

Моделирование процесса роста массива одномерных монокристаллических структур ZnO

А.А. Шарапов^{1,2}, И.В. Матюшкин¹

1. АО «НИИМЭ», г. Зеленоград

2. МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный

Работа выполняется при финансовой поддержке гранта Минобрнауки России в форме субсидии от 25.09.2020 г.

№ 075-15-2020-791 (AAAA-A20-120110990073-7)

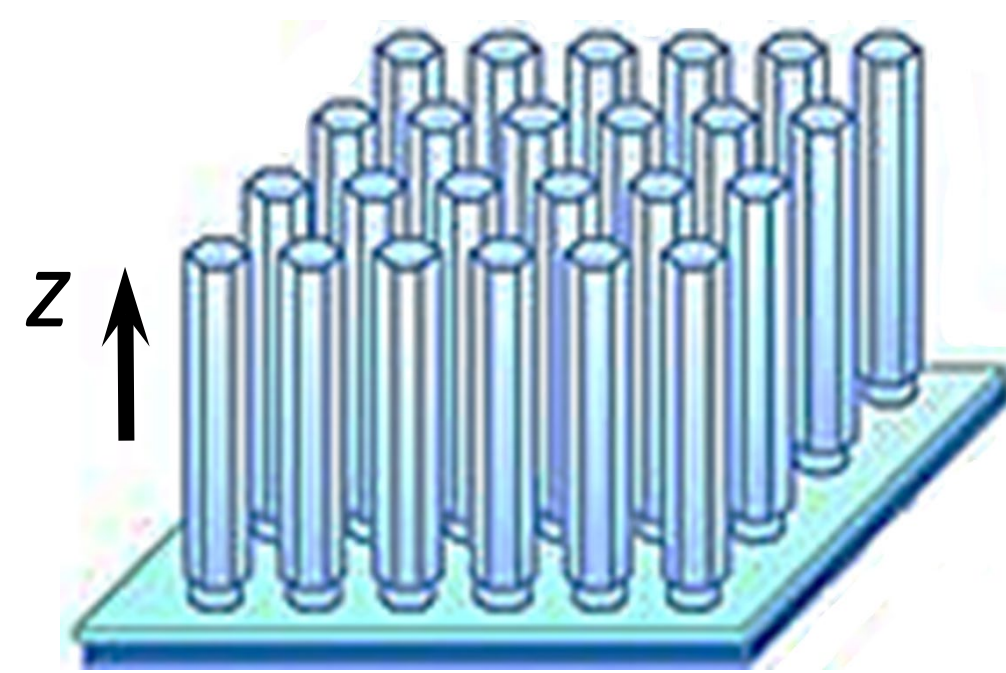
Авторы благодарят за консультации д.ф.-м.н. Редькина А.Н.

АННОТАЦИЯ

Один из методов получения высококачественных монокристаллических наностержней ZnO – газофазный рост. В работе описывается одномерная математическая модель роста наностержней ZnO на поверхности SiO₂ в ходе данного процесса.

В модели учтена теплопередача вдоль стержня от зоны экзотермической реакции образования кристаллической фазы ZnO.

Одномерные структуры оксида цинка – широкозонный (3,37 эВ) полупроводниковый материал, перспективный в областях микро-, оптоэлектроники и фотовольтаики. На его основе возможно создать высокочувствительные приборы газо- и фотосенсорной техники [1].



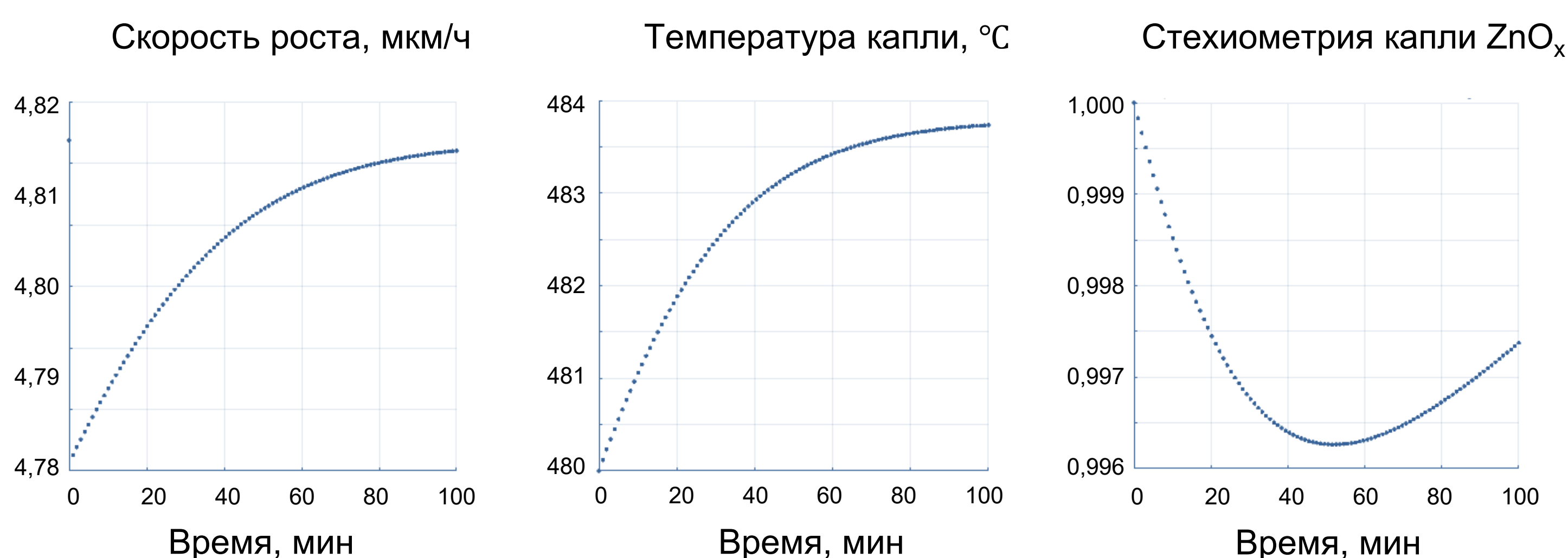
МОДЕЛЬ CVD-РОСТА НАНОСТЕРЖНЕЙ

Разработанная математическая модель связывает параметры реакции с величинами, характеризующими размер (R), температуру (T_L), молярное соотношение цинка и кислорода в жидкой фазе (x), а также распределение температуры в твёрдой кристаллической части наностержня (T_z).

Для численного решения уравнения теплопроводности для стержня используется схема Кранка–Николсона, основанная на явно-неявной аппроксимации пространственной производной:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \rightarrow \theta \left(\frac{u'_{z+h} - 2u'_z + u'_{z-h}}{h^2} \right) + (1-\theta) \left(\frac{u^{t+\tau}_{z+h} - 2u^{t+\tau}_z + u^{t+\tau}_{z-h}}{h^2} \right)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ



Процесс синтеза наностержней ZnO методом газофазного роста при давлении ниже атмосферного состоит из четырёх этапов [2]:

- 1) формирование массива нанокпель Zn на поверхности Si подложки;
- 2) образование кристаллической фазы ZnO под каплей;
- 3) рост наностержня – к данному этапу относится разработанная модель;
- 4) испарение капли – завершение процесса синтеза.

РЕАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ

Химическая реакция на границе фаз описывается законом кинетики второго порядка. Выделяющаяся теплота расходуется на разогрев капли и передачу энергии в виде теплового потока, направленного вдоль стержня.

Учёт перемещения границ как между плёнкой на подложке и стержнем, так и между стержнем и каплей производится применением процедуры перестроения сетки, привязанной к абсолютному положению в пространстве, с линейной экстраполяцией температуры:

$$\left\langle \begin{matrix} t = n\tau \\ \langle R, y, T_L \rangle \\ \left\langle \begin{matrix} T \\ z \end{matrix} \right\rangle_1, \dots, \left\langle \begin{matrix} T \\ z \end{matrix} \right\rangle_{end} \end{matrix} \right\rangle \xrightarrow{q_{n2}, W, d(R, y, T_L)} \left\langle \begin{matrix} t = n\tau + \tau \\ \langle R, y, T_L \rangle \\ \left\langle \begin{matrix} T + dT \\ z \end{matrix} \right\rangle_1, \dots, \left\langle \begin{matrix} T + dT \\ z \end{matrix} \right\rangle_{end} \end{matrix} \right\rangle \xrightarrow{b1, b2=end+1} \left\langle \begin{matrix} t = n\tau + \tau \\ \langle R + dR, y + dy, T_L + dT_L \rangle \\ \left\langle \begin{matrix} T + dT \\ z \end{matrix} \right\rangle_{b1}, \dots, \left\langle \begin{matrix} T + dT \\ z \end{matrix} \right\rangle_{b2} \end{matrix} \right\rangle$$

ВЫВОДЫ

В результате программной реализации разработанной авторами математической модели стало возможным оценить скорость роста и распределение температур в твёрдой и жидкой фазе растущего наностержня при разных параметрах реакции. Для повышения контролируемости процесса роста и количественного описания четвёртого этапа формирования наностержней целесообразно определить параметры реакции, при которых синтез в зоне роста будет прекращаться в силу термодинамических причин.

ИСТОЧНИКИ

1. Редькин А.Н. [и др.] Газофазный синтез упорядоченных массивов наностержней ZnO на подложках различного типа // Неорганические материалы. - 2011. - Т. 47, № 7. - С. 825-830.
2. Редькин А.Н., Рыжова М.В., Якимов Е.Е., Грузинцев А.Н. Упорядоченные массивы наностержней оксида цинка на кремниевых подложках // Физика и техника полупроводников. - 2013. - Т. 47, № 2. - С. 216-222.

КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Андрей Шарапов
АО «НИИМЭ»

andrey.sharapov@phystech.edu

