

Структура низкоиндексных поверхностей оксидов алюминия и титана

Зайцев А.Л.

Белорусский национальный технический университет

Оксиды алюминия и титана широко используются в приборостроении в качестве активных конструкционных элементов микро- и наносистемных устройств. Управление их электрофизическими характеристиками на нано- и атомном уровне невозможно без знания структурной организации поверхностей, которые ограничивают объем тонких монокристаллических пленок. К сожалению, в настоящее время систематические исследования структур низкоиндексных поверхностей оксидов алюминия и титана отсутствуют.

В данной работе предпринята попытка теоретически установить особенности атомной упаковки идеальных низкоиндексных поверхностей оксида алюминия и титана.

Для проведения исследований использовалась теория функционала плотности (ТФП), которая является наиболее совершенной теорией описания многоэлектронных систем кристаллических структур. Формализм ТФП и теории псевдопотенциалов реализован в вычислительном коде ABINIT, позволяющий моделировать структуру атомно-молекулярных систем и оценивать их характеристики.

Методом функционала плотности изучена атомная структура поверхностей (0001), (1000), (1100), (1101) α - Al_2O_3 и (100), (110) и (111) трех кристаллических модификаций оксида титана (рутил, анатаз, брукит) и осуществлена визуализация их изображений.

Проведенный анализ атомной структуры низкоиндексных поверхностей металлооксидов на основе алюминия и титана позволил выявить особенности строения низкоиндексных поверхностей, проявляющиеся в возможности формирования на них димерных, ямочных, и зигзагообразных цепочечных атомных структур, и оценить их устойчивость по отношению к реконструкции.

Для проведения последующего квантово-механического моделирования осуществлен выбор низкоиндексных поверхностей оксидов титана и алюминия, которые в меньшей степени подвержены перестройке поверхностной структуры. К ним относятся поверхность (001) титана (модификация рутил) и поверхность (0001) корунда. Результаты квантовых расчетов показывают, что реконструкция поверхности и электронно-энергетические эффекты существенно зависят от характера адсорбции (физическая, молекулярная, диссоциативная).