

Резюме проекта
Выполняемого при поддержке **РФФИ**
«Исследование сорбционных и диффузионных процессов при литировании
поверхности кремния (100)»
за 2014 год

Договор № 14-02-31071 мол а

Приоритетное направление: Индустрия наносистем

Критическая технология: Компьютерное моделирование наноматериалов. Наноустройств и нанотехнологий

Период выполнения: 2014-2015 г.

Ключевые слова: литий-ионные батареи, кремний, метод функционала плотности, сорбция, диффузия

1. Цель фундаментального исследования:

Целью данной работы являлось изучение механизмов сорбции и диффузии лития на поверхности и в приповерхностных слоях Si (100) с реконструкцией c(4x2), а также исследование влияния модификации и степени заполнения поверхности кремния на параметры сорбционных и диффузионных процессов.

2. Основные результаты проекта:

Исследована поверхностная сорбция и диффузия лития на Si (001). Атомы лития предпочтительно сорбируются на поверхности в канале между димерами кремния (T3, L) и постепенно их заполняют. При этом происходит дестабилизация поверхностных состояний и переход от антисимметричной модели димеров кремния к симметричной. В результате изучения поверхностной диффузии лития на Si(001) обнаружено, что миграция одиночного атома лития в объем кремния затруднена в связи с высокими энергетическими барьерами перехода (0,89-2,46 эВ). Энергетический барьер миграции лития из приповерхностного слоя в объем Si (001) сопоставим с экспериментальным значением 0,8 эВ. Установлено, что при достижении концентрации лития на поверхности в два монослоя энергетический барьер миграции лития с поверхности в объем немного ниже (на 0,11 эВ), то есть, этот процесс будет преобладать. Проведено моделирование поверхностных процессов сорбции и диффузии лития в допированном Si (001). В ходе исследования допирования Si(001) одиночным атомом бора выявлено, что для выбранного допанта наиболее выгодно положение замещения кремния, а не адсорбции. Найдено, что атом бора замещает атом третьего слоя кремния. Тенденция первоначальной сорбции атомов лития в канале между димерами сохраняется и при допировании одиночным атомом бора. Наблюдается значительное снижение энергетических барьеров перехода атома лития по поверхности кремниевой пластины при допировании бором. Величины энергетических барьеров перехода L-U с поверхности в приповерхностные слои при допировании возрастают на 0,05 эВ. Допирование бором при концентрации допанта 0,3 атомных % не решает проблему медленной диффузии лития с поверхности кремния в объем.

3. Охраноспособные результаты интеллектуальной деятельности (РИД), полученные в рамках фундаментального, прикладного научного исследования, экспериментальные разработки

4. Назначение и область применения результатов проекта

Эффективность и энергосбережение, в том числе вопросы разработки новых видов топлива.

5. Возможность коммерциализации результатов проекта

6. Эффекты от внедрения результатов проекта

7. Наличие соисполнителей

Лыхин Александр Олегович, Тихонова Людмила Витальевна, Кожевникова Татьяна Александровна, Игнатова Нина Юрьевна.

Руководитель работ по проекту

Младший научный сотрудник, Михалёва Наталья Сергеевна