

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ ИНТЕРФЕЙСОВ НА ОСНОВЕ НАНОПЛЕНОК НИТРИДА ГАЛЛИЯ

Цель работы - проведение компьютерного эксперимента по моделированию устойчивости наноструктурных гетеропереходов: политип 6H-SiC(0001) – GaN(0001), политип 6H-SiC(000 $\bar{1}$) – GaN(000 $\bar{1}$);
рассчитать удельную энергию адгезии между нанопленкой нитрида галлия и подложкой карбида кремния.

Теоретическое введение

Тонкие пленки GaN получают по технологии гетероэпитаксиального роста с рассогласованием кристаллических решеток. К настоящему времени GaN выращивался на Al₂O₃ (сапфире), SiC (карбиде кремния), Si (111), GaAs (111), ZnO, LiAlO₂, LiGaO₂, MgAl₂O₄, ScAlMgO₄. Среди всех этих подложек чаще всего используют сапфир и карбид кремния вследствие их высокой термической и химической стабильности, плоской морфологии поверхности и доступности. Для выращивания гексагональной фазы GaN наилучшей подложкой с точки зрения близости параметров решетки и коэффициента термического расширения является SiC.

SiC – это широкозонный материал, который может кристаллизоваться как в виде кубической, так и в виде гексагональной структуры и проявляет политипизм. Наиболее часто встречаются гексагональные политипы 6H и 4H.

Для роста пленок GaN используют либо поверхность SiC (0001), пленки GaN в этом случае являются Ga-полярными, либо поверхность SiC(000 $\bar{1}$) – пленки N-полярные.

Параметром устойчивости гетероперехода GaN – SiC является удельная энергия адгезии, характеризующая силу связи между нанопленкой GaN и подложки для выращивания нанопленки SiC.

Исследование устойчивости интерфейсов проводится методом наискорейшего спуска по поверхности потенциальной энергии связи (ППЭС) атомов нанопленки, в их конфигурационном пространстве.

Расчет удельной энергии адгезии на связь между нанопленкой GaN и соответствующим контактным соединением ведут по следующей формуле:

$$E_{ад} = E_{общ} - E_{GaN} - E_{SiC} / N_{св},$$

где $E_{общ}$ – общая энергия двух слоев, E_{GaN} – энергия, приходящаяся на слой нитрида галлия, E_{SiC} – энергия, приходящаяся на слой подложки, $N_{св}$ – число связей между слоями.

Порядок выполнения работы:

1. Расчет параметров структуры **GaN**.

1) Запускаем программу **NanoEvolver**.

2) Загружаем структуру *File* → *Load structure...* → **GaN.hin**. При загрузке структуры рабочее окно остается пустым.

При появлении сообщения об ошибке необходимо открыть данный файл с помощью программы **Блокнот** и заменить все «,» на «.» (*Правка* → *Заменить* → *Что*, *Чем* . → *Заккрыть* → *Сохранить изменения*)

3) *View* → *Graph...*

В окне выбираем связь **N-Ga** и в поле «*exact value*» ставим радиус обрезания 4, нажимаем «*enter*» (в рабочем окне появляется граф). В поле «*maximium*» оставляем 10. Далее нажимаем «*ok*».

4) *Edit* → *Lock graph...* → *Yes* (сохранение полученного графа)

5) *Edit* → *Set parameters*

В поле «*step, a₀*» ставим 0,1, «*step count*» – 1000

Нажимаем «*Load parameters*», выбираем файл **GaN.txt** (предварительно заменив в нем запятые на точки)

6) *Edit* → *Evolve* (Оптимизация проводится 2-3 раза, пока не перестанет изменяться общая энергия системы в появившемся окне)

7) Когда оптимизация будет завершена *File* → *Save report as...* → **GaN.htm** (сохранение данных по энергии)

2. Расчет параметров структуры **SiC**.

1) Запускаем программу **NanoEvolver**.

2) Загружаем структуру *File* → *Load structure...* → **SiC.hin**. При загрузке структуры рабочее окно остается пустым.

При появлении сообщения об ошибке необходимо открыть данный файл с помощью программы **Блокнот** и заменить все «,» на «.» (*Правка* → *Заменить* → *Что, Чем.* → *Заккрыть* → *Сохранить изменения*)

3) *View* → *Graph...*

В окне выбираем связь **C-Si** и в поле «*exact value*» ставим радиус обрезания 4, нажимаем «*enter*» (в рабочем окне появляется граф). В поле «*maximum*» оставляем 10. Далее нажимаем «*ok*».

4) *Edit* → *Lock graph...* → *Yes* (сохранение полученного графа)

5) *Edit* → *Set parameters*

В поле «*step, a₀*» ставим 0,1, «*step count*» – 1000

Нажимаем «*Load parameters*», выбираем файл **SiC.txt** (предварительно заменив в нем запятые на точки)

6) *Edit* → *Evolve* (Оптимизация проводится 2-3 раза, пока не перестанет изменяться общая энергия системы в появившемся окне)

7) Когда оптимизация будет завершена *File* → *Save report as...* → **SiC.htm** (сохранение данных по энергии)

3. Расчет параметров структуры **GaN+SiC (Si-N)**

1) Запускаем программу **NanoEvolver**.

2) Загружаем структуру *File* → *Load structure...* → **GaN+SiC (Si-N).hin**.

При загрузке структуры рабочее окно остается пустым. При появлении сообщения об ошибке

необходимо открыть данный файл с помощью программы **Блокнот** и заменить все «,» на «.» (*Правка* → *Заменить* → *Что, Чем.* → *Заккрыть* → *Сохранить изменения*)

3) *View* → *Graph...*

В окне выбираем связь **C-Si** и в поле «*exact value*» ставим радиус обрезания 4, нажимаем «*enter*» (в рабочем окне появляется граф). То же самое повторяем для связей **N-Ga** (радиус обрезания 4) и **N-Si** (радиус обрезания 6). В поле «*maximum*» оставляем 10. Далее нажимаем «*ok*».

4) *Edit* → *Lock graph...* → *Yes* (сохранение полученного графа)

5) *Edit* → *Set parameters*

В поле «*step, a₀*» ставим 0,1, «*step count*» – 1000

Нажимаем «*Load parameters*», выбираем файл **CSi+NGa.txt** (предварительно заменив в нем запятые на точки)

6) *Edit* → *Evolve* (Оптимизация проводится 2-3 раза, пока не перестанет изменяться общая энергия системы в появившемся окне)

7) Когда оптимизация будет завершена *File* → *Save report as...* → **GaN+SiC (Si-N).htm** (сохранение данных по энергии)

4. Расчет параметров структуры **GaN+SiC (Ga-C)**

1) Запускаем программу **NanoEvolver**.

2) Загружаем структуру *File* → *Load structure...* → **GaN+SiC (Ga-C).hin**.

При загрузке структуры рабочее окно остается пустым. При появлении сообщения об ошибке

необходимо открыть данный файл с помощью программы **Блокнот** и заменить все «,» на «.» (*Правка* → *Заменить* → *Что, Чем.* → *Заккрыть* → *Сохранить изменения*)

3) *View* → *Graph...*

В окне выбираем связь **C-Si** и в поле «*exact value*» ставим радиус обрезания 4, нажимаем «*enter*» (в рабочем окне появляется граф). То же самое повторяем для связей **N-Ga** (радиус обрезания 4) и **C-Ga** (радиус обрезания 7). В поле «*maximum*» оставляем 10. Далее нажимаем «*ok*».

4) *Edit* → *Lock graph...* → *Yes* (сохранение полученного графа)

5) *Edit* → *Set parameters*

В поле «*step, a₀*» ставим 0,1, «*step count*» – 1000

Нажимаем «*Load parameters*», выбираем файл **SiC+GaN.txt** (предварительно заменив в нем запятые на точки)

б) *Edit* → *Evolve* (Оптимизация проводится 2-3 раза до тех пор, пока не перестанет изменяться общая энергия системы в появившемся окне)

7) Когда оптимизация будет завершена *File* → *Save report as...* → **GaN+SiC (Ga-C).htm** (сохранение данных по энергии)

Рекомендации по оформлению отчета.

Название работы

Цель работы:

Заполните таблицу

Моделируемая структура	Изображение	Величина полной энергии связей

На основании отчетов программы рассчитываем удельную энергию адгезии по формуле:

$$E_{ад} = E_{общ} - E_{GaN} - E_{SiC} / N_{св}$$

В случае первой структуры $N_{св}$ соответствует числу Si-N связей, в случае второй структуры – числу Ga-C связей.

Сравните полученные энергии и сделайте выводы.