

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения  
Российской академии наук

# **МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ**

**Перспективные материалы  
с иерархической структурой  
для новых технологий  
и надежных конструкций**

**19 - 23 сентября 2016 г.**

**Томск, Россия**

**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА  
ПОЛУПРОВОДНИК  $A^{III}B^V$ /СОБСТВЕННЫЙ ОКСИД  
С НИЗКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ИНТЕРФЕЙСНЫХ СОСТОЯНИЙ**

Бакулин А.В.<sup>1,2</sup>, Кулькова С.Е.<sup>1,2</sup>, Аксенов М.С.<sup>3</sup>, Валишева Н.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,

<sup>2</sup>НИ Томский государственный университет, Томск, Россия

<sup>3</sup>Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск, Россия

bakulin@ispms.tsc.ru

Полупроводники элементов третьей и пятой группы  $A^{III}B^V$  такие как InAs и GaAs, а также их квазибинарные соединения  $In_xGa_{(1-x)}As$  благодаря высокой подвижности носителей заряда и прямозонной структуре являются перспективными материалами для практических приложений. Однако, на границе раздела  $A^{III}B^V$ /собственный оксид имеется достаточно высокая плотность интерфейсных состояний в запрещенной зоне. При создании приборных структур на основе полупроводников  $A^{III}B^V$  активно используются различные технологии модификации поверхности, которые призваны обеспечить низкую плотность электронных состояний на границах раздела полупроводника с диэлектриком. Одним из способов модификации поверхности полупроводников при создании таких структур является контролируемый рост фторсодержащих анодных оксидных слоев (ФАОС) в различных жидких и газовых средах. Для InAs это обеспечивает низкую плотность состояний ( $<5 \cdot 10^{10}$  эВ<sup>-1</sup>см<sup>-2</sup> при 77К) в случае границ раздела ФАОС/InAs(111)А. Анализ фазового состава и морфологии ФАОС показывает, что хорошо упорядоченная переходная область на границе раздела с полупроводником состоит из фторидов и оксифторидов элементов полупроводника, с образованием которых и связывают устранение электронных состояний в запрещенной зоне. В настоящее время для понимания микроскопических механизмов появления/устранения интерфейсных состояний активно используется моделирование в рамках теории функционала плотности, которое позволяет детально исследовать электронное строение и химическую связь на границах раздела.

В настоящей работе методом проекционных присоединенных волн с использованием обобщенного градиентного приближения для обменно-корреляционного функционала и метода гибридных функционалов изучена адсорбция кислорода и фтора, а также их коадсорбция на нереконструированной  $A^{III}B^V(111)A-(1 \times 1)$  поверхности полупроводников InAs и GaAs. Показано, что на нереконструированной  $A^{III}B^V(111)-(1 \times 1)$  поверхности энергия связи кислорода на 0.82 эВ (InAs) и 0.23 эВ (GaAs) выше, чем атома фтора. Установлено, что адсорбция фтора в энергетически предпочтительной позиции над поверхностным катионом приводит к удалению поверхностного состояния, закрепляющего уровень Ферми на нереконструированной поверхности. Адсорбция кислорода на  $(1 \times 1)$  поверхности индуцирует появление дополнительных состояний в запрещенной зоне, структура которых зависит от позиции кислорода на поверхности. Обсуждается влияние коадсорбции фтора и кислорода, а также концентрации фтора на поверхностные состояния в запрещенной зоне InAs(111)-(1×1). Показано, что поверхностные состояния, индуцированные адсорбцией кислорода, полностью или частично удаляются фтором из запрещенной зоны, если он образует связи с атомами индия, вовлеченными во взаимодействие с кислородом. При увеличении концентрации фтора наблюдаются значительные структурные изменения в приповерхностных слоях за счет проникновения в них как кислорода, так и атомов фтора, что приводит к значительному увеличению межатомного расстояния между атомами подложки, разрыву In-As связей, а также к формированию связей кислорода и фтора с мышьяком. Увеличение концентрации фтора свыше трех атомов на поверхностную  $(1 \times 1)$  ячейку приводит к

#### 4. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

появлению дополнительных состояний в щели, вследствие их опустошения вблизи вершины валентной зоны и зарядового переноса к электроотрицательным адсорбатам.

Расчеты электронной структуры показали, что использование гибридного HSE06 функционала увеличивает ширину запрещенной зоны полупроводника, что принципиально для узкозонного InAs. Хотя выявленные тенденции в поведении адсорбатов на двух полупроводниковых поверхностях, полученные в рамках стандартного PAW-GGA подхода, остаются справедливыми в HSE06 подходе, но использование последнего необходимо для лучшего понимания поведения состояний вблизи края запрещенной зоны при адсорбции.

Работа выполнена в рамках проектов РФФИ № 13-02-98017p\_a и № 14-29-08124a.

#### **ФОРМИРОВАНИЕ ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЫ МЕЖДУ МАТРИЦЕЙ И ВКЛЮЧЕНИЕМ В ПРОЦЕССЕ ИЗГОТОВЛЕНИЯ КОМПОЗИТА**

Анисимова М.А.<sup>1</sup>, Князева А.Г.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> НИ Томский политехнический университет, Томск, Россия,

<sup>2</sup> Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия  
anisimova\_mawa@mail.ru, anna-knyazeva@mail.ru

В настоящее время все чаще используются композиционные материалы, усиленные алмазными частицами. Они широко используются для управления температурным режимом электронных компонентов. Поскольку выходная мощность электронных устройств становится все выше, они генерируют больше тепла. Рабочая температура совместно с возникающими термическими напряжениями ограничивает надежность электронных деталей и требует новых материалов с высокой тепловой и электрической проводимостью и низким коэффициентом теплового расширения. К таким материалам как раз относятся композиты с металлической матрицей и алмазными включениями. Для улучшения контакта между матрицей и частицами на последние предварительно наносят покрытие, которое существенно влияет на эффективные свойства композита [1, 2].

Особый интерес представляют процессы на границе раздела фаз, определение физико-механических свойств и характеристик полученного материала. В процессе кристаллизации между матрицей и включением образуется переходный слой с новым химическим составом. Толщина данного слоя оказывает существенное влияние на свойства всего композита [3].

В данной работе мы численно проанализировали сферически симметричную задачу о формировании переходной зоны между частицей с покрытием и матрицей. Модель учитывает диффузию и формирование фаз в переходной зоне. Цель работы состоит в том, чтобы изучить влияние технологических параметров процесса изготовления композита на толщину и состав этой зоны.

#### **Литература:**

- 1 Yang, B., Yu, J., Chen, C. Microstructure and thermal expansion of Ti coated diamond/Al composites // Trans. Nonferrous Met. Soc. China 19 (2009), p. 1167-1173.
- 2 M. Anisimova, A. Knyazeva, I. Sevostianov Effective thermal properties of an aluminum matrix composite with coated diamond inhomogeneities // International Journal of Engineering Science 106 (2016), p. 142–154.
- 3 Johnson, W. B., Sonuparlak, B. Diamond/Al metal matrix composites formed by the pressureless metal infiltration process // J. Mater. Res. 8 (5) (1993), p. 1169-1173.