

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФУЛЕРЕНОПОДОБНЫХ СТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ (001) КРЕМНИЯ

В.Н. Соловьев, Т.И. Максимова, С.А. Семерилов  
г. Кривой Рог, Криворожский государственный педагогический университет

В последние годы уделяется большое внимание поиску новых материалов с уникальными физическими свойствами. Примером таких структур являются малые кластеры Si расширенного объема, а так же кремниевые структуры, близкие по физическому смыслу к фулереноподобным. Целью данной работы было исследования стабильности указанных структур на поверхности кристаллического кремния.

## Построение модели

При построении поверхности кремния использовался стандартный метод молекулярной динамики с использованием эмпирических потенциалов [1]. В настоящее время метод молекулярной динамики (МД) остаётся одним из наиболее перспективных в моделировании поверхностей. Он дает возможность получить статические и динамические характеристики вещества на молекулярном и атомарном уровне.

В основе метода лежит предположение о том, что движение атомов вещества подчиняется законам движения Ньютона, то есть, может быть описано уравнениями движения классической динамики с заданным потенциалом взаимодействия  $u(r_{ij})$ .

Выбор потенциала взаимодействия является важным вопросом для нашей модели. Сильная угловая зависимость связи в ковалентных полупроводниках ведет к существенным смещениям атомов на поверхности и к возникновению сложных квантово-механических эффектов, включая взаимодействие атомов, разрыв и образование химических связей, искажение  $sp^3$  гибридизации, перетекание заряда. Для расчета сил межатомного взаимодействия нами был выбран потенциал Каксираса [2], выведенный из *ab initio* расчетов. Параметры потенциала и его функциональная форма достаточно корректно отражают квантово-

механические процессы на поверхности.

Расчетная ячейка включает 1000 атомов. В модели введены периодические граничные условия в двух направлениях. Первоначально атомы расчетной ячейки располагались в узлах идеальной кристаллической решетки кремния, их дальнейшие положения вычислялись из решения уравнений движения по алгоритму Верлета [1] с шагом интегрирования 0.001 пс.

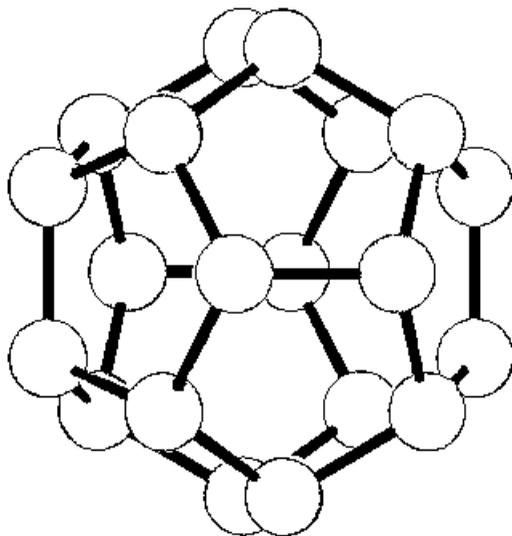


Рис. 1. Минимальный клэсрейт кремния, размещаемый на поверхности (001) Si – пентагональный додекаэдр, состоит из 20 атомов кремния.

Моделировались следующие типы поверхностей:

- кремниевые фазы увеличенного объема (клэсрейты). На идеальной поверхности (001) кремния размещались энергетически устойчивые минимальные клэсрейты Si<sub>20</sub> (рис.1.) [3]. Далее производилось их пересвязывание и находились стабильные структуры с минимальной энергией.

- фуллерены. На идеальной поверхности (001) кремния наносилились фуллерены с наименьшим числом атомов Si<sub>24</sub>. Далее производилась релаксация полученной поверхностной структуры, анализировалась ее стабильность и энергетический выигрыш.

- для сравнения фулереноподобной и обычной поверхности кремния моделировалась сильно разупорядоченная поверхность (001) Si [4], структурные характеристики которой находятся в хорошем согласии с последними результатами сканирующей туннельной микроскопией [5] и другими экспериментальными методами [6].

#### Анализ полученных результатов

Поверхность с напыленными кремниевыми фазами увеличенного объема (кларейты – состоят из 6-членных колец и колец с меньшим числом атомов) является достаточно устойчивой структурой, в то время как фулерены (присутствуют только 6-ти членные кольца) на поверхности гораздо менее устойчивы. На рис.2 приведены кривые радиального распределения атомов для поверхностной структуры с кларейтами, и поверхности с фулеренами, которые совпадают с полученными расчетными данными [7].

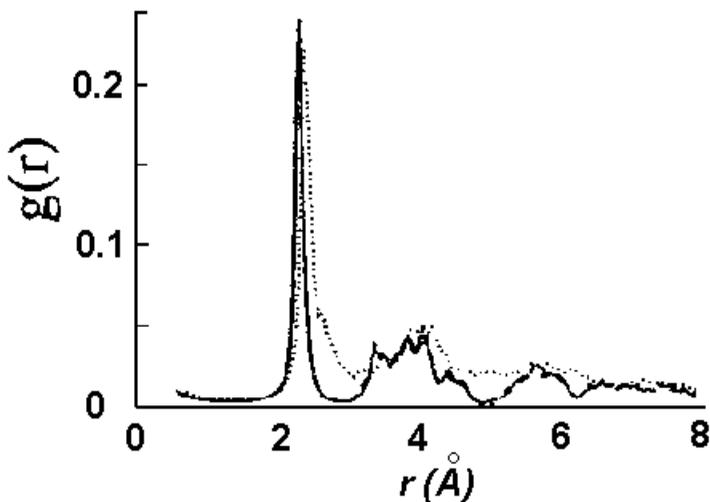


Рис.2. Кривые радиального распределения атомов для поверхностной структуры с кларейтами (сплошная линия), и поверхности с фулеренами (пунктирная линия).

При пересвязывании фулеренов возникают устойчивые кольца с числом атомов меньшим шести. Это позволяет сделать

вывод, что структуры типа клэсрейтов более характерны для кремния, в то время как фуллерены кремния не являются достаточно устойчивыми структурами.

Аналогичные результаты мы наблюдаем при изучении энергетических характеристик полученных поверхностей. Для клэсрейтов имеем энергетический выигрыш 0.08 эВ на каждый атом из приповерхностных слоев по сравнению с моделью разупорядоченной поверхности, и 0.05 эВ/атом по сравнению с моделью фуллеренов.

При напылении минимальных фуллереноподобных структур  $\text{Si}_{20}$  и  $\text{Si}_{24}$  на поверхность (001) Si имеем пять верхних приповерхностных слоев с некристаллической структурой, разупорядочение обычной поверхности (001) кремния распространяется на четыре верхних слоя. Длина связи четырех разупорядоченных приповерхностных слоев поверхности (001) составляет 2.32Å, при наличии фуллереноподобных структур она увеличивается до 2.41Å. Поверхность (001) Si характеризуется большим числом 3-членных и наличием других аномальных колец с числом атомов от 2 до 8. При напылении фуллеренов и клэсрейтов аномальные полигоны практически отсутствуют, что говорит об отсутствии напряженных подвижных связей, большое число которых ухудшает энергетические характеристики обычной (001) поверхности.

#### Литература:

1. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике: Пер. с англ. / Под. ред. С.А. Ахманова. – М.: Наука. Гл. ред. физ.- мат. лит., 1990. – 176 с.
2. M.Z. Bazant, E. Kaxiras, *Environment-dependent interatomic potential for bulk silicon*, Phys.Rev, В **56**(14), 8542-8552 (1997).
3. A. Demkov, O. Sankey, K. Schmidt, *Theoretical investigation of alkali-metal doping in Si clathrates*, Phys.Rev., В **50**(23), 17001-17008 (1994).
4. Максимова Т.И. Компьютерное моделирование радиационно-стимулированной стабилизации (001) Si поверхности.// Фотоэлектроника, № 8, 1998.
5. H.Neddermeyer *Scanning tunnelling microscopy of semiconductor surfaces*, Rep.Prog.Phys **59**(6), 701-769 (1996).

6. Бехштедт Ф., Эндерлайн Р. Поверхности и границы раздела полупроводников: Пер. с англ. – М.: Мир, 1990. – 488с.
7. J. Song, S. Illoa, D. Drabold, Exciton-induced lattice relaxation and the electronic and vibrational spectra of silicon clusters, *Phys.Rev.*, В **53**(12), 8042-8051 (1996).
8. K.Inoue, Y. Moricawa, *Order-disorder phase transition on the Si (001) surface: Critical role of dimer defects*, *Phys.Rev.*, В **49**(20), 14774-14777 (1994).