

УДК 541.1

Компьютерное моделирование устойчивости полупроводниковых нанoeлектромеханических систем $A^{II}B^{IV}As_2$ после аттосекундного импульсного воздействия

А.А. Гайдукова, Ю.В. Терентьева, С.А. Безносюк

Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

Computer Simulation of the Semiconductor Nanoelectromechanical Systems $A^{II}B^{IV}As_2$ Stability after Attosecond Impulse Exposure

A.A. Gaydukova, Yu.V. Terentyeva, S.A. Beznosyuk

Altai State University (Barnaul, Russia)

Рассматривается компьютерное моделирование отклика многокомпонентных полупроводниковых нанoeлектромеханических систем арсенидов на аттосекундный импульс излучения при криогенной ($T_1=77$ К) и стандартной температуре ($T_2=298$ К). Построены кинетические кривые релаксационных процессов, происходящих в тройных полупроводниковых нанослоях: $CdSiAs_2$, $CdGeAs_2$, $ZnSiAs_2$, $ZnGeAs_2$ и нанослоях переменного состава: $CdSi_{1-x}Ge_xAs_2$, $ZnSi_{1-x}Ge_xAs_2$, $Cd_{1-x}Zn_xSiAs_2$ и $Cd_{1-x}Zn_xGeAs_2$. Показаны различия в средней энергии релаксации нанослоев в зависимости от температуры, а также амплитуды колебания значений энергии и времени выхода на плато. Показано сравнение с релаксационными процессами, проходящими при абсолютном нуле температур. Рассмотрены радиальные функции распределения атомов в системе до и после релаксационных процессов, вызванных импульсным воздействием на систему атомов в полупроводниковом слое. Описана модификация пиков координационных сфер распределения атомов в зависимости от состава нанослоя. Выявлены закономерности релаксационного изменения координационных сфер первого порядка и разрушения координационных сфер второго и третьего порядка при криогенной и стандартной температурах.

Ключевые слова: аттосекундная физика, нанoeлектромеханические системы, тройные полупроводники, арсениды, соединения переменного состава, радиальная функция распределения, кинетическая кривая, компьютерное моделирование.

DOI: 10.14258/izvasu(2021)4-03

Введение

Тройные полупроводники $CdSiAs_2$, $CdGeAs_2$, $ZnSiAs_2$ и $ZnGeAs_2$ представляют собой соединения типа $A^{II}B^{IV}C^V_2$ семейства пниктидов, которые кристаллизуются в тетрагональной пространственной группе с четырьмя формульными единицами в каж-

The article deals with computer modeling of responses of multicomponent semiconductor nanoelectromechanical systems of arsenides to an attosecond radiation pulse at cryogenic ($T_1=77$ K) and standard temperatures ($T_2=298$ K). Kinetic curves of relaxation processes in ternary semiconductor nanolayers $CdSiAs_2$, $CdGeAs_2$, $ZnSiAs_2$, $ZnGeAs_2$, and nanolayers of variable composition $CdSi_{1-x}Ge_xAs_2$, $ZnSi_{1-x}Ge_xAs_2$, $Cd_{1-x}Zn_xSiAs_2$, and $Cd_{1-x}Zn_xGeAs_2$ are obtained. This research reveals the differences in the average relaxation energy of nanolayers that depend on temperature and the amplitudes of energy fluctuations, and the time of reaching the plateau. A comparison with relaxation processes taking place at absolute zero temperatures is demonstrated. The radial distribution functions of atoms in the system before and after relaxation processes caused by impulsive action on the system of atoms in the semiconductor layer are considered. The modification of the peaks corresponding to the coordination spheres of atomic distribution depending on the composition of the nanolayer is described. The regularities of relaxation changes of the first order coordination spheres, as well as the regularities of relaxation destructions of the second and the third order coordination spheres at cryogenic and standard temperatures are revealed.

Key words: attosecond physics, nanoelectromechanical systems, ternary semiconductors, arsenides, compounds of variable composition, radial distribution function, kinetic curve, computer simulation.

дой элементарной ячейке и имеют структуру халькопирита [1–6], которая тесно связана со структурой цинковой обманки. В структуре халькопирита ($CuFeS_2$) в позицию атомов меди встают атомы A^{II} , в позицию атомов железа — атомы B^{IV} , а атомы серы заменяются атомами мышьяка. Компьютерное моделирование устой-

чивости квантовых нанoeлектроmechanических систем (НЭМС) слоев многокомпонентных полупроводниковых соединений под воздействием мощного аттосекундного импульса является актуальной задачей [7–9]. Полупроводники данного типа привлекают значительное внимание из-за возможности применения как монокристаллических, так и поликристаллических тонких пленок и светодиодов в солнечных элементах, фотоэлектрических приборах, светоизлучающих устройствах видимого и инфракрасного диапазона [10–12].

Компьютерное моделирование полупроводниковых нанoeлектроmechanических систем $A^{II}B^{IV}As_2$

В ходе компьютерного эксперимента построены модели НЭМС переменного состава $CdSi_{1-x}Ge_xAs_2$, $ZnSi_{1-x}Ge_xAs_2$, $Cd_{1-x}Zn_xSiAs_2$ и $Cd_{1-x}Zn_xGeAs_2$, которые представляли собой нанослои, состоящие из 6400 атомов размером $20 \times 20 \times 1$ элементарных ячеек. В качестве примера на рисунке 1 представлены модели $CdSiAs_2$, $CdGeAs_2$, $ZnSiAs_2$ и $ZnGeAs_2$.

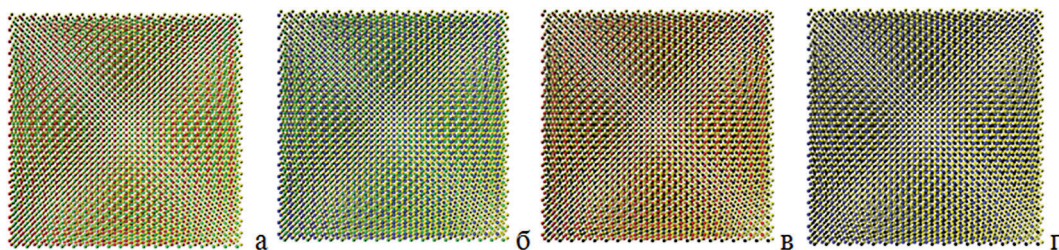


Рис. 1. Модели НЭМС слоев а- $CdGeAs_2$, б- $CdSiAs_2$, в- $ZnGeAs_2$, г- $ZnSiAs_2$

Исследование релаксационных процессов в указанных нанослоях проводилось методом квантовой нанокинетики при двух температурах: $T_1=77$ К и $T_2=298$ К. Равновесные потенциалы, соответствующие

парам атомов, расположенных на первой координационной сфере, были получены методом нелокального орбитально-оболочечного функционала плотности и представлены в таблице 1.

Таблица 1

Парные корреляционные потенциалы атомов нанослоев арсенидов

Димер	Равновесная энергия связи, кДж/моль	Равновесная длина связи, нм	Частота нулевых колебаний, cm^{-1}
Cd-As	-225	0,25	212
Ge-As	-271	0,26	276
Zn-As	-138	0,27	188
Si-As	-263	0,25	382

Для оценки изменений, которым подвергаются структуры исследуемых полупроводников в результате импульсного воздействия, необходимо оценить изменения радиальных функций распределения атомов. Радиальная функция распределения атомов в идеальном кристалле халькопирита представлена на рисунке 2.

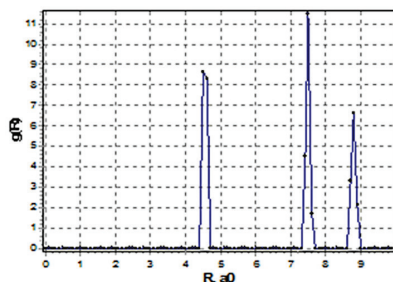


Рис. 2. Радиальная функция распределения атомов в идеальной структуре типа халькопирит

На радиальной функции распределения атомов в структурах типа халькопирит показаны три коор-

динационные сферы. Первая координационная сфера представлена уширенным пиком на расстоянии $4,4-4,6 a_0$. Что соответствует расстояниям пар атомов Fe-S и Cu-S в структуре халькопирита или расстояниям катионов A^{II} и B^{IV} с атомом мышьяка. Пики на радиальной функции распределения, соответствующие второй и третьей координационной, свидетельствуют о наличии дальнего порядка в кристаллической структуре.

Результаты компьютерного моделирования

Методом квантовой нанокинетики были исследованы полупроводниковые НЭМС при температурах 77 и 298 К. Были получены параметры квантовой релаксации НЭМС слоев $CdGeAs_2$, $CdSiAs_2$, $ZnGeAs_2$, $ZnSiAs_2$ и слоев переменного состава по катионам типа A^{II} и B^{IV} . В результате компьютерного моделирования релаксации НЭМС при воздействии импульсного облучения были получены кинетические кривые релаксации, представленные на рисунке 3.

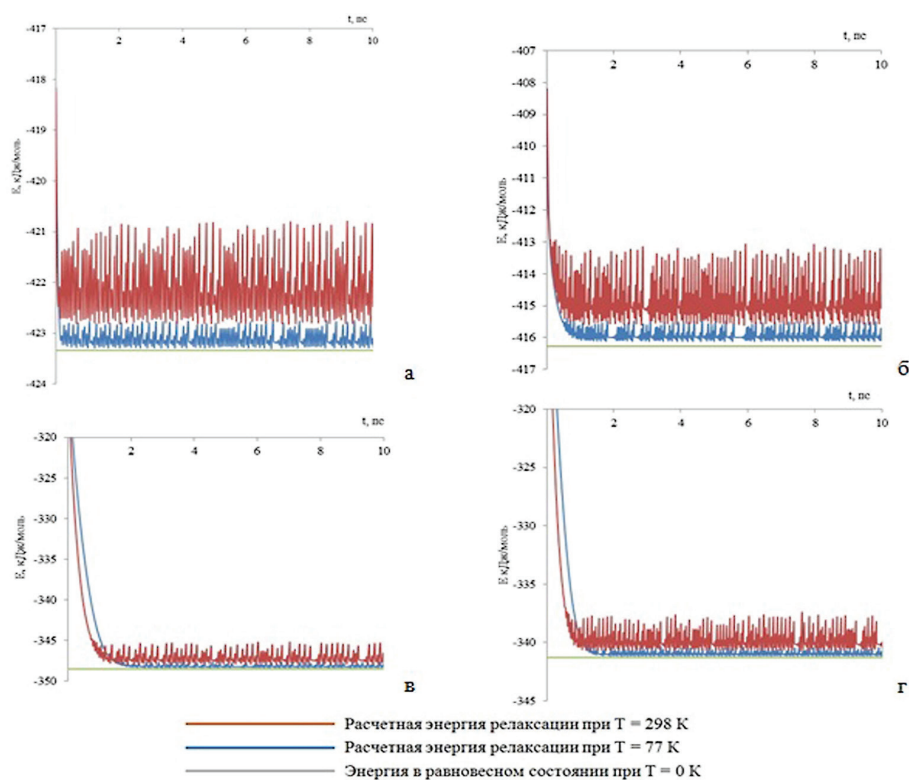


Рис. 3. Кинетические кривые релаксации энергии НЭМС слоев а-CdGeAs₂, б-CdSiAs₂, в-ZnGeAs₂, г-ZnSiAs₂ (первые 10 пс релаксации)

Результаты исследования атто-фемтосекундного процессинга представлены в таблице 2.

Таблица 2

Показатели атто-фемтосекундного процессинга нанослоев переменного состава Zn(Cd)Si_xGe_{1-x}As₂ и Zn_xCd_{1-x}Si(Ge)As₂ при различных температурах

Состав нанослоя	Показатели атто-фемтосекундного процессинга						
	E ₀ ¹ , кДж/моль	E ₇₇ ¹ , кДж/моль	t ₇₇ ² , пс	A ₇₇ ³ , кДж/моль	E ₂₉₈ ¹ , кДж/моль	t ₂₉₈ ² , пс	A ₂₉₈ ³ , кДж/моль
1	2	3	4	5	6	7	8
CdSiAs ₂	-416,27	-415,91	0,83	0,71	-414,76	0,62	2,84
CdSi _{0.75} Ge _{0.25} As ₂	-417,33	-416,96	0,11	0,76	-415,79	0,06	2,96
CdSi _{0.5} Ge _{0.5} As ₂	-419,39	-419,01	0,15	0,68	-417,87	0,11	2,80
CdSi _{0.25} Ge _{0.75} As ₂	-421,44	-421,07	0,18	0,65	-419,96	0,15	2,66
CdGeAs ₂	-423,34	-423,11	0,19	0,60	-422,10	0,22	2,44
ZnSiAs ₂	-341,29	-340,91	1,28	0,88	-339,69	0,86	3,53
ZnSi _{0.75} Ge _{0.25} As ₂	-343,32	-342,91	1,44	0,85	-341,69	0,91	3,32
ZnSi _{0.5} Ge _{0.5} As ₂	-345,38	-344,97	1,62	0,83	-343,77	1,08	3,25
ZnSi _{0.25} Ge _{0.75} As ₂	-346,40	-346,03	1,74	0,82	-344,86	1,09	3,13
ZnGeAs ₂	-348,49	-348,12	1,79	0,76	-347,05	1,11	2,92
Zn _{0.75} Cd _{0.25} SiAs ₂	-363,19	-362,805	1,26	0,80	-361,62	0,91	3,15
Zn _{0.5} Cd _{0.5} SiAs ₂	-384,53	-384,15	1,08	0,76	-382,99	0,70	3,00
Zn _{0.25} Cd _{0.75} SiAs ₂	-405,87	-405,49	0,93	0,76	-404,35	0,63	2,89
Zn _{0.75} Cd _{0.25} GeAs ₂	-368,80	-369,97	1,38	0,70	-368,43	0,85	2,74
Zn _{0.5} Cd _{0.5} GeAs ₂	-380,22	-379,89	1,28	0,67	-378,85	0,99	2,67
Zn _{0.25} Cd _{0.75} GeAs ₂	-401,57	-401,23	0,97	0,64	-400,21	0,62	2,62

¹Энергия релаксированного нанослоя при 0 К, 77 К и 298 К

²Время релаксации при 77 К и 298 К

³Амплитуда флуктуации энергии при 77 К и 298 К

По данным таблицы 1 можно сделать выводы для всех исследуемых систем. Для нанослоев аттофемтосекундная релаксация при температуре 0 К приводит к вырожденному аттрактору с энергией, которая задается точным значением, но даже при таком состоянии в системе имеются малоамплитудные атомные смещения. Эти значения приведены во втором столбце таблицы 2. В результате компьютерного эксперимента получили время выхода на плато аттрактора начально активированного состояния. Как показывают данные эксперимента, оно зависит от температуры. При этом квантовая эволюция неравновесных нанослоев достигает релаксации за разное время (колонки 4 и 7 таблицы 2). Как видно, вре-

мя выхода на плато при температуре 77 К быстрее, чем при температуре 298 К. При этом амплитуды колебаний при температуре 77 К (колонка 5) меньше, чем амплитуды колебаний энергии при температуре 298 К (колонка 8).

В результате компьютерного моделирования методом квантовой кинетики при температурах 77 К и 298 К получены радиальные функции распределения атомов НЭМС полупроводниковых слоев переменного состава $\text{CdSi}_x\text{Ge}_{1-x}\text{As}_2$, $\text{ZnSi}_x\text{Ge}_{1-x}\text{As}_2$, $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{GeAs}_2$ и $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{SiAs}_2$. Радиальные функции распределения атомов в данных структурах представлены на рисунках 4, 5. Рисунок слева соответствует температуре 77 К, рисунок справа — 298 К.

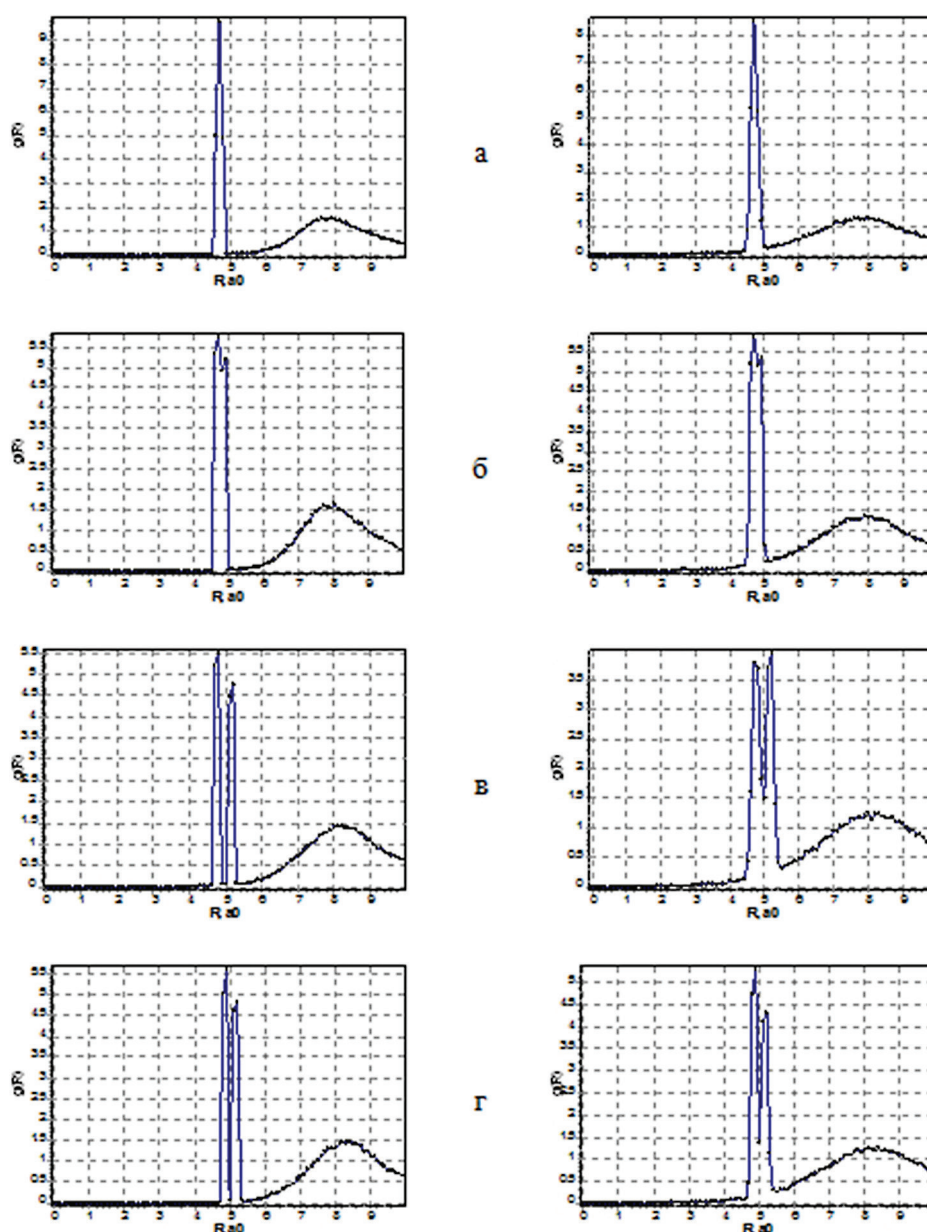


Рис. 4. Радиальные функции распределения атомов в трехкомпонентных полупроводниковых нанослоях при температурах 77 К и 298 К: а — CdSiAs_2 , б — CdGeAs_2 , в — ZnSiAs_2 , г — ZnGeAs_2

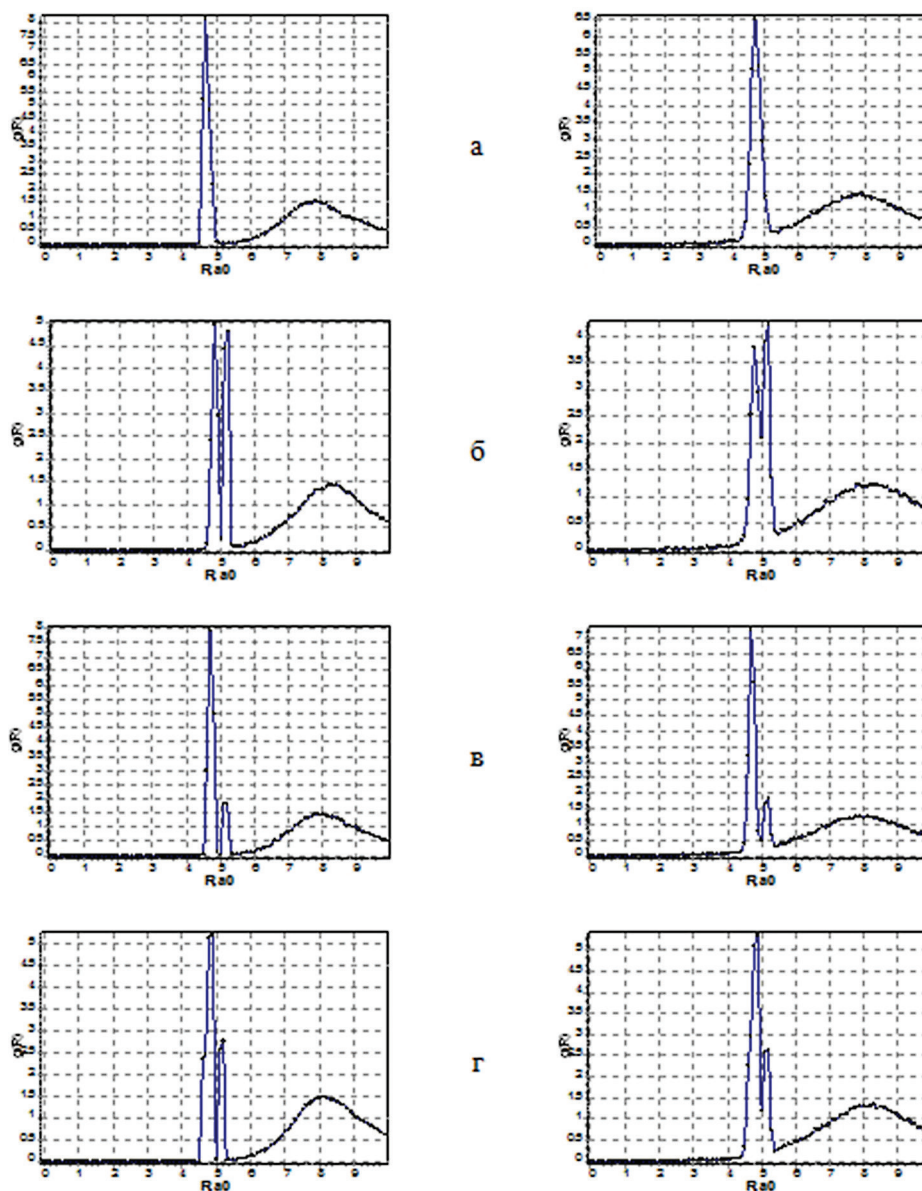


Рис. 5. Радиальные функции распределения атомов в полупроводниковых нанослоях переменного состава при температурах 77 К и 298 К: а — $\text{CdGe}_{0,5}\text{Si}_{0,5}\text{As}_2$, б — $\text{ZnSi}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}\text{As}_2$, в — $\text{Zn}_{0,5}\text{Cd}_{0,5}\text{SiAs}_2$, г — $\text{Zn}_{0,5}\text{Cd}_{0,5}\text{GeAs}_2$

Общей чертой всех радиальных функций распределения атомов в исследуемых структурах НЭМС при температурах 77 К и 298 К наблюдаются четкий пик на первой координационной сфере и размытие пиков дальних порядков (по сравнению с рисунком 2), что свидетельствует о разрушении дальнего упорядочения атомов и приводит к аморфизации нанослоев.

На рисунке 4 представлены радиальные функции распределения «чистых» трехкомпонентных полупроводников.

На рисунке 4а представлена система CdSiAs_2 . Поскольку равновесное расстояние пар атомов Cd-As и Si-As составляет 0,25 нм, то пики первой координационной сферы при температурах 77 и 298 К

представляют собой узкие интенсивные пики на соответствующем расстоянии.

На рисунке 4б показаны радиальные функции распределения атомов в слое CdGeAs_2 , различие в длинах связей пар атомов Cd-As и Ge-As приводит к уширению пика первой координационной сферы и более низкой интенсивности за счет смещения длин связей.

На рисунке 4в представлены радиальные функции распределения атомов в структуре ZnSiAs_2 . За счет значительного различия длин связей в Zn-As (0,27 нм) и Si-As (0,25 нм) пик первой координационной сферы раздваивается на два четких пика. Та же тенденция характерна для распределения атомов в слое ZnGeAs_2 (длины связей Zn-As 0,27 нм, Ge-As — 0,26 нм) — рисунок 4г.

В связи с различием расстояний между атомами катионов и мышьяка происходит уширение или раздвоение пиков первой координационной сферы в НЭМС полупроводниковых слоев переменного состава. Радиальные функции распределения НЭМС переменного состава представлены на рисунке 5.

Заключение

Выполненные исследования полупроводниковых НЭМС при криогенных ($T_1=77$ К) и стандартных ($T_2=298$ К) условиях показывают разрушение координационных сфер порядков выше первой.

Трансформация первой координационной сферы вызвана различными равновесными расстояниями между атомами катионов и аниона. Первая координационная сфера либо остается неизменной в случае «чистого» трехкомпонентного нанослоя $CdSiAs_2$, что связано с одинаковым равновесным расстоянием между атомами Cd-As и Si-As, либо уширением или раздвоением пиков во всех остальных случаях, что объясняется различными равновесными расстояниями между парами катион-анион, входящими в состав НЭМС.

Анализ кинетических кривых процесса релаксации исследуемых структур показал, что с повышением температуры релаксации от криогенных ($T_1=77$ К) до стандартных ($T_2=298$ К) условий средняя энергия НЭМС при всех концентрациях падает на 1 кДж/моль, а квантовые флуктуации увеличиваются с 0,11 кДж/моль до 3,53 кДж/моль.

Библиографический список

1. Verma A. S. Thermal properties of chalcopyrite semiconductors // *Philosophical Magazine*. 2009. Vol. 89. № 2.
2. Jiawei L., Shifu Z., Beijun Z. XPS Analysis and Determination of Surface Damage Layer of CdGeAs₂ Single Crystal // *Rare Metal Materials and Engineering*. 2015. Vol. 44. № 4.
3. Achanta V.G. Surface waves at metal-dielectric interfaces: Material science perspective // *Surface waves at metal-dielectric interfaces: Material science perspective*. 2020. Vol. 5.
4. Koroleva L.I., Zashchirinskii D.M., Khapaeva T.M. Manganese-doped CdGeAs₂, ZnGeAs₂ and ZnSiAs₂ chalcopyrites: A new materials for spintronics // *Journal of magnetism and magnetic materials*. 2011. Vol. 323. No. 23.
5. Novotortsev V.M., Palkina K.K., Mikhailov S.G. Synthesis and Structure of Mn-Doped CdGeAs₂ Single Crystals // *Inorg Mater*. 2005. Vol. 41. № 5.
6. Demin R.V., Koroleva L.I., Marenkin S.F., et al. Mn doped CdGeAs₂ Chalcopyrite: A New Ferromagnet with a Curie Temperature of 355 K // XIX Mezhdunarodnaya shkola-seminar po novym magnitnym materialam mikroelektroniki (XIX Int. Workshop on New Magnetic Materials for Microelectronics). M., 2004.
7. Volkov D.A., Terenteva Y.V., Beznosyuk S.A. Attosecond nanotechnology: Quantum dots of nanoelectromechanical systems of CuInxGa1-xS₂ compounds // *Bulletin of the university of Karaganda-chemistry*. 2019. Vol. 95. № 3.
8. Терентьева Ю.В., Безносюк С.А., Волков Д.А., Гайдук А.А., Лысенко А.С. Компьютерное моделирование устойчивости нанослоев селенида цинка, легированных железом, подвергшихся импульсному воздействию // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2020. Т. 17. № 3.
9. Терентьева Ю.В., Безносюк С.А., Волков Д.А. Компьютерное моделирование устойчивости легированных марганцем морфологических модификаций квантовых НЭМС диарсенида цинка-кремния // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2020. Т. 17. № 4.
10. Zawilski K.T., Schunemann P.G., Pollak T.M. Glass formation and optical properties of CdGeAs₂ // *Journal of Crystal Growth*. 2008. Vol. 310. № 7–9.
11. Boukabrine F., Chiker F., Khachai H. Ab initio calculation of ZnSiAs₂ and CdSiAs₂ semiconductor compounds // *Physica B: Condensed Matter*. 2011. Vol. 406. № 2.
12. Xu B., Han H., Sun J. The structural, electronic and optical properties of the chalcopyrite semiconductor ZnSiAs₂ // *Physica B: Condensed Matter*. 2009. Vol. 404. № 8–11.