

Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 3

ТВЕРЬ 2011

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор, заслуженный деятель науки Российской Федерации, проректор по научной работе Тверского государственного технического университета

В.А. Тихомиров

Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики пьезо- и сегнетоэлектриков Тверского государственного университета

Н.Н. Большакова

Редакционная коллегия:

Самсонов Владимир Михайлович – заведующий кафедрой теоретической физики ТвГУ, профессор, д.ф.-м.н. (ответственный редактор);

Созаев Виктор Адыгеевич – заведующий кафедрой физики факультета электронной техники Северо-Кавказского горно-металлургического института, профессор, д.ф.-м.н.;

Гафнер Юрий Яковлевич – заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики Хакасского государственного университета, профессор, д.ф.-м.н.;

Сдобняков Николай Юрьевич – доцент, к.ф.-м.н. (зам. ответственного редактора, ответственный секретарь);

Базулев Анатолий Николаевич – доцент, к.ф.-м.н.;

Комаров Павел Вячеславович – доцент, к.ф.-м.н.;

Скопич Виктор Леонидович – доцент, к.ф.-м.н.;

Соколов Денис Николаевич – технический редактор.

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2011. – Вып. 3. – 284 с.

ISBN 978-5-7609-0560-4

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей вузов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре теоретической физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-0560-4

© Коллектив авторов, 2011

© Тверской государственной
университет, 2011

УДК 621.391.1:004

**ПРИМЕНЕНИЕ МАШИНЫ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ
SOFTSAM ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ
НАНОКРИСТАЛЛОВ КРЕМНИЯ В СЛОЕ SiO_x**

И.В. Матюшкин, С.В. Коробов

Национальный исследовательский университет «МИЭТ»

124498, Москва, Зеленоград, проезд 4806, 5

ateist85@mail.ru

Аннотация: Разработана математическая модель формирования нанокристаллов кремния в матрице SiO_x . Модель реализована средствами машины клеточных автоматов SoftSAM. Результаты моделирования при принятой параметризации удовлетворительно согласуются с опытными данными.

Ключевые слова: *клеточные автоматы, самоорганизация, кремний, нанокристаллы.*

При переходе микроэлектроники к проектным нормам менее 10нм ключевое значение приобретает замена электрических межсоединений оптическими [1]. Однако такая замена межсоединений связана с отсутствием светоизлучающих элементов, технология изготовления которых была бы совместима с кремневыми технологиями. Одним из перспективных направлений создания светоизлучающих элементов является разработка МОП светодиодов, в которых в качестве окисла используется композиционный материал Si/SiO_2 , представляющий собой аморфную матрицу SiO_2 с внедренной в нее нанокристаллами Si [2].

Формирование нанокристаллов (НК) в широкозонных диэлектрических матрицах является эффективным решением повышения люминесцентных свойств кремния, такой подход использует квантово-размерный эффект для получения люминесцентных температур сравнимых с комнатными [3,4]. Наиболее распространенные методы формирования стабильных светоизлучающих НК Si , окруженных матрицей SiO_2 , можно отнести: окисление пористого кремния [5]; отжиг толстых слоев SiO_x ($x < 2$), полученных с помощью методов осаждения (в вакууме) [6] или ионной имплантацией [7,8]. В данной статье мы моделируем стадию отжига при получения НК кремния. В ходе процесса моделирования мы рассматривали слой нестехиометрического оксида ($x < 2$), который разделяется в модели на малые микрообъемы, обладающих определенным отношением атомов $Si:O$. В процессе отжига, который проводится при температурах от 900 до 1100 °С в течение 30-40 минут, за счет облегчения диффузионных процессов происходит сепарация фаз.

Реальные модели, описывающие неоднородные динамические системы, в частности, модели кристаллизации, представленные в виде дифференциальных уравнений, достаточно сложны и не учитывают

атомарные особенности среды. Выходом из сложившейся ситуации может служить применение других методов моделирования, прежде всего клеточно-автоматных (КА) [9].

Клеточный автомат – дискретная динамическая система, представляющая собой совокупность одинаковых клеток, одинаковым образом соединенных между собой. Все клетки образуют решетку клеточного автомата. Решетки могут быть различных типов, отличаясь как по размерности, так и по форме клеток. Каждая клетка является конечным автоматом, состояния которого определяются состоянием соседних и, возможно, ее собственным состоянием, а в частном случае локальными правилами [10]. На функцию переходов КА не накладывается никаких ограничений (они могут быть нелинейными, разрывными, вероятностными, что позволяет моделировать такие процессы, как фазовые переходы, химические превращения и т.п.) [11]. КА уже нашли широкое применение как инструмент для исследования процессов самоорганизации кремния [12], процессов диффузии и перемешивания веществ [13] (например, автомат Ооно-Кохмото и т.д.

Наша модель предполагает кванты связанными с массой атомов и частотой колебаний связи $Si-O$: $L=0,5$ нм – физический размер клетки,

$\tau=1$ пс – постоянная времени, $r_x = \frac{\tau}{L} \sqrt{\frac{3kT}{m_{Si}}}$, $r_y = \frac{\tau}{L} \sqrt{\frac{3kT}{m_O}}$, $r_z = \tau \cdot \Omega_{Si-O}$ –

коэффициенты интенсивности обмена.

Физический размер клетки Состояние клетки описывается тремя вещественными величинами, отвечающими содержанию атомов кремния (x), кислорода (y) и пустого пространства (z) в её объеме, а также логической переменной $\delta = \{0,1,2\}$. Мы приписываем каждой клетке значение «энергии», зависящее от ее состояния. Это значение состоит из трех частей: а) внутренней, с двумя минимумами для чистого кремния ($y=0$) и чистого диоксида кремния ($2x=y$); б) энергией деформации механического толка; в) поверхностной энергии. Перенос вещества между ячейками обуславливается сравнением «энергии» в соответствии с больцмановской экспонентой:

$$\bar{z} = V - (xv_{Si} + yv_O), \quad E = U(x, y) + G(z - \bar{z})^2 + E_{surf} \theta \left(\frac{1}{2} - \delta \right)$$

$$\min U(x, y) = \{U_1, U_2 < U_1\}, \quad Arg(U_1) = \{(x, y = 0)\}, \quad Arg(U_2) = \{(x, y = 2x)\}$$

В процессе моделирования нашего КА использовалась программа SoftSAM (разработка кафедры ПКИМС МИЭТ), универсальное средство исследования и проектирования клеточно-автоматных моделей [14] и имеющая в своем составе средства визуализации [15]. С помощью программы (рис.1) мы можем независимо разрабатывать, используя

синтаксис языка C++, правила переходов, вводить дополнительные состояния клеточного автомата, задавать алгоритм поиска соседей и т.д.

Пользователь либо сам описывает правила перехода, состояния клеточного автомата, правила определения соседний, либо выбирает из доступных заранее описанных КА. Пользователь должен инициализировать все ячейки, либо сгенерировать случайным образом (задается в программе), задать размерность поля моделирование, после этого нажать на кнопку «Build automate», при нажатии на данную клавишу будут сгенерированы файлы C++ из которых соберется динамическая библиотека с интерфейсными функциями взаимодействия непосредственно КА с ядром программы SoftCAM. По завершению процесса сборки пользователь может вызвать визуализатор клеточных автоматов. Полученный данные в визуализаторе можно сохранить либо как видео показывающий весь процесс «жизни» КА, либо сохранить в виде рисунка.

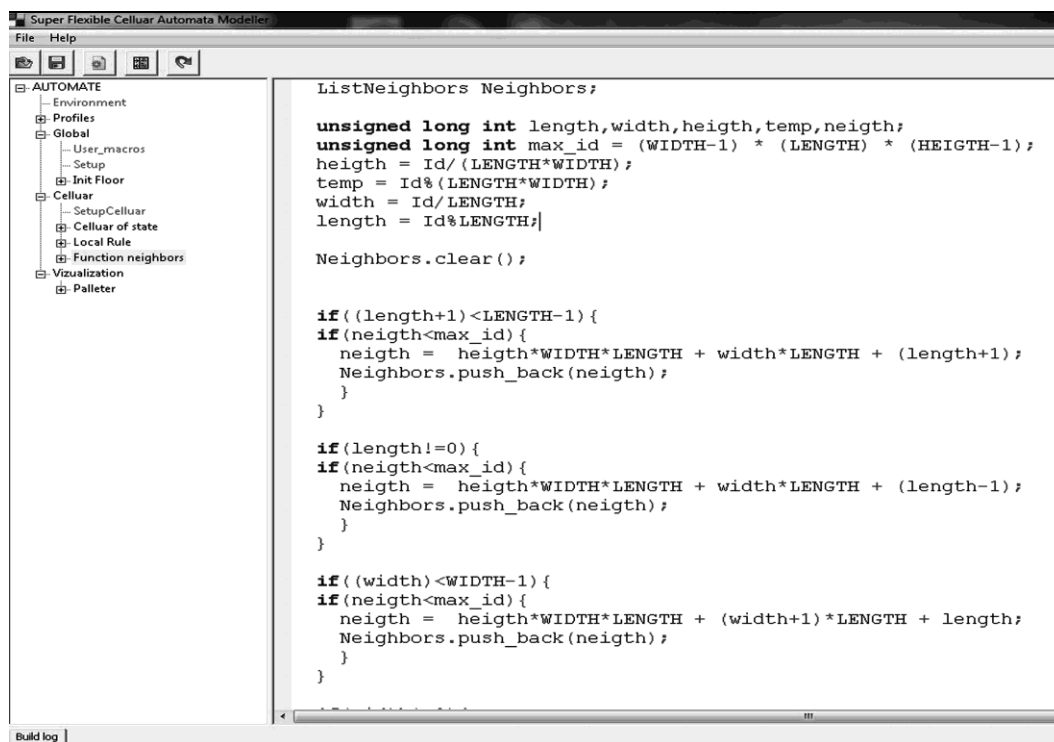


Рис. 1 Интерфейс программы SoftCAM

Результаты визуализации формирования НК кремния представлены на графическом виде (рис. 2), цвет воксела линейно зависит от процентного содержания кислорода, чем больше темного, тем выше концентрация кремния в данной клетке. Размер куба составляет 100^3 клеток, каждая из которых имеет линейный размер 3 нм.

В ходе моделирования были получены данные, которые, представлены в Таблице 1, которые с учетом погрешностей подтверждаются экспериментальными результатами других авторов [16].

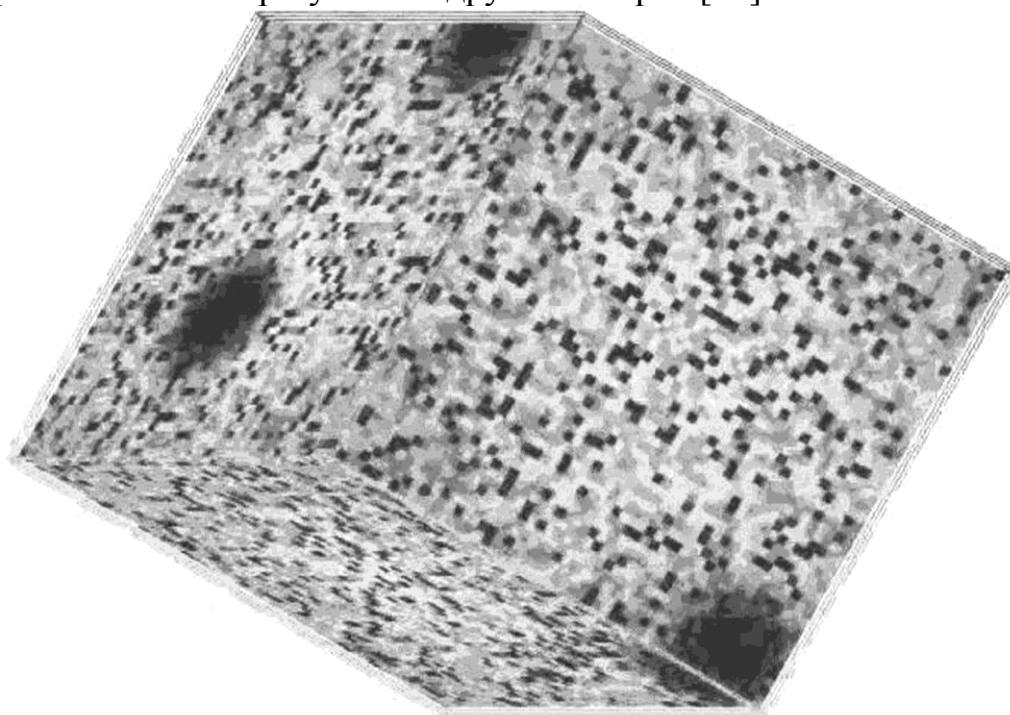


Рис. 2 Самоорганизация НК кремния с течением времени

Таблица 1. Зависимости радиуса НК от времени моделирования ($x = 1,1$, $T = 1150^\circ\text{C}$)

Время отжига, мин	Радиус НК кремния, нм (усредненное значение)	Радиус НК кремния, нм [19]
5	0,66	0,69
10	1,05	1,1
15	1,46	1,4
20	1,73	1,6
25	1,88	1,7
30	1,97	2,0
35	2,16	2,3
40	2,31	2,4
45	2,45	2,6
50	2,56	2,6
55	2,65	2,7
60	2,75	2,8

Библиографический список:

1. **Горшков, О.Н.** Наноразмерные частицы кремния и германия в оксидных диэлектриках. Формирование, свойства, применение / О.Н. Горшков, Д.И. Тетельбаум, А.Н. Михайлов. – Нижний Новгород: Издательство НГУ им. Лобачевского, 2006. – 81 с.

2. **Семиногов, В.Н.** Исследование структурно-фазовых трансформации и фотолюминесцентных, оптических, электрических, электролюминесцентных свойств композитов на основе нанокластеров Si (нк-Si) в матрице SiO₂, перколяционный подход (часть I) / В.Н. Семиногов, В.И. Соколов, В.Н. Глебов и др. // http://www.laser.ru/30/SiO2_matrix_structure_and_phase_transformation.pdf.
3. **Bettotti, P.** Silicon nanostructures for photonics / M. Cazzanelli, L. Dal Negro et al // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – V.14. – P. 8253-8281.
4. **Fauchet, P.M.** Light emission from Si quantum dot / P. M. Fauchet // Materials Today. – 2005. – V. 8. – № 1. – P. 26-33.
5. **Cullis, A.G.** The structural and luminescence properties of porous silicon / A.G. Cullis, L.T.Canham, P.D.J. Calcott // Applied Physics Letters. – 1997. – V. 82. № 3. – P. 909-965.
6. Schuppler, S. Size, shape, and composition of luminescent species in oxidized Si nanocrystals and H passivated porous Si / S. Schuppler, S. L. Friedman, M. A. Marcus, et al // Physical Review B. – 1995. – V. 52. – № 7. – P. 4910-4925.
7. **Garrido, B.** Optical and electrical properties of Si-nanocrystals ion beam synthesized in SiO₂ / B. Garrido, M. Lopez, A. Perez-Rodriguez et al // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. – 2004. – V. 216. – P. 213-221.
8. **Тетельбаум, Д.И.** Свойства нанокристаллов кремния, сформированных и легированных методом ионной имплантации в различных оксидных матрицах / Д.И. Тетельбаум, А.Н. Михайлов и др. // Нанотехника. – 2006. – № 3. – С. 36-52.
9. **Мамзин, Е.А.** Высокпроизводительные клеточные автоматы с реконфигурируемым шаблоном и их применение для моделирования неоднородных динамических систем: автореферат дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.18 / Мамзин Евгений Анатольевич. – Тольятти, 2011. – 20 с.
10. **Наумов, Л.** Клеточные автоматы. Реализация и эксперименты / Л. Наумов, А. Шалыто // <http://is.ifmo.ru/download/klet.pdf>.
11. **Бандман, О.Л.** Метод построения клеточно-автоматных моделей процессов формирования устойчивых структур / О.Л. Бандман // Прикладная дискретная математика. – 2010. – №4. – С. 91-99.
12. **Зотов, А.В.** Магические кластеры и другие атомные конструкции самоорганизация упорядоченных наноструктур на поверхности кремния / А.В. Зотов, А.А. Саратин // Научно-популярный журнал «Природа». – 2006. – № 4.
http://vivovoco.rsl.ru/VV/JOURNAL/NATURE/04_06/MAGIC.HTM
13. **Евсеев, А.А.** Клеточно-автоматное моделирование диффузионных процессов на триангуляционных сетках / А.А. Евсеев, О.И. Нечаева // Прикладная дискретная математика. – 2009. – №4. – С. 72-83.
14. **Матюшкин, И.В.** Применение языка UML при проектировании машин клеточных автоматов / И.В. Матюшкин, А.В. Хамухин // Известия высших учебных заведений. Электроника. – 2010. – № 6. – С. 39-48.
15. **Матюшкин, И.В.** Визуализация данных клеточно-автоматных моделей на примере задачи роста нанокристаллов Si в матрице SiO_x / И.В. Матюшкин, С.В. Коробов // Известия высших учебных заведений. Электроника. – 2011. – № 6. – С. 39-48.
16. **Fernandez, B. G.** Influence of average size and interface passivation on the spectral emission of Si nanocrystals embedded in SiO₂ / B. G. Fernandez, M. Lopez, C. Garcia, A. Perez-Rodriguez et al // Journal of Applied Physics. – 2002. – V. 91. – №2. – P. 798-807.