

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

1. Использование установок “Плазменный Фокус” в испытаниях керамических материалов, перспективных для элементов внутренних стенок камер токамаков / В. А. Грибков, Е. В. Дёмина, В. Н. Пименов // Перспективные материалы.– 2011.– № S13.– С.263–272.
2. Повреждаемость оксида алюминия мощными импульсными потоками ионов, плазмы и лазерного излучения / С.А. Масляев, Е.В. Морозов, П.А. Ромахин // Физика и химия обработки материалов.– 2015.– №3.– С.5–17.
3. Модификация материалов компрессионными плазменными потоками / В.В. Углов [и др.].- Минск: БГУ, 2013.– 248 с.
4. Damages on pure tungsten irradiated by compression plasma flows / M.Qu, F.Kong, S.Yan // Nuclear Inst. and Meth. Phys. Res. B.– 2019.– Vol. 444.– P. 33–37.
5. Формирование рельефа поверхности металлической мишени при воздействии компрессионных плазменных потоков / В. М. Асташинский, А. Я. Лейви, В. В. Углов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.– 2014.– № 6.– С. 12–17.
6. Модификация структуры и фазового состава поверхностного слоя анодного оксида алюминия под действием компрессионных плазменных потоков / Н.Н. Черенда, В.В. Углов, С.В. Гусакова // Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 13-й Междунар. конф. (Минск, Беларусь, 30 сент. – 3 окт. 2019 г.) / БГУ; редкол.: В. В. Углов (отв. ред.) [и др.]. – Минск: БГУ, 2019. – С. 501–504.
7. Исследование полиморфных превращений в оксиде алюминия / В.В. Сторож, Г.Я. Якимов, И.В. Горелик // Журнал технической физики.– 1996.– Т.66, № 9.– С. 86–97.

АЛЛОТРОПИЯ МОЛЕКУЛ, ВХОДЯЩИХ В КЛАСТЕР ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ

Ю. Шмермбекк

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
ул. Петруся Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь,
e-mail: julia.schmerbeck@mail.ru*

С помощью разработанной модели формирования молекулярных и кластерных структур с учетом ковалентной, ионной, наведенной, электрон-дипольной и диполь-дипольной связи удалось расчетным методом получить результаты, которые согласуются с экспериментальными. В конденсированном состоянии кластеры кремния формируются трехатомными молекулами (или тримерами). Теоретически и экспериментально обоснована конструкция поверхности кристаллического кремния и осажденного на него индия. Благодаря такой модели стало возможным объяснение динамики осаждения индия на кремний и отличные друг от друга свойства отдельных структурных ячеек на поверхности кристаллического кремния.

Ключевые слова: кремний; поверхность кремния; кластеры; взаимодействие частиц в кластере; межкластерное взаимодействие; индий; кластеры индия; аллотропия молекул.

ALLOTROPY OF MOLECULES INCLUDED IN THE SILICON SURFACE CLUSTER

J. Shmermbekk

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, st. Petrusya Brovki 6,
220013 Minsk, Belarus,*

Corresponding author: J. Shmermbekk (julia.schmerbeck@mail.ru)

Using the developed model of the formation of molecular and cluster structures, taking into account the covalent, ionic, induced, electron-dipole and dipole-dipole bonds, it was possible to obtain by the calculation method, which agree with the experimental ones. In the condensed state, silicon clusters are formed by triatomic molecules (or trimmers). Theoretically and experimentally based on the design of crystalline silicon and indium deposited on it. Thanks to such models, it became possible to explain the dynamics of the deposition of indium on silicon and the different properties of individual surfaces on the surface of crystalline silicon.

Key words: silicon; silicon surface; clusters; interaction of particles in a cluster; inter-cluster interaction; indium; indium clusters; molecular allotropy.

ВВЕДЕНИЕ

Поверхности кристаллических тел являются одной из интересных областей исследования. Такие материалы как индий и кремний используются для разных электронных устройств. 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

При выполнении экспериментальной работы 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].

В ходе 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 ди-

меров 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.

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 *а* 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.

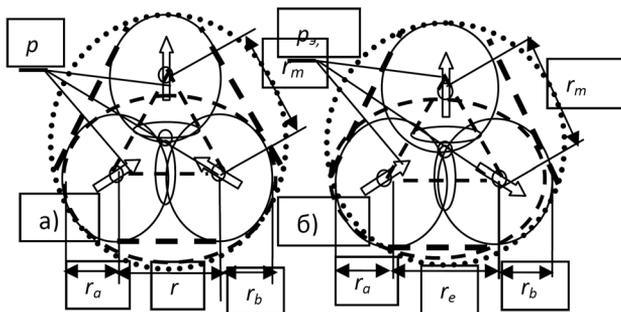


Рисунок 1. – Общий вид трехатомной молекулы [5]: *а* – нормальное расположение встроенных дипольных электрических моментов в молекуле; *б* – последовательное расположение встроенных дипольных электрических моментов в двухатомной молекуле

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.

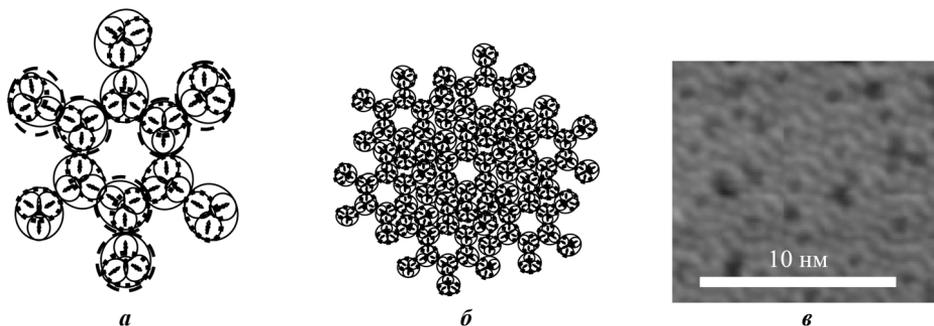
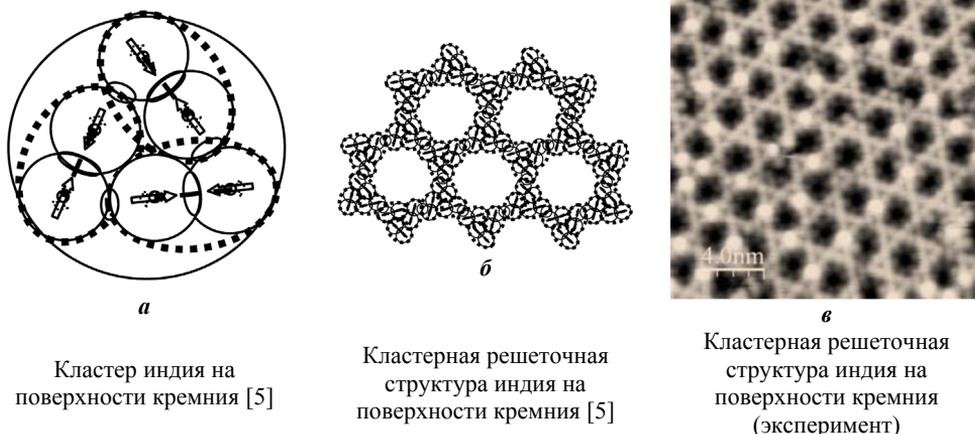


Рисунок 2. – Расчетные и экспериментальные изображения поверхности кремния [4]

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. На рис. 3 представлено изображение кластера индия на поверхности кремния и экспериментальные данные.



а
Кластер индия на поверхности кремния [5]

б
Кластерная решеточная структура индия на поверхности кремния [5]

в
Кластерная решеточная структура индия на поверхности кремния (эксперимент)

Рисунок 3. – Кластеры индия, полученные методом расчета и экспериментально на туннельном микроскопе

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 подтверждение увидеть на полученных изображениях, представленных на рисунках 4 и 5.

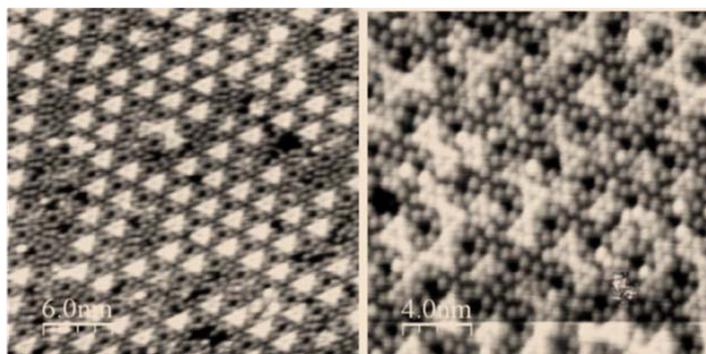


Рисунок 4. – Образование кластеров индия на поверхности Si (111) в процессе напыления

На рисунке 4 показано, 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.

О разных свойствах двух ячеек кремния свидетельствует также нижеприведенное изображение двух кластеров индия, осажденных на две разные структурные ячейки поверхности кремния. Из рисунка 6 видно, что кластеры индия на поверхности кремния имеют разный контраст, что также подтверждает разные по величине и направлению силы взаимодействия между разными ячейками поверхности кремния с осажденными на них кластерами индия.

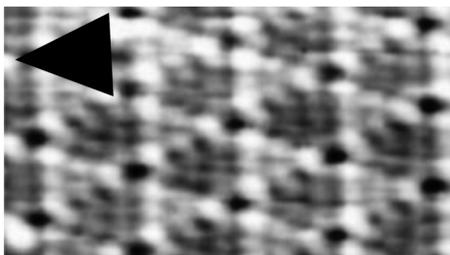


Рисунок 5. – Поверхность кремния, полученная на туннельном микроскопе при напряжении –2В

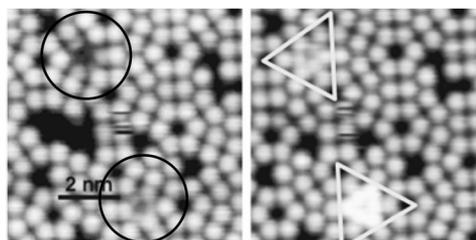


Рисунок 6. – Кластеры индия на поверхности индия, полученные на туннельном сканирующем микроскопе при напряжениях +0,3 В и 0,5 В соответственно

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании проведенных теоретических и экспериментальных исследований установлено:

- поверхности исследуемых кристаллов кремния и индия формируют кластеры;
- в конденсированном состоянии кластеры кремния формируются трехатомными молекулами (тримерами), образуя сложную разветвленную структуру, а кластеры индия треугольники, состоящие из двухатомных молекул (димеров);
- молекулы кластеров кремния обладают аллотропией, благодаря чему условные половинки одной ячейки поверхности кристалла кремния при напылении заполняются кластерами индия с разницей во времени;
- аллотропия молекул, входящих в кластер кремния, соответственно также проявляется во взаимодействии их с осажденными кластерами индия на поверхность кремния.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ ССЫЛКИ

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.