



Kraków, 29 sierpnia 2019

Teoria ujawnia naturę niedoskonałości kryształów (węglika krzemu)

Defekty w kryształach, zwłaszcza dyslokacje krawędziowe o charakterze długich uskoków, wpływają na strukturę całego materiału i modyfikują jego podstawowe właściwości, redukując możliwości zastosowań. Fizycy z Krakowa i Warszawy na przykładzie kryształu węglika krzemu pokazali, że nawet tak wymagające obliczeniowo defekty można z powodzeniem badać z dokładnością atomową za pomocą umiejętnie skonstruowanego modelu.

Matematyka kocha perfekcję. Niestety, perfekcja nie kocha fizycznej rzeczywistości. Teoretycy zajmujący się modelowaniem kryształów od dawna próbowali uwzględnić defekty występujące w prawdziwych strukturach krystalicznych i przewidywać ich wpływ na właściwości fizyczne materiałów. Modele, bazujące na wynikach różnych eksperymentów, opisywały zmiany podstawowych własności materiału bez wyjaśniania rzeczywistych przyczyn i skutków zaistniałych zjawisk. Dopiero nowy model węglika krzemu (SiC), zbudowany przez fizyków z Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk (IFJ PAN) w Krakowie, pozwolił zademonstrować, że już dziś można „z pierwszych zasad” modelować kryształy nawet z tak złożonymi defektami jak dyslokacje krawędziowe i wyjaśniać ich cechy procesami zachodzącymi w skali atomowej. Spektakularny rezultat, omawiany podczas niedawnej konferencji Multis 2019 w Krakowie i opublikowany w czasopiśmie „Journal of Materials Science”, krakowscy fizycy osiągnęli we współpracy z ulokowanymi w Warszawie Instytutem Podstawowych Problemów Techniki PAN i Instytutem Wysokich Ciśnień PAN.

„Staraliśmy się poznać na poziomie atomowym mechanizmy odpowiedzialne za obniżanie się prądu przebicia w kryształach węglika krzemu. Nasze obliczenia, wywodzące się z ‘pierwszych zasad’, prowadzą ku jakościowemu zrozumieniu problemu i przyczyniają się do wyjaśnienia szczegółów tego zjawiska”, mówi dr hab. Jan Łażewski, prof. IFJ PAN.

Obliczenia „z pierwszych zasad” mają długą historię związaną z Nagrodą Nobla dla Waltera Kohna i Johna Pople’a w 1998 roku (do symulacji defektów w kryształach wprowadzono je jednak niedawno). Pojęciem tym określa się obliczenia przeprowadzane z użyciem równań mechaniki kwantowej, wsparte jedynie wiedzą o budowie atomu i symetrii kryształów. W podejściu tym nie ma żadnych bezpośrednich informacji z eksperymentów, co oznacza, że z jego pomocą można analizować również takie materiały, których jeszcze nikt nigdy nie badał, a nawet nie zsyntetyzował. Ze względu na dużą komplikację zagadnienia, do tej pory obliczenia z pierwszych zasad stosowano jedynie do zaburzeń punktowych, związanych z wakansami (brakami atomów, czyli dziurami w strukturze krystalicznej) lub domieszkami wprowadzanymi do kryształu.

Krakowscy badacze nie bez przyczyny zajęli się węglikiem krzemu. Właściwości tego półprzewodnika są tak interesujące, że kiedyś uważano go nawet za następcę krzemu. Jego przerwa energetyczna (bariera, którą musi pokonać ładunek żeby przedostać się z pasma walencyjnego do pasma przewodnictwa i brać udział w przewodzeniu prądu) jest niemal trzykrotnie większa niż w krzemie, dopuszczalna gęstość prądu przewodzenia – dwukrotnie, zdolność do odprowadzania ciepła – ponadtrzykrotnie, a graniczna częstotliwość pracy kryształu – aż sześciokrotnie. Mało tego, układy wykonane z węglika krzemu mogą pracować w temperaturach do 650 stopni Celsjusza, podczas gdy układy krzemowe zaczynają mieć problemy już przy 120

stopniach. SiC ma także wysoką temperaturę topnienia, jest twardy, odporny na kwasy i promieniowanie. Do jego wad należy przede wszystkim cena: o ile dwucalowe płytki krzemowe kosztują zaledwie kilka dolarów, wartość podobnych płytek z węgliku krzemu trzeba liczyć w tysiącach. Kryształy węgliku krzemu o niskiej jakości to popularny materiał ścierny, stosowany również w kamizelkach kuloodpornych i w tarczach hamulcowych najdroższych samochodów świata, takich jak Lamborghini czy Bugatti. Wysokiej jakości kryształy służą do wyrobu zwierciadeł teleskopów i elementów wysokonapięciowych urządzeń o dużej odporności na temperaturę.

Na poziomie atomowym kryształy węgliku krzemu są zbudowane z wielu ułożonych jedna na drugiej płaskich warstw. Każda warstwa przypomina plaster miodu: składa się z sześciokątnych komórek, w których narożnikach są ulokowane pionowo cząsteczki węgliku krzemu. Każde dwie sąsiednie warstwy można połączyć na trzy sposoby. Wielowarstwowe „kanapki” o różnych wzajemnych ułożeniach tworzą tzw. modyfikacje politypowe, których w przypadku węgliku krzemu jest ponad 250. Grupa z IFJ PAN zajmowała się politypem oznaczonym jako 4H-SiC.

„Przy modelowaniu tego typu struktur jednym z podstawowych problemów jest złożoność obliczeniowa. Model kryształu czystego, pozbawionego domieszek czy dyslokacji, charakteryzuje się dużą symetrią i można go przeliczyć nawet w kilka minut. Żeby zrobić rachunek dla materiału z dyslokacją, potrzebujemy już całych miesięcy pracy komputera o dużej mocy obliczeniowej”, podkreśla dr hab. Paweł Jochym, prof. IFJ PAN.

Kłopoty z dyslokacjami krawędziowymi wynikają ze skali ich wpływu na strukturę krystaliczną materiału. Obrazowo można je porównać do problemów z zamaskowaniem braku części jednego rzędu płytek w posadzce. Wyrwę można „zabliźnić” przesuwając płytki sąsiadujących rzędów, ale defekt pozostanie zawsze widoczny. Dyslokacje krawędziowe, wynikające z braku całych ciągów lub połączeń atomów/cząsteczek w poszczególnych warstwach kryształu, działają podobnie, wpływając na położenia atomów i cząsteczek w wielu sąsiednich warstwach. A ponieważ dyslokacje mogą się rozciągać na znaczne odległości, w praktyce wywołane nimi zaburzenia obejmują cały kryształ.

Najciekawsze zjawiska zachodzą w rdzeniu dyslokacji, a więc w bezpośrednim sąsiedztwie krawędzi uszkodzonej warstwy sieci krystalicznej. Aby wyeliminować dalekozasięgowe efekty, wywołane pojedynczą dyslokacją, a tym samym znacznie ograniczyć liczbę rozważanych atomów, zastosowano trik: wprowadzono drugą dyslokację, o przeciwnym działaniu. W ten sposób skompensowano oddziaływanie pierwszej dyslokacji na większych odległościach.

Model kryształu SiC składał się z około 400 atomów. Przeprowadzone symulacje wykazały, że w warstwach kryształów, wzdłuż krawędzi rdzenia defektu, pojawiają się „tunele” w formie kanałów o zmniejszonej gęstości ładunku. Obniżają one lokalnie barierę potencjału i powodują, że ładunki elektryczne mogą „wyciekać” z pasma walencyjnego. Dodatkowo w przerwie wzbronionej, która w izolatorze gwarantuje brak przewodzenia prądu elektrycznego, pojawiają się stany redukujące jej szerokość i skuteczność w ograniczaniu przepływu ładunku. Wykazano, że stany te pochodzą od atomów ulokowanych w rdzeniu dyslokacji.

„Sytuację można porównać do głębokiego, stromego wąwozu, który próbuje pokonać wiewiórka. Jeśli dno wąwozu jest puste, wiewiórka nie przedostanie się na drugą stronę. Jeśli jednak na dnie rośnie pewna liczba odpowiednio wysokich drzew, wiewiórka może po ich wierzchołkach przeskoczyć na drugą stronę wąwozu. W modelowanym przez nas kryształ wiewiórką są ładunki elektryczne, pasmo walencyjne to jedna krawędź wąwozu, pasmo przewodnictwa – druga, a drzewami są wspomniane stany związane z atomami rdzenia dyslokacji”, mówi prof. Łażewski.

Teraz, gdy mechanizmy odpowiedzialne za obniżanie progów bariery energetycznej stały się znane na poziomie atomowym, pojawiło się ogromne pole do popisu dla eksperymentatorów. Zaproponowany mechanizm trzeba będzie zweryfikować, by później móc go użyć do ograniczenia negatywnego wpływu badanych defektów. Na szczęście istnieją już odpowiednie ku temu możliwości techniczne.

„Przyszłość zweryfikuje, czy nasze pomysły zostaną potwierdzone w całości. Jesteśmy jednak spokojni o losy naszego modelu i zaprezentowanego podejścia do symulowania dyslokacji krawędziowych. Już teraz wiemy, że model ‘z pierwszych zasad’ sprawdził się w konfrontacji z niektórymi danymi eksperymentalnymi”, podsumowuje prof. Jochym.

Instytut Fizyki Jądrowej PAN (IFJ PAN) w Krakowie zajmuje się strukturą materii i własnościami oddziaływań fundamentalnych od skali kosmicznej po wnętrza cząstek elementarnych. Wyniki badań – obejmujących fizykę i astrofizykę cząstek, fizykę jądrową i oddziaływań silnych, fazy skondensowanej materii, fizykę medyczną, inżynierię nanomateriałów, geofizykę, biologię radiacyjną i środowiskową, radiochemię, dozymetrię oraz fizykę i ochronę środowiska – są każdego roku przedstawiane w ponad 600 artykułach publikowanych w recenzowanych czasopismach naukowych. Częścią Instytutu jest nowoczesne Centrum Cyklotronowe Bronowice, unikalny w skali europejskiej ośrodek obok badań naukowych zajmujący się terapią protonową nowotworów. IFJ PAN jest członkiem Krakowskiego Konsorcjum Naukowego „Materia-Energia-Przyszłość” o statusie Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego (KNOW) na lata 2012-2017. Instytut zatrudnia ponad pół tysiąca pracowników. W klasyfikacji MNiSW Instytut został zaliczony do kategorii naukowej A+ w grupie nauk ścisłych i inżynierskich.

KONTAKT:

dr hab. **Jan Łażewski**, prof. IFJ PAN
Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk
tel.: +48 12 6628281
email: jan.lazewski@ifj.edu.pl

dr hab. **Paweł Jochym**, prof. IFJ PAN
Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk
tel.: +48 12 6628269
email: pawel.jochym@ifj.edu.pl

dr hab. **Przemysław Piekarz**, prof. IFJ PAN
Instytut Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk
tel.: +48 12 6628209
email: przemyslaw.piekarz@ifj.edu.pl

PUBLIKACJE NAUKOWE:

1. „Destructive influence of the edge dislocation on 4H-SiC properties – DFT study”
J. Łażewski, P. T. Jochym, P. Piekarz, M. Sternik, K. Parliński
https://indico.ifj.edu.pl/event/212/attachments/1120/1642/BoA_Multis2019.pdf
2. „DFT modelling of the edge dislocation in 4H-SiC”
J. Łażewski, P. T. Jochym, P. Piekarz, M. Sternik, K. Parliński, J. Cholewiński, P. Dłużewski, S. Krukowski
Journal of Materials Science (2019) 54:10737-10745
DOI: 10.1007/s10853-019-03630-5

POWIĄZANE STRONY WWW:

<https://multis2019.ifj.edu.pl/>
Strona konferencji Multiscale Phenomena in Molecular Matter 2019.

<http://www.ifj.edu.pl/>
Strona Instytutu Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk.

<http://press.ifj.edu.pl/>
Serwis prasowy Instytutu Fizyki Jądrowej PAN.

MATERIAŁY GRAFICZNE:

IFJ190829b_fot01s.jpg

HR: http://press.ifj.edu.pl/news/2019/08/29/IFJ190829b_fot01.jpg

Model kryształu węgla krzemu z dyslokacjami krawędziowymi wprowadzonymi w miejscach zaznaczonych na czerwono. Na dole wygląd pojedynczej płaszczyzny krystalograficznej. Na żółto wyróżniono miejsca, przez które ładunki elektryczne mogą „wyciekać” do sąsiednich warstw. (Źródło: IFJ PAN)