

Міністерство освіти України
Криворізький державний педагогічний університет

Комп'ютерне моделювання
та інформаційні технології
в освітній діяльності

Збірка наукових праць

Кривий Ріг
Видавничий відділ КДПУ
1999

ББК 32.973.3

К 63

УДК 681.3.001.57+37.01:007

Збірник друкується відповідно до розпорядження МО України
«Про організацію і проведення науково-методичних конференцій
та науково-практичних семінарів у 1999 році»
(Наказ №1/9-113 від 24.03.99 р., п. 47)

Рекомендовано до друку рішенням Вченої ради Криворізького
державного педагогічного університету (Протокол №9 від
11.03.1999 р.)

*Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології в
освітній діяльності: Збірник наукових праць. – Кривий Ріг:
Видавничий відділ КДПУ, 1999. – 249 с.*

Збірник містить статті з різних аспектів застосування мо-
делювання у природничих науках та освітній діяльності, нових
технологій навчання фізики, математики та інформатики. Значну
увагу приділено мережним технологіям та методиці дис-
танційного навчання.

Для студентів вищих навчальних закладів, аспірантів,
наукових та педагогічних працівників.

Рецензенти:

Є.Я. Глушко – д-р физ.-мат. наук, проф., зав. кафедри
фізики Криворізького державного педа-
гогічного університету

Я.В. Шрамко – д-р філософських наук, доцент кафедри
філософії Криворізького державного педа-
гогічного університету

ISBN 5-7763-2587-0

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАБИЛИЗАЦИИ ПОВЕРХНОСТИ (001) Si НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ИОНАМИ

А.Е. Кив¹, В.Н. Соловьев², Т.И. Максимова²

¹ г. Одесса, Южно-Украинский государственный педагогический университет им. К.Д. Ушинского

² г. Кривой Рог, Криворожский государственный педагогический университет

При рассмотрении всего многообразия применения твердых тел в технологических процессах, оказывается, что наиболее часто используются механические, химические, электрические, оптические свойства поверхностей и границ раздела, где объем образца играет лишь роль подложки, которую можно заменить каким-либо другим веществом. В обратных случаях, когда необходимость использования твердого тела обоснована его объемными свойствами, отрицательное влияние поверхностных эффектов часто делает материал непригодным для применения. Возникает необходимость разработки различных способов модификации поверхностей. Наиболее распространенные среди них в настоящее время – лазерное облучение, покрытие поверхности слоем чужеродного материала, ионная бомбардировка с энергиями порядка нескольких килоэлектронвольт.

Кремний является наиболее широко применяемым в микроэлектронике полупроводником. Тенденция к уменьшению интегральных схем и приборов ведет к увеличению роли поверхностных эффектов. За последние десятилетия микроэлектроника практически полностью перешла на использование интегральных схем с поверхностью кремния (001) [1]. Так как эта поверхность не является естественной поверхностью скола (в отличие от (111)), то она особенно неустойчива. Приготовление чистой (001) Si поверхности (без адатомов и вакансий) требует значительных усилий. Наиболее неутешительным фактором является медленная релаксация поверхности после скола. Действительно, в плоскости скола (001) Si на один поверхностный атом приходится по две незаполненные связи (в плоскости естественного скола (111) Si и в плоскости (011) на один поверхностный атом приходится только одна оборванная связь). Димерная модель

реконструкции поверхности прогнозирует заполнение только одной ненасыщенной связи. Таким образом, у каждого поверхностного атома остается по одной оборванной связи, что делает поверхность (001) Si достаточно химически активной, – возникает необходимость разработки методов стабилизации поверхности и ее ускоренной релаксации.

Анализ особенностей формирования и влияния радиационных допороговых и послеороговых дефектов на основные физические процессы в полупроводниках [2] привел нас к следующему предположению. Облучение поверхности кремния нейтральными ионами с энергиями, меньшими энергии дефектообразования E_d может способствовать переходу ее структуры в энергетически более стабильное состояние. Этот метод стабилизации поверхности может быть более предпочтительным, чем использование распространенной в настоящее время ионной бомбардировки с энергиями ионов порядка нескольких килоэлектронвольт [1], которая может приводить к значительным перестройкам приповерхностных слоев.

Построение модели

При моделировании поверхности кремния нами использован метод молекулярной динамики [3] с эмпирическими потенциалами Стиллинджера-Вебера [4] и Китинга [5]. Расчетная ячейка включает 864 атома – 12 слоев по 72 атома в каждом. В модели введены периодические граничные условия в двух направлениях. Первоначально атомы расчетной ячейки располагаются в узлах идеальной кристаллической решетки кремния, их дальнейшие положения вычисляются из решения уравнений движения по алгоритму Верлета [3]. Шаг интегрирования 0.001 пс. Бомбардировка ионами проводилась при температуре системы 300°K.

Потенциал Стиллинджера-Вебера [4], представлен в виде суммы радиальной v_2 и угловой v_3 компонент:

$$v_2 = \mathcal{E}_2(r_{ij} / \delta), \quad v_3 = \mathcal{E}_3(r_i / \delta, r_j / \delta, r_k / \delta),$$

где

$$f_2(r) = A(Br^{-4} - 1) \exp[(r - a)^{-1}] \quad (r < a),$$

$$f_2(r) = 0 \quad (r \geq a);$$

$$f_3(r_i, r_j, r_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_i) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_j) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_k),$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_i) = \lambda \exp[\gamma(r_{ij} - a)^{-1} + \gamma(r_{ik} - a)^{-1}] \left(\cos \theta_i + \frac{1}{3}\right)^2$$

$$(r_{ij}, r_{ik} < a)$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_i) = 0 \quad (r_{ij}, r_{ik} > a).$$

Здесь $\theta_i = \theta_{ijk}$, $\varepsilon=1.79549$ эВ, $\delta=0.20951$ нм, $A=7.049556277$, $B=0.602245584$, $\alpha=1.8$, $\lambda=21.0$, $\gamma=1.2$.

Для исследования возможного влияния нейтральных низкоэнергетических ионов на процесс релаксации поверхности, отдельным ее атомам передавались импульсы, соответствующие энергии налетающей частицы. Энергия ионов E_i выбирались из интервала (5 – 50) эВ (пороговая энергия дефектообразования для Si в направлении $\langle 001 \rangle$ $E_d^{\langle 001 \rangle} \approx 30$ эВ [2]). Число атомов, которым одновременно передавалась энергия налетающего иона, выбиралось так, чтобы обеспечить экспериментально используемые потоки порядка 10^{16} см⁻²с⁻¹.

Обсуждение результатов моделирования

Моделировалась сильно разупорядоченная поверхность (001) кремния. В такой модели реконструкция распространяется на четыре приповерхностные слоя, кривая радиального распределения (КРРА) атомов 4-х приповерхностных слоев напоминает КРРА аморфного кремния [6,7].

Без бомбардировки характерна следующая реконструкция атомов по слоям. В первом слое мы наблюдаем ряды как симметричных димеров, реконструированных по типу 2×1, так и асимметричных наклонных и изогнутых димеров [8]. Реконструкция четвертого слоя сохраняет симметрию 1×1. Третий слой атомов играет роль демпфирующего слоя, связывающего поверхностные слои, не имеющие трансляционной симметрии, и нижние слои, характеризующиеся трансляционной симметрией.

В ходе реконструкции часть атомов первого слоя смещается вниз (13-18 %), в то время как часть атомов третьего слоя смещается вверх (7-16.5 %). Таким образом, оба эти слоя разрыхляются, возникают 3-х членные кольца, связывающие атомы третьего слоя с первым. Если в объеме наблюдаются 6-членные кольца, в

идеальной модели поверхностных димеров – 5-ти и 6-ти членные кольца, то здесь мы наблюдаем кольца с числом атомов от двух до восьми, среди которых 5-ти и 6-ти членные кольца преобладают. Из теории дефектообразования [2] известно, что подобные аномальные кольца характеризуются напряженными неустойчивыми связями.

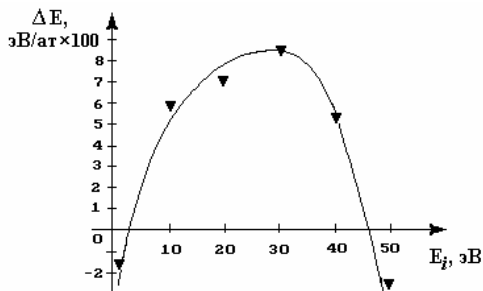


Рис.1. Зависимость степени релаксации поверхности от энергии налетающего иона.

Бомбардировка нейтральными ионами с энергиями порядка пороговой энергии E_d для кристаллического направления $\langle 001 \rangle$ ($E_d^{\langle 001 \rangle} \approx 30$ эВ [2]) ускоряла релаксацию и приводила к стабильному энергетическому выигрышу системы (рис.1). Максимальное ускорение релаксации и наибольший энергетический выигрыш 0.08 эВ на каждый атом из четырех приповерхностных слоев наблюдались при энергии налетающих ионов, равной пороговой энергии для данного направления.

Ускорение релаксации сопровождалось улучшением структуры поверхности. Улучшение структуры первого слоя (его уплотнение) наблюдалось при энергиях ионов 10 – 30 эВ. Соответственно 18 – 46 % атомов возвращались в слой. Восстановление третьего слоя наблюдается при энергиях ионов 20 – 40 эВ. При бомбардировке порядка 30 эВ слой может восстанавливаться до 100 %. Однако, напряженность связей третьего слоя делает их подвижными, поэтому восстановление и разрыхление третьего слоя носит периодический характер. При пороговом и подпороговом облучении увеличивается количество 6-членных колец, уменьшается число аномальных полигонов.

При облучении поверхности нейтральными ионами с энер-

гиями выше пороговой влияние отдельных ударов распространяется до 7-го приповерхностного слоя, – возникают структурные дефекты в пятом, шестом, седьмом слоях, наблюдается большее разупорядочение первого слоя.

Таким образом, облучение поверхности нейтральными ионами с подпороговыми и пороговыми энергиями ведет к ускорению релаксации поверхности и улучшению ее структурных характеристик.

Обнаруженная ускоренная релаксация поверхности под пучком низкоэнергетических ионов позволяет надеяться на возможность обеспечения радиационно-стимулированной технологии формирования стабильных поверхностных структур. Полученные данные можно использовать для целенаправленной модификации поверхностей и прогнозирования их структурно-зависимых физических свойств.

Литература:

1. Бехштедт Ф., Эндерлайн Р. Поверхности и границы раздела полупроводников: Пер. с англ. – М.: Мир, 1990. – 488с.
2. Вавилов В.С., Кив А.Е., Ниязова О.Р. Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках. – М.: Наука., Главная редакция физ.-мат. литературы, 1981. – 368с.
3. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике: Пер. с англ. / Под. ред. С.А.Ахманова. - М: Наука. Гл. ред. физ.- мат. лит., 1990. - 176 с.
4. F. Stillinger, T. Weber, *New interatomic potential for Si*, Phys. Rev. B **31**, 5262 (1985).
5. I. Ohdomari, H. Akatsu, *The structural models of the Si/SiO₂ interface*, Non-Cryst. Sol. **89** 239-248 (1987).
6. Максимова Т.И. Компьютерное моделирование радиационно-стимулированной стабилизации (001) Si поверхности.// Фотоэлектроника, № 8, 1998.
7. Ishimaru M., Munetoh S. Generation of amorphous silicon structure by rapid quenching: A molecular-dynamics study.// Phys.Rev., B **56** (23), 15133-15138 (1997).
8. K.Inoue, Y. Moricawa, *Order-disorder phase transition on the Si (001) surface: Critical role of dimer defects*, Phys.Rev., B **49** (20), 14774-14777 (1994).

Зміст

<i>М.К. Нечволод, М.М. Голоденко, Ю.М. Грищенко, А.Ф. Прун.</i> Комп'ютерне моделювання коливань при великих амплітудах	4
<i>А.Е. Кив, В.Н. Соловьев, Т.И. Максимова.</i> Моделирование стабилизации поверхности (001) Si низкоэнергетическими ионами	7
<i>Л.С. Шуригіна, М.М. Голоденко, В.О. Надточій, В.М. Ткаченко.</i> Комп'ютерне моделювання досліду Франка-Герца	12
<i>В.Н. Соловьев, Т.И. Максимова, С.А. Семерилов.</i> Компьютерное моделирование фуллереноподобных структур на поверхности (001) кремния	16
<i>Е.И. Гетьман, В.И. Марченко.</i> Компьютерное моделирование курса "Химия твердого тела"	21
<i>Д.И. Родькин, А.А. Хараджян, С.А. Семерилов.</i> Метод определения параметров двигателя постоянного тока	27
<i>Я.В. Шрамко.</i> Ревизия знаний как проблема научной эпистемологии	34
<i>І.О. Теплицький.</i> Фізичні моделі в курсі "Основи комп'ютерного моделювання"	46
<i>Е.Я. Глушко, В.Н. Евтеев.</i> Исследование состояний в иерархических структурах	55
<i>Е.Я. Глушко, Е.В. Журавель, И.Л. Линчук.</i> Моделирование интерфейсных состояний в полупроводниковых гетероконтактах	57
<i>О.П. Шестопалова.</i> Використання компютерних версій психологічних тестів як засіб діагностики та розвитку пізнавальних здібностей	63
<i>Р.М. Балабай, А.В. Черноок.</i> Метод модельного отжига для решения оптимизационных задач	68
<i>Н.В. Грищенко.</i> До питання викладання основ комп'ютерного моделювання на природничих факультетах	74
<i>Н.В. Грищенко.</i> Моделювання точкових дефектів у кремнії: нероз'єднані пари Френкеля	78
<i>Т.И. Максимова.</i> Моделирование поверхности (001) кремния методом молекулярной динамики с использованием эмпирических потенциалов	86

<i>Е.П. Никонова.</i> Компьютерное моделирование низкотемпературных аномалий физических свойств структурно-неупорядоченных материалов	97
<i>В.Л. Малорян, О.В. Крапивная, В.С. Озийчук.</i> Некоторые особенности организации преподавания курса информатики в вузе на базе сетевых технологий	108
<i>А.С. Зеленский, Л.Л. Жукова, С.В. Баран.</i> Использование современных программных средств при автоматизированном контроле знаний студентов	113
<i>С.В. Диордиенко, В.Л. Малорян.</i> Влияние современных технологий программирования на содержание школьного курса информатики	117
<i>Н.С. Завізена, Є.В. Чернов, О.А. Хараджян.</i> Методична схема складання та використання математичних задач в курсі інформатики	122
<i>О.В. Бич, О.В. Григор'єва.</i> Застосування нових інформаційних технологій при вивченні математики	125
<i>Л.О. Черних.</i> Вивчення стохастичної лінії шкільного курсу математики з використанням НІТ	128
<i>А.П. Полищук, С.А. Семериков.</i> Концепция курса “Численные методы в объектной методологии”	131
<i>Ю.М. Кравченко.</i> Блиц-игра как система автоматизированного контроля знаний	139
<i>А.А. Коновал.</i> Об объемном заряде проводника с током	143
<i>А.А. Коновал.</i> Закон Био-Савара для зарядов, движущихся с релятивистскими скоростями	147
<i>Ю.А. Курбатов.</i> Возможности лазерной телеметрии в ШКФ	149
<i>В.П. Ржепецький.</i> Про шляхи вдосконалення викладання фізики в школі	153
<i>М.І. Задорожній.</i> Інформаційні технології навчання в загальноосвітній школі	158
<i>Е.А. Кривенко.</i> Компьютерные физические демонстрации в курсе оптики	169
<i>Н.С. Завизена.</i> Актуальность внедрения и использования дистанционного обучения	174
<i>С.В. Брадул, Э.И. Славенко, С.А. Тернов.</i> Создание учебной информационной системы для решения экономических задач на базе intranet-технологий	177

<i>Т.Н. Золотарева.</i> Информационные технологии в подготовке менеджера	181
<i>К.А. Безпалько.</i> Організація інформаційного наповнення локальної мережі вищих навчальних закладів	186
<i>О.С. Бондар.</i> Методика використання мережі Internet у викладанні теорії основ ринкової економіки	190
<i>В.С. Колеватих.</i> Проблеми і результати використання новітніх інформаційних технологій при створенні автоматизованих систем контролю знань	194
<i>О.П. Поліщук.</i> Інструментально-виконавча система навчання та тестування	198
<i>Л.А. Лисина, Е.В. Курочкина.</i> Создание рабочей среды для уроков по Excel	207
<i>Ю.В. Филатов.</i> Разработка алгоритмов, имитирующих решение задачи человеком	211
<i>Л.Н. Шокотько.</i> Использование дидактических основ информационных технологий для развития устойчивого интереса учеников к обучению	220
<i>Ю.П. Рева.</i> Відбір та оцінка програмного забезпечення для організації сучасного процесу навчання	225
<i>Ю.П. Рева.</i> Використання концептуальної технології навчання в сучасних умовах	230
<i>О.О. Запорожець.</i> Формування комп'ютерної грамотності учнів	236
<i>М.Э. Егорова.</i> Новые информационные технологии + информатика=творчество и успех	240

Наукове видання

**Комп'ютерне моделювання та інформаційні технології
в освітній діяльності**

*Збірник наукових статей
(за матеріалами Всеукраїнської конференції)*

Підп. до друку 07.04.99
Бумага офсетна №1
Ум. друк. арк. 14,60

Формат 80x84 1/16.
Зам. №4-0701
Тираж 300

Видавничий відділ Криворізького державного педагогічного
університету
КДПУ, 324086, Кривий Ріг-86, пр. Гагаріна, 54

E-mail: svn@kpi.dp.ua