

Рисунок 3 – SEM-изображение нанопровода и его EDX-спектр

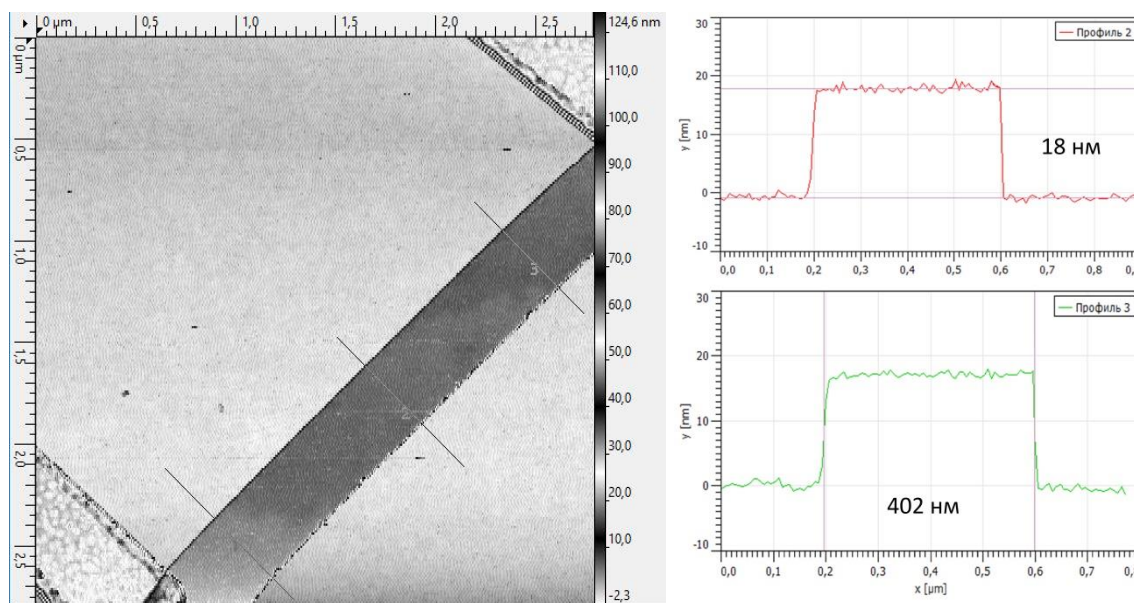


Рисунок 4 – AFM-изображение нанопровода и его профили

Список использованных источников:

1. Nowka, C. Catalyst-free growth of single crystalline Bi_2Se_3 nanostructures for quantum transport studies / C. Nowka et al. // *Crystal Growth & Design*. – 2015. – Т. 15. – №. 9. – P. 4272-4278.
2. Andzane, J. Catalyst-free vapour–solid technique for deposition of Bi_2Te_3 and Bi_2Se_3 nanowires/nanobelts with topological insulator properties / J. Andzane et al. // *Nanoscale*. – 2015. – Т. 7. – №. 38. – P. 15935-15944.

ВЛИЯНИЕ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ НА СТАБИЛЬНОСТЬ НАНОШНУРОВ КРЕМНИЯ

Самусевич И.С. Сафронов И.В

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь

Мигас Д. Б. – д-р физ.-мат. наук, профессор

Проведено исследование стабильности наношнуров кремния с ориентацией роста $\langle 111 \rangle$ и экспериментально наблюдаемой пилообразной морфологией в диапазоне диаметров 30 – 70 нм. Моделирование проводилось методом молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS. Установлено, что для рассмотренного диапазона диаметров, появление различных граней на поверхности не значительно влияет на стабильность наношнуров.

Рассмотрены кремниевые наношнуры с экспериментально наблюдаемой ориентацией роста $\langle 111 \rangle$ в диапазоне диаметров от 30 до 70 нм и различными морфологиями. Все структурные модели имеют кристаллическую структуру как у объёмного кремния, сечение усеченной пирамиды и характеризуются наличием $\{112\}$ и $\{011\}$ граней, которые параллельны оси наношнура [1]. Для граней $\{112\}$, чтобы избавиться от поверхностных атомов с двумя оборванными связями, проводили

димеризацию [1]. Также экспериментально установлено, что для данных нанощнуров возможно появление $\{111\}$ и $\{113\}$ граней на поверхности, которые не параллельны оси нанощнура и имеют так называемую пилообразную морфологию [2]. Действительно, принимая во внимание, что поверхностная энергия $\{112\}$ и $\{011\}$ граней достаточно большая по сравнению на пример с $\{001\}$, $\{111\}$ и $\{113\}$ гранями [1], то для уменьшения полной энергии системы (за счет понижения поверхностной энергии) не исключено появление пилообразной морфологии. Исследованию влияния пилообразной морфологии на стабильность $\langle 111 \rangle$ ориентированных кремниевых нанощнуров и посвящена данная работа.

Экспериментально установлено, что в рассмотренном диапазоне диаметров пилообразная морфология возникает за счет малых граней $\{112\}$ [2] (как показано на рисунке 1) принимая во внимание нанощнуры с сечением усеченной пирамиды (рисунок 2). Образующиеся «зубцы» представляют собой грани $\{113\}$ и $\{111\}$. Размер пилообразной области для различных диаметров варьируется от 8 до 14 нм [3].

Для получения равновесных структур использован метод молекулярной динамики, реализованный в программном пакете LAMMPS. Проводилась минимизация полной энергии с учетом оптимизации геометрии структуры. Использовались трехмерные периодические граничные условия с вакуумным зазором $\sim 20 \text{ \AA}$ в плоскости xy (поперечное сечение нанощнура), чтобы минимизировать возможное взаимодействие между соседними нанощнурами. После релаксации системы любая компонента силы, действующая на атом, оказалась менее $1 \times 10^{-6} \text{ эВ/\AA}$. Межатомное взаимодействие для системы описывалось с помощью потенциала Терсоффа.

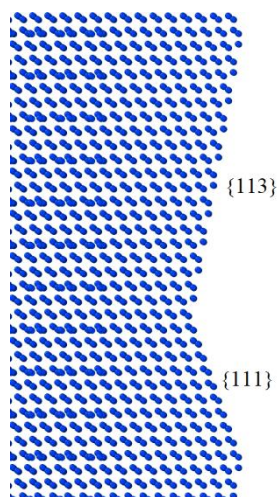


Рисунок 1 – Вид сбоку на пилообразную грань.

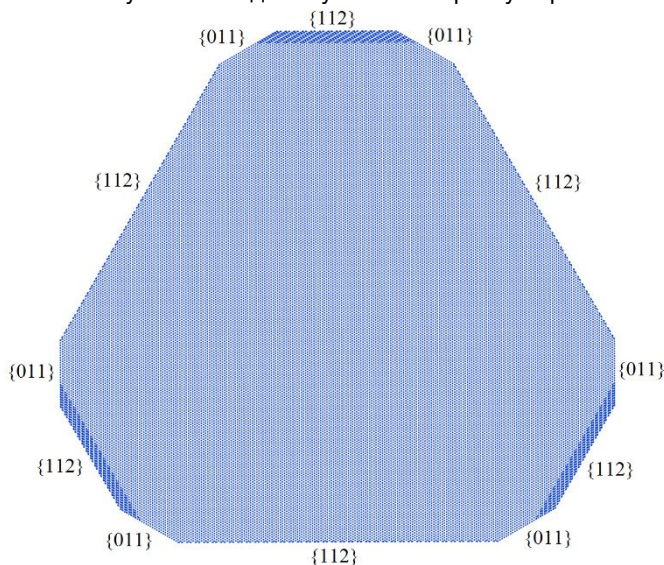


Рисунок 2 – Поперечное сечение нанощнура, где в место малых по размеру граней $\{112\}$ сформирована пилообразная морфология, включающая не параллельные оси нанощнура $\{111\}$ и $\{113\}$ грани (рисунок 1).

На рисунке 3 представлена как полная энергия кремниевых нанострунур меняется в зависимости от количества атомов (что также пропорционально диаметру). Очевидно, что с увеличением диаметра полная энергия нанострунура, приведенная на атом, стремится к значению в объемном материале. Это объясняется уменьшением влияния поверхностной энергии на полную энергию структуры. При меньших диаметрах вклад поверхностных атомов в полную энергию структуры более значителен [1]. В соответствии с полученными результатами не наблюдается значительной разницы по энергии для кремниевых нанострунур с различной морфологией. Появление пилообразной морфологии, наблюдаемой экспериментально, можно объяснить флуктуационной природой появления либо {112}, либо {113} и {111} граней во время роста.

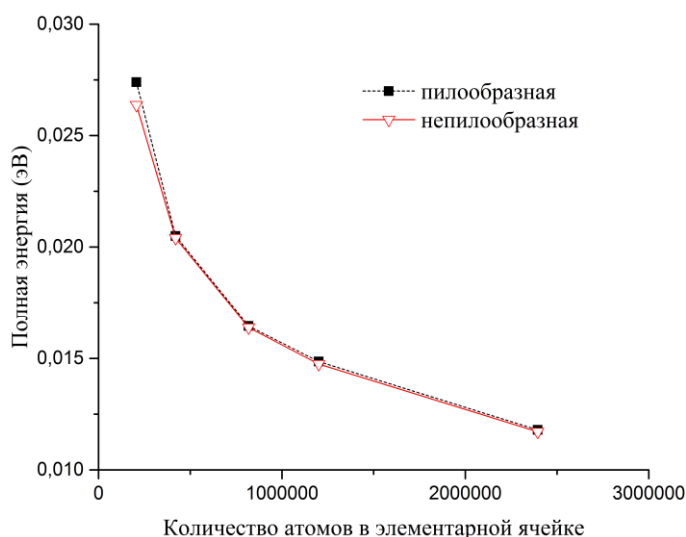


Рисунок 3 – Зависимость полных энергий кремниевых нанострунур с различной морфологией, приведенной на атом, от количества атомов в структуре. Ноль на шкале энергии соответствует полной энергии атома кремния в объеме.

Список использованных источников:

1. Revising morphology of <111>-oriented silicon and germanium nanowires / D. B. Migas, V. E. Borisenko, Rusli and C. Soci // Nano Convergence 2, 16 (2015).
2. Tao Xu, Faceted sidewalls of silicon nanowires: Au-induced structural reconstructions and electronic properties / Jean Philippe Nys, Ahmed Addad, Oleg I. Lebedev, Ana Urbieto, Billel Salhi, Maxime Berthe, Bruno Grandidier, Didier Stievenard // Physical review B 81, 115403 (2010)
3. F. M. Ross, Sawtooth Faceting in Silicon Nanowires / F. M. Ross, J. Tersoff, M. C. Reuter // Physical review letters 95, 146104 (2005)

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОТОКА В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ ТИТАНАТ БАРИЯ/ТИТАНАТ СТРОНЦИЯ

Крымский В.И.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
г. Минск, Республика Беларусь*

Гапоненко Н.В. – д-р физ.-мат. наук., профессор

Сформирована гетероструктура титанат бария/титанат стронция на подложке кремния. Пленка титаната бария формировалась золь-гель методом, пленка титаната стронция – ВЧ магнетронным распылением. Обсуждаются фотоэлектрофизические свойства гетероструктуры BaTiO₃/SrTiO₃. Обнаружены изменения ВАХ гетероструктуры при освещении галогенной лампой с интенсивностью 57 мВт/см² с цветовой температурой вольфрамовой нити накаливания 3123 °С.

Разработка технологии формирования пленок титаната бария и титаната стронция представляет интерес для формирования пленочных конденсаторов, мемристоров, варисторов, сенсоров и др. [1]. Пленки титаната бария и титаната стронция формируют методами химического осаждения из газовой фазы [2], молекулярно-лучевой эпитаксией, осаждением из жидкой фазы, импульсно-лазерным напылением, магнетронным напылением и золь-гель методом [3].