

Молекулярно-динамическое моделирование поверхности Si (100)-2x1

Игошкин А.М., Рогило Д.И.

Современные методики моделирования поверхности Si

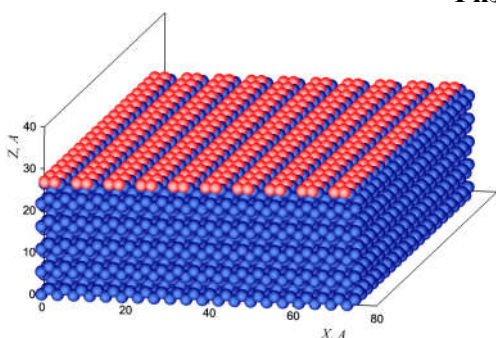
- Ab initio расчеты
- **Метод молекулярной динамики**
- Метод Монте-Карло
- Континуальные модели

Ключевое преимущество метода молекулярной динамики – возможность непосредственного исследования механизмов на поверхности

Основной недостаток – расчет энергий происходит с помощью эмпирических потенциалов, которые не всегда точны

Задача: Установить набор величин, которые могут использоваться в качестве критериев пригодности эмпирических потенциалов для корректного качественного и количественного описания процессов на подложке Si(100). Провести расчет этих величин для известных актуальных молекулярно динамических потенциалов Si.

Физико-математическая модель



- Периодические условия в направлениях X и Y
- Верхняя плоскость реконструирована
- Две нижних плоскости жестко закреплены
- Вся система находится в термостате Нозе-Хувера

Потенциалы взаимодействия

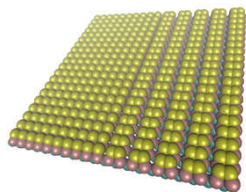
G.P. Purja Pun, and Y. Mishin // *Physical Review B*, 2017, **95**(22)

T. Kumagai et al. // *Computational Materials Science*, 2007, 39(2), 457-464

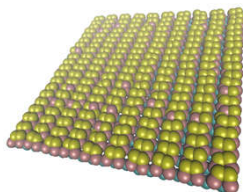
J. Tersoff // *Physical Review B*, 1988, **38**(14), 9902-9905.

Результаты

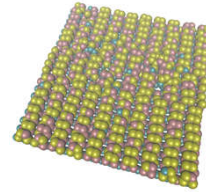
Исследования устойчивости структуры 2x1



Три верхние плоскости структуры в начальном состоянии. Система находится в минимуме энергии.



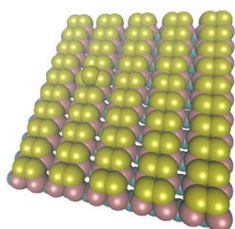
Три верхние плоскости структуры после разогрева до 1100 К. Вся поверхность реконструировалась.



Три верхние плоскости структуры после разогрева до 1150 К. Структура 2x1 распалась на фрагменты.

Данные расчеты проводились с использованием потенциала tersoff/mod (Т. Kumagai et al. // *Computational Materials Science*, 2007, 39(2), 457-464). Два других потенциала не обеспечивают в аналогичном численном эксперименте бездефектной реконструкции поверхности.

Диффузия адатомов Si по поверхности Si (100)-2x1



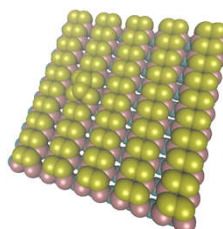
Активационные барьеры

$$\Delta E_i \approx 0,8 \text{ эВ}$$

$$\Delta E_f \approx 1,1 \text{ эВ}$$

Рассматриваются траектории движения одиночных адатомов или димеров на поверхности. Из этих траекторий рассчитываются параметры диффузии.

Диффузия димеров Si по поверхности Si (100)-2x1



Активационные барьеры

$$\Delta E_i \sim \Delta E_f \sim 2 \text{ эВ}$$

Согласно экспериментальным данным (Y. W. Mo et al. // *Phys. Rev. Lett.* 66, 1998 (1991)) и ab initio расчетам (G. Brocks and P. J. Kelly // *Phys. Rev. Lett.* 66, 1729 (1991)) барьеры для адатомов равны примерно $\Delta E_i \approx 0,6-0,7 \text{ эВ}$ и $\Delta E_f \approx 1 \text{ эВ}$

Выводы

Проведены молекулярно-динамические расчеты процессов на поверхности Si (100)-2x1. Было выявлено:

- Из трех рассмотренных потенциалов только tersoff/mod (Т. Kumagai et al. // *Computational Materials Science*, 2007, 39(2), 457-464) описывает структуру Si (100)-2x1, устойчивую внешним возмущениям в широком температурном диапазоне (до 1150К, по экспериментальным данным – примерно до 1350К)
- Активационные барьеры, полученные в результате исследования диффузии адатомов Si по поверхности, находятся в хорошем согласии с данными экспериментов и ab initio расчетов
- Спонтанное движение адатома по поверхности индуцирует активное перемешивание первых трех слоев подложки