

ФОРМИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ, СОСТОЯЩИХ ИЗ ТРИМЕРОВ И ДИМЕРОВ

Ю. Шмермбекк

Белорусский государственный радиотехнический университет, ул. П. Бровки 6, 220013 Минск, Беларусь,

Email: julia.schmermbeck@mail.ru

В ходе эксперимента, выполненного на сканирующем туннельном микроскопе для обоснования полученных результатов был выбран метод расчета, в котором были учтены ковалентная, ионная, наведенная, электрон-дипольная и диполь-дипольная связь в молекулярных и кластерных структурах исследуемых кристаллов. Расчетные результаты полностью совпали с экспериментальными, что также позволило выяснить и обосновать, каким образом формируются кластеры кристалла кремния и кластеры осажденного на его поверхность индия.

Ключевые слова: кремний, поверхность кремния, кластеры, взаимодействие частиц в кластере, межкластерное взаимодействие.

FORMATION OF THE SURFACE OF CRYSTALS CONSISTING OF TRIMERS AND DIMERS

J. Shmermbeck

Belarussian state university of informatics and radioelectronics, av.P. Brovki 6, 220013 Minsk, Belarus,

Email: julia.schmermbeck@mail.ru

In the course of the experiment carried out on a scanning tunneling microscope, to substantiate the results obtained, a calculation method was chosen, which took into account the covalent, ionic, induced, electron-dipole and dipole-dipole bonds in the molecular and cluster structures of the crystals under study. The calculated results completely coincided with the experimental ones, which also made it possible to clarify and substantiate how clusters of a silicon crystal and clusters of indium deposited on its surface are formed.

Key words: silicon, silicon surface, clusters, interaction of particles in a cluster, inter-cluster interaction.

ВВЕДЕНИЕ

Поверхности кристаллических тел являются одной из интересных областей исследования в нанотехнологиях. Материалы как индий и кремний, например, используются в электронике. При исследовании поверхности кремния, а также кремния с напылением индия, используемые методы расчета не дали согласованный результат с экспериментом, что явилось причиной поиска нового метода расчета и обоснования теоретической модели. Целью данной работы является обоснование экспериментальных результатов, полученных на туннельном сканирующем микроскопе, а также уточнение выбранного метода расчета для исследуемых материалов.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В ходе выполнения эксперимента на сканирующем туннельном микроскопе ставилась задача объяснить полученные результаты и представить их теоретическую модель. Так как с помощью рентгеновского анализа можно получить только расположение атомов в кристалле, но не кластеров или молекул, а расчет с помощью приближения Терсоффа-Хамана [1] для исследуемой поверхности кремния не приводит к соответствию с экспериментом, был выбран метод расчета по Гайтлеру-Лондону [2, 3].

При выполнении эксперимента были получены изображения поверхности кремния и осажденной на нее поверхности индия. Изображения снимали при разных напряжениях, что позволило установить условия применимости сканирующего туннельного микроскопа для анализа эмиссионного портрета исследуемой поверхности, а также объяснить различия в полученных изображениях. Для этого разработана теория автоэлектронной эмиссии с одного эмиссионного центра, применимая для сканирующего туннельного микроскопа. Для решения поставленных задач использовался уточненный для исследуемого кристалла метод расчета Гайтлера-Лондона,

как было уже сказано выше. При этом следовало определить энергию связи при образовании димеров или двухатомных молекул и тримеров (трехатомных молекул) для кремния и индия, энергию связи частиц в кластерных образованиях, в частности для кремния и индия и определить энергию межкластерных связей. При бинарном взаимодействии учитывались следующие типы связей: ковалентная, ионная, наведенная, электрон-дипольная, диполь-дипольная как показано в работе [4]. На основании сделанных расчетов был проведен анализ, какими связями формируются кластеры исследуемых кристаллов и из каких частиц состоят эти кластеры. Оказалось, кластеры кристалла кремния формируются трехатомными молекулами, а кластеры индия – двухатомными [4, 5]. Полученные расчеты соответствуют полностью с представленными экспериментальными результатами.

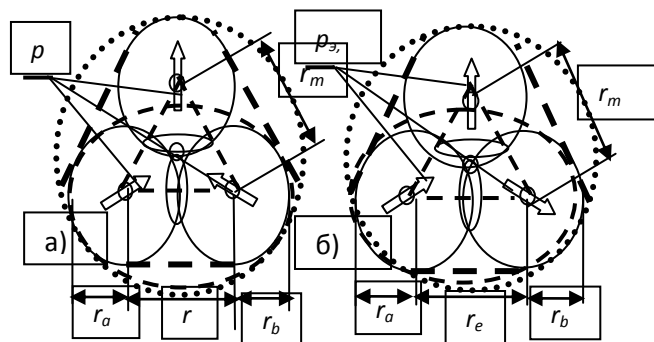
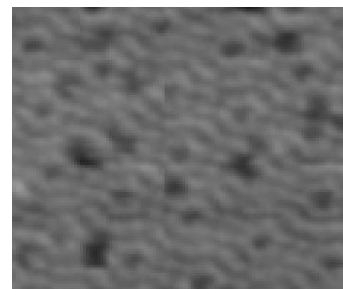
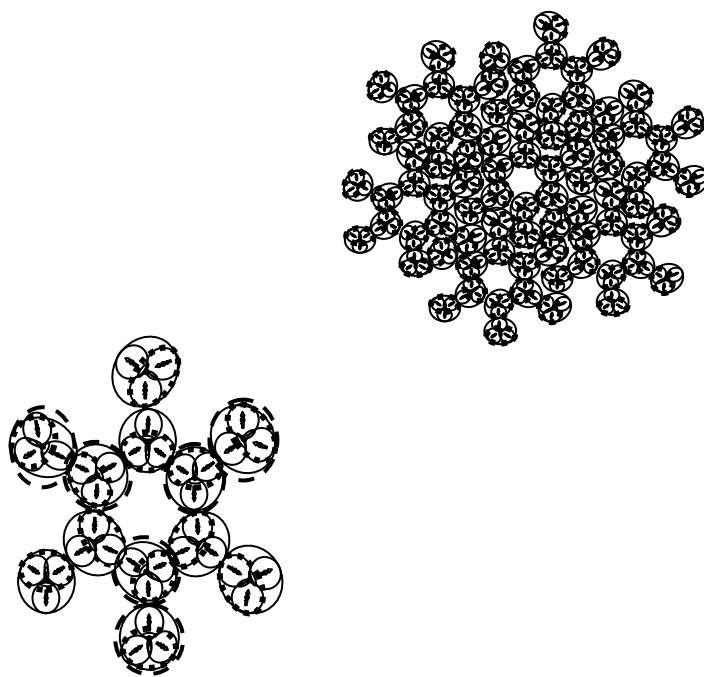


Рис. 1. Расчетный вид трехатомной молекулы:

***a)* нормальное расположение встроенных дипольных электрических моментов в молекуле; *б)* последовательное расположение встроенных дипольных электрических**

На рис.1 представлены расчетные результаты конфигурации сил взаимодействия атомов в молекулах кремния. В данном случае встроенные дипольные моменты атомов [6] внутри молекулы кремния имеют два наиболее энергетически выгодных расположения. Оба вида представленных молекул на рисунке *a* и *б* имеют разный результирующий вектор встроенного дипольного момента, а значит в кластере, при взаимодействии с молекулами других кластеров, в определенных локациях поверхности проявляют себя по-разному. Для этого необходимо рассматривать основной кластер кремния и его взаимодействия с соседними кластерами.



***в.* Изображение поверхности кремния, полученное на туннельном микроскопе**

Рис 2. Расчетные и экспериментальные изображения поверхности кремния

Кластеры кремния в кристаллическом состоянии взаимодействуют таким образом, что они сцепляются друг с другом, и в результате этого между центральной частью кластеров образуется прослойка из трехатомных молекул, как показано на рис. 2. Расчетные рисунки полностью совпадают с экспериментальными изображениями поверхности, полученными на туннельном сканирующем микроскопе. Данное расчетное приближение использовалось также для обоснования экспериментальных данных для осажденного индия на кристалл кремния. Ниже представлены рисунок кластера индия на поверхности кремния и экспериментальные данные:

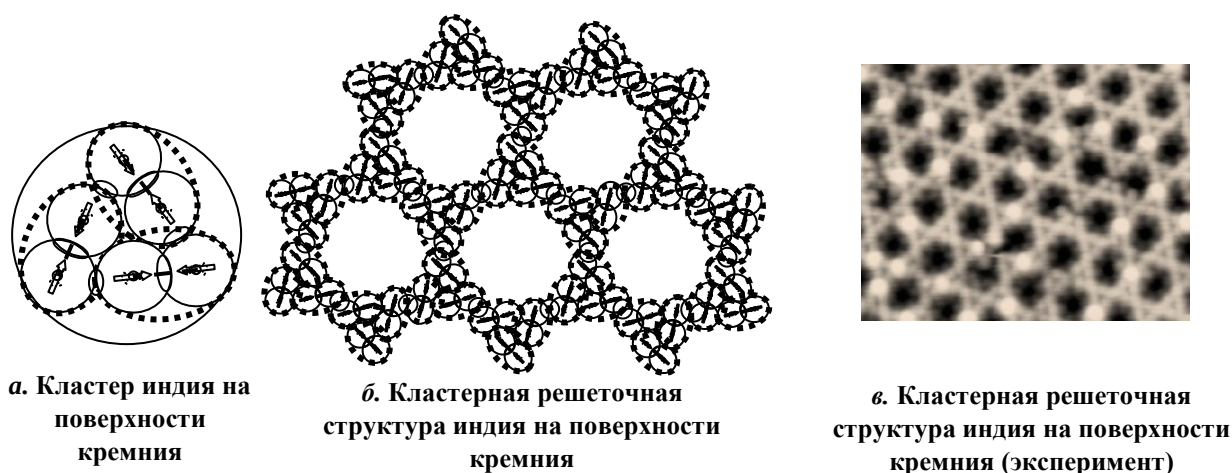


Рис. 3. Кластеры индия, полученные методом расчета и экспериментально на СТМ

Как видно из рисунка 3, расчетная модель кластеров индия на поверхности кремния соответствует полученному изображению на сканирующем туннельном микроскопе. С помощью данного метода расчета приведены также объяснения оседания кластеров индия в процессе напыления вначале на одной из половинок ромба кремния, а потом на другой. Расчетные данные также согласуются с тем, что две половинки ромба одной ячейки имеют разные результирующие дипольные моменты, что можно в подтверждении увидеть на полученных изображениях, представленных на рисунках 4 и 5.

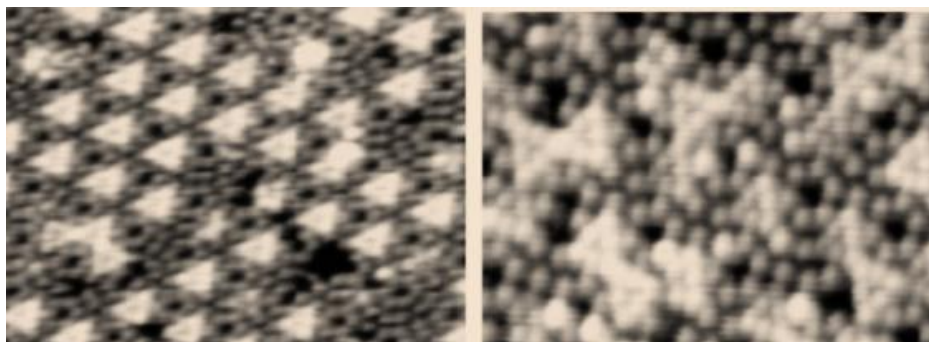


Рис. 4. Образование кластеров индия на поверхности Si (111) в процессе осаждения.

На рисунке 4 представлено, что кластеры индия осаждаются вначале на одну половинку такого ромба, а потом уже на другую. Также из представленного ниже рисунка 5 видно, что условные части ромба поверхности кремния отличаются по контрасту, если снимать изображение при отрицательном напряжении, что подтверждает аллотропию тримеров, входящих в кластеры поверхности кремния.

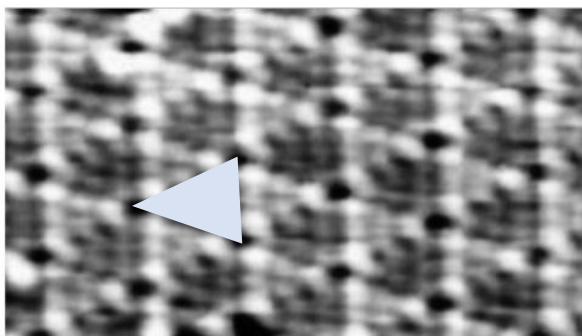


Рис. 5. Изображение поверхности кремния (СТМ – снимок при напряжении -2В).

Также предложенный расчет и основанная на нем модель структуры поверхностей исследуемых кристаллов помогла объяснить полученные экспериментальные результаты на вицинальной поверхности кремния Si (557).

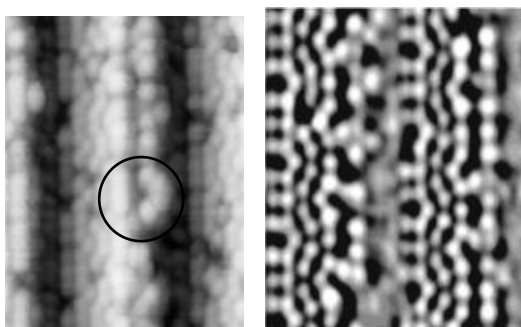


Рис.6 Вицинальная поверхность кремния (557)

а) изображение, полученное на СТМ б) изображение вицинальной поверхности кремния [7]

На рисунке 6 представлены изображения вицинальной поверхности кремния, полученные на СТМ и литературные данные. Из рисунка видно, что ступеньки обрываются на первом координационном слое кластерной поверхностной структуры кремния. Это также подтверждает полученный теоретический расчет и предположения о том, что кристаллическая структура кремния формируется кластерной структурой послойно, так как каждая ступенька вицинальной поверхности отстоит по высоте от предыдущей на одно межатомное расстояние, а значит может рассматриваться как подслой предыдущей террасы. Предположение о послойном формировании и структуре кристаллов высказали еще отец и сын В.Г Брэгг и В.Л. Брэгг, объясняя полученные результаты на лауэграмме исследуемых ими кристаллов тем, что любая трехмерная решетка состоит из бесконечного числа параллельных атомных плоскостей, расположенных на равных расстояниях друг от друга. Исходя из вышеизложенного можно сделать вывод, что точное расположение атомов в кристаллической структуре дает рентгеновский анализ, а сканирующий туннельный микроскоп дает возможность определить связи между этими атомами и увидеть

непосредственно уже кластерную структуру исследуемого кристалла, что полностью согласуется с выбранным методом расчета для исследуемых материалов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании проведенных теоретических и экспериментальных исследований установлено:

1. Поверхности кристаллов кремния и индия формируют кластеры.
2. В кристаллическом состоянии кластеры кремния формируются тримерами или трехатомными молекулами, образуя сложную разветвленную структуру, а кластеры индия образуют треугольники, состоящие из двухатомных молекул или димеров.
3. Молекулы, из которых состоят кластеры кремния, обладают аллотропией. Это объясняет заполнение разных половинок ячеек поверхности кремния при напылении ее индием с разницей во времени.
4. Рост кристалла кремния формируется путем образования кластерной структуры послойно.

ЛИТЕРАТУРА

1. C.J. Chen, Introduction to Scanning Tunneling Microscopy, Oxford University Press, New York, 1993.
2. Walter Heitler – Key participants in the development of Linus Pauling's. The Nature of the Chemical Bond.
3. Valence Bond Theory and the Chemical Bond Valerio Magnasco, in Elementary Methods of Molecular Quantum Mechanics, 2007, 3.
4. Гречихин Л.И., Латушкина С. Д., Комаровская В. М., Шмермбекк Ю. Кластерная структура кремния и конструкция его поверхности. //Упрочняющие технологии и покрытия. 2015. № 9. С. 9-16.
5. Гречихин Л.И., Латушкина С. Д., Комаровская В. М., Шмермбекк Ю. Образование плотноупакованной и кластерной решеточной структуры индия на поверхности кремния. //Упрочняющие технологии и покрытия. № 6, 2015. С. 3-12.
6. Гречихин Л. И. Физика наночастиц и нанотехнологий. Общие основы, механические, тепловые и эмиссионные свойства. – Мн.: УП «Технопринт». 2003. 399 с.
7. A. Kirakosian, R. Bennewitz, J.N.Crain, Th.Fauster, J.-L. Lin, D. Y. Petrovykh, and F.J. Himpsel, Atomically accurate Si grating with 5,73 nm period. Applied physics letters, volume 79, number 11