

УДК 517.958:535+537.812

РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА В МОДЕЛЯХ КЛАСТЕРНОГО РОСТА

А. В. Можаяев¹, А. В. Проказников²

Исследуется задача расчета потенциала в трехмерных компьютерных моделях кластерного роста с изменяющейся границей потенциального поля. Сформулирована непрерывная краевая задача. Разработан эффективный алгоритм вычисления потенциала.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, потенциальное поле, случайное блуждание, формирование кластеров.

1. Введение. В последние годы в областях, связанных с современной микроэлектроникой, значительно возрос интерес к исследованиям структур с пониженной размерностью, проявляющих ряд необычных свойств, которыми не обладает исходный материал. Простейшими возможностями создания такого рода структур с пониженной размерностью являются анодирование полупроводника в режиме порообразования или его химическая обработка в специальных составах, приводящие к формированию пористого пространства, которое включает в себя кластеры квантовых размеров. Процессы формирования структур пониженной размерности тесным образом связаны с явлениями, описываемыми случайными блужданиями различных физических объектов. Явления случайного блуждания в трехмерном пространстве [1], когда частицы формируют кластеры в определенных местах, представляют интерес как с точки зрения изучения общих свойств образования кластеров, так и в плане практического применения. Процессы формирования кластеров изучаются в настоящее время в рамках моделей с ограниченной диффузией агрегации [2, 3].

Важной для исследования является задача, когда помимо случайного блуждания имеет место движение в выделенном направлении, обусловленное приложенным внешним полем. В частности, подобная ситуация имеет место при формировании как кластеров, так и сплошных слоев при осаждении металлов из растворов солей, а также при кластеризации ионно-синтезированных структур в ходе отжига. Как показывает эксперимент, физические свойства кластеров зависят от условий их формирования [4, 5], поэтому вызывает интерес более детальное изучение воздействия различных параметров на свойства как пористых, так и созданных на их основе металлических кластеров, прежде всего на их рост и размер. Подобный интерес диктуется стремлением создать объекты нанометровых размеров с заданными свойствами. Для практического приложения подобных процессов очень важным является этап математического моделирования с целью выяснения основных закономерностей изучаемых процессов. Важной частью исследуемой модели является расчет электрических полей в ограниченном пространстве, что и является предметом исследования данной работы.

2. Описание физического эксперимента и математической модели. Пусть пластинка кремния толщиной порядка 0.4–0.5 мм является дном сосуда, в котором находится плавиковая кислота. В кислоту помещается платиновый катод, а нижняя поверхность пластинки кремния соединяется с анодом; таким образом, внутри кремния создается постоянное напряжение. Под воздействием напряжения и химических реакций, протекающих на границе кремния и плавиковой кислоты, происходит травление кремния (анодирование) с образованием пористого пространства внутри него. При моделировании кремний рассматривается как прямоугольный параллелепипед Γ , который разбивается сеткой на трехмерные клетки (кубы). Каждая клетка может находиться в одном из двух состояний — протравленном (образовалась пустота) и непротравленном.

Образование пустот (пор) происходит под воздействием заряженных частиц, движение которых образует электрический ток внутри кремния. Для моделирования движения этих заряженных частиц необходимо знать величину потенциала в каждой клетке модели. Сложность заключается в том, что область постоянного потенциала (граница кремния и плавиковой кислоты) меняет свою форму при образовании пор, поэтому расчет потенциала в таких моделях не является тривиальной задачей.

¹ Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова, физический факультет, ул. Советская, д. 14, 150000, г. Ярославль; аспирант, e-mail: lxmzhv@gmail.com

² Ярославский филиал физико-технологического института РАН, ул. Университетская, 21, 150007, г. Ярославль; вед. научн. сотр., e-mail: prokaznikov@mail.ru

3. Постановка математической задачи. Для математической постановки задачи необходимо ввести некоторые обозначения. Электростатическое поле характеризуется двумя величинами: потенциалом $\phi(x, y, z)$ и напряженностью $\mathbf{E}(x, y, z)$. Потенциал является скалярной характеристикой поля, когда каждой точке поля сопоставляется число. В нашем случае рассматривается электрическое поле внутри полупроводникового кристалла кремния, которое изменяется в ходе физико-химических процессов. Напряженность является векторной характеристикой потенциального поля и определяет силу, действующую на единичный положительный заряд. В каждый отдельный момент времени (такт) электрическое поле является постоянным, поэтому потенциал поля удовлетворяет уравнению Пуассона $\Delta\phi = -4\pi\rho$, где $\rho = \rho(x, y, z)$ — плотность свободного заряда [6]. В физическом эксперименте воздействие блуждающих внутри кремния частиц на электрическое поле несущественно и плотность $\rho(x, y, z)$ является величиной порядка единицы, которой можно пренебречь; и для внутренних областей кремния это уравнение примет вид

$$\Delta\phi = 0. \quad (1)$$

Напряженность электрического поля выражается через потенциал: $\mathbf{E} = -\text{grad } \phi$. В физическом эксперименте при разных значениях напряжения получаются различные пористые структуры [7], поэтому потенциал ϕ_0 на верхней поверхности кремния является параметром модели, в то время как потенциал на нижней поверхности полагается равным нулю, поскольку важна именно разность потенциалов, а не абсолютное его значение. Нижняя поверхность кремния плоская, поэтому равенство потенциала нулю на этой поверхности можно выразить следующим образом: $\phi(x, y, z_{\max}) \equiv 0$, где $z_{\max}$ — это толщина пластинки кремния (в модели это расстояние между верхней и нижней поверхностями). Верхняя же граница кремния, на которой потенциал остается равен заданному значению ϕ_0 , изменяется в ходе процесса травления кремния, поэтому второе условие будет выглядеть несколько сложнее: $\phi(x, y, z) = \phi_0$ для всех $(x, y, z) \in \Psi$, где Ψ — граница между непротравленной областью кремния и протравленной областью кремния, в которой произошли химические реакции и кристаллическая решетка кремния была разрушена, т.е. образовалась пора. Однако до начала процесса травления кремния данная граница также является плоской, поэтому до образования пор это условие можно записать следующим образом: $\phi(x, y, 0) \equiv \phi_0$. Зная величину потенциала на верхней и нижней границах кремния, необходимо рассчитать потенциал внутри него.

Рассмотрим состояние системы до образования пор. Поскольку в моделируемом эксперименте толщина пластинки кремния много меньше, чем ее ширина, то изначально распределение потенциала в нашей задаче будет эквивалентно распределению потенциала в пространстве между двумя пластинками конденсатора. Последняя задача хорошо изучена, и известно, что в данном случае электрическое поле можно считать однородным [6], при этом напряженность поля одинакова во всем объеме и направлена от плоскости с большим потенциалом к плоскости с меньшим потенциалом. Таким образом, до образования пор вектор напряженности имеет вид

$$\mathbf{E}_0 = \left(0, 0, \frac{\phi_0}{z_{\max}}\right). \quad (2)$$

Это означает, что изначально потенциал линейно убывает по направлению от верхней поверхности кремния к нижней. Образование же поры изменяет потенциальное поле, так как при этом изменяется область постоянного потенциала (поверхность Ψ). Если при расчете потенциала исходить из формулы (1), то для этого потребуются знать потенциал на всей границе интересующей нас области. Последняя представляет собой часть параллелепипеда Γ , из которого исключена протравленная область. Нам известно значение потенциала на верхней и нижней поверхностях кремния, а для боковых границ, которые являются гранями параллелепипеда Γ , можно сделать допущение, что потенциал на них изменяется линейно относительно координаты z , т.е. согласно формуле (2). Это можно сделать, поскольку толщина пластинки кремния мала по сравнению с ее шириной и поэтому данное допущение почти не влияет на процесс порообразования вдали от боковых границ кремния. Таким образом, нам известно значение потенциала на всей границе исследуемой области, что позволяет поставить следующую краевую задачу:

$$\Delta\phi(x, y, z) = 0 \quad \phi(x, y, z) = \begin{cases} \phi_0, & \text{для всех } (x, y, z) \in \Psi, \\ \phi_0 \left(1 - \frac{z}{z_{\max}}\right) & \text{для всех } (x, y, z) \in \partial\Gamma \setminus \Psi_0, \end{cases} \quad (3)$$

где $\partial\Gamma$ — граница параллелепипеда Γ и Ψ_0 — верхняя грань Γ , т.е. часть плоскости $(x, y, 0)$.

Решить эту задачу аналитически невозможно, так как область Ψ не имеет аналитического представления, поэтому решать поставленную краевую задачу следует численно. Однако при ее решении разностными методами при достаточно густых сетках возникают системы линейных уравнений, решение которых требует значительных вычислительных ресурсов. Поэтому авторами был разработан специальный эффективный алгоритм решения задачи (3).

4. Эффективный алгоритм вычисления потенциала. Потенциальное поле есть следствие присутствия в пространстве электрического заряда, поэтому когда мы говорим, что поле изменяется из-за наполнения поры электролитом, это означает, что пора наполняется зарядом, который влияет на электрическое поле вокруг себя. Электрическое поле удовлетворяет принципу суперпозиции: электрическое поле системы зарядов является суммой полей отдельных зарядов. Поэтому при добавлении в систему нового заряда достаточно сложить создаваемый этим зарядом потенциал с уже существующим потенциалом. Следовательно, мы можем отслеживать только изменения потенциала, а не пересчитывать его полностью. Из уравнения (2) следует, что потенциал внутри кремния до образования пор имеет вид $\phi(x, y, z) = \phi_0 \left(1 - \frac{z}{z_{\max}}\right)$ для всех $(x, y, z) \in \Gamma$. Для непосредственных вычислений удобнее использовать следующую формулу:

$$\phi_i = \phi_0 \frac{n - i + 1/2}{n}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4)$$

где n — количество слоев клеток по высоте, i — порядковый номер слоя клеток (1 — верхний слой, n — нижний) и ϕ_i — потенциал в i -м слое клеток.

На начальном этапе заполняется трехмерная вещественная матрица значений потенциала в центре каждой клетки модели согласно формуле (4). Когда образуется пора, в систему добавляется вклад от потенциала точечного заряда: $\phi_r(x, y, z) = kq \frac{1}{r(x, y, z)}$, где $\frac{1}{r(x, y, z)}$ — фундаментальное решение уравнения Лапласа в пространстве [8]; $r(x, y, z)$ — расстояние от добавленного к кластеру заряда q до точки с координатами (x, y, z) ; k — коэффициент, значение которого зависит от используемой системы единиц измерения: $k = 1$ (СГС), $k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}$ (СИ), ϵ_0 — диэлектрическая

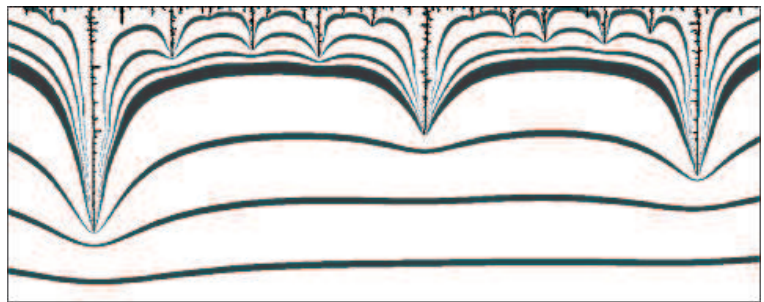


Рис. 1. Двумерная кластерная структура модели размером 1280×500 и распределение потенциала в виде эквипотенциальных линий, полученные компьютерным моделированием

проницаемость вакуума ($\epsilon_0 \approx 8.85 \times 10^{-12}$ Ф/м). В соответствии с данной формулой модифицируются все элементы матрицы потенциалов, что не требует больших затрат ни по памяти, ни по процессорному времени. Таким образом, на каждом шаге нам известно значение потенциала в каждой клетке модели, и это решает поставленную задачу. Результаты проведенного моделирования физической системы с учетом распределения электрического потенциала представлены на рис. 1 и 2 (см. также [9]).

5. Заключение. В заключение отметим, что приложенное внешнее электрическое поле позволяет эффективно управлять процессами формирования кластеров. Алгоритм случайных блужданий, на который накладывается воздействие внешних полей, является достаточно универсальным алгоритмом, имеющим базовое значение для широкого спектра физических и математических проблем. Кластеры, в основе формирования которых лежат стохастические процессы случайных блужданий, имеют, как правило, достаточно ветвящийся вид. Отметим также, что нами разработана динамическая дискретная компьютерная модель процессов формирования трехмерного пористого пространства в полупроводниковых кристаллах при анодировании в химически активных средах.

Рассмотренный в настоящей работе алгоритм вычисления приложенного к системе электрического потенциала является достаточно оптимальным с точки зрения реализации на современных персональных компьютерах. Этот алгоритм входит в созданный пакет программ, осуществляющих компьютерное трехмерное моделирование процессов образования кластеров в глубине полупроводниковых кристаллов с учетом процессов, происходящих на поверхности, а также химических реакций, сопровождающих яв-

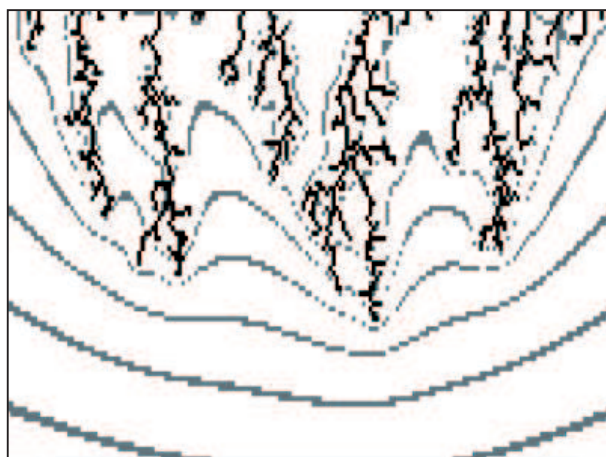


Рис. 2. Двумерная кластерная структура модели размером 200×160 и распределение потенциала в виде эквипотенциальных линий, полученные компьютерным моделированием

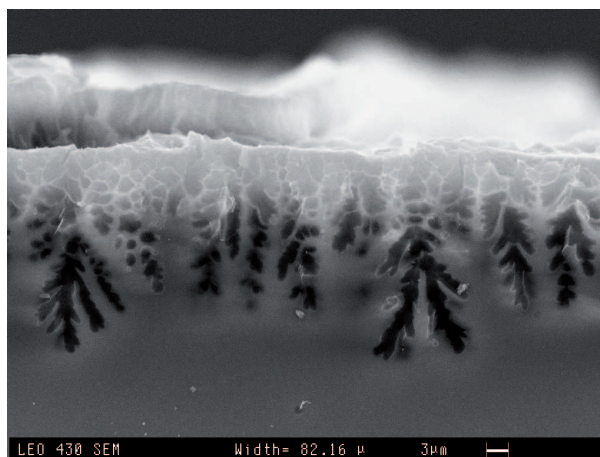


Рис. 3. Поперечный скол экспериментально полученной структуры пористого кремния, сформированного путем анодирования кремниевой пластины в растворах плавиковой кислоты

ления порообразования. В основе разработанного подхода лежат достаточно универсальные алгоритмы случайного блуждания, которые являются основой целого ряда процессов в различных областях физики и математики. Фрактальная размерность пористых структур, сформированных на основании разработанной модели, как правило, не превышала значения 2.39. Полученные результаты могут быть распространены на ряд других физических процессов, в основе которых лежат аналогичные закономерности. Типичная структура, получаемая при анодировании кремния в растворе плавиковой кислоты, представлена на рис. 3.

Результаты работы могут быть использованы при анализе эффектов анизотропного травления, приводящего к формированию кластеров различного размера [10], в том числе и нанометровых масштабов. В сочетании с различными технологиями электроосаждения результаты могут найти применение также при создании перспективных наноматериалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990.
2. Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991.
3. Пьетронеро Л., Тозатти Э. Фракталы в физике. М.: Мир, 1988.
4. Nallet P., Chassaing E., Walls M.G., Hytch M.J. Interface characterization in electrodeposited Cu-Co multilayers // J. Appl. Phys. 1996. **79**, N 9. 6884–6889.
5. Aravamudhan S., Luongo K., Poddar P., Srikanth H., Bhatsali S. Porous silicon templates for electrodeposition of nanostructures // Appl. Physics A. 2007. **83**. 773–780.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Краткий курс теоретической физики. Т. 1. М.: Наука, 1969.
7. Бучин Э.Ю., Проказников А.В. Закономерности образования пор различной морфологии // Микроэлектроника. 1998. **27**, вып. 2. 107–113.
8. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972.
9. Можсаев А.В., Бучин Э.Ю., Проказников А.В. Динамическая модель формирования трехмерных кластеров // Письма в Журн. технич. физики. 2008. **34**, вып. 10. 53–60.
10. Bisi O., Osicini S., Pavesi L. Porous silicon: a quantum sponge structure for silicon based electronics // Surf. Sci. Reports. 2000. **38**. 1–126.

Поступила в редакцию
27.10.2008