

луча (снимок *г*) частица сместилась на периферию падающего луча. На снимках (*д*) и (*е*) снова создан встречный световой луч, и наблюдаемая частица смещается ближе к центру лучей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены результаты экспериментальных исследований захвата и транспортировки серебряных наночастиц, находящихся в жидкости, электромагнитным полем созданным встречными световыми пучками гауссовой формы. Показано, что встречные пучки способны создавать силы достаточные для пленения наночастиц.

Результаты работы могут стать основой для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований по влиянию сил светового давления лазерного излучения гауссовой формы на металлические наночастицы в жидкостях.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Афанасьев, А. А. Транспортировка сферической прозрачной наночастицы радиационными силами в поле гауссова пучка лазерного излучения / А. А. Афанасьев, Л. С. Гайда, Д. В. Гузатов, Д. В. Новицкий, Е. В. Матук // Оптика и спектроскопия. – 2016. – Т. 120, № 1. – С. 153–157
2. Движение серебряных наночастиц в жидкости с различной вязкостью под действием сил светового давления / А. А. Афанасьев, Л. С. Гайда, Е. В. Матук, А. Ч. Свистун // Проблемы физики, математики и техники. – 2016. – № 4 (29). – С. 7–12.
3. Кургузенкова, И.И. Световое давление на сферическую наночастицу с концентрической оболочкой в поле плоской электромагнитной волны / И.И. Кургузенкова, Д.В. Гузатов, Л.С. Гайда // Проблемы физики, математики и техники. – 2013. – № 2. – С. 11–17.
4. Модуляция концентрации частиц в интерференционном поле лазерного излучения / А.А. Афанасьев [и др.] // ЖПС. – 2002. – Т. 69, № 5. – С. 675–678.
5. Четырехволновое смещение в жидкой суспензии диэлектрических прозрачных микросфер / А.А. Афанасьев [и др.] // ЖЭТФ. – 2005. – Т. 128, № 3. – С. 451–463.
6. Wulf, K.D. Aberration correction in holographic optical tweezers / K.D. Wulf // Opt. Express. – 2006. – Vol. 14, No. 9.
7. Lekner, J. Force on a scatterer in counter-propagating coherent beams / J. Lekner // Journal of Optics: Pure Appl. Optics – 2005. – № 7. – P. 238–248.

ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ НА СТАБИЛЬНОСТЬ НАНОШНУРОВ КРЕМНИЯ И ГЕРМАНИЯ

И. С. Самусевич¹, Д. А. Шохонов¹, И. В. Сафронов², Д. Б. Мигас¹

¹⁾ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
П. Бровки, 6, 200013 Минск, Беларусь,
e-mail: ivan.samusevich@gmail.com,

²⁾ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Проведено исследование стабильности наношнуров кремния и германия с различными типами морфологий и направлениями роста в диапазоне диаметров ~1,5–20 нм. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS. Результаты показывают, что с увеличением диаметра наношнуров более 20 нм их морфология практически не влияет на стабильность.

Ключевые слова: кремний; германий; наношнур; морфология; стабильность.

INFLUENCE OF SURFACE MORPHOLOGY ON THE STABILITY OF NANOWIRES OF GERMANIUM AND SILICON

I. S. Samusevich¹, D. A. Shohonov¹, I. V. Safronov², D. B. Migas¹

¹⁾ Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
P. Browki 6, 200013 Minsk, Belarus,

²⁾ Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus,
Corresponding author: I. S. Samusevich (ivan.samusevich@gmail.com)

Investigation of stability of silicon and germanium nanowires with various morphologies and growth directions in the range of diameters of ~1.5–20 nm has been carried out. The simulation was performed by using the molecular dynamics method realized in the LAMMPS package. The results show that nanowire morphology does not affect stability if diameters are larger than 20 nm.

Key words: silicon; germanium; nanowire; morphology; stability.

ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые нанопровода представляют большой интерес из-за особых электрических и оптических свойств [1]. Нанопровода являются перспективными элементами электронных и оптоэлектронных приборов нового поколения, также немаловажной деталью является их совместимость с существующей кремниевой технологией. Наблюдаемые диаметры синтезированных нанопроводов находятся в интервале от 5 до 100 нм. Несмотря на большое количество исследований в данной области, многие свойства полупроводниковых нанопроводов изучены не в полной мере. В отличие от [2,3], где использовался метод из первых принципов для выявления предпочтительных морфологий кремниевых и германиевых нанопроводов с диаметрами не более 5 нм, в данной работе с помощью метода молекулярной динамики проведено исследование зависимости полной энергии от диаметра кремниевых и германиевых нанопроводов с различными морфологиями и ориентациями, но с диаметрами до 20 нм, что позволит в полной мере выявить взаимосвязь их морфологии и стабильности.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рассматривались экспериментально наблюдаемые $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ ориентации для кремниевых и германиевых нанопроводов [1]. Структуры нанопроводов были получены из объемного кристалла используя правило Вульфа для определения граней на поверхности. На $\{100\}$, $\{112\}$ и $\{113\}$ гранях проводилась димеризация атомов с двумя оборванными связями, что типично для Si(100) или Ge(100) поверхностей. Пентагоноподобные структуры с одним димером формировались на поверхности $\{112\}$ и $\{113\}$ граней. Грани $\{011\}$ и $\{111\}$ характеризуются поверхностными атомами только с одной оборванной связью и не требуют дополнительной реконструкции. На краях, разделяющие соседние грани, не оказалось атомов с двумя оборванными связями [2,3]. С увеличением диаметра нанопроводов сохранялись особенности морфологии, которые показаны на рисунке 1.

Для получения равновесных структур использован метод молекулярной динамики, реализованный в программном пакете LAMMPS. Проводилась минимизация полной энергии с учетом оптимизации геометрии структуры. Использовались трех-

мерные периодические граничные условия с вакуумным зазором $\sim 20 \text{ \AA}$ в плоскости xy (поперечное сечение нанопровура). После минимизации энергии системы любая компонента силы, действующая на любой атом, менее $1 \times 10^{-6} \text{ эВ/\AA}$. Межатомное взаимодействие для системы описывалось с помощью потенциала Терсоффа.

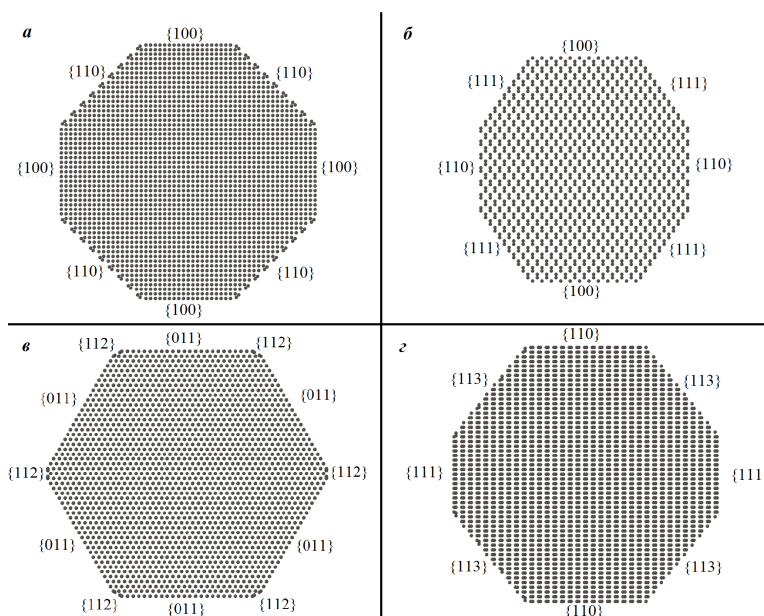


Рисунок 1. – Нанопровуры Si и Ge с различными морфологиями и ориентациями роста. Все грани обозначены: $a - \langle 001 \rangle$; $b - \langle 011 \rangle$; $v - \langle 111 \rangle$; $z - \langle 112 \rangle$

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рисунке 2 показано как полная энергия, приведённая на атом, зависит от числа атомов в элементарной ячейке (также пропорционально диаметру) для кремниевых нанопровур с различными ориентациями.

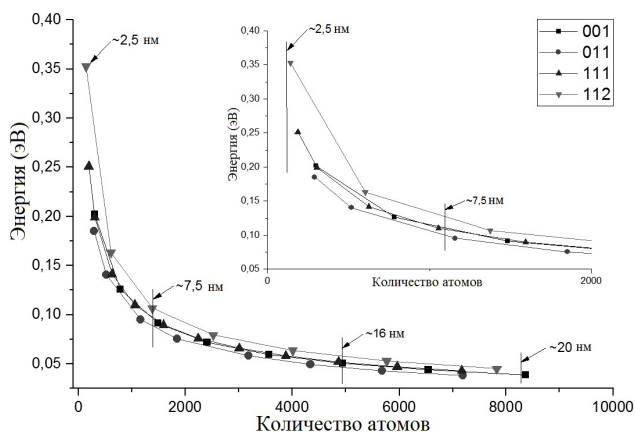


Рисунок 2. – Зависимость разности полных энергий на атом от количества атомов для нанопровур кремния

Так как ноль на шкале энергий соответствует энергии атома кремния в объеме, с увеличением диаметра нанотрубок их стабильность увеличивается. Это объясняется уменьшением доли поверхностных атомов по сравнению с объемными. Из рисунка 2 очевидно, что в рассмотренном диапазоне диаметров (вплоть до 20 нм) нанотрубки с ориентациями $\langle 011 \rangle$ наиболее стабильны, что хорошо соответствует результатам, полученным методами из первых принципов [2]. Вслед за ними следуют $\langle 111 \rangle$ - и $\langle 001 \rangle$ - ориентированные кремниевые нанотрубки, которые очень близки по значениям энергии. В то же время кремниевые нанотрубки с осями $\langle 112 \rangle$ оказались наименее стабильными. Следует отметить, что полученные результаты полностью соответствуют экспериментальным данным, согласно которым выявлено почти абсолютное доминирование направлений роста $\langle 011 \rangle$ для кремниевых нанотрубок с диаметрами от 3 до 10 нм [1]. Аналогичный результат наблюдается для нанотрубок германия (рисунк 3).

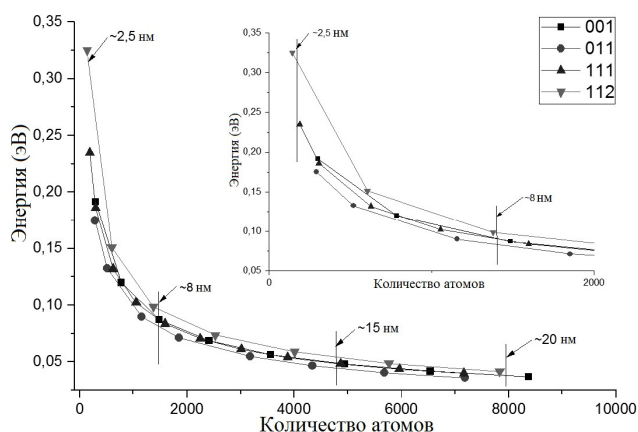


Рисунок 3. – Зависимость разности полных энергий на атом от количества атомов для нанотрубок германия

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные результаты указывают на уменьшение разницы между полными энергиями для кремниевых и германиевых нанотрубок с различными ориентациями при увеличении числа атомов в структуре (или диаметра). Для нанотрубок с диаметрами около 3 нм эта разница составляет 0,15 эВ, а для 20 нм – не более 0,02 эВ. Эта тенденция не линейна и наибольшие изменения по энергии наблюдаются для нанотрубок кремния и германия с малыми диаметрами, что обусловлено уменьшением вкладов в полную энергию от поверхностных атомов по отношению к вкладам, принадлежащим атомам внутри кремниевых и германиевых нанотрубок. Очевидно, что для кремниевых и германиевых нанотрубок морфология не оказывает существенного влияния на ориентацию при диаметрах 20 нм и более. Экспериментально наблюдаемые различные ориентации данных нанотрубок с большими диаметрами скорее всего обусловлены различием в межфазовой энергии между нанотрубкой и подложкой и/или нанотрубкой и каталитической частицей, нежели влиянием морфологии на полную энергию нанотрубок.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Lu, W. Semiconductor nanowires / W. Lu, C.M. Lieber // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2006. – Vol. 39, № 21 – P. R387–R406.
2. Migas, D.B. The role of morphology in stability of Si nanowires / D. B. Migas and V. E. Borisenko // J. Appl. Phys. – 2009. – Vol. 105, № 10 – P.104316.
3. Revising morphology of <111>-oriented silicon and germanium nanowires / D. B Migas, V. E. Borisenko, Rusli and C. Soci // Nano Convergence – 2015. – Vol. 2. – P. 16.

ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ НА СТАБИЛЬНОСТЬ НАНОШНУРОВ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ

И. И. Холяво¹, А. Л. Хомец¹, И. В. Сафронов², Д. Б. Мигас¹

¹⁾ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. Петруся Бровки 6, 220089, Минск, Беларусь,

²⁾ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,
e-mail: kholyavo.ivan@gmail.com

В данной работе исследовалось влияние морфологии на стабильность GaAs-наношнуров со структурами цинковой обманки (B3) и вюрцита (B4) в диапазоне размеров ~1–45 нм с помощью метода молекулярной статистики, реализованного в пакете LAMMPS. Для оценки структурной стабильности наношнуров находилась величина, равная разности полных энергий кристалла и наношнуров, приведенных на формульную единицу ($FU = \text{Ga} + \text{As}$). Результаты исследований показывают, что наношнуры со структурой вюрцита с морфологией типа I-B4 (большая грань {011} и малая грань {112}), являются наиболее стабильными из всех предложенных.

Ключевые слова: наношнур; арсенид галлия; цинковая обманка; вюрцит; стабильность.

EFFECTS OF MORPHOLOGY ON STABILITY OF GALLIUM ARSENIDE

I. I. Khaliava¹, A. L. Khomets¹, I. V. Safronov², D. B. Migas¹

¹⁾ Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
P. Browki 6, 220013 Minsk, Belarus,

²⁾ Belarusian State University, Nezavisimosti av. 4, 220030 Minsk, Belarus
Corresponding author: I. I. Khaliava (kholyavo.ivan@gmail.com)

In this paper we present our results as obtained by molecular dynamics simulations (the code LAMMPS) on effects of morphology on stability of GaAs nanowires. GaAs nanowires with the experimentally observed <111> orientations, both in the zinc-blende (denoted as B3) and wurtzite (denoted as B4) structures and having diameters of 1–45 nm have been considered. It is found that wurtzite GaAs nanowires with large {011} and small {112} facets on the surface are the most stable.

Key words: nanowires; gallium arsenide; zinc blende; wurzit; stability.