

УДК 539.2:004.414+541.128:004.414

Компьютерное моделирование устойчивости нанoeлектромеханических чипов полупроводниковых соединений переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$

С.А. Безносюк, Ю.В. Терентьева, Н.С. Захарова

Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

Computer Simulation of Stability of Nano-Electromechanical Chips of Variable Composition Semiconductor Compounds $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$

S.A. Beznosyuk, Yu.V. Terentyeva, N.S. Zakharova

Altai State University (Barnaul, Russia)

Представлено исследование релаксации наноструктурных соединений электромеханических наночипов переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$. Построены полупроводниковые нанoeлектромеханические чипы AlP и GaP, состоящие из 6400 атомов размером $20 \times 20 \times 2$ элементарных ячеек в кристаллической структуре сфалерита. Методом аппроксимирующего квазичастичного функционала плотности получены значения парных межатомных электромеханических псевдопотенциалов Al — P и Ga — P. Устойчивость наночипов переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ исследована методом молекулярной механики. Показано, что в целом образование нанoeлектромеханических чипов в матрице кристалла сфалерита состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ незначительно изменяет полную энергию и межатомные расстояния. Образование непрерывных твердых растворов замещения на подрешетке A^3 в наночипах соединений состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ достаточно хорошо подчиняется закону Vegarda. Незначительные отклонения от закона Vegarda обусловлены трансформациями второй и третьей координационной сферы в наночипах при изменении концентрации компонента A^3 . При $x = 0,5$ преобладает нелинейный дестабилизирующий вклад с положительным отклонением полной энергии.

Ключевые слова: квантовые НЭМС, полупроводниковые наночипы, арсенид алюминия-галлия, фосфид алюминия-галлия, наночипы переменного состава.

DOI 10.14258/izvasu(2017)4-02

Введение. В течение последних десяти лет интенсивное исследование полупроводниковых соединений $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ привели к быстрому развитию оптоэлектроники и формированию широкого класса полупроводниковых устройств: светодиоды, лазеры, фотодетекторы, транзисторы, солнечные элементы и др. Среди сложных полупроводниковых фаз первое место

The paper presents a study of relaxation of nanostructured compounds of variable composition electromechanical nanochips $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$. Semiconductor nanoelectromechanical chips AlP and GaP, consisting of 6400 atoms of $20 \times 20 \times 2$ unit cells in the crystal structure of sphalerite are constructed. Interatomic Al — P and Ga — P electromechanical pseudopotentials are calculated using the method of approximating quasiparticle density functional theory. Stability of variable composition $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ nanochips is studied by the method of molecular mechanics. It is shown that, in general, a formation of nanoelectromechanical chips in a matrix of sphalerite crystal $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ slightly changes the total energy and interatomic distances. Development of continuous substitutional solid solutions in the sub-lattice A^3 of nanochips of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ compounds follows Vegard's law quite well. Minor deviations from Vegard's law are caused by transformations of the second and the third coordination spheres in nanochips due to component A^3 concentration changes. In case of $x = 0,5$, there is a predominant destabilizing nonlinear contribution to the positive deviation of total energy.

Key words: Quantum NEMS, semiconductor, variable composition compounds, aluminium-gallium arsenide, aluminium-gallium phosphide, nanochip, density functional theory, computer simulation.

по изученности и частоте применения в электронных устройствах занимают двойные (бинарные) полупроводниковые соединения, из которых соединения типа $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ составляют основу для оптоэлектроники и быстроедействующих СВЧ-приборов [1–4].

В 70–80-х гг. XX в. в микроэлектронике из соединений типа $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$ были востребованы GaAs, InP, GaP,

GaSb, а также твердые растворы $Al_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}As$, GaP_xAs_{1-x} , в меньшей степени разработки касались AlP, AlAs, InAs, AlSb, InSb и нитридов Al, Ga и In [1, 2, 5].

С развитием микроэлектроники и увеличением требований к свойствам электронных устройств все больше внимания уделяется тройным полупроводниковым соединениям [6]. Сегодня каждый из указанных бинарных полупроводников имеет определенную область применения в полупроводниковой микро- и нанoeлектронике.

Грядущий прогресс в повышении быстродействия и снижении используемой мощности тесно связан с изобретением интегральных схем, в составе которых GaAs, GaP и их твердых растворов с различными соединениями типа $A^{III}B^V$. Для изготовления «силовых» полупроводниковых приборов (клапаны, тиристоры, мощные транзисторы) применяют в больших масштабах полупроводниковые материалы. Ежегодно расширяется применение полупроводниковых материалов в солнечной энергетике. Основными полупроводниковыми материалами для изготовления солнечных батарей являются GaAs, $Al_xGa_{1-x}As$. На основе ряда прямозонных соединений типа $A^{III}B^V$ создают лазеры. Основными материалами для изготовления лазеров являются: $Al_xGa_{1-x}P$ и $Al_xGa_{1-x}As$. При изготовлении

светодиодов часто используют: GaAs, GaP, $Al_xGa_{1-x}P$ и $Al_xGa_{1-x}As$ [7-9].

1. Нанослой A^3B^5 . Почти все соединения A^3B^5 кристаллизуются таким образом, что каждый атом располагается в центре правильного тетраэдра, в четырех углах которого находятся атомы другого элемента. Из таких тетраэдров можно образовывать структуры двух типов: цинковой обманки (кубическая) и вюрцита (гексагональная).

Кубическая структура цинковой обманки (иначе - сфалерита) аналогична структуре алмаза с тем отличием, что в ее решетке чередуются атомы двух разных элементов. III-атомы и V-атомы в отдельности образуют кубические гранцентрированные частичные решетки, которые смещены одна относительно другой на четверть диагонали куба [5, 10].

2 Описание метода расчета и построение моделей наночипов переменного состава $Al_xGa_{1-x}P$. Для расчёта потенциалов сил связи наночастиц с учетом их атомного строения была использована известная методика нелокального орбитально-оболочечных функционалов плотности (ООФП) [11].

Расчёт параметров Al — P и Ga — P-связей проводился с помощью пакета WINDBOND программы для ПЭВМ «Компьютерная нанотехнология» [12].

Равновесные параметры искомым потенциалов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Равновесные параметры связей димеров состава Al — P и Ga — P

Связь атомов	U_0 , кДж/моль	R_0 , нм	ω_0 , 1/см	Связь атомов	U_0 , кДж/моль	R_0 , нм	ω_0 , 1/см
Al — P	- 175,49	0,26	358	Ga — P	-198,28	0,25	313

U_0 — энергия связи; R_0 — равновесное расстояние; ω_0 — циклическая частота

Для построения точной геометрической модели нанослоев переменного состава $Al_xGa_{1-x}P$ в модуле «Crystals» программного пакета HyperChem portable [13, 14] требовались координаты атомов в элементарной ячейке и параметры элементарных ячеек AlP и GaP с кристаллической структурой сфалерита.

В результате построения полупроводниковых нанослоев AlP были получены модели, состоящие

из 6400 атомов размером $20 \times 20 \times 2$ элементарных ячеек. Как показали тестовые расчёты, такой размер нанослоев является вполне презентативным для рассматриваемых соединений, так как при увеличении размера наноструктур энергия связи в расчёте на атом изменялась в пределах ошибки компьютерного эксперимента. Изображение полученных структур представлено на рисунке 1.

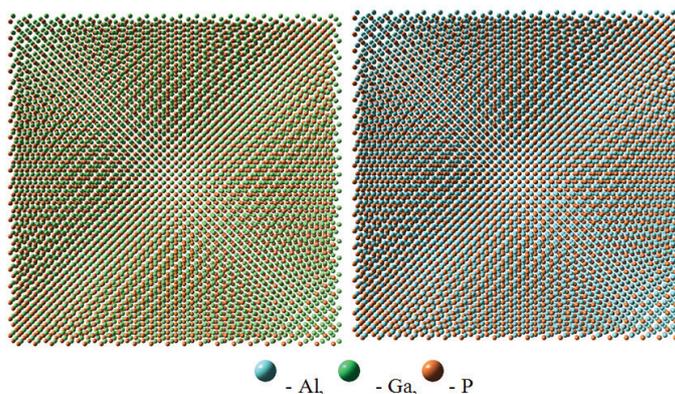


Рис. 1. Нанослой AlP и GaP

Нанослои переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ были построены аналогичным образом, но определенная доля атомов алюминия в таких структурах была заменена атомами галлия. В качестве соединений переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$ были соединения с $x = 0,25$; $0,50$ и $0,75$.

Исследование релаксации проводится в программном пакете NanoEvolver методом наискорейшего спуска по поверхности потенциальной энергии связи

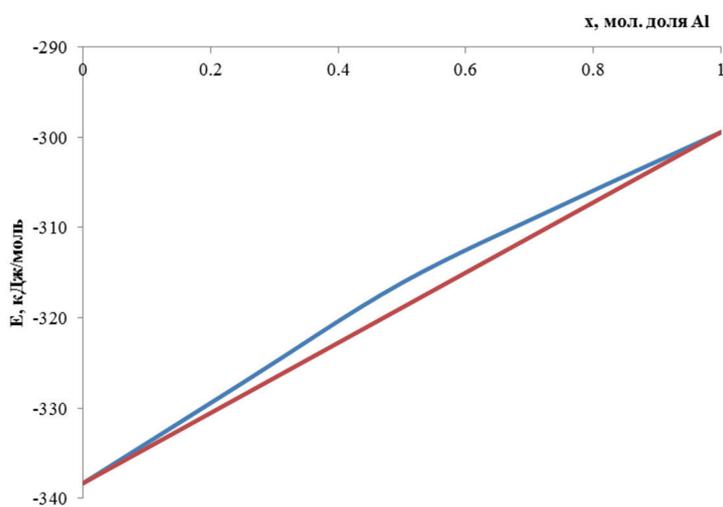
(ППЭС) атомов системы, в их конфигурационном пространстве. ППЭС представлена в виде суперпозиции термов парных межатомных взаимодействий.

3. Результаты компьютерного эксперимента и анализ полученных данных В ходе компьютерного эксперимента были получены оптимизированные структуры нанослоев переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$. Результаты эксперимента представлены в таблице 2 и на рисунке 2.

Таблица 2

Значение энергии нанослоев переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$

Структура	GaP	$\text{Al}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{P}$	$\text{Al}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{P}$	$\text{Al}_{0,75}\text{Ga}_{0,25}\text{P}$	AlP
Энергия наночипа, кДж/моль	-338,30	-327,20	-316,11	-307,54	-299,43

Рис. 2. Зависимость устойчивости полупроводниковых нанослоев переменного состава $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}$

Построение упорядоченных структур непрерывных растворов производили в модели наличия слоевого упорядочения в расположении атомов алюминия и галлия в подрешетке A^3 .

Межатомные потенциалы (длина связи в НЭМС) отличаются от молекулярной в кристаллах: для AlP и GaP они больше, чем в молекуле. Если в кристалле образуется НЭМС, то у него перестраиваются потенциалы, они отличаются от молекулярных, в случае AlP связи растянулись, высота пиков, координационных чисел понизилась, и они уширились, что говорит о нарушении ближнего и дальнего порядка. Второй пик расщепился на два с более короткими и более длинными связями. Третий пик сдвинулся, как и первый, вправо. В случае GaP пики понизились, сдвинулись и уширились. Сдвиг — сжатие для первого и второго пиков, а для третьего — расширение. В GaP разрушение дальнего порядка больше, чем в AlP (см. рис. 3).

На парной корреляционной функции отмечается монотонное линейное понижение пика первой коор-

динационной сферы AlP – до 9,8 и понижение пика первой координационной сферы GaP до 10,5.

Что касается второй и третьей координационных сфер, то здесь происходят уширение второй координационной сферы и расщепление третьей координационной сферы на два пика.

При увеличении концентрации алюминия происходит изменение второй и третьей координационных сфер, а именно: вторая координационная сфера уменьшает интенсивность, а третья сливается в широкий пик (см. рис. 4).

В соответствии с тем, что энергия НЭМС чипа определяется парной корреляционной функцией ядер при движении от $x = 0$ до $x = 1$ непрерывных твердых растворов замещения, на подрешетке A^3 происходит монотонное линейное изменение параметров первой координационной сферы и сложная трансформация второй и третьей координационной сфер. Но так как основной вклад в энергию дает первая координационная сфера (основной пик), то в энергии доминирует линейная за-

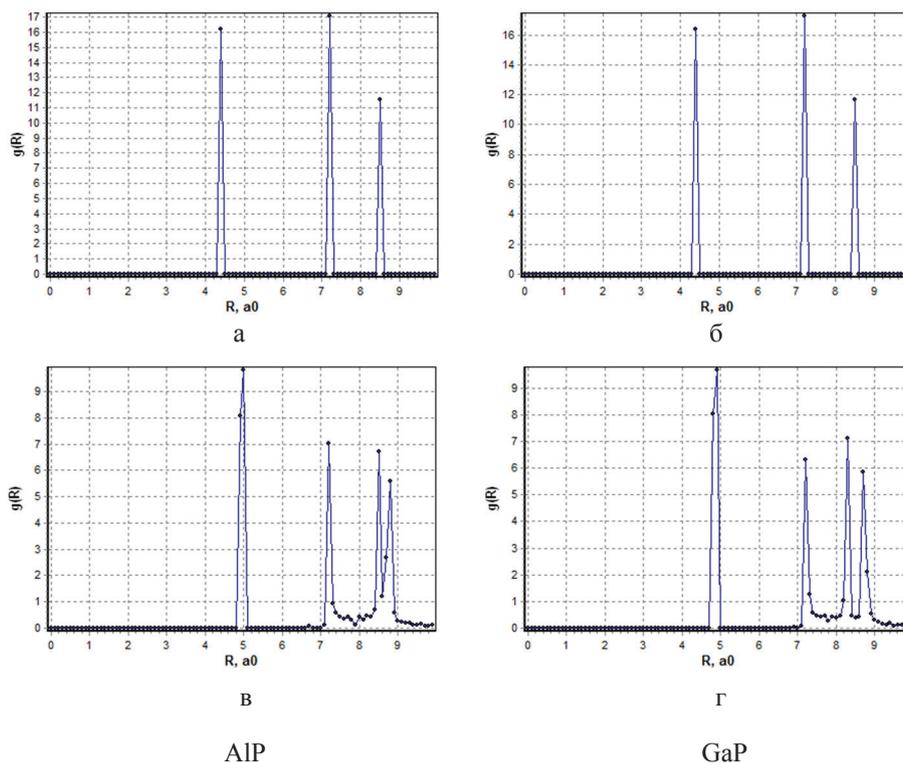


Рис. 3. Радиальная функция распределения атомов в структуре наночипов до оптимизации (а, б) и после геометрической оптимизации (в, г)

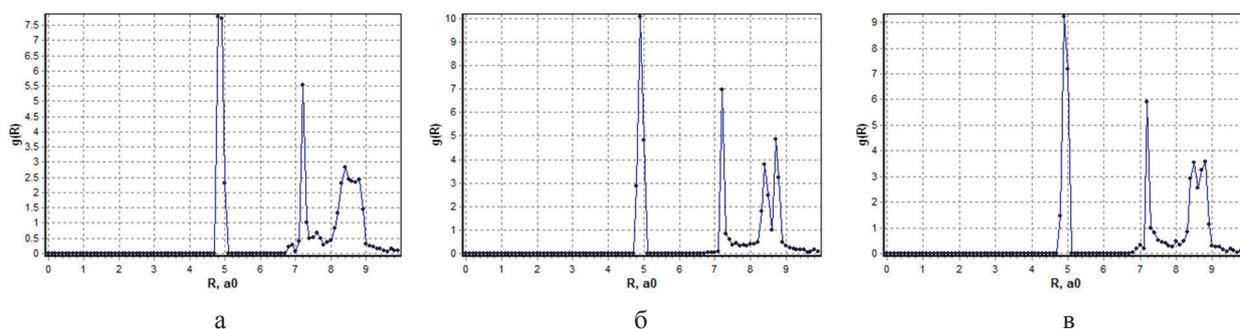


Рис. 4. Радиальная функция распределения атомов в структуре наночипа Al_{0.25}Ga_{0.75}P (а), Al_{0.5}Ga_{0.5}P (б) и Al_{0.75}Ga_{0.25}P (в) после геометрической оптимизации

зависимость энергии чипа от концентрации x (закон Вегарда). Отклонение от линейного закона связано с трансформированием второй и третьей координационных сфер (изменение дальнего порядка). Линейность закона навязана первой координационной сферой. Нелинейные отклонения связаны с трансформацией второй и третьей координационных сфер с возрастанием концентрации алюминия.

Положительный дестабилизирующий вклад достигает максимума при $x = 0,5$ в области стехиометрического состава, что соответствует вы-

шеописанным сложным трансформациям парной корреляционной функции на второй и третьей координационных сферах.

Заключение и выводы

1. В целом образование НЭМС чипа в матрице кристалла сфалерита состава Al _{x} Ga_{1- x} P изменяет энергию и межатомные расстояния незначительно.

2. Образование непрерывных твердых растворов замещения на подрешетке A³ соединений состава Al _{x} Ga_{1- x} P достаточно хорошо подчиняется закону

Вегарда – линейному закону изменения параметров от концентрации компонента. В данном исследовании таким параметром является энергия НЭМС чипа.

3. Отклонения от закона Вегарда обусловлены трансформациями второй и третьей координацион-

ных сфер раствора при изменении концентрации x компонента.

4. При $x = 0,5$ преобладает нелинейный дестабилизирующий вклад с положительным отклонением энергии.

Библиографический список

1. Угай Я.А. Введение в химию полупроводников. — М., 1975.
2. Готра З.Ю. Технология микроэлектронных устройств : справочник. — М., 1991.
3. Гусев А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. — М., 2009.
4. Васильев А.Г., Колковский Ю.В., Концевой Ю.А. СВЧ-транзисторы на широкозонных полупроводниках. — М., 2011.
5. Безносюк С.А., Терентьева Ю.В., Придчина С.А. Компьютерное моделирование устойчивости нанозлектромеханических чипов полупроводниковых соединений переменного состава $ZnS_{1-x}Se_x$. // Известия Алтайского гос. ун-та. — 2016. — №1(89). DOI: 10.14258/izvasu(2016)1-02.
6. Лебеденко С.Е. Физико-химические аспекты и компьютерное моделирование формирования нанослоевых структур выпрямляющих контактов : дис. ... канд. хим. наук. — Барнаул, 2007.
7. Зюзин Ю.Б. Обзор изобретений «Полупроводниковые приборы и интегральные схемы». Ч. 1–3 // Аналитические обзоры [Электронный ресурс]. Scitechlibrary.com. — 2003.
8. Мильвидский М.Г., Пелевин О.В., Сахаров Б.А., Физико-химические основы получения разлагающихся полупроводниковых соединений (на примере арсенида галлия). — М., 1974.
9. Гаман В.И. Физика полупроводниковых приборов. — М., 2000.
10. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. — М., 1971.
11. Многоуровневое строение, физико-химические и инфомационные свойства вещества / С. А. Безносюк, А. И. Потеекаев, М. С. Жуковский, Т. М. Жуковская, Л. В. Фомина. — Томск, 2005.
12. Безносюк С.А., Жуковский М.С., Важенин С.В., Лерх Я.В. КомпНаноТех / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2009613043 от 10 июня 2009 г.
13. HyperChem® Release 5.0 for Windows. Reference manual / Copyright © 1996 Hypercube, Inc. — Canada. — 1996.
14. HyperChem® Computational Chemistry. Practical Guide / Copyright © 1996 Hypercube, Inc. — Canada. — 1996.