

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ СТАДИЙ ПРОЦЕССА РОСТА КРЕМНИЕВЫХ НАНОУСОВ С ПОМОЩЬЮ АЛЮМИЕВЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ

Кожевникова Т.А.

Научный руководитель — к.ф.-м.н. Кузубов А.А.

Институт цветных металлов и материаловедения Сибирский федеральный университет

Наноструктуры кремния привлекают внимание исследователей из-за их потенциальной применимости в электронике, фотонике, биосенсорах. В частности, нанонити (наноусы) кремния обладают уникальными термическими, механическими и электрическими свойствами, что обеспечивает хорошие перспективы их использования в производстве наноэлектроники, гибкой электроники, термоэлектрических устройств, солнечных батарей, электродов аккумуляторов и биосенсоров.

Одним из методов получения кремниевых наноусов является их рост на кластерах металла. Эти кластеры напыляются на подложку кремния, а затем в систему подается Si или SiH₄ в виде газовой фазы. В результате наблюдается вертикальный рост нанонитей кремния. Причем они растут под металлическим кластером (он как бы поднимается вверх на ус) и диаметр наноуса сопоставим с диаметром кластера.

Существует проблема в понимании процессов, происходящих при росте наноусов с помощью данного метода. И изучение этих процессов с помощью квантово-химических расчетов должно помочь данной проблеме.

В данной работе были проведены квантово-химические расчеты процесса взаимодействия атомов и кластеров алюминия с поверхностью кремния (001).

Для расчетов была взята реконструированная поверхность Si (001) в виде пластины размерностью (443) и кластер алюминия, состоящий из 51 атома и полученный путем вырезания его из кристаллической структуры Al. Вычисления были проведены в рамках формализма функционала локальной плотности (DFT) с использованием пакета VASP.

Энергия связи на один атом металла рассчитывалась по формуле:

$$E_{св} = (E_{пол} - E_{Si} - n * E_{Me}) / n,$$

где $E_{пол}$ - полная энергия структуры кремния с металлом, E_{Si} - полная энергия чистой реконструированной поверхности кремния, E_{Me} - энергия одиночного атома металла, n - количество атомов металла в системе.

Энергия связи между кластером металла и подложкой кремния, а также между кластером металла и одиночным атомом кремния рассчитывалась по формуле:

$$E_{св} = (E_{пол} - E_{Si} - E_{Me}),$$

где $E_{пол}$ - полная энергия структуры кремния с металлом, E_{Si} - полная энергия соответственно чистой реконструированной поверхности или одиночного атома кремния, E_{Me} - энергия кластера металла.

Для начала на поверхность кремния помещался атом металла в различных наиболее выгодных положениях. Было посчитано четыре поверхностных состояния: у нижнего атома димера L, ассиметричное между двумя димерами в одном димерном ряду Pa, симметричное Ps, траншейное T4 и T3, и три «внутренних» положения: UPs, UN и UD (рисунок 1).

В ходе расчетов положение T4 трансформируется в T3, положение Ps в Pa, а положение UH в UD.

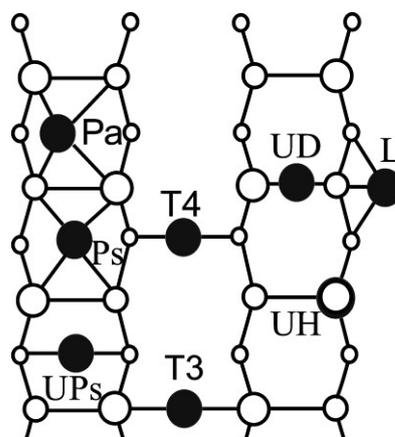


Рис. 1. Различное положение атомов металла на поверхности и под поверхностью Si (001)

В результате расчеты показали, что наиболее выгодные поверхностные положения Pa и T3. «Внутренние» положения менее выгодны, чем поверхностное Pa. Подповерхностное положение UD выгоднее, чем UH и UPs. Причем в случае с UD димер кремния, находящийся над этим положением, выравнивается.

Табл. 1. Значения энергии связи (eV) атома металла в различных положениях и поверхности кремния (001)

Положение металла	L	Pa	T3	UP	UH	UD
Энергия связи	-1.06	-2.81	-2.22	-0.80	-2.41	-2.49

Затем были оптимизирована поверхность кремния, полностью заполненная атомами алюминия в наиболее выгодных положениях: Pa, L, T3 и UD.

Табл. 2. Значения энергии связи (eV) атома металла и поверхности Si (001) при полном заполнении в различных положениях

Положение металла	L	Pa	T3	UD
Энергия связи	-1.29	-2.84	-2.70	-1.77

В ходе оптимизации полного заполнения в положении Pa, атомы сместились в положение Ps, так как данная структура более симметрична, что приводит к уменьшению ее энергии. Кроме того, в данном положении все димеры кремния выровнялись, а атомы алюминия выстроились в ряд, что подтверждается экспериментальными данными.

В положении T3 димеры кремния так же выравниваются, а атомы металла становятся в ряд, что также подтверждается экспериментальными данными.

При полном заполнении наиболее выгодные положения Ps и T3. Подповерхностное же положение UD по энергии намного выше, поэтому можно сделать вывод, что атомы алюминия будут адсорбироваться на поверхности кремния (001) и не будут занимать подповерхностные положения.

На поверхности, скорее всего, атомы будут выстраиваться двумя рядами в положениях Ps и T3.

Поэтому был произведен расчет поверхности, заполненных одновременно в двух наиболее выгодных положениях Ps и T3. Энергия связи для данной структуры на атом металла равна -2.65eV .

Затем была оптимизирована структура кластера алюминия из кристаллической структуры. После этого было проведено моделирование отжига данного кластера с помощью метода демпфированной динамики с последующей оптимизацией. Энергия в структуре в результате уменьшалась. Разница энергий составила порядка 6eV .

Структура алюминиевого кластера приведена на рисунке 2.

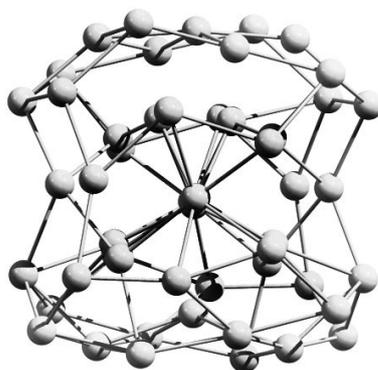


Рис. 2. Структура кластера Al151 после демпфированной динамики

Следующим этапом работы было помещение кластера Al151 на поверхность кремния (001). Положение кластера на поверхности выбиралось исходя из полученных результатов по заполнению атомами алюминия поверхности кремния, то есть атомы кластера располагались так, чтобы оказаться в положениях Ps и T3 (рисунок 3).

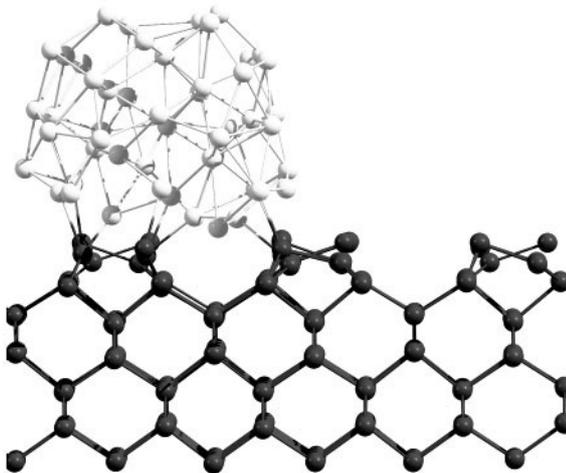


Рис. 3. Кластер Al151 на поверхности кремния (001)

Помещаемый кластер был после демпфированной динамики. Энергия связи между кластером и поверхностью для данной структуры составила -3.69eV .

Затем на поверхность кластера алюминия помещался одиночный атом кремния, как на поверхность, так и во внутренние положения. После этого так же моделировался отжиг данных структур, как методом демпфированной динамики, так и методом молекулярной динамики. В результате получилось, что для атома кремния нет существенной разницы в месте адсорбции на кластере (разница энергий не превышает $0,5\text{eV}$). Кроме того, на одной из структур было показано, что атом кремния способен переме-

щаться по поверхности кластера, что может обеспечить возможность миграции атом кремния по поверхности кластера к месту реакции.