

Исследования в области компьютерного моделирования свойств перспективных материалов и технологических процессов микро- и наноэлектроники

В.Р. Стемпицкий, М.С. Зеленина, О.А. Козлова
Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники
e-mail: vstem@bsuir.by

Фундаментальные и прикладные исследования последних лет продемонстрировали широкие возможности применения наноструктурированных материалов в различных областях науки и техники. Эффективным инструментом в дальнейшем прогрессе понимания и объяснения физических явлений, происходящих в наноразмерных объектах, принадлежит использованию *ab initio*, первопринципных методов моделирования.

Особое внимание с настоящее время привлекает оксид цинка (ZnO). В частности, экспериментальные исследования показали, что наноструктурированный ZnO, при определенных условиях приобретает ферромагнитные свойства обладая при этом высокой температурой фазового перехода второго рода. За последние десять лет было проведено огромное число экспериментальных исследований с целью выявления ферромагнетизма у ZnO и уже не раз удавалось получить соединения на основе оксида цинка с температурой Кюри выше комнатной. Это открывает возможности использования оксида цинка в качестве материала структурных элементов запоминающих устройств, функционирующих на спиновых эффектах. Однако, результаты, полученные исследователями, не сводятся к единому выводу, а именно, если одна группа коллективов экспериментаторов получила данные, свидетельствующие о наличии ферромагнетизма в ZnO, то другая группа не смогла его выявить.

Еще одной группой перспективных наноструктурированных материалов являются ультратонкие квази-двухмерные структуры слоистых дихалькогенидов переходных металлов (ХПМ). Материалы данного типа технологически просты в производстве, эффективны в использовании и обладают более широким диапазоном электро-химических свойств. В частности, структуры, состоящие из одного или нескольких слоев ХПМ, полученные посредством отслаивания объемных материалов или CVD-методом, являются прямозонными полупроводниками, значение запрещенной зоны и тип носителя заряда которых, колеблется в зависимости от кристаллографической конфигурации, химического состава и размерности соединений. Таким образом, возможность модификации электронной структуры ХПМ делает их привлекательными для различных приложений микро- и наноэлектроники.

В дополнение к составу и кристаллографической конфигурации атомов в соединениях ХПМ, размерность играет решающую роль в определении их

основных электронных свойств. Наиболее ярким примером проявления аналогичного поведения является графен, уникальные свойства которого отсутствуют в объемном графите. Высокие исследования электронных свойств графена и разработанных методологий подготовки и получения сверхтонких слоев привело к освоению других двумерных материалов. В частности, монослои ХПМ структур, подобные структуре графита, получили значительное внимание, так как некоторые из них являются полупроводниками с значительной шириной запрещенной зоны и широко распространены в природе.

В слоистых структурах ХПМ IV группы, каждый слой имеет толщину $6 \sim 7$ Å, который состоит из гексагонально упакованного слоя атомов металла между двумя слоями атомов халькогена. Связи М – Х внутри слоя преимущественно ковалентные, слои соединены слабыми ван-дер-ваальсовыми силами, таким образом, возможно легко расщепить кристалл вдоль поверхности слоя. Соединения ХПМ IV группы являются узкозонными полупроводниками или полуметаллами, характеризуются низким значением удельного электрического сопротивления ($\sim 10^{-6}$ Ом·см) и периодическим перераспределением в пространстве электронного, ионного и суммарного зарядов (волна зарядовой плотности). Длина связи М – М в структурах ХПМ IV группы изменяется в диапазоне от 3,15 Å до 4,03 Å, в зависимости от размера ионов металла и халькогена. Эти величины на 15-25% больше, чем длины связей, в соединениях переходных металлов твердых веществ, что указывает на ограниченное энергетическое и пространственное перекрытие орбиталей в соединениях ХПМ. Кристаллографическая конфигурация металлов М в структуре ХПМ может быть как тригонально призматической, так и октаэдрической.

Для анализа магнитного состояния наноструктуры традиционно используются современные методы зонных расчетов, основанных на теории функционала электронной плотности (density-functional theory – DFT). Получаемые результаты касаются распределения энергетических зон, плотностей состояний и характера их спинового расщепления, величин магнитных моментов атомов-компонентов в дефектных системах. Оценка энергий различных магнитных состояний системы, используется для обоснования типа спинового упорядочения. Еще одним важным расчетным параметром, который привлекаемыми при изучении типа коллективного магнетизма, являются параметры обменных взаимодействий.

Моделирование проводилось с использованием программного комплекса VASP [1-2], который реализует первопринципные методы расчетов фундаментальных электронных, оптических и магнитных свойств материалов. Данная программа для квантово-механических расчетов применяет метод псевдопотенциала и разложения волновых функций в базисе плоских волн.

В рамках квантово-механического подхода исследованы электронные и магнитные свойства зернистых пленок ZnO и квазидвухмерных структур TiS₂ и TiSe₂.

Установлено, что зернистая структура ZnO имеет стабильную

ферромагнитную фазу. Магнитный момент равен $2,51 \mu_B$ (магнетон Бора). Получено распределение эффективной спиновой магнитной плотности в структуре. Показано, что распределение магнитной плотности в дефектной структуре ZnO носит анизотропный характер: значение магнитной плотности достигает максимального значения в области межзеренной границы и равно нулю в областях отдаленных от нее. Эта особенность позволяет сделать предположение о наличии зависимости ферромагнетизма ZnO от размера и разориентации зерен в его структуре. Такое предположение позволяет объяснить различия в результатах измерений ферромагнетизма в образцах ZnO и дает возможность использования данной структуры в приборах сенсорики.

Обнаружено, что объемный TiS_2 является полуметаллом, а его квазидвухмерный аналог TiS_2 является полупроводником с шириной запрещенной зоны $1,1$ эВ. Электронные свойства $TiSe_2$ также изменяются при уменьшении размерности структуры. Квазидвухмерная структура $TiSe_2$ является полупроводником с шириной запрещенной зоны $0,7$ эВ. Магнитные свойства в исследованных структурах TiS_2 и $TiSe_2$ не обнаружены. Анализ результатов моделирования свидетельствуют многообразии физико-химических свойств указанных объемных и квазидвухмерных структур на основе ХПМ, что в свою очередь предоставляет множество возможностей для использования электронных и магнитных свойств указанных соединений для широкого круга приложений микро- и нанoeлектроники, в частности для устройств хранения энергии, каталитически активных элементов в оптоэлектронике, и в структурных компонентах микроэлектронных приборов.

Список использованных источников

1. Kresse, G. (1996). Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Comput. Mat. Sci.* 6: 15-19.
2. Kresse, G., Marsman, M., & Furthmüller, J. (2003). *VASP the guide: tutorial*. Vienna: University of Vienna.