

Известия Алтайского государственного университета. 2024. № 1 (135). С. 61–66.
Izvestiya of Altai State University. 2024. No 1 (135). P. 61–66.

Научная статья
УДК 539.2:004.414:541.128:004.414
DOI: 10.14258/izvasu(2024)1-08

Компьютерное моделирование многослойных наночастиц на базе элементарных полупроводников

Юлия Владимировна Терентьева¹, Сергей Александрович Безносюк²

¹Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия, zyv1985@mail.ru

²Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия, bsa1953@mail.ru

Original article

Computer Simulation of Multilayer Nanoparticles of Elementary Semiconductors

Yulia V. Terentyeva¹, Sergey A. Beznosyuk²

¹Altai State University, Barnaul, Russia, zyv1985@mail.ru

²Altai State University, Barnaul, Russia, bsa1953@mail.ru

Представлены результаты компьютерного моделирования алмазоподобных наночастиц, состоящих из кремния и германия, а также слоевых полупроводников различной нуклеарности с чередующимися слоями. Было построено 16 моделей наночастиц размером 3-3-3 элементарные ячейки и размером 5-5-5 элементарных ячеек с различным чередованием слоев кремния и германия.

Методом нелокального функционала плотности были получены равновесные параметры связей пар атомов, входящих в кристаллическую структуру исследуемых НЭМС с различным морфологическим строением. Методами молекулярной механики была изучена зависимость энергии исследуемых наночастиц от размера, состава, а также последовательности чередования слоев кремния и германия.

Показано незначительное изменение межатомного расстояния в полупроводниковых системах с алмазоподобной структурой и в НЭМС состоянии. Системы, имеющие в своем составе только атомы кремния, оказались энергетически более устойчивы, чем системы, состоящие только из атомов германия. Внедрение атомов германия в кремниевые системы понижает термодинамическую стабильность частицы, в то время как внедрение атомов кремния в германиевые наночастицы повышает их устойчивость. Появление в наночастице связей типа кремний — германий стабилизирует частицы из германия и дестабилизирует частицы из кремния.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, кремний, германий, алмазоподобные полупроводники, нанослоевые полупроводники

The paper presents the results of computer simulations of diamond-like silicon and germanium nanoparticles, as well as layered semiconductors of various nuclearities with alternating layers. In the work, 16 models of nanoparticles with the sizes of 3-3-3 elementary cells (e.c.) and 5-5-5 e.c. with different alternations of Si and Ge layers have been constructed.

The equilibrium parameters of bonded atom pairs in the crystal structure of the studied NEMS with different morphological structures are obtained using the non-local density functional method. The dependence of the energy of the studied nanoparticles on the size, composition, and the sequence of Si and Ge alternating layers is studied by the methods of molecular mechanics.

It is revealed that there are slight changes in the interatomic distance in semiconductor systems with a diamond-like structure and in the NEMS state. Systems with only Si atoms turned out to be energetically more stable than systems with only Ge atoms. The introduction of Ge atoms into Si-based systems reduces the thermodynamic stability of the particle, while it is vice versa for the Si atoms introduced into Ge-based systems. It is concluded that the appearance of the Si-Ge bonds in a nanoparticle stabilizes germanium particles and destabilizes silicon particles.

Keywords: computer simulation, silicon, germanium, diamond-like semiconductors, nanolayer semiconductors

Для цитирования: Терентьева Ю.В., Безносюк С.А. Компьютерное моделирование многослойных наночастиц на базе элементарных полупроводников // Известия Алтайского государственного университета. 2024. № 1 (135). С. 61–66. DOI: 10.14258/izvasu(2024)1-08.

Введение

Исследования многослойных наночастиц на базе элементарных полупроводников имеют большую актуальность в связи с растущим спросом на эти материалы в различных областях науки и техники [1, с. 10–15]. Одной из основных областей применения многослойных наночастиц является электроника. Многослойные наночастицы используются для создания полупроводниковых приборов, таких как транзисторы, диоды и другие электронные устройства. Благодаря своим уникальным свойствам многослойные наночастицы могут быть использованы для увеличения скорости работы электронных приборов и улучшения их энергоэффективности. Еще одним важным направлением применения многослойных наночастиц является оптика. Они используются для создания оптических приборов, таких как лазеры, светодиоды и фотоэлементы. Многослойные наночастицы могут улучшать оптические свойства материалов, что приводит к значительному увеличению эффективности этих приборов. Также многослойные наночастицы могут использоваться в медицине для создания новых методов диагностики и лечения заболеваний. Например, многослойные наночастицы могут использоваться в качестве носителей для доставки лекарственных препаратов в определенную область организма или для диагностики различных заболеваний [2, с. 7].

Многослойные наночастицы на базе элементарных полупроводников кремния и германия обладают рядом уникальных свойств и характеристик, которые делают их идеальными материалами для различных технологических приложений [3, с. 8–19]. Исследование наночастиц германия и кремния имеет большую актуальность в настоящее время, так как нанотехнологии становятся все более востребованными в различных отраслях промышленности [4, с. 11–24]. Например, наночастицы могут использоваться в качестве катализаторов в производстве химических веществ, в медицине для создания новых лекарственных препаратов и методов диагностики, в электронике для создания более эффективных и компактных устройств, а также в экологии для очистки воды и воздуха от загрязнений. Кроме того, исследование наночастиц германия имеет важное значение для безопасности и здоровья человека, так как некоторые наночастицы могут оказывать токсическое действие на организм. Поэтому изучение свойств и поведения наночастиц германия и кремния является актуальной задачей для научных исследований [5, с. 183; 6, с. 88–106].

For citation: Terentyeva Yu.V., Beznosyuk S.A. Computer Simulation of Multilayer Nanoparticles of Elementary Semiconductors. *Izvestiya of Altai State University*. 2024. No 1 (135). P. 61–66. (In Russ.). DOI: 10.14258/izvasu(2024)1-08.

1. Компьютерное моделирование нанoeлектро-механических систем многослойных элементарных полупроводниковых частиц

Для исследования устойчивости НЭМС многослойных элементарных полупроводниковых наночастиц необходимо построить компьютерные модели различного строения. Методика построения моделей с алмазоподобной кристаллической решеткой была описана в работах [7, с. 120–124; 8, с. 143–149]. Для построения точной геометрической модели необходимы данные по параметрам кристаллических решеток кремния и германия ($a_{Si}=0,357$ нм, $a_{Ge}=0,357$ нм [9]). В качестве объектов исследования выбраны наночастицы, построенные по следующим типам моделей:

Структура типа 1 — чистый Si размером 3-3-3 э.я.

Структура типа 2 — чистый Ge размером 3-3-3 э.я.

Структура типа 3 — структура размером 3-3-3 э.я., внешняя оболочка состоит из Si, внутренняя часть состоит из Ge (размер включения 1 э.я.).

Структура типа 4 — структура размером 3-3-3 э.я., внешняя оболочка состоит из Ge, внутренняя часть состоит из Si (размер включения 1 э.я.).

Структура типа 5 — структура размером 3-3-3 э.я., состоящая из чередования поочередно слоев Si-Ge-Si.

Структура типа 6 — структура размером 3-3-3 э.я., состоящая из чередования поочередно слоев Ge-Si-Ge.

Структура типа 7 — чистый Si размером 5-5-5 э.я.

Структура типа 8 — чистый Ge размером 5-5-5 э.я.

Структура типа 9 — структура размером 5-5-5 э.я., внешняя оболочка состоит из Si, внутренняя часть состоит из Ge (размер включения 1 э.я.).

Структура типа 10 — структура размером 5-5-5 э.я., внешняя оболочка состоит из Ge, внутренняя часть состоит из Si (размер включения 1 э.я.).

Структура типа 11 — структура размером 5-5-5 э.я., состоит из оболочки Si, внутренняя часть размером 3-3-3 э.я. состоит из Ge.

Структура типа 12 — структура размером 5-5-5 э.я., состоит из оболочки Ge, внутренняя часть размером 3-3-3 э.я. состоит из Si.

Структура типа 13 — структура размером 5-5-5 э.я., внутренняя часть размером 1 э.я. состоит из Si, далее идет слой Ge (толщина 1 э.я.), далее слой Si (толщина 1 э.я.).

Структура типа 14 — структура размером 5-5-5 э.я., внутренняя часть размером 1 э.я. состоит из Ge, далее идет слой Si (толщина 1 э.я.), далее слой Ge (толщина 1 э.я.).

Структура типа 15 — структура размером 5-5-5 э.я., состоит из чередования слоев Si-Ge-Si-Ge-Si.

Структура типа 16 — структура размером 5-5-5 э.я., состоит из чередования слоев Ge-Si-Ge-Si-Ge.

Пример структур типа 5 и 6 и их связевые графы представлены на рисунке 1.

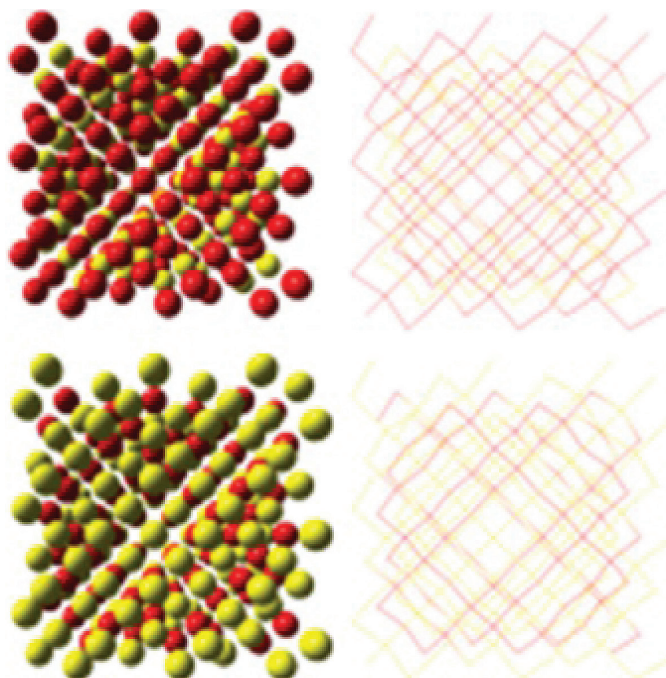


Рис. 1. Модели наночастиц со структурами 5 и 6 и их связевые графы

Методом нелокального функционала плотности были получены параметры внутрискристаллической связи для пар атомов, входящих в состав исследу-

емых наночастиц. Параметры связей представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры связей пар атомов, входящих в состав полупроводниковых структур

Димер	Равновесная энергия связи U_0 , кДж/моль	Равновесная длина связи R_0 , нм	Частота нулевых колебаний ω_0 , см ⁻¹
Si-Si	2,6315	4,3	536
Ge-Ge	2,1489	5,1	235
Si-Ge	2,8194	4,7	426

2. Анализ устойчивости элементарных многослойных полупроводниковых наноструктур, исследованных методом молекулярной механики

Результаты компьютерного моделирования процессов релаксации наночастиц представлены в таблице 2.

Таблица 2

Значение энергии наночастиц переменного состава

Модель	Нуклеарность (состав наночастицы)	Энергия нанослоя, кДж/моль
1	216 атомов Si (Si_{3-3-3})	-390,86
2	216 атомов Ge (Ge_{3-3-3})	-319,36
3	208 атомов Si, 8 атомов Ge (Si_{3-3-3} ядро Ge_{1-1-1})	-390,82
4	208 атомов Ge, 8 атомов Si (Ge_{3-3-3} ядро Si_{1-1-1})	-326,00
5	144 атома Si, 72 атома Ge ($Si-Ge-Si_{3-3-3}$)	-376,31
6	144 атома Ge, 72 атома Si ($Ge-Si-Ge_{3-3-3}$)	-356,91
7	1000 атомов Si (Si_{5-5-5})	-435,30

Модель	Нуклеарность (состав наночастицы)	Энергия нанослоя, кДж/моль
8	1000 атомов Ge (Ge_{5-5-5})	-355,54
9	992 атома Si, 8 атомов Ge (Si_{5-5-5} ядро Ge_{1-1-1})	-435,30
10	992 атома Ge, 8 атомов Si (Ge_{5-5-5} ядро Si_{1-1-1})	-356,94
11	784 атома Si, 216 атомов Ge (Si_{5-5-5} ядро Ge_{3-3-3})	-423,61
12	784 атома Ge, 216 атомов Si (Ge_{5-5-5} ядро Si_{3-3-3})	-383,79
13	208 атомов Ge, 792 атома Si (Si-Ge-Si_{5-5-5})	-423,61
14	208 атомов Si, 792 атома Ge (Ge-Si-Ge_{5-5-5})	-383,79
15	400 атомов Ge, 600 атомов Si ($\text{Si-Ge-Si-Ge-Si}_{5-5-5}$)	-416,49
16	400 атомов Si, 600 атомов Ge ($\text{Ge-Si-Ge-Si-Ge}_{5-5-5}$)	-403,93

Анализ данных в таблице 2 показывает, что системы, состоящие из кремния, энергетически более устойчивы, чем системы, состоящие из германия. Внедрение атомов германия в кремниевые системы понижает термодинамическую стабильность частицы, в то время как внедрение атомов кремния в германиевые наночастицы повышает их устойчивость.

Появление в частице связей типа Si-Ge стабилизирует частицы из германия и дестабилизирует частицы из кремния.

Частицы, построенные по моделям 12 и 14, оказались вырожденными по энергии. Такой же эффект наблюдался в частицах, построенных по моделям 11 и 13.

В результате анализа радиальных функций распределения атомов в наночастицах, представленных в работе, показано, что распределение пиков в структурах с кремнием свидетельствует о незначительном отклонении атомов в наноэлектромеханической системе (НЭМС) от положений, характерных для алмазоподобной структуры на первой координационной сфере распределения атомов. Однако координационные сферы распределения атомов более высокого порядка в НЭМС расположены более плотно, чем в алмазоподобной решетке. Увеличение размера кластера до размеров 5-5-5 э.я. усложняет структуру распределения атомов кремния в НЭМС, что приводит к усложнению внешнего вида пиков.

Аналогичная ситуация происходит и с наночастицами, состоящими только из атомов германия. Пики, соответствующие первой координационной сфере германия в НЭМС, располагаются на расстоянии $5,1 a_0$. Для стартовой структуры в алмазоподобной системе распределения атомов это расстояние составляло $4,7 a_0$. Координационные сферы более высокого порядка не уплотняются при переходе к НЭМС, а лишь претерпевают характерные изменения. При увеличении размера наночастицы до 5-5-5 э.я. пик первой координационной сферы сохраняется, однако пики координационных сфер более высокого порядка сливаются в один широкий пик, что фактически приводит к их разрушению.

Введение в систему чистого полупроводника второго атома позволяет получить расщепленные пики первой координационной сферы. Появляются три типа пиков, которые соответствуют взаимодействию атомов одного сорта между собой и атомов разных сортов, что позволяет оценить долю взаимодействий между атомами одного сорта и атомами разных сортов при образовании НЭМС в системах с кремнием и германием в различных комбинационных вариантах. На рисунке 2 представлены радиальные функции распределения атомов в алмазоподобной структуре (а), структуре, состоящей из кремния (б) и из германия (в).

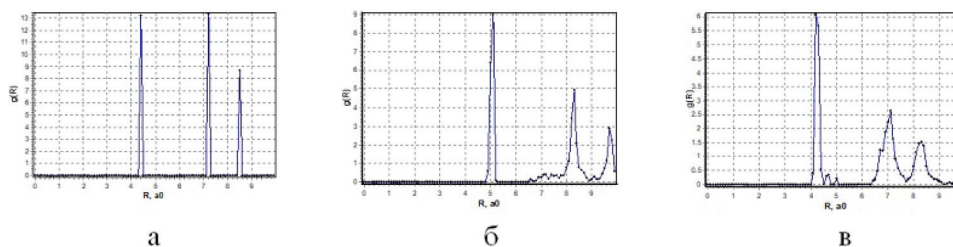


Рис. 2. Радиальная функция распределения атомов в структурах: а — алмазоподобная структура, б — структура размером 3-3-3 э.я. Si_{3-3-3} , в — структура размером 3-3-3 э.я. Ge_{3-3-3}

Заключение

В результате компьютерного моделирования наночастиц элементарных полупроводников было по-

строено 16 моделей различного состава: как моноэлементарные частицы, так и бинарные частицы различной нуклеарности и слоистости. Было пока-

зано незначительное изменение межатомного расстояния в полупроводниковых системах с алмазоподобной структурой и в НЭМС состоянии. Системы, состоящие из кремния, оказались энергетически более устойчивы, чем системы, состоящие из германия. Внедрение атомов германия в кремниевые системы

понижало термодинамическую стабильность частицы, в то время как внедрение атомов кремния в германиевые наночастицы повышает их устойчивость. Появление в частице связей типа Si-Ge стабилизирует частицы из германия и дестабилизирует частицы из кремния.

Библиографический список

1. Марков В.Ф., Мухамедзянов Х.Н., Маскаева Л.Н. *Материалы современной электроники*. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2014. 272 с.
2. Терентьева Ю.В. Физико-химические условия устойчивости легированных марганцем нанослоев арсенида галлия и его изоэлектронных аналогов : дисс. ...канд. физ.-мат. наук : 02.00.04. Барнаул, 2013. 138 с.
3. Кеслер В.Г. Взаимная диффузия в Ge_xSi_{1-x}/Si гетероструктурах, выращенных методом МЛЭ : дисс. ...канд. физ.-мат. наук : 01.04.10. Новосибирск, 2005. 218 с.
4. Лобанов Д.Н. Исследования особенностей роста и фотолюминесценции Ge(Si) самоформирующихся островков, выращенных на Si(001) подложках и напряженных $Si_{1-x}Ge_x$ слоях : дисс. ...канд. физ.-мат. наук : 01.04.07. Нижний Новгород, 2006. 159 с.
5. Карпенко Е.С., Курдюмов Н.Е., Хованова А.О. Свойства германия в макро- и наноструктурах // *Международный студенческий научный вестник*. 2018. №6. С. 183–188.
6. Каплунов И.А., Роголин В.Е. Оптические свойства и области применения германия в фотонике // *Фотоника*. 2019. Т. 13 № 1. С. 88–106. DOI: 10.22184/FRos.2019.13.1.88.106
7. Терентьева Ю.В., Белоусова Е.С., Безносюк С.А. Компьютерное моделирование наноструктур на основе кремния-германия // *Актуальные проблемы биофармации, материаловедения и химической биотехнологии : Региональная научно-практическая конференция молодых ученых, 20–27 апреля 2017 г.* Барнаул: АлтГУ, 2017. С. 120–125.
8. Терентьева Ю.В., Безносюк С.А., Белоусова Е.С. Компьютерное моделирование НЭМС твердых растворов кремния-германия // *Многоядерные процессоры, параллельное программирование, ПЛИС, системы обработки сигналов*. 2017. № 7. С. 143–149.
9. Barthelmy D. Germanium (Германий), структурный тип — diamond // *Кристаллографическая и кристаллохимическая база данных для минералов и их структурных аналогов www-Минкрис*. URL: http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/s_carta.php?GERMANIUM+1740 (дата обращения: 01.12. 2023).

References

1. Markov V.F., Muhamedzyanov H.N., Maskaeva L.N. *Materials of Modern Electronics*. Ekaterinburg: Ural University Press, 2014. 272 p. (In Russ.).
2. Terentyeva Yu.V. *Physicochemical Conditions for the Stability of Manganese-Doped Nanolayers of Gallium Arsenide and Its Isoelectronic Analogues*. Ph. D. thesis. Barnaul, 2013. 138 p. (In Russ.).
3. Kesler V.G. *Mutual Diffusion in Ge_xSi_{1-x}/Si Heterostructures Grown by MBE*. Ph. D. thesis. Novosibirsk, 2005. 218 p. (In Russ.).
4. Lobanov D.N. *Studies of the Growth and Photoluminescence Features of Ge(Si) Self-Forming Islands Grown on Si(001) Substrates and Strained $Si_{1-x}Ge_x$ Layers*. Ph. D. thesis. Nizhniy Novgorod, 2006. 159 p. (In Russ.).
5. Karpenko E.S., Kurdyumov N.E., Hovanova A.O. Properties of Germanium in Macro- and Nanostructures. *Mezhdunarodnyy Studencheskiy Nauchnyy Vestnik*, 2018. No 6. P. 183–188. (In Russ.).
6. Kaplunov I.A., Rogalin V.E. Optical Properties and Applications of Germanium in Photonics. *Fotonika*, 2019. Vol.13. No 1. P. 88–106. DOI: 10.22184/FRos.2019.13.1.88.106 (In Russ.).
7. Terentyeva Yu.V., Belousova E.S., Beznosyuk S.A. Computer Simulation of Nanostructures Based on Silicon-Germanium. *Current Problems of Biopharmacy, Materials Science and Chemical Biotechnology Regional Scientific and Practical Conference of Young Scientists, 20–27 April 2017*. Barnaul: Altai State University, 2017. P. 120–125. (In Russ.).
8. Terentyeva Yu.V., Beznosyuk S.A., Belousova E.S. NEMS Computer Simulation of Silicon-Germanium Solid Solutions. *Multi-core Processors, Parallel Programming, FPGAs, Signal Processing Systems*. 2017. No 7. P. 143–149. (In Russ.).
9. Barthelmy D. Germanium (Germanium), Structural Type — Diamond. *Crystallographic and Crystallochemical Database for Minerals and their Structural Analogues www-Mincrist*. URL: http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/s_carta.php?GERMANIUM+1740/(access date: 12.01.2023) (In Russ.).

Информация об авторах

Ю.В. Терентьева, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической и неорганической химии, Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия;

С.А. Безносюк, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической и неорганической химии, Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия.

Author information

Yu.V. Terentyeva, Candidate of Sciences in Physics and Mathematics, Associate Professor of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University, Barnaul, Russia;

S.A. Beznosyuk, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Professor, Head of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University, Barnaul, Russia.