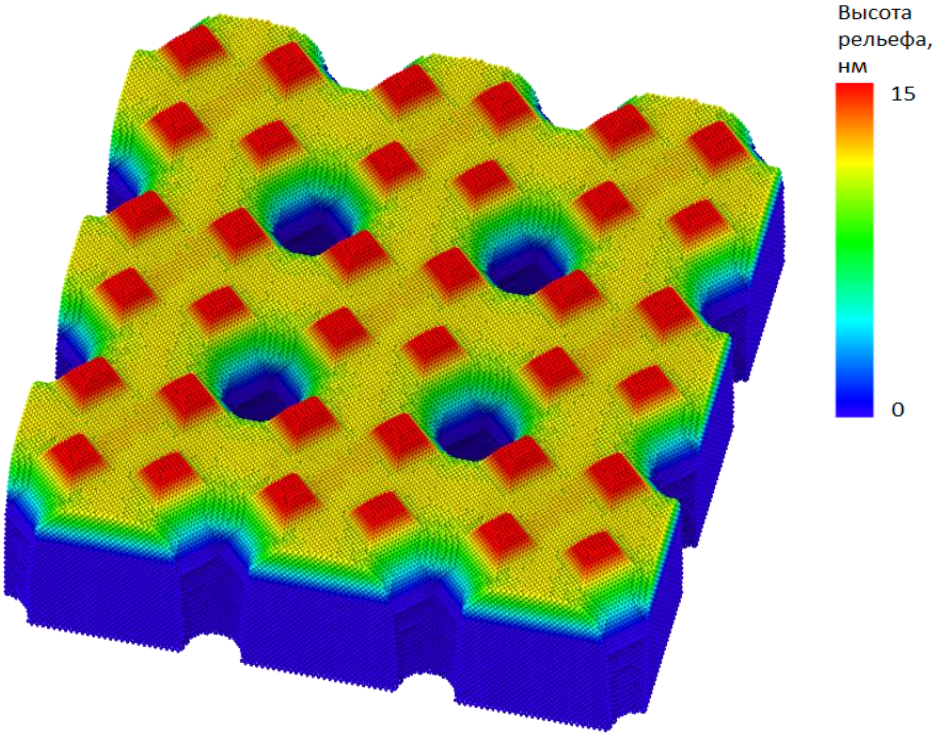

Рис. 8. Морфология поверхности после моделирования осаждения Ge на подложку Si(100), содержащую упорядоченный массив ямок. Размеры подложки 20.6x20.6x13.5 нм, диаметр ямок 5.4 нм, период между ямками 20.6 нм. Осаждено 1.086 нм Ge со скоростью 0. 0136 нм/с при температуре 707 К. Цветом показана высота рельефа.

6. Заключение

Были рассмотрены алгоритмы моделирования методом Монте-Карло гетероэпитаксиального роста. В схеме моделирования методом МК определены вычислительно сложные блоки «Шаг Монте-Карло» и «Термический отжиг». Результаты оптимизации и распараллеливания этих блоков позволили сократить время моделирования от 1.5 до 3 раз в зависимости от условий эксперимента. Проведенное моделирование роста Ge на подложке Si(100), содержащей упорядоченный массив ямок, показало, что полученные результаты согласуются с экспериментальными данными. Анализ результатов моделирования показал, что квантовые точки зарождаются в областях минимальной упругой энергии по внешнему периметру ямок. Эволюция поля упругой деформации обусловлена изменением огранки поверхности в

области ямок в процессе роста, что способствует накоплению Ge по периметру ямок. Этот процесс конкурирует с процессом миграции Ge вглубь ямки. Эффективность такого стока увеличивается с увеличением плотности ямок. Поэтому в случае близкорасположенных ямок зарождение островков не наблюдается.

Литература

1. *Shmidt O. G. and Eberl K.* Self-assembled Ge/Si dots for faster field-effect transistors // IEEE Trans. El. Dev. 2001. V. 48, № 6. P. 1175.
2. *Stangl J., Holy V., and Bauer G.*. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures // Rev. Mod. Phys. 2004. V. 76. P. 725.
3. *Tsybeskov L. and Lockwood D. J.* Silicon-Germanium Nanostructures for Light Emitters and On-Chip Optical Interconnects // Proc. IEEE. 2009. V. 76, № 7. P. 1284.
4. *Eaglesham D. J. and Cerullo M.* Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100) // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. P. 1943.
5. *Mo Y.-W., Savage D. E., Swartzentruber B. S., and Lagally M. G.* Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001) // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 65. P. 1020.
6. *Zhong Z. and Bauer G.* Site-controlled and size-homogeneous Ge islands on prepatterned Si (001) substrates // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 84. P. 1992.
7. *Zhong Z., Schwinger W., Schaffler F., Bauer G., Vastola G., Monalenti F., and Migilo L.* Delayed Plastic Relaxation on Patterned Si Substrates: Coherent SiGe Pyramids with Dominant {111} Facets // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 98. P. 176102.
8. *Hackl F., Grydlik M., Brehm M., Groiss G., Schaffler F., Fromherz T., and Bauer G.* Microphotoluminescence and perfect ordering of SiGe islands on pit-patterned Si(001) substrates // Nanotechnology. 2011. V. 22. P. 165302.
9. *Pezzoli F., Stoffel M., Merdzhanova T., Rastelli A., and Schmidt O. G.* Alloying and Strain Relaxation in SiGe Islands Grown on Pit-Patterned Si(001) Substrates Probed by Nanotomography // Nanoscale Res. Lett. 2009. V. 4. P. 1073.
10. *Vastola G., Grydlik M., Brehm M., Fromherz T., Bauer G., Boioli F., Miglio L., and Montalenti F.* How pit facet inclination drives heteroepitaxial island positioning on patterned substrates // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P. 155415.
11. *Yang B., Liu F., and Lagally M.* Local Strain-Mediated Chemical Potential Control of Quantum Dot Self-Organization in Heteroepitaxy // Phys. Rev. Lett. 2004. V. 92. P. 025502.
12. *Ma Y., Huang S., Zeng C., Zhou T., Zhong Z., Zhou T., Fan Y., Yang X., Xia J. and Jiang Z.* Towards controllable growth of self-assembled SiGe single and double quantum dot nanostructures // Nanoscale. 2014. V. 6. P. 3941-3948.
13. *Zhong Z., Schmidt O., and Bauer G.* Increase of island density via formation of secondary ordered islands on pit-patterned Si (001) substrates // Appl. Phys. Lett. 2004. V. 87. P. 133111.
14. *Grydlik M., Brehm M., and Schaffler F.* Morphological evolution of Ge/Si(001) quantum dot rings formed at the rim of wet-etched pits // Nanoscale Res. Lett. 2012. V. 7. P. 601.
15. *Rudin S. A., Zinovyev V. A. Nenashev A. V., Polyakov A. Yu., Smagina Zh. V., and Dvurechenskii A. V.* Three-dimensional model of heteroepitaxial growth of germanium on silicon // Optoelectronics Instr. and Data Proc. 2013. V. 49. P. 461.
16. *Novikov P. L., Nenashev A. V., Rudin S. A., Polyakov A. S., and Dvurechenskii A. V.* Simulating the nucleation and growth of Ge quantum dots on Si using high-efficiency algorithms // Nanotechnologies in Russia. 2015. V. 10. P. 192.
17. *Smagina Zh. V., Zinovyev V. A., Rudin S. A., Novikov P. L., Rodyakina E. E., and Dvurechenskii A. V.* Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography // J. Appl. Phys. 2018. V. 123. P. 165302.

18. *Rudin S. A., Zinovyev V. A., Smagina Zh. V., Novikov P. L., Nenashev A. V., Pavsky K. V.* Groups of Ge nanoislands grown outside pits on pit-patterned Si substrates // J. of Crystal Growth. 2022. V. 593. P. 126763.
19. *Smagina Zh. V., Zinovyev V. A., Rudin S. A., Novikov P. L., Rodyakina E. E., and Dvurechenskii A. V.* Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography // J. Appl. Phys. 2018. V. 123. P. 165302.
20. *Keating P. N.* Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure // Phys. Rev. 1966. V. 145. P. 637.
21. Открытый стандарт для распараллеливания программ на языках Си, Си++ и Фортран [Электронный ресурс]. URL: `https://www.openmp.org/` (дата обращения: 22.06.2023).
22. Информационно-вычислительный центр Новосибирского государственного университета [Электронный ресурс]. URL: `http://nusc.ru` (дата обращения: 21.06.2023).

Рудин Сергей Алексеевич
младший научный сотрудник лаборатории неравновесных полупроводниковых систем, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (ИФП СО РАН), e-mail: `rudin@isp.nsc.ru`, ORCID ID: 0000-0002-9509-4008.

Павский Кирилл Валерьевич
д.т.н., доцент, заведующий лабораторией вычислительных систем, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (ИФП СО РАН); профессор кафедры вычислительных систем, Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики (СибГУТИ), e-mail: `pkv@isp.nsc.ru`, ORCID ID: 0000-0002-2271-7358.

Ревун Артем Леонидович
инженер-программист лаборатории вычислительных систем, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (ИФП СО РАН); старший преподаватель кафедры вычислительных систем, Сибирский государственный университет телекоммуникаций и информатики (СибГУТИ), e-mail: `pm@artemrevun.ru`, ORCID ID: 0009-0006-5774-415X.

Двуреченский Анатолий Васильевич
чл.-корр РАН, профессор, д.ф.-м.н, заведующий лабораторией неравновесных полупроводниковых систем, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (ИФП СО РАН); профессор кафедры физики полупроводников, Новосибирский государственный университет (НГУ), e-mail: `dvurech@isp.nsc.ru`, ORCID ID: 0000-0001-5443-4769.

Авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.
Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
Вклад соавторов: *Каждый автор внес равную долю участия как во все этапы проводимого теоретического исследования, так и при написании разделов данной статьи.*

Monte Carlo Simulation of Heteroepitaxial Growth of Ge on Pit-patterned Si(100) Substrate and Parallelization of Calculations

Sergei A. Rudin[1], Kiril V. Pavsky[1,2], Artem L. Revun[1,2], Anatoly V. Dvurechenskii[1,3]

[1] Rzhanov Institute of Semiconductor Physics (ISP SB RAS)
[2] Siberian State University of Telecommunications and Information Science (SibSUTIS)
[3] Novosibirsk State University (NSU)

Abstract: Methods and algorithms of Monte Carlo simulation of heteroepitaxial growth of Ge on Si are considered. The computational complexity analysis of simulation program blocks is carried out. Parallelization of time-consuming cycles using directives of the open standard OpenMP is proposed. The Monte Carlo simulation of heteroepitaxial growth of Ge on pit-patterned Si substrate was carried out. The position of Ge nanoislands is determined by the competition between the nucleation process of three-dimensional islands due to the accumulation of elastic strain in the growing layer and the process of diffusion of Ge atoms into the pits serving as a drain.

Keywords: Monte Carlo simulation, heteroepitaxy, germanium, silicon, pre-patterned substrate, spatial ordering, OpenMP.

For citation: Rudin S. A., Pavsky K. V., Revun A. L., Dvurechenskii A. V. Monte Carlo simulation of heteroepitaxial growth of Ge on pit-patterned Si(100) substrate and parallelization of calculations (in Russian). *Vestnik SibGUTI*, 2024, vol. 18, no. 1, pp. 16-28. https://doi.org/10.55648/1998-6920-2024-18-1-16-28.

Content is available under the license Creative Commons Attribution 4.0 License

© Rudin S. A., Pavsky K. V., Revun A. L., Dvurechenskii A. V., 2024

The article was submitted: 07.07.2023;
accepted for publication 18.08.2023.

References

1. Shmidt O. G. and Eberl K. Self-assembled Ge/Si dots for faster field-effect transistors. *IEEE Trans. El. Dev*, 2001, vol. 48, iss. 6, p. 1175.
2. Stangl J., Holy V., and Bauer G. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures. *Rev. Mod. Phys.*, 2004, vol. 76, p. 725.
3. Tsybeskov L. and Lockwood D. J. Silicon-Germanium Nanostructures for Light Emitters and On-Chip Optical Interconnects. *Proc. IEEE*, 2009, vol. 76, iss. 7, p. 1284.
4. Eaglesham D. J. and Cerullo M. Dislocation-free Stranski-Krastanow growth of Ge on Si(100). *Phys. Rev. Lett.*, 1990. vol. 64, p. 1943.
5. Mo Y.-W., Savage D. E., Swartzentruber B. S., and Lagally M. G. Kinetic pathway in Stranski-Krastanov growth of Ge on Si(001). *Phys. Rev. Lett.*, 1990, vol. 65, p. 1020.
6. Zhong Z. and Bauer G. Site-controlled and size-homogeneous Ge islands on prepatterned Si (001) substrates. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, vol. 84, p. 1992.
7. Zhong Z., Schwinger W., Schaffler F., Bauer G., Vastola G., Monalenti F., and Migilo L. Delayed Plastic Relaxation on Patterned Si Substrates: Coherent SiGe Pyramids with Dominant {111} Facets. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, vol. 98, p. 176102.
8. Hackl F., Grydlik M., Brehm M., Groiss G., Schaffler F., Fromherz T., and Bauer G. Microphotoluminescence and perfect ordering of SiGe islands on pit-patterned Si(001) substrates. *Nanotechnology*, 2011, vol. 22, p. 165302.
9. Pezzoli F., Stoffel M., Merdzhanova T., Rastelli A., and Schmidt O. G. Alloying and Strain Relaxation in SiGe Islands Grown on Pit-Patterned Si(001) Substrates Probed by Nanotomography. *Nanoscale Res. Lett.*, 2009, vol. 4, p. 1073.

10. Vastola G., Grydlik M., Brehm M., Fromherz T., Bauer G., Boioli F., Miglio L., and Montalenti F. How pit facet inclination drives heteroepitaxial island positioning on patterned substrates. *Phys. Rev. B.*, 2011, vol. 84, p. 155415.
11. Yang B., Liu F., and Lagally M. Local Strain-Mediated Chemical Potential Control of Quantum Dot Self-Organization in Heteroepitaxy. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, vol. 92, p. 025502.
12. Ma Y., Huang S., Zeng C., Zhou T., Zhong Z., Zhou T., Fan Y., Yang X., Xia J. and Jiang Z. Towards controllable growth of self-assembled SiGe single and double quantum dot nanostructures. *Nanoscale.*, vol. 6, pp. 3941-3948.
13. Zhong Z., Schmidt O., and Bauer G. Increase of island density via formation of secondary ordered islands on pit-patterned Si (001) substrates. *Appl. Phys. Lett.*, 2004, vol. 87, p. 133111.
14. Grydlik M., Brehm M. and Schaffler F. Morphological evolution of Ge/Si(001) quantum dot rings formed at the rim of wet-etched pits. *Nanoscale Res. Lett.*, 2012, vol. 7, p. 601.
15. Rudin S. A., Zinovyev V. A. Nenashev A. V., Polyakov A. Yu., Smagina Zh. V., and Dvurechenskii A. V. Three-dimensional model of heteroepitaxial growth of germanium on silicon. *Optoelectronics Instr. and Data Proc.*, 2013, vol. 49, p. 461.
16. Novikov P. L., Nenashev A. V., Rudin S. A., Polyakov A. S., and Dvurechenskii A. V. Simulating the nucleation and growth of Ge quantum dots on Si using high-efficiency algorithms. *Nanotechnologies in Russia*, 2015, vol. 10, p. 192.
17. Smagina Zh. V., Zinovyev V. A., Rudin S. A., Novikov P. L., Rodyakina E. E., and Dvurechenskii A. V. Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography. *J. Appl. Phys.*, 2018, vol. 123, p. 165302.
18. Rudin S. A., Zinovyev V. A., Smagina Zh. V., Novikov P. L., Nenashev A. V., Pavsky K. V. Groups of Ge nanoislands grown outside pits on pit-patterned Si substrates. *J. of Crystal Growth*, 2022, vol. 593, p. 126763.
19. Smagina Zh. V., Zinovyev V. A., Rudin S. A., Novikov P. L., Rodyakina E. E., and Dvurechenskii A. V. Nucleation sites of Ge nanoislands grown on pit-patterned Si substrate prepared by electron-beam lithography. *J. Appl. Phys.*, 2018, vol. 123, p. 165302.
20. Keating P. N. Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure. *Phys. Rev.*, 1966, vol, 145, p. 637.
21. *Otkrytyi standart dlya rasparallelivaniya programm na yazykakh Si, Si++ i Fortran* [Application programming interface (API) that supports multi-platform shared-memory multiprocessing programming in C, C++, and Fortran], available at: `https://www.openmp.org/` (accessed 22.06.2023).
22. *Informatsionno-vychislitel'nyi tsentr Novosibirskogo gosudarstvennogo universiteta* [Information and Computing Center of NSU], available at: `http://nusc.ru` (accessed 21.06.2023).

Sergei A. Rudin
Junior scientist of Laboratory of Nonequilibrium Semiconductor Systems, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (ISP SB RAS), e-mail: `rudin@isp.nsc.ru`, ORCID ID: 0000-0002-9509-4008.

Kiril V. Pavsky
Dr. of Sci. (Engineering), Head of Computer Systems Laboratory, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (ISP SB RAS); Professor of the Department of computer science, Siberian State University of Telecommunications and Information Science (SibSUTIS), e-mail: `pkv@isp.nsc.ru`, ORCID ID: 0000-0002-2271-7358.

Artem L. Revun
Software engineer of Computer Systems Laboratory, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (ISP SB RAS); Senior teacher of the Department of computer science, Siberian State University of Telecommunications and Information Science (SibSUTIS), e-mail: `pm@artemrevun.ru`, ORCID ID: 0009-0006-5774-415X.

Anatoly V. Dvurechenskii
Professor, Doc. phys.-math. sci., Corresponding member of RAS, Head of Laboratory of Nonequilibrium Semiconductor Systems, Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences (ISP SB RAS); Professor of the Department of Semiconductor Physics, Novosibirsk State (NSU), e-mail: `dvurech@isp.nsc.ru`, ORCID ID: 0000-0001-5443-4769.