

Тема работы

Наноструктурирование функциональных поверхностей материалов с помощью газоструйных ионно-кластерных пучков для полупроводниковой продукции

Состав коллектива

Николаев Иван Владимирович, к.ф.-м.н., с.н.с. ОПФ НГУ, руководитель коллектива
Коробейщиков Николай Геннадьевич, к.ф.-м.н., в.н.с. ОПФ ФФ НГУ
Стишенко Павел Викторович, к.ф.-м.н., с.н.с. ОПФ НГУ

Финансовая поддержка.

Грант РФФИ № 23-79-10061 “Наноструктурирование функциональных поверхностей материалов с помощью газоструйных ионно-кластерных пучков для полупроводниковой продукции” на период 07.2023 – 06.2026 под руководством Николаева Ивана Владимировича.

Научное содержание работы

Постановка задачи

Наноструктурирование поверхностей с помощью газоструйных ионно-кластерных пучков является уникальным способом конструирования морфологии поверхности с особыми свойствами, обеспечивая потенциально высокую эффективность формирования самоорганизующихся наноструктур при минимальном повреждении обрабатываемого материала. Данный проект направлен на решение проблемы улучшения функциональных характеристик материалов для полупроводниковой продукции путем формирования упорядоченных самоорганизующихся наноструктур на их поверхности с максимальной эффективностью и минимальной инвазивностью. Для решения данной научной проблемы необходимо выполнить ряд взаимосвязанных задач. Во-первых, необходимо опытным путем определить оптимальные условия малоинвазивной ионно-кластерной обработки для наиболее эффективного формирования наноструктур с требуемыми параметрами и минимальным повреждением обрабатываемого материала, варьируя основные параметры кластерных пучков (кинетическую энергию, размеры кластеров) и условия обработки (угол падения на мишень, дозу облучения и др.). Во-вторых, необходимо обеспечить диагностику всех основных характеристик морфологии поверхности обрабатываемых материалов (топография поверхности, химический состав и структура подповерхностного слоя и др.) в наноразмерном масштабе. В-третьих, необходимо использовать современные методы численного моделирования, в нашем случае, метод молекулярной динамики (МД), который позволяет исследовать динамику процессов кластеров с высоким пространственно-временным разрешением (с характерным временем десятки пикосекунд) в атомно-молекулярных масштабах.

Современное состояние проблемы (на момент начала работы)

На сегодняшний день формирование наноструктур на функциональных поверхностях различных материалов востребовано в солнечной энергетике, электронной технике, телекоммуникации, плазмонике, оптоэлектронике, создании высокочувствительных датчиков и других технологических приложений. Благодаря различным видам наноструктур (волнообразным, конусным, нанопилларам и др.), можно получать материалы с измененными или приобретенными свойствами, такими как высокая электрическая и/или термическая проводимость, оптическая активность, супергидрофобность и т.д. Наноструктурирование поверхности является апробированным способом улучшения функциональных свойств

различных материалов без изменений их химического состава. К настоящему времени формирование наноструктур с помощью кластерных ионов не описано в теоретических моделях. Данное направление имеет ограниченное количество экспериментальных работ.

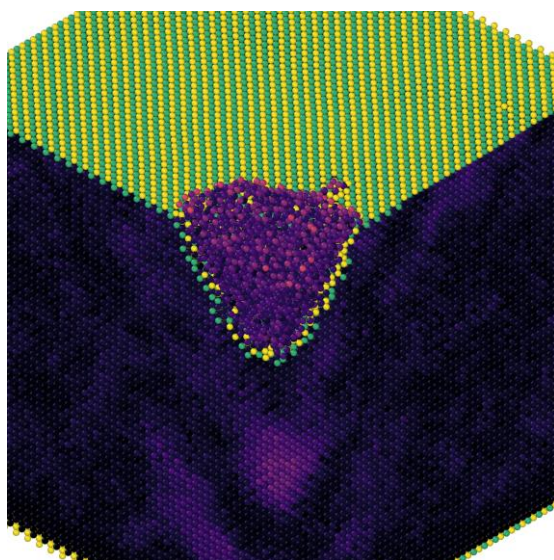
Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

При моделировании ударов ионных кластеров использовались алгоритмы классической молекулярной динамики, реализованные в программе LAMMPS. Для описания межатомных взаимодействий использовались различные параметризации трёхчастичного потенциала типа Tersoff. Для описания межатомных взаимодействий на коротких дистанциях использовался потенциал ZBL (Ziegler-Biersack-Littmark). Данная модель взаимодействий является оптимальным для данной задачи компромиссом между точностью и производительностью. Размер кластера был около 1000 атомов, размер мишени — около 900 000 атомов. Размер мишени выбирался таким образом, чтобы устранить влияние конечного размера, граничных эффектов и взаимодействий с периодическими образами. Интегрирование по времени в большинстве симуляций выполнялось в два этапа. Первый этап — моделирование с шагом в 0,1 фемтосекунды. Второй этап — моделирование с шагом в 1 фемтосекунду. На обоих этапах было выполнено 50 000 шагов. Таким образом общее время моделированного процесса удара составило 55 пикосекунд. Моделирование выполнялось при разных углах удара относительно поверхности и осей симметрии кристалла мишени, а также при разных точках удара для оценки среднего и дисперсии результатов.

Полученные результаты

В ходе моделирования получены формы кратеров и аморфизированной области образующихся на поверхности кристаллического кремния и германия результате ударов кластерами аргона при различных углах падения. Получены распределения количества распыленного вещества мишени и распространения энергии удара по различным степеням свободы, а именно: на нагрев мишени, образование кратера, аморфизацию поверхностного слоя, распыление кластера и мишени.

Иллюстрации, визуализация результатов



Сечение мишени германия в области кратера. Цвет мишени отражает распределение скорости атомов. Цвет аморфизированной области отражает распределение потенциальной энергии атомов.

Дальнейшая работа

В дальнейшем планируется моделирование ударов по бинарным полупроводниковым мишеням. В силу более сложной модели взаимодействий бинарных систем ожидается, что вычислительная стоимость таких расчётов будет выше. Будет проведена серия вычислительных экспериментов с использованием различных потенциалов для установления приемлемого компромисса между точностью и производительностью модели.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Благодаря использованию кластера стало возможным моделирование ударов ионных кластеров с релевантными размерами и энергиями столкновения. Доступных вычислительных мощностей оказалось достаточно для устранения граничных эффектов от конечного размера мишени при релевантных параметрах удара, а также для симуляции достаточно длительного времени после удара, чтобы получить релаксированное состояние мишени.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы

Нет.