

На правах рукописи



Ли Кю Ко

**ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ФОРМИРОВАНИЯ МАГНЕТРОННЫХ
НАНОРАЗМЕРНЫХ ПЛЕНОК ИЗ АЛЮМИНИЯ НА ПОВЕРХНОСТИ
СИТАЛЛА**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Курск – 2020

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Юго-Западный государственный университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор,
Заводинский Виктор Григорьевич

Официальные оппоненты: **Вахрушев Александр Васильевич**,
доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры «Тепловые двигатели и установки», заведующий отделом «Моделирование и синтез технологических структур», федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение науки Институт механики УдмФИЦ УрО РАН (г. Ижевск)

Коротковский Вадим Игоревич,
кандидат физико-математических наук, доцент
кафедры химии, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Курский государственный университет» (г. Курск)

Ведущая организация: государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН (г. Владивосток)

Защита диссертации состоится «10» декабря 2020 г. в 16-00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.105.04 при Юго-Западном государственном университете по адресу: 305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на официальном сайте федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Юго-Западный государственный университет»
<https://www.swsu.ru>

Автореферат разослан « 02 » ноября 2020 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета Д 212.105.04,
к.ф. - м.н., доцент

Кочура Алексей Вячеславович



ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Среди физических методов магнетронное распыление и термическое испарение известны как два наиболее распространенных. Самые ранние эксперименты с использованием этих методов были проведены еще в середине девятнадцатого века [1, 2]. Вплоть до конца 1960-х годов термическое испарение было предпочтительным методом осаждения пленок. Недостатком методов термического испарения является образование микроскопических капель при интенсивном нагреве испаряемого материала. Методы термического испарения характеризуются более высокими скоростями осаждения пленок, меньшими энергозатратами и более простой реализацией в сравнении методом магнетронного распыления. В то же время метод магнетронного распыления позволяет изготавливать более качественные пленки, но из-за технологических сложностей реализации этот метод развивался значительно медленнее. Актуальность изучения тонких металлических нанопленок в настоящее время заключается в том, что они применяются в различных устройствах микроэлектронной техники. В частности, металлические нанопленки являются основным элементом химических и биологических сенсоров на тонкопленочных структурах, тонкопленочных транзисторов, нанокатализаторов для топливных элементов, изолированных кластеров и наночастиц.

Объектом исследования является рост магнетронной металлической нанопленки алюминия Al, нанесённой на поверхность ситалла, который является керамическим материалом, содержащим 60.5% SiO₂, 13.5% Al₂O₃, 8.5% CaO, 7.5% MgO и 10.5% TiO₂. Например, в работе [3] отмечено, что алюминий на кристалле WSe₂ не растет эпитаксиально, подобно тому, как это происходит со многими другими металлами. Это объясняется тем, что алюминий способен формировать сильные химические связи с селеном и становится малоподвижным. Примерно так же, на поверхности SiO₂ алюминий образует слой своего оксида Al₂O₃ [4, 5]. Характерно, что примерно так же ведут себя на поверхности диоксида кремния атомы железа [6] и молибдена [7]. Активное связывание алюминия с атомами кислорода происходит в тех случаях, когда одновременно с кислородом в системе присутствуют азот и углерод [8]. С чистым же кремнием алюминий реагирует как допант [9]. В то же время на поверхности кристалла NaCl алюминий растет эпитаксиально, что характерно и для многих других металлов, в частности, Ni, Cu, Ag, Au [10].

Существующий уровень разработанности темы исследования свидетельствует о том, что теоретическое исследование малых однородных металлических кластеров (Me_n) вызывает значительный интерес в связи с возможностью их использования в качестве катализаторов различных

химических процессов. Одним из активно используемых методов создания таких слоев является метод магнетронного распыления. В этой связи установление закономерностей формирования и взаимосвязей микро- и наноструктурных особенностей металлических нанопленок в зависимости от режимов и параметров магнетронного распыления, получаемых с использованием современных аналитических методов, их анализ с учетом достижений физики конденсированного состояния, их сопоставление с результатами первопринципных расчетов в рамках теории функционала электронной плотности, энергии адгезии атомов и кластеров, к примеру, алюминия на поверхности монокристаллического алюминия, свидетельствуют об их как фундаментальном, так и практическом значении.

Объектом исследования являются экспериментальное и теоретическое исследование (вычислительный эксперимент) магнетронной металлической нанопленки алюминия Al, нанесённой на поверхность ситалла.

Цель диссертационной работы

Целью работы является анализ формирования алюминиевых магнетронных нанопленок и компьютерное моделирование их роста из первых принципов.

Для достижения поставленной цели были решены задачи:

1. Провести литературный обзор исследований в области микроскопического описания процессов, происходящих в магнетроне при образовании пленки на подложке – кластеризации, взаимодействия кластеров друг с другом, взаимодействия кластеров с поверхностью подложки, возникновения пленки на подложке, формирования пленки.
2. Получить методом магнетронного распыления на подложках типа ситалл металлические нанопленки из алюминиевой мишени;
3. Освоить современные методики для исследования морфологических особенностей металлических магнетронных нанопленок;
4. Исследовать свойства и особенности получаемых магнетронных металлических нанопленок;
5. Провести моделирование структуризации магнетронной пленки;
6. Провести характеризацию структуры и свойств металлических нанопленок.

Методология и методы исследования

В экспериментальной части диссертации в качестве подложки, на которой исследуется рост пленки алюминия, использован ситалл, который является керамическим материалом, содержащим 60.5% SiO₂, 13.5% Al₂O₃, 8.5% CaO, 7.5% MgO и 10.5% TiO₂. Исследовать теоретически поведение атомов алюминия на поверхности такого сложного материала не представляется возможным, поэтому мы ограничились моделированием

роста алюминия на поверхности оксида кремния, который составляет большую часть ситалла, при этом для простоты в качестве оксида кремния был взят кристаллический кварц в форме кристобалита. Проведены их комплексные исследования с использованием методов атомно-силовой микроскопии (АСМ). Численные расчеты были выполнены с использованием кода AVINIT. Псевдопотенциалы конструировались с помощью пакета FHI98PP. Обменно-корреляционное взаимодействие учитывалось в обобщенно-градиентном приближении (GGA) [11, 12].

Научная новизна работы

1. Выполнено экспериментальное исследование роста пленки Al, наносимой магнетронным методом на подложку ситалла, с использованием метода АСМ.

2. Проведены расчеты геометрических структур малых кластеров металла Al_N ($N=3-8$), найдены их параметры (величины энергии диссоциации на атом (D_e) и минимальные длины связей (R_e)), которые сравниваются с экспериментальными данными.

3. Доказано, что при осаждении атомов алюминия Al_N ($N = 1-5$) на подложку из алюминия кластеры с количеством три и более атомов укладываются на поверхности кристалла алюминия в структуры, близкие к структуре регулярной поверхности кристалла.

4. Теоретически обнаружено, что при осаждении магнетронной нанопленки Al на подложку из SiO_2 -кристобалита возникает сильное сцепление пленки с подложкой за счет формирования связей Al-O.

5. Расчеты показали, что пленки с толщиной более 5 нм утрачивают однородность структуры, терпят разрывы, увеличивают свою шероховатость, что может вести к образованию островков (кластеров) и столбчатых структур.

На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Результаты наноразмерных исследований серии образцов алюминиевых нанопленок, наносимых при постоянной мощности с разными длительностями напыления методом магнетронного распыления на подложку из ситалла, полученные методами АСМ.

2. Расчеты структуры и энергии диссоциации свободных кластеров алюминия. Проведенный поиск геометрий кластеров с минимальными энергиями показал наличие нескольких локальных минимумов для кластеров, содержащих более трех атомов.

3. Результаты анализа рассчитанных энергий адгезии одного атома алюминия и кластеров алюминия Al_N ($N=1-5$) на поверхности монокристаллического алюминия на поверхностях (100), (110) и (111).

4. Результаты анализа расчетов начальных этапов и дальнейшего роста формирования пленки алюминия на поверхности SiO_2 -кристобалита (модель

ситалла) при осаждении методом магнетронного распыления: расположение атомов алюминия на поверхности кристобалита, терминированной кислородом; величины энергии адсорбции атомов кремния на первых трёх стадиях осаждения; плотность электронных состояний SiO₂-кристобалита, на поверхность которого адсорбированы первые три слоя атомов алюминия; возможный механизм структуризации пленки алюминия на ситалле при ее дальнейшем росте.

Теоретическая значимость работы

Методами компьютерного моделирования из первых принципов показано наличие нескольких локальных минимумов для кластеров, содержащих более трех атомов; рассчитаны энергии адгезии одного атома алюминия и кластеров алюминия на монокристаллической поверхности алюминия. Обнаружено, что сильное сцепление пленки алюминия с поверхностью ситалла может быть объяснено формированием химических связей Al-O.

Практическая значимость работы

Установлено, что при увеличении толщины пленки алюминия энергия связи, приходящаяся на один атом, уменьшается и сближается с величинами, характерными для гетероэпитаксиальных пленок, имеющих собственную для алюминия структуру fcc-Al (при толщине до 5 нм), что было подтверждено данными атомно-силовой микроскопии на серии образцов алюминиевых магнетронных нанопленок.

Апробация и внедрение результатов работы

Основные результаты работы были представлены на следующих конференциях: «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», Хабаровск, 2018; XVI региональная научная конференция «Молодежь и наука: шаг к успеху», Курск, 2019; 3- ая всероссийская научная конференция перспективных разработок молодых ученых «Нанотехнологии: образование, наука, инновации», Курск, 2019; X всероссийская научно-практическая конференция «International Conference on Innovations in Nanomaterials and Nanotechnology», Бангкок, Тайланд, 2019.

Публикации

По результатам исследований опубликовано 7 печатных работ, в том числе – 3 статьи в рецензируемых научных журналах (1 – Scopus, 3 – Перечень ВАК), 3 – материалы и тезисы конференций.

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами. Автором были выполнены экспериментальные работы методом магнетронного распыления и методом атомно-силовой микроскопии (АСМ), были выполнены компьютерные

моделирования с использованием программного пакета ABINIT в операционной системе Linux.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 106 страницах машинописного текста, содержит 47 рисунков, 6 таблиц и список литературы из 165 наименований.

Во введении обоснована актуальность темы исследований, определены цели и задачи работы, отражена степень разработанности темы исследования. Отмечены научная новизна, теоретическая и практическая значимость диссертации, представлены методология и методы исследования, изложены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлен аналитический обзор работ в области магнетронного распыления, акцентировано внимание на методе формирования магнетронной пленки из металлов, выполнен теоретический обзор в области процессов роста кластеров и плёнок магнетронным методом. Проведенный аналитический обзор работ в области магнетронного распыления показал, что это перспективный метод формирования нанослоев из металлов. Данный метод позволяет создавать равномерные покрытия, что обусловлено малым размером распыляемых частиц (кластеров), которые выравнивают поверхность, заполняя ее дефекты. Магнетронные пленки обладают более однородной структурой и лучшей адгезией, чем пленки, изготовленные методом термического распыления. Регулирование мощности магнетрона и потенциала, приложенного к подложке, позволяет осаждать кластеры в различных режимах: мягкая посадка, пиннинг, имплантация. Метод магнетронного распыления позволяет создавать как многослойные пленки, так и пленки из смеси различных металлов. Изменяя параметры напыления, можно влиять не только на скорость роста, но и на структуру растущих покрытий. Также в рамках этого метода возможно напылять не только металлы, но и полупроводники, изготавливать пленки для различных отраслей производства.

В второй главе описаны характеристики использованных приборов и инструментов и этапы подготовки к эксперименту. Приведены параметры установки, при которых были получены пленки. Показано, что для характеристики полученных образцов могут быть применены методы атомно-силовой микроскопии, что позволяет провести комплексные наноразмерные исследования полученной пленки.

В третьей главе приведены результаты наноразмерных исследований магнетронных пленок, полученных методом магнетронного распыления в зависимости от времени нанесения при постоянной мощности 600 Вт. В ходе исследования использовался атомно-силовой микроскоп AIST-NT SmartSPM.

Изображения поверхностей были получены с помощью программного обеспечения AIST-NT SPM Control Software, поставляемого в комплекте с микроскопом. На атомно-силовом изображении поверхности при мощности 300 Вт не заметно образования каких-либо структур, шероховатость поверхности близка к шероховатости чистой подложки. В дальнейшем мощность магнетрона увеличивалась с шагом 100 Вт. Только по достижении 600 Вт на поверхности начали образовываться ярко выраженные структуры.

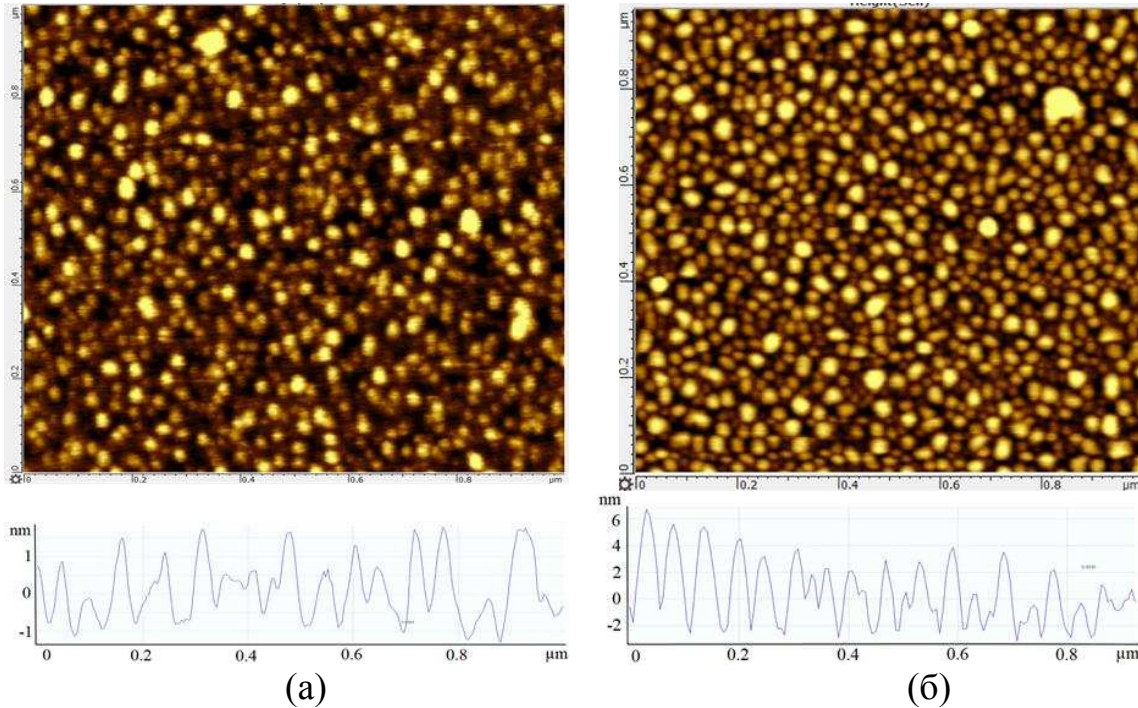


Рисунок 1 – Атомно-силовые микроскопические изображения магнетронных нанопленок из Al, время нанесения – (а) 30 с; – (б) 60 с при мощности 600 Вт

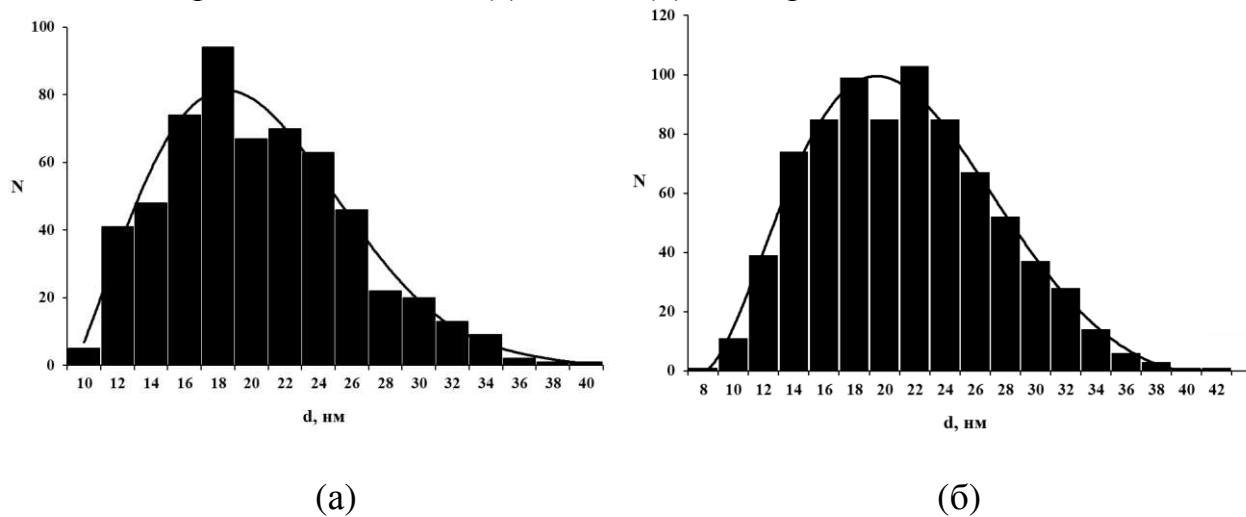


Рисунок 2 – Гранулометрическое латеральное распределение по размерам для магнетронной нанопленки из Al, время нанесения – (а) 30 с; – (б) 60 с

На рисунке 1, (а) видно, что при мощности 600 Вт на подложке равномерно осаждаются алюминиевые кластеры. Максимальная высота кластеров достигает 6 нм, латеральный размер ~30 нм. На профиле распределения по высоте поверхности видны частицы с высотой около 2,5 нм.

На рисунке 1, (б) видно, что увеличение времени распыления привело к образованию более крупных структур. Высота образований увеличилась более чем в 2 раза и достигла максимальной высоты 13 нм, анализ профиля поверхности показал, что чаще встречаются частицы высотой до 6 нм. Латеральный размер частиц увеличился на 60% в сравнении с предыдущим опытом.

На рисунках 2, (в) и 2, (г) представлены графики распределения частиц по размерам для описанных ранее образцов. Проведенные исследования показали, что при мощности магнетрона 600 Вт происходит стабильное распыление атомов из мишени. Анализ распределений, полученных в программном обеспечении Digimizer, предоставляет статистические данные о размерах напыляемых частиц. Сравнение этих распределений показывает, что с увеличением времени распыления латеральный размер частиц увеличивается. Показано, что при магнетронном напылении происходит островковый рост пленки. Во время роста латеральный размер островков увеличивается намного быстрее их высоты, что говорит о высокой степени диффузии оседающих кластеров на поверхности.

Таким образом, в процессе магнетронного напыления на структурном уровне, фактически на всех этапах, имеет место кластеризация, начиная с магнетронного разряда, а также при адсорбции атомов и уже возникших нанокластеров на подложке.

В четвертой главе представлены результаты численного моделирования. Численные расчеты были выполнены с использованием кода ABINIT, который распространяется на условиях открытого лицензионного соглашения GNU, позволяющего свободно использовать, копировать, модифицировать и распространять этот код. Расчеты состояний кластеров алюминия на поверхности проводились в формализме теории функционала плотности (ТФП).

Таблица 1 – Рассчитанные параметры кластеров алюминия Al_N (энергии диссоциации на атом (D_e) и минимальные длины связей (R_e)) в сравнении с экспериментальными данными

	Метод	Al_2	Al_3	Al_4	Al_5	Al_6	Al_7	Al_8	$Al_{кр}$
D_e (eV/n)	Наш расчет	0.99	1.55	1.65	1.85	2.12	2.26	2.28	3.32
	Расчет [13]	0.83	1.39	1.61	1.80	2.07	2.16	2.16	
	Эксп. [13]	0.68	1.25						3.37
R_e (Å)	Наш расчет	2.46	2.60	2.74	2.69	2.73	2.60	2.65	2.91
	Расчет [13]	2.71	2.52						
	Эксп. [13]	2.7							2.86

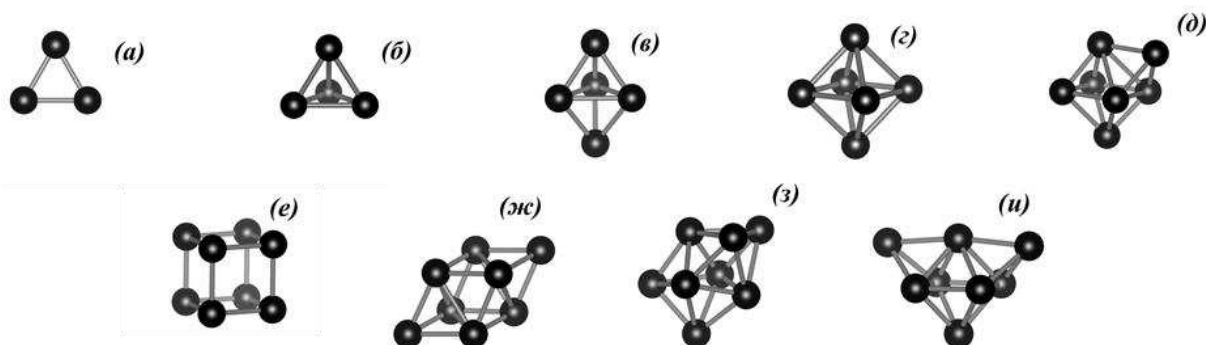


Рисунок 3 – Геометрические структуры, полученные для кластеров Al . Для кластеров Al_8 показаны четыре структуры, соответствующие локальным минимумам энергии (е – и)

На рис. 3. представлены геометрии рассчитанных кластеров Al . В табл. 1. сравниваются результаты расчетов энергии диссоциации кластера, приходящейся на один атом (D_e) и минимальной длины связи (R_e) с результатами других авторов и экспериментальными данными [13]. В целом наши расчеты согласуются с экспериментальными данными.

Представлены результаты расчетов энергии адгезии малых кластеров алюминия Al_N ($N=1-5$) на поверхности монокристаллического алюминия на поверхностях (100), (110) и (111). Например, на рис. 4. представлены результаты расчетов для (100).

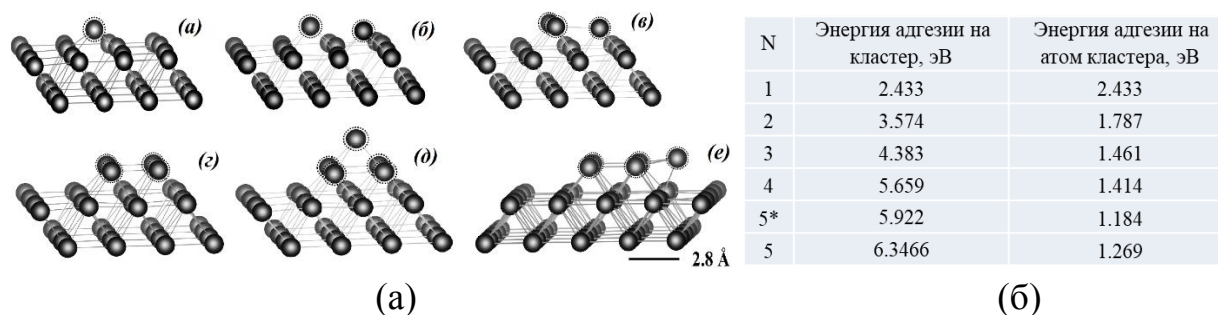


Рисунок 4 – (а) Геометрические структуры, полученные для кластеров алюминия на поверхности кристалла алюминия (100); – (б) Энергия связи кластеров алюминия разной величины с поверхностью кристалла алюминия (100), приходящаяся на один атом

Из рисунка 4 видно, что один атом над поверхностью заметно искажает подлежащую поверхность сдвигая ближайшие к нему атомы. Причем подлежащие атомы поверхности приподнимаются над поверхностью на 0.07 Å. Аналогичная ситуация с кластером Al_2 , атомы которого сами по себе располагаются существенно асимметрично. Для двухатомного кластера смещения поверхностных атомов аналогичны, за исключением среднего, который опускается на 0.03 Å. С увеличением размера кластера, составляющие его атомы выстраиваются в структуру, повторяющую подлежащую поверхность (100). Отметим, что для кластера с пятью атомами имеются два расположения (рис. 4, (а), д, е) соответствующие локальному минимуму энергии, причем глобальному минимуму соответствует тот из них, который способствует равномерному поверхностному распределению кластера.

На рис. 4, (б) приведены результаты расчетов энергии связи кластеров алюминия разной величины с поверхностью кристалла алюминия, приходящейся на один атом. Величина энергии адгезии на атом кластера постепенно уменьшается, стремясь к энергии атомов в объеме. Такое изменение энергии адгезии говорит о том, что кластеры не стремятся образовать дефекты, и происходит постепенный рост кристалла.

В экспериментальной части диссертации в качестве подложки, на которой исследуется рост пленки алюминия, использован ситалл, который является керамическим материалом, содержащим 60.5% SiO_2 , 13.5% Al_2O_3 , 8.5% CaO , 7.5% MgO и 10.5% TiO_2 . Однако исследовать теоретически поведение атомов алюминия на поверхности такого сложного материала не представлялось возможным, поэтому мы ограничились моделированием роста алюминия на поверхности оксида кремния, который составляет большую часть ситалла, при этом для простоты в качестве оксида кремния был взят кристаллический кварц в форме кристобалита.

На рисунке 5 представлена схема расположения атомов алюминия на поверхности кристобалита, терминированной кислородом.

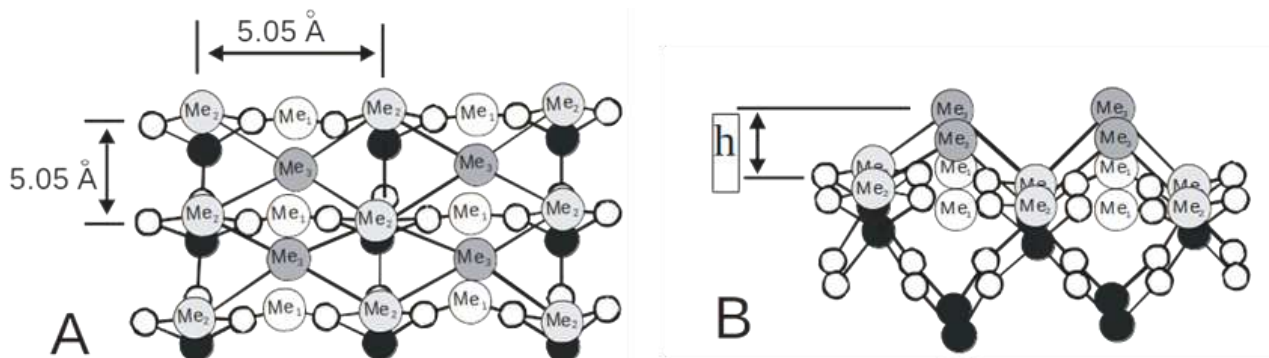


Рисунок 5 – Схема расположения атомов металлов на поверхности кристобалита. – А) вид сверху; – В) вид сбоку. Me_1 – позиции атомов Al первой стадии адсорбции (химической адсорбции); Me_2 – позиции атомов Al второй стадии адсорбции (физической адсорбции); Me_3 – позиции атомов Al третьей стадии адсорбции. Черные шары – атомы кремния, малые белые – атомы кислорода. Для алюминия позиции Me_1 и Me_2 находились примерно на одном уровне с поверхностными атомами кислорода. Величина h , характеризующая высоту расположения атомов третьей стадии адсорбции Me_3 , равнялась примерно 2.5 \AA

Следует отметить, что схема носит условный, качественный характер, так как в результате релаксации системы под действием межатомных сил происходит существенное отклонение позиций атомов от указанных на рисунке, и это отклонение для атомов разного типа различно.

На самой первой стадии осаждения атомов металлов наиболее выгодными позициями оказались позиции Me_1 в виде мостиков между верхними атомами кислорода, как это показано на рисунке 5. При осаждении последующих атомов металла наиболее выгодным оказывается их связывание также с атомами кислорода, но уже в других позициях (Me_2), поскольку позиции Me_1 уже заняты. Осаждение третьего слоя металла (Me_3) характеризуется тем, что все поверхностные атомы кислорода уже связаны с атомами металла (и кремния), и, формально говоря, вновь осажденные атомы металла могут связываться лишь с атомами металла.

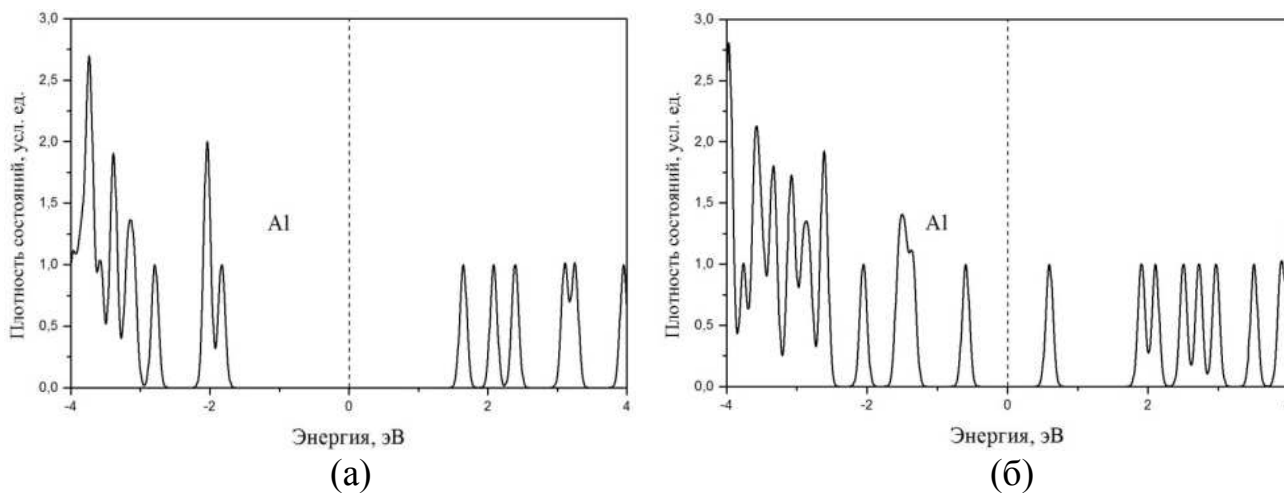
Энергии адсорбции вычислялись как

$$E_{ad1} = \frac{E(\text{sub} + Me_1) - E(\text{sub}) - N_1 E_{at}(Me)}{N_1}, \quad (1)$$

$$E_{ad2} = \frac{E(\text{sub} + \text{Me}_1 + \text{Me}_2) - E(\text{sub} + \text{Me}_1) - N_2 E_{at}(\text{Me})}{N_2}, \quad (2)$$

где E_{ad1} – энергия первой стадии адсорбции, E_{ad2} – энергия второй стадии адсорбции, $E(\text{sub})$ – энергия подложки (пластины кристобалита), $E(\text{sub} + \text{Me}_1)$ – энергия системы, состоящей из подложки и атомов металла Me_1 , адсорбированных на чистую подложку, $E(\text{sub} + \text{Me}_1 + \text{Me}_2)$ – энергия системы, состоящей из подложки, атомов металла первого слоя Me_1 и атомов металла второго слоя Me_2 , и N_1, N_2 , – количество атомов металла первого и второго адсорбционного слоя. Формула для энергии адсорбции третьего слоя не приводится, она по аналогии очевидна.

Результаты вычисления по формуле (1) показали, что величина энергии адсорбции атомов алюминия первого слоя равна 10.6 эВ на атом, что существенно превышает энергию связи алюминия с одиночным атомом кислорода (5.3 эВ [14]). Это означает, что на первой стадии скорость роста пленки лимитируется адсорбцией, которую можно считать химической адсорбцией. Величина энергии физической адсорбции алюминия, вычисленная по формуле (2), равна 2.7 эВ на атом, что существенно ниже, чем соответствующая величина энергии химической адсорбции. Адсорбцию этого типа можно назвать физической адсорбцией. Энергия адсорбции атомов алюминия третьего слоя практически такая же, как у атомов второго слоя.



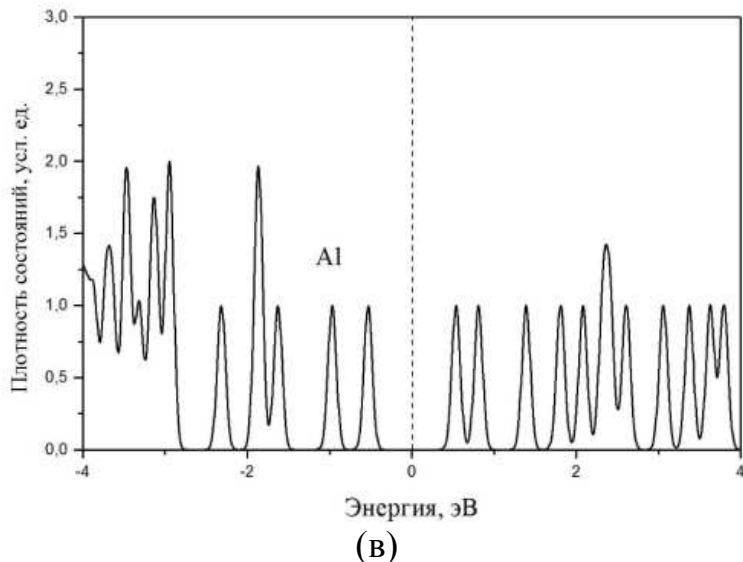


Рисунок 6 – Плотность электронных состояний SiO_2 -кристобалита, на поверхность которого адсорбирован – (а) первый слой атомов алюминия; – (б) второй слой атомов алюминия; – (в) третьей слой атомов алюминия

Из рис. 6, (а) следует, что атомы алюминия, каждый из которых обладает тремя валентными электронами, весьма успешно насыщают кислородные связи, в результате чего суммарный электронный спектр системы SiO_2 -Al приобретает диэлектрический характер с энергетической щелью около 3 эВ. На рис. 6, (б) видно, что диэлектрическая щель в системе SiO_2 -Al заметно уменьшается: от 3 до 1 эВ. Из рис. 6, (в) можно видеть, что в этом случае энергетическая щель с шириной 1 эВ на уровне Ферми сохраняется, то есть металлизация пленки еще не происходит.

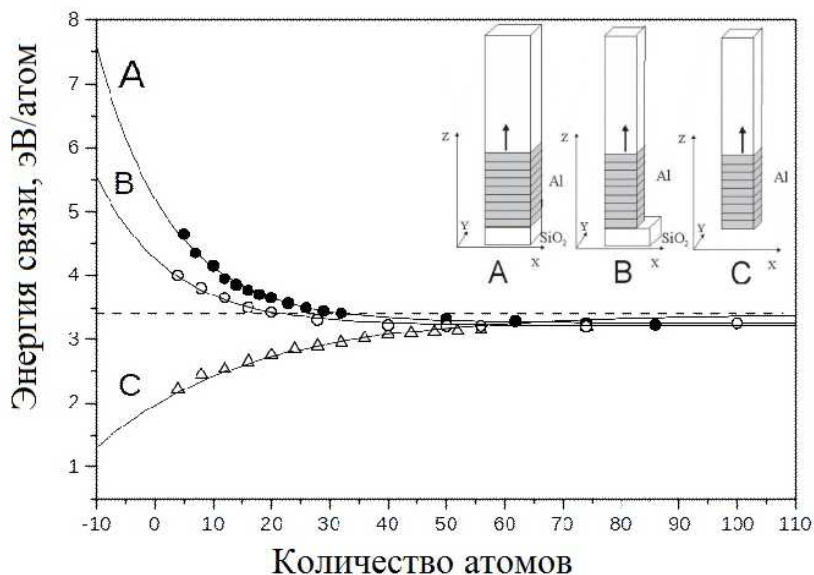


Рисунок 7 – Энергия связи атомов алюминия в зависимости от количества

атомов. – А) гетероэпитаксиальный рост на поверхности кристобалита; – В) fcc-Al пленка, контактирующая с поверхностью кристобалита; – С) свободная fcc-Al пленка. Пунктиром указана для сравнения величина энергии связи в объемном алюминии

Анализ рисунка 7 показывает, что с ростом толщины гетероэпитаксиальной пленки алюминия энергия связи, приходящаяся на один атом, уменьшается и сближается с величинами, характерными для пленок, имеющих структуру fcc-Al. Это происходит при толщине пленки около 5 нм. То есть, пленки толще 5 нм утрачивают однородность структуры, терпят разрывы, увеличивают свою шероховатость, что может приводить к образованию алюминиевых островков (кластеров) и столбчатых структур.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках выполнения диссертационной работы были изучены труды отечественных и зарубежных ученых, на основе которых было проведено экспериментально и теоретическое исследование процесса формирования нанопленок алюминия методом магнетронного распыления. Описаны процессы формирования кластеров, агрегации кластеров на пути к подложке, режимы осаждения кластеров, этапы образования и роста пленки.

1. Методом компьютерного моделирования из первых принципов были выполнены расчеты структуры и энергии диссоциации свободных кластеров алюминия. Проведенный поиск геометрий кластеров с минимальными энергиями показал наличие нескольких локальных минимумов для кластеров, содержащих более трех атомов. Также были рассчитаны энергии адгезии одного атома алюминия и кластеров алюминия на монокристаллической поверхности алюминия. Рассчитаны соответствующие геометрии структуризации таких кластеров на поверхности. Агрегация кластеров на монокристаллической поверхности показывает, что кластеры с количеством три и более атомов укладываются на поверхности кристалла алюминия в структуры, близкие к структуре регулярной поверхности кристалла.

2. Теоретическое исследование начальной стадии формирования пленки алюминия на поверхности SiO₂-кристобалита (модель ситалла) показало, что прочность связи первых слоев алюминия, в первую очередь, определяется характером взаимодействия атомов алюминия с кислородом. Алюминий, как легко окисляемый металл, характеризуется высокой адгезией (энергия хемадсорбции 10,6 эВ/атом). Дальнейшее осаждение алюминия (до трех атомных слоев) характеризуется физической адсорбцией с существенным уменьшением энергии связи и сохранением диэлектрического характера электронного спектра.

3. При последующем увеличении толщины гетероэпитаксиальной пленки алюминия энергия связи, приходящаяся на один атом, уменьшается и сближается с величинами, характерными для пленок, имеющих собственную для алюминия структуру fcc-Al. Это происходит при толщине пленки около 5 нм. То есть, пленки толще 5 нм утрачивают однородность структуры, терпят разрывы, увеличивают свою шероховатость, что может вести к образованию островков (кластеров) и столбчатых структур.

4. Методом магнетронного распыления была получена серия образцов алюминиевых нанопленок с разными длительностями напыления. Показано, что для характеристики полученных образцов может применяться метод атомно-силовой микроскопии. Применение данного метода позволило провести наноразмерные исследования синтезированных на поверхности подложек металлических нанопленок. Показано, что увеличение времени напыления приводит к росту частиц преимущественно в латеральном направлении.

5. Для каждого образца были определены средние размеры частиц. Проведенный анализ атомно-силовой микроскопии магнетронной нанопленки из алюминия позволяет сделать вывод о наличии многоуровневого механизма поверхностной агломерации кластеров образующих нанопленок. Выявлено влияние длительности магнетронного распыления на размеры кластеров, формирующих нанопленку.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Grove, W.R. On the Electro-Chemical Polarity of Gases / W.R. Grove // *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* – 1852. – Vol. 142, – P. 87-101.
2. Faraday, M. The Bakerian lecture: experimental relations of gold (and other metals) to light / M. Faraday // *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* – 1857. – Vol. 147. – P. 145-181.
3. Cooley, K.A. Room-temperature epitaxy of metal thin films on tungsten diselenide / K.A. Cooley, R. Alsaadi, R.L. Gurunathan // *Journal of Crystal Growth.* – 2019. – Vol. 505. – P. 44-51.
4. Jianqiu, H. Hydrogen release at metal-oxide interfaces: A first principle study of hydrogenated Al/SiO₂ interfaces / H. Jianqiu, T. Eric // *Applied Surface Science.* – 2017. – Vol. 406. – P. 128-135.
5. Satoa, Y. Solid phase growth of some metal and metal oxide thin films on sapphire and quartz glass substrates / Y. Satoa, T. Suzuki, H. Mogami // *Materials Sci Forum.* – 2013. – Vol. 753. – P. 505-509.
6. Saber, G. Grafting of iron on amorphous silica surfaces from ab initio calculations / G. Saber, B. Michael, L. Sébastien // *The Journal of Chemical Physics.* – 2020. – Vol. 152, No. 21. – P. 214706-1 – 214706-11.

7. Shirazi, M. Strategies to facilitate the formation of free standing MoS₂ nanolayers on SiO₂ surface by atomic layer deposition: A DFT study / M. Shirazi, W.M.M. Kessels, A.A. Bola // *APL Mater.* – 2018. – Vol. 6. – P. 111107-1 – 111107-8.
8. Sznajder, M. Ab initio studies of early stages of AlN growth process on the oxygen-terminated diamond (111) surface / M. Sznajder, R. Hrytsak. // *Diamond and Related Materials.* – 2018. – Vol. 83. – P. 94-103.
9. Jack, T.L. An Ab Initio Study of Aluminium self-compensation in Bulk Silicon / T.L. Jack, Poulton, R. David, Bowler // *J. Physics: Condens. Matter.* – 2019. – 14p.
10. Ino, S. Epitaxial growth of metals on rocksalt faces cleaved in vacuum / S. Ino, D. Watanabe, S. Ogawa // *J Phys Soc Japan.* – 1964. – Vol. 19, No. 6. – P. 881-891.
11. Perdew, J.P. Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy / J.P. Perdew, Y. Wang // *Phys Rev B.* – 1986. – Vol. 33. – P. 8800-8802.
12. Zhigang, W. More accurate generalized gradient approximation for solids / W. Zhigang, R. E. Cohen // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73. – P. 235116-1 – 235116-5.
13. Valéria, O.K. DFT and CCSD(T) electronic properties and structures of aluminum clusters: Al_nx (n=1–9, x=0, ±1) / O.K. Valéria, F.V. Edson Carvalho, W.A. Carlos Paschoal // *Chemical Physics Letters.* – 2013. – Vol. 568-569. – P. 42-48.
14. Cottrell, T.L. The Strengths of Chemical Bonds / T.L. Cottrell // London: Butterworths Scientific Publications. – 1958. – 161p.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ ИЗЛОЖЕНО В СЛЕДУЮЩИХ ПУБЛИКАЦИЯХ:

(статьи в рецензируемых изданиях, включенных в перечень ВАК и Scopus):

1. Кузьменко, А.П. Расчет малых кластеров металлов cu, ni и al в рамках теории функционала плотности / А.П. Кузьменко, Н.А. Хохлов, К.К. Лин // *Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии.* – 2018. – Т. 8, № 2 (27). – С. 138-146.
2. Хохлов, Н.А. Структурирование магнетронной пленки малыми кластерами алюминия в рамках теории функционала плотности / Н.А. Хохлов, А. П. Кузьменко, К.К. Лин // *Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии.* – 2019. – Т. 9, № 1(30). – С. 87-98.

3. Заводинский В.Г. Квантово-механическое исследование роста пленки алюминия на поверхности SiO_2 со структурой кристобалита / В.Г. Заводинский, А.П. Кузьменко, К.К. Лин, М.Т. Мьо // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии, – 2020. – Т. 10, № 2. – С. 66 – 75.

4. Kuz'menko, A.P. Ab initio calculations of aluminium clustering on aluminium surfaces / A.P. Kuz'menko, N.A. Khokhlov, K.K. Lin, M.T. Myo, A.S. Petrov. // Journal of Physics: Conf. Series. – 2020. – Vol. 1455. – P. 012001-1 – 012001-5.

(публикации в других изданиях):

5. Кузьменко, А.П. Квантово-механический расчёт параметров малых кластеров металлов меди и никеля / А.П. Кузьменко, К.К. Лин, Н.А. Хохлов. // Материалы XVI региональной научной конференции «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование», – Хабаровск, 2019. – P. 115-119.

6. Хохлов, Н. А. Магнетронное осаждение кластеров алюминия / Н.А. Хохлов, А. П. Кузьменко, К.К. Лин // Сборник научных статей 3- й Всероссийской научной конференции перспективных разработок молодых ученых «Молодежь и наука: шаг к успеху». – Курск, 2019. – С. 239-246.

7. Кузьменко, А.П. Расчет процессов адгезии малых кластеров алюминия на кристаллической поверхности алюминия / А.П. Кузьменко, К.К. Лин, А.С. Петров, Н.А. Хохлов // Сборник статей X Всероссийской научно-практической конференции «Нанотехнологии: образование, наука, инновации», – Курск, 2019. – С. 129-131.

Подписано в печать 20.10.2020 г. Формат 60×84/16.
Печать офсетная. Усл. печ.л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ____.
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94