

СОЗДАНИЕ СВЕРХРЕШЕТКИ ИЗ АТОМОВ КРЕМНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ ПОЛИМЕРА

И.А. Какорин, студент

Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI: 10.24412/2500-1000-2023-6-4-108-110

Аннотация. В данной статье рассматриваются электронные, оптические, механические и термические свойства сверхрешеток из кремния, с помощью квантово-химических расчетов предложено три способа построения кремниевой сверхрешетки на поверхности полимерной матрицы. Построены электронно-энергетические спектры и определена ширина запрещенной зоны.

Ключевые слова: кремний, регулярная адсорбция, полимерная матрица, сверхрешетка.

В области науки и нанотехнологий исследователи постоянно стремятся раздвинуть границы проектирования и изготовления материалов. Одной из увлекательных областей исследований является разработка кремниевых сверхрешеток, представляющих собой инженерные структуры, состоящие из чередующихся слоев кремния и других материалов. Слои обычно имеют толщину всего несколько нанометров, а их точное расположение и состав можно подобрать с большой точностью. Управляя толщиной слоя, выбором материала и ориентацией кристалла, исследователи могут создавать уникальные электронные, оптические и структурные свойства полученной сверхрешетки. Эти наноструктуры обладают уникальными свойствами и обладают огромным потенциалом для широкого спектра приложений, от электроники и фотоники до хранения энергии и квантовых вычислений.

Одно из наиболее значительных преимуществ кремниевых сверхрешеток заключается в их перестраиваемых электронных свойствах. Тщательно выбирая толщину и состав каждого слоя, исследователи могут создавать запрещенную зону и энергетические уровни, которые отличаются от таковых у объемного кремния. Эта возможность проектировать структуру электронной полосы открывает возможности для новых функциональных возможностей устройств, таких как высокопроизводительные транзисторы, светоизлучающие диоды и фотодетекторы. Кремниевые

сверхрешетки также предлагают потенциал для применения в квантовых вычислениях, где решающее значение имеет точное управление уровнями энергии и поведением электронов.

Кремний, традиционно известный своими плохими оптическими свойствами в диапазоне видимого света, может быть преобразован в эффективный оптоэлектронный материал за счет внедрения сверхрешеток. Благодаря включению слоев различных материалов с дополнительными оптическими свойствами, таких как оксид кремния или нитрид кремния, полученная сверхрешетка демонстрирует улучшенные характеристики поглощения, излучения и пропускания света. Это делает кремниевые сверхрешетки многообещающими кандидатами для разработки передовых фотонных устройств, включая лазеры, волноводы и солнечные элементы.

Кремниевые сверхрешетки также обладают улучшенными механическими и термическими свойствами по сравнению с объемным кремнием. Введение альтернативных материалов в структуру сверхрешетки может изменить ее механическое поведение, обеспечивая повышенную прочность, гибкость и устойчивость к растрескиванию. Более того, межфазные эффекты между слоями могут эффективно рассеивать фононы, что приводит к снижению теплопроводности. Это свойство можно использовать для термоэлектрических применений, где требуется эффективное преобразование тепла в электричество.

Уникальные свойства кремниевых сверхрешеток открывают потенциал для приложений по хранению энергии. Включая материалы с высокой подвижностью ионов лития, такие как оксид кремния или соединения лития, в структуру сверхрешетки, исследователи могут повысить производительность и емкость литий-ионных аккумуляторов. Кремниевые сверхрешетки также могут найти применение в катализе, датчиках и восстановлении окружающей среды благодаря их особым свойствам и большой площади поверхности [1-3].

Построение сверхрешетки из атомов кремния проходило на монослое пиролизованного полиакрилонитрила [4-5]. Для создания сверхрешетки из атомов кремния

на поверхности тонкой пленки полимера необходимо рассмотреть адсорбцию группы строго расположенных (упорядоченных) над поверхностью атомов, которая будет представлять из себя решетку с заданным периодом. Этот процесс можно назвать регулярной адсорбцией.

Было предложено несколько вариантов модифицирования:

1) Над атомами углерода, находящимися в узлах гексагонов («прямоугольная» сверхрешетка).

2) Над атомами углерода, находящимися в узлах гексагонов («ромбическая вариант 1» сверхрешетка).

3) Над фиктивными атомами, находящимися в центре гексагонов («ромбическая вариант 2» сверхрешетка) (рис. 1).

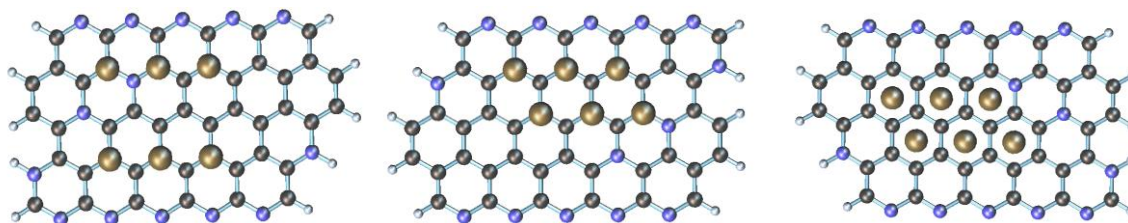


Рис. 1. Сверхрешетка из атомов кремния на поверхности полимера: а) «Прямоугольная» сверхрешетка; б) «Ромбическая» сверхрешетка вариант 1; в) «Ромбическая» сверхрешетка вариант 2.

Расчеты были проведены с полной оптимизацией геометрии, в результате были получены геометрические структуры ППАН со всеми видами сверхрешетки из атомов кремния. Выполненные расчеты

позволили установить стабильность полученных структур, рассчитать ширину запрещенной зоны различных конфигураций сверхрешетки (рис. 2).

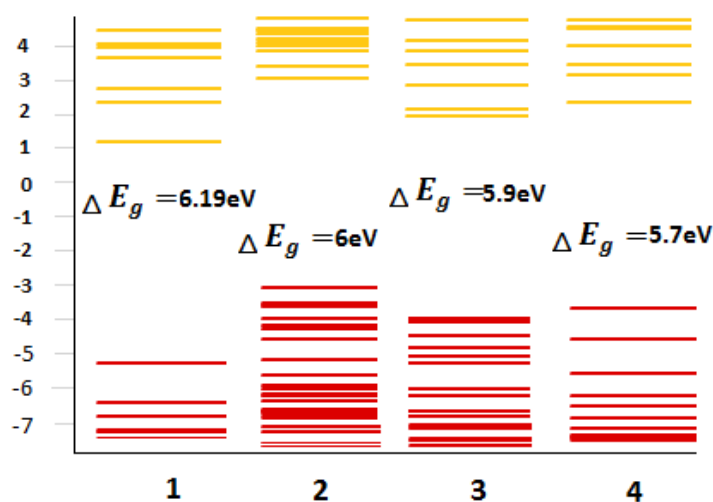


Рис. 2. Одноэлектронные энергетические спектры: 1 «прямоугольная» сверхрешетка; «ромбическая» сверхрешетка вариант 1; «ромбическая» сверхрешетка вариант 2

Как видно, значение ширины запрещенной зоны увеличивается при наличии атомов кремния над поверхностью ППАН. Также этот параметр зависит и от способа расположения атомов кремния на поверхностью полимера.

Кремниевые сверхрешетки обладают индивидуальными электронными, оптическими, механическими и тепловыми свойствами. Благодаря их развитию и приме-

нению они занимают лидирующую позицию в развитии передовых технологий, прокладывая путь в будущее, где перво-степенное значение имеет точный контроль над свойствами материалов. С помощью квантово-химических расчетов показана возможность построить сверхрешетку из кремния на полимерной матрице.

Библиографический список

1. Кристаллизация и формирование карбида кремния в двухслойных аморфных пленках кремний-углерод при электронном облучении / А.И. Сидоров, Е.Я. Лекс, О.А. Подсвилов, А.Ю. Виноградов // Журнал технической физики. – 2022. – Т. 92, № 11. – С. 1705-1710. – DOI 10.21883/JTF.2022.11.53444.180-22.

2. Григорьев, М.Н. Моделирование структуры легированных тонких пленок кремний – углеродных соединений / М.Н. Григорьев, Н.К. Плуготаренко, Т.А. Бедная // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2018. – № 2(196). – С. 94-104. – DOI 10.23683/2311-3103-2018-2-94-104.

3. Миловзоров, Д. Тонкопленочный нанокристаллический кремний (111) для солнечной энергетики и электроники / Д. Миловзоров // Наноиндустрия. – 2010. – № 3. – С. 52-60.

4. Давлетова О.А. Структура и электронные характеристики пиролизованного полиакрилонитрила: специальность 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Давлетова Олеся Александровна. – Волгоград, 2010. – 140 с.

5. Какорин, И.А. Взаимодействие молекул фтора и хлора с пиролизованным полиакрилонитрилом / И.А. Какорин // Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2023. – № 3-2(78). – С. 116-119. – DOI 10.24412/2500-1000-2023-3-2-116-119.

CREATION OF A SUPERLATTICE OF SILICON ATOMS ON THE SURFACE OF A THIN POLYMER FILM

I.A. Kakorin, Student
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

Abstract. *This article discusses the electronic, optical, mechanical and thermal properties of silicon superlattices, using quantum chemical calculations, three methods for constructing a silicon superlattice on the surface of a polymer matrix are proposed. Electron-energy spectra are constructed and the band gap width is determined.*

Keywords: *silicon, regular adsorption, polymer matrix, superlattice.*