

Teilprojekt

C7

Zweistufige Parallelisierung eines Bandstrukturprogramms
und massiv parallele Anwendung auf
Amorphisierungsphänomene an inneren Grenzflächen

2.1 Teilprojekt C7

Zweistufige Parallelisierung eines Bandstrukturprogramms und massiv parallele Anwendung auf Amorphisierungsphänomene an inneren Grenzflächen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Michael Schreiber
22.04.1954

Professur Theoretische Physik III
(Theorie ungeordneter Systeme)

Fakultät für Physik

Technische Universität Chemnitz

09107 Chemnitz

Tel.: (0371) 531-3142

Fax: (0371) 531-3143

schreiber@physik.tu-chemnitz.de

PD Dr. Sibylle Gemming

25.08.1968

Institut für Physikalische Chemie
und Elektrochemie

Fakultät für Naturwissenschaften

Technische Universität Dresden

01062 Dresden

(0351) 463-39449

(0351) 463-35953

sibylle.gemming@chemie.tu-dresden.de

Dr. Sibylle Gemming (geb. Köstlmeier) ist seit Januar 2004 an der Technischen Universität Dresden beschäftigt. Sie hat im Dezember 2004 an der Technischen Universität Chemnitz habilitiert und hat dort seit April 2005 die Lehrbefugnis im Fach Physik.

2.1.2 Projektbearbeiter

Dr. Walter Alsheimer (09/05–10/05)

Dr. Andrey Enyashin (07/05–12/05)

Dr. Agnieszka Jaron-Becker (09/05–12/05)

Carsten Olbrich (wiss. Hilfskraft)

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Gegenstand des Teilprojekts ist die Untersuchung von Strukturbildungs- und Amorphisierungsvorgängen an Metall-Halbleiter-Grenzflächen mit Hilfe von Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen auf einer gestuft parallelen Plattform aus mehreren *shared-memory*-Compute-Servern, die untereinander mit einem schnellen, internen Netzwerk verbunden sind. Mit drei HP 9000 N4000 Enterprise-Servern mit je 8 *shared-memory*-Prozessoren verfügt die Arbeitsgruppe über eine geeignete Testplattform, und die gegenwärtigen Entwicklungen der Computertechnik hin zu Mehrprozessor-Rechnern bestätigen daher den gewählten Ansatz. Konkretes Ziel der Untersuchungen war es, den Zusammenhang zwischen den strukturellen Eigenschaften von reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen und dem elektronischen Transport im nanoskaligen Bereich zu beschreiben. Der Fokus der Studie ist auf Grenzflächen zwischen Titan und Silizium und die dort

entstehenden dünnen Filme aus binären Modifikationen gerichtet. Insbesondere in der Nanoelektronik spielt diese Materialkombination eine immer bedeutendere Rolle, weil Ti als Haftvermittler für mikro- und nanoskalige Goldkontakte auf Silizium-Oberflächen eingesetzt wird. Konkret sollte die Grenzfläche $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ als Modellsystem dienen, deren Struktur und Reaktivität in der dritten Förderperiode bereits quantitativ analysiert wurden. Zu diesem Materialsystem liegt somit eine umfangreiche Datenbasis vor, auf der nun der Zusammenhang von Struktur und Transporteigenschaften über die Grenzfläche untersucht werden sollte.

Im Berichtszeitraum wurden dazu folgende Ziele bearbeitet:

- Die Studien zu $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ wurden auf größere Strukturmodelle ausgedehnt, um den Einfluß weitergehender Relaxationen zu erfassen.
- Parallel dazu wurden die Wechselwirkungen an den neu entstandenen Grenzflächen zum binären Silizid hinsichtlich der Stabilität und der strukturellen und elektronischen Eigenschaften charakterisiert.
- In Ergänzung zur Untersuchung der dünnen Grenzflächenfilme wurden die strukturellen und elektronischen Eigenschaften eindimensional ausgedehnter Titansilizid-Nanostrukturen (Nanoröhren, Nanostäbchen) untersucht, um auch den Zusammenhang zwischen Dimensionalität und Leitfähigkeit quantitativ zu erfassen.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Im Berichtszeitraum wurden die Grundlagen für die geplante Untersuchung des elektronischen Transports über Metall-Halbleiter-Grenzflächen und -Nanostrukturen erarbeitet. Die Teilaufgaben 2.3.1 bis 2.3.3 sind verbunden mit den materialwissenschaftlichen Fragestellungen, den Dichtefunktional-Bandstruktur-Rechnungen zu Strukturbildung, Wechselwirkung und den elektronischen Eigenschaften reaktiver Metall-Halbleiter-Grenzflächen. Teilaufgabe 2.3.4 erweitert diese Thematik auf eindimensional ausgedehnte binäre Nanostrukturen wie Röhren und Stäbchen.

2.3.1 Teilaufgabe “Untersuchung langreichweitiger Relaxationen an der $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche mit größeren Strukturmodellen”

Der Mitarbeiter der Ergänzungsaustattung sollte ausgehend von den in der dritten Förderperiode untersuchten Grenzflächen $\text{Si}(111)|\text{Ti}(0001)$ zwischen den Elementkristallen größere Superzellen konstruieren und optimieren. Für diese Rechnungen werden Schichtmodelle in großen Superzellen periodisch wiederholt, und somit die Grenzflächen als unendlich ausgedehnte planare Defekte beschrieben. Da die meisten experimentell beobachteten Systeme dieses Typs die Festphasen-Amorphisierung durchlaufen, gibt es - abgesehen von den in der dritten Förderphase mit kleineren Strukturmodellen berechneten Ergebnissen - bislang wenige Daten zur Stabilität, zur lokalen geometrischen

Struktur, oder zu den elektronischen Wechselwirkungen an dieser Grenzfläche. Da mit kleineren Strukturmodellen auch in der Mitte der Siliziumschicht noch strukturelle Relaxationen auftraten, sollten zusätzliche Daten aus molekularstatischen Modellrechnungen größerer Superzellen vor der Amorphisierung gewonnen werden. Bisher wurden folgende Faktoren für die Reaktivität der Grenzfläche identifiziert: der Elektronegativitätsunterschied von Ti und Si, der eine Negativierung der Silizium-Ionen und damit eine Silizid-Bildung bevorzugt, sowie die Fehlpassung der Gitterkonstanten von Silizium und Titan, welche ungünstige elastische Wechselwirkungen an der Grenzfläche induziert. Es war zu prüfen, ob auch größere, realistische Strukturmodelle diese Trends bestätigen.

2.3.2 Teilaufgabe “Silizid-Bildung an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche”

Der Beginn der Bildung von TiSi_2 an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche wurde bereits in der letzten Förderphase mit Hilfe der Dichtefunktional-Molekulardynamik-Methode studiert. Dabei folgen die Kerne den klassischen Newton'schen Bewegungsgleichungen auf der Born-Oppenheimer-Oberfläche, die durch die quantenmechanische Wechselwirkung des Elektronensystems bestimmt ist. So konnte mit Hilfe geeigneter Strukturmodelle gezeigt werden, wie sich die relevanten Wechselwirkungsparameter, die Elektronegativität und die elastische Verspannung mit zunehmender Temperatur verändern und wie sich bei Ausbildung der neuen Modifikation die elastische Verspannung der Grenzfläche reduziert. Im Berichtszeitraum sollten längere Simulationszeiten bei einer Temperatur von 900 K durchgeführt werden, auf deren Basis gemittelte Strukturparameter wie Koordination und Bindungslänge an der Grenzfläche quantifiziert werden können.

2.3.3 Teilaufgabe “Stabilität und Struktur der reagierten Grenzfläche”

Durch die Ausbildung der Silizid-Modifikation entstehen an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche zwei neue Grenzflächen zwischen Silizid und Silizium bzw. zwischen Silizid und Titan. Die Stabilität dieser beiden Grenzflächen sollte mit Hilfe von Dichtefunktional-Untersuchungen berechnet werden. Ein Vergleich der Grenzflächenenergien mit derjenigen der unreaktierten Grenzfläche erlaubt es, den thermodynamischen Beitrag abzuschätzen, der zu einer Stabilisierung der reagierten Grenzfläche führt. Dazu sollte zunächst eine niederenergetische, stabile Kristallebene des TiSi_2 gefunden und dann in Kontakt mit den beiden Grenzflächenebenen der Reinkristalle, also mit Ti(0001) und Si(111) gebracht werden. Dabei war zu beachten, dass die Gitterfehlpassung nicht höher als die der Ausgangsverbindungen ist, da die Reaktion unter der Randbedingung erfolgt, dass die elastische Energie des Systems durch die Reaktion verringert wird.

2.3.4 Teilaufgabe “Stabilität, Struktur und elektronische Eigenschaften von nanostrukturiertem TiSi_2 ”

In Ergänzung zu den dünnen, zweidimensionalen Grenzflächenfilmen aus Titandisilizid, welche an ausgedehnten Titan-Silizium-Kontakten gebildet werden, sollte gezielt auch der Einfluss einer nanoskaligen Kontaktgeometrie auf die strukturellen, elektronischen und Transport-Eigenschaften untersucht werden. Neben nanotubularen Systemen, welche vor allem von weniger stark ionischen Materialien bevorzugt werden, sollten auch stäbchenförmige Strukturen untersucht werden, in denen die lokale Koordinationsgeometrie mehr der im ungestörten, unendlich ausgedehnten Volumenkristall entspricht. Um die Periodizität der Strukturen in Röhren- bzw. Stäbchen-Richtung zu nutzen, sollte auch diese Untersuchung mit dem Bandstruktur-Verfahren erfolgen, mit dem bereits die Grenzfläche optimiert wurde. Um eine Wechselwirkung der Nanoröhren oder Nanostäbchen mit ihren periodischen Replika auszuschließen, sollte die Superzellgröße so optimiert werden, dass sie hinreichend viel Vakuum enthält.

2.4 Ergebnisse

Im Berichtszeitraum erfolgte die Anwendung des parallelisierten Pseudopotential-Bandstruktur-Programms zur Berechnung der strukturellen und elektronischen Eigenschaften der Metall-Halbleiter-Grenzflächen, ergänzt um Dichtefunktional-basierte “tight-binding”-Studien zu noch größeren Strukturmodellen mit bis zu 1000 Atomen. Die Gitterfehlpassung, die durch die unterschiedlichen Gitterkonstanten von Titan bzw. Vanadium und Silizium an der $\text{M}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche auftritt, konnte dadurch adäquat mit großen Superzellen mit vertretbarem numerischem Aufwand modelliert werden. Dazu wurde vor allem die in den numerischen Algorithmen des Programms vorliegende Parallelität über die Stützstellen bei der k -Raum-Integration sowie bei der Fouriertransformation zwischen Orts- und Impulsraum genutzt.

2.4.1 Teilaufgabe “Untersuchung langreichweitiger Relaxationen an der $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche mit größeren Strukturmodellen”

Ausgehend von den in der dritten Förderperiode untersuchten Grenzflächen zwischen den Elementkristallen $\text{Si}(111)|\text{Ti}(0001)$ wurden größere Superzellen mit bis zu 1000 Atomen konstruiert und optimiert. Zum Erstellen der Startstrukturen für diese Rechnungen wurde auf ein Dichtefunktional-basiertes “tight-binding”-Verfahren zurückgegriffen, das ebenfalls unter Verwendung periodischer Randbedingungen eine Beschreibung des Grenzflächensystems mit Hilfe von Schichtmodellen ermöglicht. Dies war erforderlich, da bei den Untersuchungen, die in der dritten Förderperiode an kleineren Strukturmodellen mit bis zu 200 Atomen noch eine Veränderung der Strukturparameter im Inneren der Siliziumschicht gefunden wurde.

Die Grenzflächenenergie des Silizium-Titan-Kontaktes vor der Reaktion wurde mit Dichtefunktional-Untersuchungen zu 0.28 J/m^2 berechnet [GS05a, G04, gs04]. Mit der “tight-

binding"-Methode wurde für die selbe Superzellgröße ein Wert von 0.32 J/m^2 erhalten, der im Rahmen der Methodengenauigkeit sehr gut mit dem Ergebnis der Dichtefunktional-Studie übereinstimmt. Auch für größere Superzellen von bis zu 1000 Atomen steigt die berechnete Grenzflächenenergie nur noch marginal auf 0.35 J/m^2 an. Die strukturelle Relaxation umfasst die ersten beiden Si(111)-Doppellagen an der Grenzfläche und klingt dann ab, so dass bereits die dritte Si-Doppellage den Si-Si-Abstand des relaxierten Volumenkristalls aufweist. Auch der Translationszustand, der mit Rechnungen auf der Basis der vollen Dichtefunktionaltheorie erhalten worden war, wurde in diesen Berechnungen bestätigt. Damit sind die bereits diskutierten Faktoren für die Reaktivität der Grenzfläche bestätigt: der Elektronegativitätsunterschied von Ti und Si führt zu einer Negativierung der Silizium-Ionen und damit zur Silizid-Bildung, während die Fehlpassung der Gitterkonstanten von Silizium und Titan ungünstige elastische Wechselwirkungen an der Grenzfläche induziert und die Mobilität der Atome erhöht [gcs04a, g05, ges05].

2.4.2 Teilaufgabe "Silizid-Bildung an der Ti(0001)|Si(111)-Grenzfläche"

Darauf aufbauend wurden Molekulardynamik-Simulationen mit Hilfe von Superzellmodellen durchgeführt, welche die Grenzfläche Ti(0001)|Si(111) vor, während und nach der Silizidbildung repräsentieren. Vor der Silizidbildung beträgt die Energie der reinen Grenzfläche nur 0.28 J/m^2 [GS05a, G04, gs04, gcs04a]. Dies deutet darauf hin, dass die Wechselwirkung vor der Grenzflächenreaktion nur schwach attraktiv ist und von den wenigen direkten Ti-Si-Bindungen vermittelt wird. Die Grenzflächenreaktion führt zu einer Angleichung und Reduktion der Komponenten des elastischen Spannungstensors, durch den die Fehlanpassung ausgeglichen wird. Durch diesen Vorgang erhöht sich die Bindungsenergie signifikant auf 0.52 J/m^2 [GS06a, GS06b]. Im Einklang mit experimentellen Befunden wurde beobachtet, dass Silizium die mobilere Spezies an der Grenzfläche ist. Vorläufige Ergebnisse für die Grenzflächen Ti|TiSi₂|Si lassen darauf schließen, dass die für Kobalt berechnete Stabilisierung durch Silizidbildung auch bei Titan erfolgt (siehe auch Abschnitt 2.4.3) [GS05a, ges05].

Für ein kleineres Superzell-Modell, bei dem starke expansive Kräfte auf Silizium und kontraktive Kräfte auf Titan wirken, war das System sogar nichtbindend [gs04, g04a]. Diese Befunde stehen im Einklang mit weiteren Dichtefunktional-Untersuchungen zu Fremdatom-dotierten Oxid-Grenzflächen, an denen abhängig von der Größe und der elektronischen Struktur des Dotierstoffs ein Versagen der Grenzfläche prognostiziert wird, welches - neben elektronischen Faktoren - wie an der Titan-Silizium-Grenzfläche auf ungünstige elastische Wechselwirkungen zurückzuführen ist [GS06c, GS05b, gjss04, g04a, g04b, g04c].

Aufgrund der Gitterfehlanpassung zwischen Titan ($a_0 = 2.95 \text{ \AA}$) und Silizium ($a_0 = 3.85 \text{ \AA}$) beinhalten gleiche Bereiche der Ti(0001)- und Si(111)-Oberflächen eine unterschiedliche Anzahl an Atomen mit einem Verhältnis von Ti : Si von etwa 16 : 18, so dass die Bildung eines durchgehenden TiSi₂-Films mit größeren Atomumordnungen verbunden ist und innerhalb der begrenzten Simulationsdauer nicht erwartet werden kann. Es können jedoch die lokalen Strukturparameter, z. B. der Ti-Si-Abstand, an der Grenzfläche im Simulationsmittel verfolgt werden. Vor der Reaktion ergab die Geometrieoptimierung

der Grenzfläche eine Verbiegung der Titan-Ebene an der Grenzfläche um 0.09 \AA . Durch diese Deformation gleichen sich die Ti-Si-Abstände für die verschiedenen Adhäsionsplätze an der Grenzfläche einander an, so dass sie im Intervall 2.6 bis 2.7 \AA liegen. Die Siliziumlage an der Grenzfläche zeigte hingegen keine signifikante Aufräuhung, aber der Abstand zur darunterliegenden Siliziumlage war um 0.21 \AA vermindert. Dadurch bilden die beiden Siliziumlagen eine leicht abgeflachte gewellte Sechseckstruktur, die auch in Schichtsiliziden wie CaSi_2 vorliegt. Dadurch kommen bereits am nicht reagierten Kontakt die Si-Atome der zweiten Lage in näheren Kontakt mit der Titanschicht und können sich an der Wechselwirkung mit dem Titan beteiligen [GS05a, G04].

Abbildung 2.1 zeigt die radiale Verteilungsfunktion (*Radial Distribution Function*) für den Si-Ti-Abstand, der im Bereich der Grenzfläche auftritt. Die obere Kurve stellt die Abstände vor der Grenzflächenreaktion dar, die untere Kurve gibt die Mittelwerte wieder, die im Verlauf einer Born-Oppenheimer-Molekulardynamik-Simulation bei einer Temperatur von 600 K über einen Zeitraum von 5 ps erhalten wurden. Da vor der Reaktion nur einige wenige Si-Ti-Abstände die lokale Koordination an der Grenzfläche bestimmen, weist die obere Kurve sehr klar gegeneinander abgegrenzte Maxima auf, während die Verteilungsfunktion durch die Mittelung über die Molekulardynamik-Simulation verbreitert wird. Wie Abbildung 2.1 zeigt, verstärkt sich der Trend zur Angleichung der Ti-Si-Abstände nach der Reaktion der beiden Komponenten. Durch die Grenzflächenreaktion kommt es damit zu einer Ausbildung weiterer attraktiver Ti-Si-Wechselwirkungen, welche die Erhöhung der Grenzflächenenergie nach sich ziehen [GS06a, GS06b]. Neben den Molekulardynamik-Simulationen wurde auch ein modifiziertes Monte-Carlo-Ising-Verfahren entwickelt, das es erlaubt, die Strukturbildung in einer Filmgeometrie auf einem größeren Ausschnitt einer realistischen, defektbehafteten Oberfläche zu simulieren [O04, gmcs04, sgmc04, omg+05]. Dieses Verfahren, ursprünglich für die Bedeckung mit Molekülen konzipiert, erlaubt es nach einer Anpassung der Wechselwirkungsparameter auch, die Bildung von Silizid-Inseln bzw. -Körnern an der Grenzfläche zu modellieren.

2.4.3 Teilaufgabe “Stabilität und Struktur der reagierten Grenzfläche”

An der $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche entstehen durch die Reaktion und Ausbildung einer Silizid-Modifikation zwei neue Grenzflächen zwischen Silizid und Silizium bzw. zwischen Silizid und Titan. Die Stabilität dieser beiden Grenzflächen wurde mit Hilfe von Dichtefunktional-Studien untersucht. Für die Grenzfläche zwischen einer $\text{Si}(111)$ - und einer $\text{TiSi}_2(001)$ -Oberfläche konnte ein Strukturmodell erstellt werden, welches eine geringere Gitterfehlpassung von 5% aufweist. Dabei stehen je zwei Einheitszellen des Si einer Einheitszelle des TiSi_2 ($a_0 = 8.10 \text{ \AA}$) gegenüber. Hochsymmetrische Adhäsionsplätze gibt es für Silizium-Atome der $\text{Si}(111)$ -Fläche auf den Si-Atomen, auf den Ti-Atomen, bzw. auf den Dreifachloch-Plätzen über je zwei Si-Atomen und einem Ti-Atom des TiSi_2 . Alle drei Plätze sind mit Grenzflächenenergien zwischen 0.9 und 1.2 J/m^2 stabiler als die $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Grenzfläche vor der Reaktion. Die Ti-Si-Bindungslängen betragen 2.64 \AA und sind damit ebenfalls in dem Bereich, der sich während der Molekulardynamik-Simulation als stabile Koordinationsgeometrie einstell-

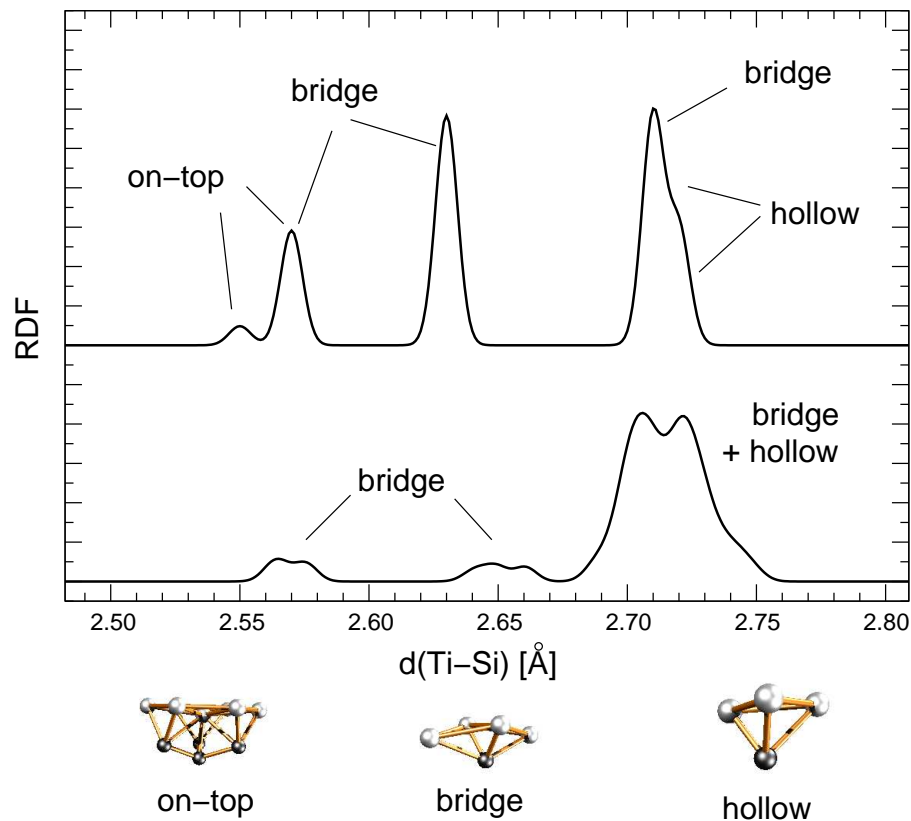


Abbildung 2.1: Lokale Koordination im Grenzflächensystem Ti(0001)|Si(111)

te. Für die analoge Untersuchung der Ti(0001)|TiSi₂-Grenzfläche konnte bislang keine kleine Einheitszelle gefunden werden, welche eine Berechnung mit voller Dichtefunktionaltheorie erlaubt. Eine Abschätzung mit Hilfe der “tight-binding”-Methode ergab aber auch für diese Grenzfläche Energien von mehr als 1.2 J/m².

2.4.4 Teilaufgabe “Stabilität, Struktur und elektronische Eigenschaften von nanostrukturiertem TiSi₂”

In Ergänzung zu den dünnen, zweidimensionalen Grenzflächenfilmen aus Titandisilizid, welche an ausgedehnten Titan-Silizium-Kontakten gebildet werden, sollte gezielt auch der Einfluss einer nanoskaligen Kontaktgeometrie auf die strukturellen, elektronischen und Transport-Eigenschaften untersucht werden, da in verwandten, metallischen wie halbleitenden binären und ternären Nanostrukturen deutliche Abweichungen zwischen den Materialeigenschaften von Nanokontakten und von makroskopisch ausgedehnten Systemen auftreten [GSS04a, GSS04b, IHGS06, gss04a, gss04b, gss04c, gss04d, gs05]. Neben nanotubularen Systemen, welche besonders von weniger stark ionischen Materialien bevorzugt werden, wurden vor allem für kleinere Durchmesser auch stäbchenförmige Strukturen untersucht, in denen die lokale Koordinationsgeometrie mehr der im ungestörten, unendlich ausgedehnten Volumenkristall entspricht [g04a, g04b, g04c]. Um die Periodizität der Strukturen in Röhren- bzw. Stäbchen-Richtung zu nutzen, erfolgte auch

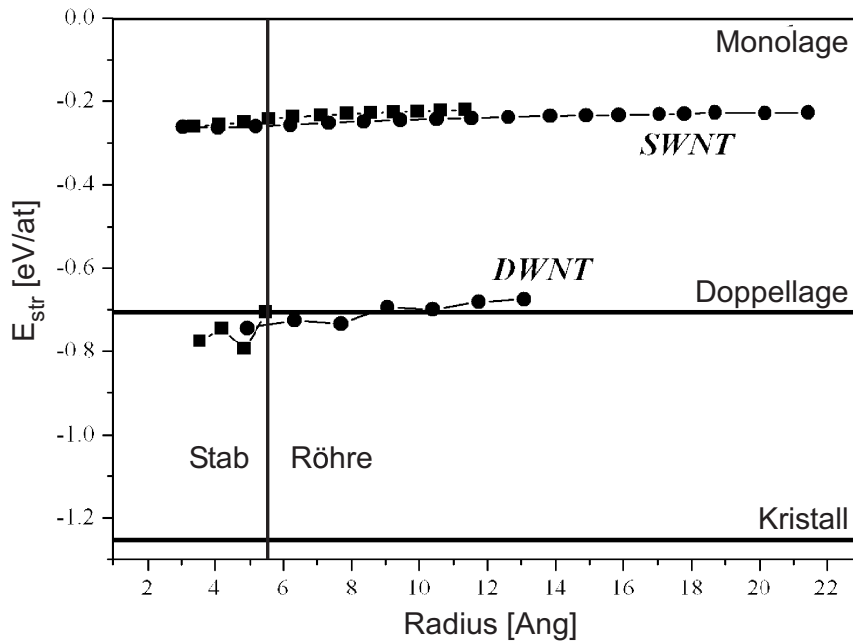


Abbildung 2.2: Energetik nanoskaliger TiSi_2 -Strukturen im Vergleich zur Energie des Volumenkristalls bzw. der dünnen ein- und zweilagigen Filme.

diese Untersuchung mit dem Bandstruktur-Verfahren, mit dem bereits die Grenzfläche optimiert wurde [EGS06].

Abbildung 2.2 zeigt die Energetik der berechneten Nanostrukturen im Vergleich zur Energie des Volumenkristalls, der Monolage und der Doppellage. Im Gegensatz zur Situation bei Nanoröhren sind die Nanostrukturen jeweils stabiler als die entsprechende Mono- bzw. Doppellage. Dies zeigt, dass neben der elastischen Verspannung, die zur Krümmung der Lage erforderlich ist, attraktive, kovalente und Coulomb-Wechselwirkungen auftreten, welche die kompakteren Strukturen begünstigen. Im Gegensatz zu anderen binären Verbindungen unterscheidet sich aber bei binären Titan-Silizium-Phasen das Mischungsverhalten auf der Nanometerskala nicht grundlegend von den Verhältnissen im ausgedehnten Volumenkristall [GSS04a, gss04a, gss04b, gss04c, gss04d]. In einem Hauptgruppen-Silizid der gleichen Stöchiometrie wie die hier relevanten Verbindungen, dem CaSi_2 , wurde ferner nachgewiesen, dass sich das Zintl-Konzept der Strukturbildung auch auf Nanostrukturen übertragen lässt.

Im Gegensatz dazu weichen die elektronischen Eigenschaften des nanostrukturierten TiSi_2 von denen des Volumenkristalls ab. Abbildung 2.3 gibt eine Gegenüberstellung der berechneten elektronischen Zustandsdichten für den Volumenkristall in der C54-Struktur (a), für eine (001)-Monolage (b), sowie für eine tubuläre Nanostruktur mit einem Innendurchmesser von 6.21 Å. Neben der gesamten Zustandsdichte sind auch projizierte Zustandsdichten links für Titan, rechts für Silizium, abgebildet. Deutlich erkennbar ist der starke Anstieg elektronischer Zustände im Bereich der Fermienergie (0 eV) beim Übergang vom Volumenkristall zur Nanostruktur, der ein Indiz für eine bessere elektronische Leitfähigkeit der Nanostrukturen ist. Der Anstieg der Zu-

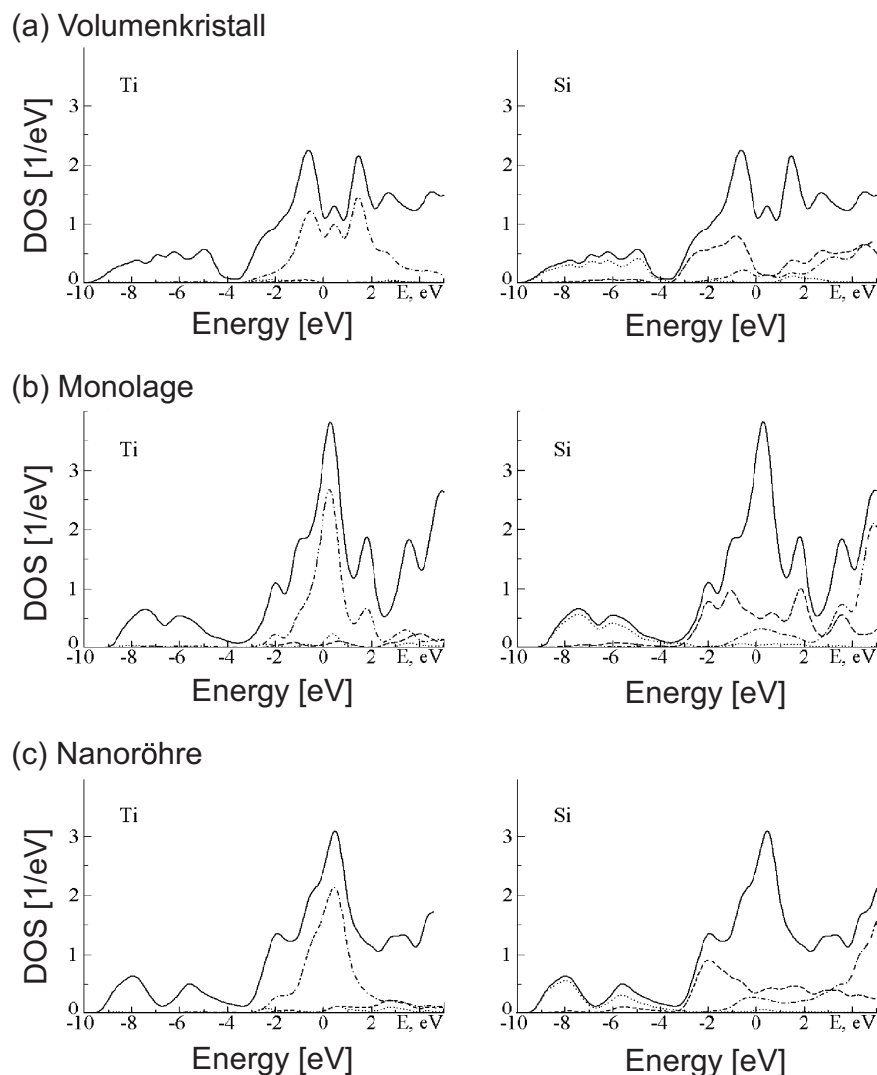


Abbildung 2.3: Platz- und Drehimpuls-projizierte Dichte elektronischer Zustände von TiSi_2 als Volumenkristall (a), als (001)-Monolage (b) und als (6,6)-Nanoröhre (c). Die durchgezogenen Linien zeigen die gesamte Zustandsdichte, die s-, p- und d-Zustände sind jeweils durch gepunktete, gebrochene und gestrichpunktete Linien gekennzeichnet. Die linken Graphen zeigen Projektionen auf die Ti-Zustände, die rechten Graphen sind Projektionen auf die Si-Zustände.

standsdichte tritt bereits bei der einzelnen Monolage auf und ist bei der Nanoröhre verstärkt, ist also als "finite-size"-Effekt zu klassifizieren. Deshalb sollten TiSi_2 -Schichten am $\text{Ti}(0001)|\text{Si}(111)$ -Kontakt, welche die Adhäsion zwar verbessern, aus elektronischen Gründen im tatsächlich herzustellenden Bauelement möglichst dünn gehalten werden. Mit Hilfe der Platz- und Drehimpuls-projizierten Zustandsdichten konnte gezeigt werden, dass die leeren d-Zustände des Titan für diesen Anstieg maßgeblich sind, so dass das Silizid auch eine ideale Basis für eine Kontaktierung mit einem anderen Übergangsmetall, z. B. mit Gold darstellt.

Literaturverzeichnis

- [EGS06] A. N. Enyashin, S. Gemming, G. Seifert, TiSi₂ nanostructures - enhanced conductivity at the nanoscale? *phys. stat. sol. (b)*, zur Veröffentlichung eingereicht.
- [G04] S. Gemming. Structure and reactivity at interfaces - density-functional investigations, Habilitation, TU Chemnitz, Dezember 2004.
- [GS05a] S. Gemming, M. Schreiber. Density-functional investigation of alloyed nanowires. *Comp. Phys. Commun.* 169:57-59, 2005.
- [GS05b] S. Gemming, M. Schreiber. Impurity and vacancy clustering at the $\Sigma 3$ (111) [1-10] grain boundary in strontium titanate *Chem. Phys.* 309:3-13, 2005.
- [GS06a] S. Gemming, M. Schreiber. Theoretical investigation of interfaces. in *New materials in experiments and simulations*, Hrsg.: J.B. Suck, M. Schreiber und S. Gemming, Springer Series in Material Science (Springer, Berlin, Heidelberg 2006), zur Veröffentlichung eingereicht.
- [GS06b] S. Gemming, A. Enyashin, M. Schreiber. Amorphisation at heterophase interfaces. in *Parallel Algorithms and Cluster Computing - Implementations, Algorithms, and Applications* -, Hrsg.: K.H. Hoffmann und A. Meyer, Springer Lecture Notes in Computational Science and Engineering (Springer, Berlin, Heidelberg 2006), zur Veröffentlichung eingereicht.
- [GS06c] S. Gemming, M. Schreiber. Structural and electronic properties of the near $\Sigma 5(111)$ grain boundary in anatase. *J. Chem. Phys.*, zur Veröffentlichung eingereicht.
- [GSS04a] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. DFT investigation of nanostructured binary compounds. in *Electronic properties of synthetic nanostructures*, Hrsg. H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring und S. Roth, AIP Conf. Proc. 723, 368-371 (2004).
- [GSS04b] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density functional investigation of gold-coated nanowires. *Phys. Rev. B* 69, 245410:1-6, 2004.
- [IHGS06] V. V. Ivanovskaya, T. Heine, S. Gemming, G. Seifert, Structure, stability and electronic properties of the composite Mo_{1-x}Nb_xS₂ nanotubes. *phys. stat. sol. (b)*, im Druck.
- [O04] C. Olbrich. Ising-Modell zur Simulation von Molekülaggregaten auf gestuften Oberflächen, Bachelor-Arbeit, TU Chemnitz, August 2004.

Beiträge zu wissenschaftlichen Veranstaltungen:

- [g04a] S. Gemming. DFT for systems with reduced dimensionality. Seminar des SFB 648, Ruhr-Universität Bochum, Bochum, 07/04.
- [g04b] S. Gemming. DFT für Systeme mit reduzierter Dimensionalität. Heraeus-Ferienkurs für Physik, TU Chemnitz, 09/04.
- [g04c] S. Gemming. DFT for systems with reduced dimensionality. Seminar des IFF, IFW Dresden, Dresden, 11/04.
- [g05] S. Gemming. Density-functional band-structure calculations. COST-Workshop “Density-Functional Methods”, Dresden, 04/05.
- [gcs04a] S. Gemming, I. Chaplygin, M. Schreiber. A reactive interface: silicon - titanium. EPS-Meeting, Prag, Tschechien, 07/04.
- [ges05] S. Gemming, A. Enyashin, M. Schreiber. Structure and reactivity at metal-semiconductor interfaces. Psi-K Meeting (EU), Schwäbisch Gmünd, 09/05.
- [gjs04] S. Gemming, R. Janisch, M. Schreiber, N. Spaldin. DFT Investigation of a low-energy interface in anatase. 103. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft, Dresden, 05/04.
- [gmcs04] S. Gemming, K. Morawetz, C. Olbrich, M. Schreiber. A multi-parameter Ising model for the adsorption at structured surfaces. Seminar des SFB 609, Institut für Gesteinshüttenkunde, RWTH Aachen, 11/04.
- [gs04] S. Gemming, M. Schreiber. Density-functional study of the titanium-silicon interface. Europhysics Conference on Computational Physics (CCP 2004), Genua, Italien, 09/04.
- [gs05] M. Schreiber, S. Gemming. DFT investigation of systems with reduced dimensionality. Summer School NANOMA 2005, Physics and Chemistry of Nanomaterials, Cluj-Napoca, Rumänien, 09/05.
- [gss04a] S. Gemming, M. Schreiber, G. Seifert. DFT investigation of alloyed nanowires. EPS-Meeting, Prag, Tschechien, 07/04.
- [gss04b] S. Gemming, M. Schreiber, G. Seifert. Density functional investigation of gold-coated metallic nanowires. Workshop Cooperative Phenomena in Optics and Transport in Nanostructures, MPI Dresden, 06/04.
- [gss04c] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. Density-functional investigation of alloyed metallic nanowires. Europhysics Conference on Computational Physics (CCP 2004), Genua, Italien, 09/04.
- [gss04d] S. Gemming, G. Seifert, M. Schreiber. DFT investigation of alloyed metallic nanowires. 40th Symposium for Theoretical Chemistry, Suhl, 09/04.
- [omg+05] C. Olbrich, K. Morawetz, S. Gemming, R. Scholz, M. Schreiber, R. Ermrich, G. Seifert. A multi-parameter Ising model for the adsorption of molecules at structured surfaces. DPG-Frühjahrstagung des AK Festkörperphysik, Berlin, 03/05.

- [sgmc04] M. Schreiber, S. Gemming, K. Morawetz, C. Olbrich. A multi-parameter Ising model for the adsorption of molecules at structured surfaces. CompPhys04 (5th NTZ-Workshop on Computational Physics, Leipzig, 11/04.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

In der laufenden Förderperiode wurden die mikroskopischen Mechanismen aufgeklärt, welche die Strukturbildung an reaktiven Metall-Halbleiter-Grenzflächen steuern und in nanostrukturierten binären Modifikationen zur Ausbildung neuartiger elektronischer Eigenschaften führen. Dazu wurde neben dem parallelen Bandstrukturverfahren auch ein “tight-binding”-Ansatz verwendet, mit dem sich im Sinne eines Skalen-übergreifenden Modellierens von Materialeigenschaften geeignete Startgeometrien für die Strukturoptimierung effizient generieren lassen. Diese Ergebnisse zu Strukturbildung und zu den Eigenschaften des elektronischen Grundzustands sollen als Ausgangspunkt für die weitergehende Untersuchung des elektronischen Transports über Metall-Halbleiter-Grenzflächen dienen.

Konkret sollen damit für das System Ti(0001)|Si(111) drei komplementäre theoretische Ansätze verfolgt werden:

1. Dichtefunktional-Störungstheorie, bei der die Reaktion des Systems auf ein externes elektrisches Feld sowie auf Auslenkungen der Atome um ihre optimalen Positionen berechnet wird und die als zeitabhängige Formulierung einen Zugang zu angeregten Einteilchenzuständen liefert,
2. Wellenpaket-Dynamik auf den ebenfalls in der laufenden Förderperiode berechneten Potentialhyperflächen für den Grundzustand und für den ersten elektronisch angeregten Zustand,
3. Lösung der Bethe-Salpeter-Gleichung für die Zweiteilchen-Streuung am bereits berechneten Grenzflächenpotential.

Damit sollen folgende experimentelle Beobachtungen erklärt werden:

1. Elektronische Eigenschaften der Grenzfläche, z.B. die Leitfähigkeit, korrelieren mit der konkret vorliegenden atomistischen Struktur. Dies ist insbesondere für das Endprodukt der Grenzflächenreaktion, das TiSi₂, interessant, da von den beiden niederenergetischen Modifikationen nur die C54-Struktur (TiSi₂-Strukturtyp) einen geringen elektrischen Widerstand aufweist, während die C49-Struktur (ZrSi₂-Typ) einen für die Anwendung unerwünscht hohen Kontaktwiderstand hat.
2. Da experimentelle Hinweise vorliegen, dass die Abscheidung einer Monolage Niob an der Grenzfläche den elektronischen Transport über die Grenzfläche deutlich verstärkt, sind ebenfalls Modellrechnungen zum Einfluss der Dotieratome geplant.
3. Darüber hinaus sollen die Erkenntnisse zur Strukturbildung an der Titan-Silizium-Grenzfläche auf die Wechselwirkungen an der Grenzfläche zwischen Vanadium und

Silizium angewandt werden. Für prototypische Strukturen sollen so die Potentialdaten erzeugt werden, welche in eine vergleichende Studie zum elektrischen Transport über die Grenzfläche hinweg einfließen.

