

К.А. Иваничкина<sup>1,2</sup>, А.Е. Галашев<sup>1,2</sup>, А.В. Исаков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения  
Российской Академии Наук, Екатеринбург,

<sup>2</sup>Уральский федеральный университет им. первого  
Президента Б.Н. Ельцина,  
Екатеринбург

## **КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ПОЛУЧЕНИЯ ОДНОСЛОЙНОЙ ПЛЕНКИ КРЕМНИЯ НА СЕРЕБРЯНОЙ И ГРАФИТОВОЙ ПОДЛОЖКАХ**

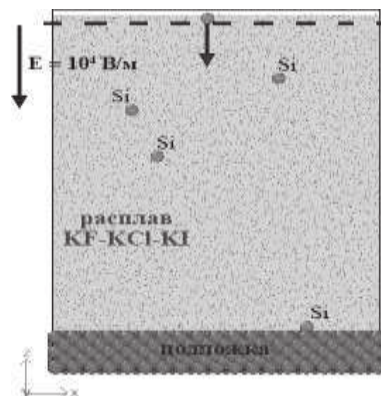
Солнечная энергия занимает ведущее место среди возобновляемых источников энергии, т.к. имеет огромный потенциал доступности и применения. В настоящее время производство кремниевых фотоэлементов является одной из самых дорогостоящих операций. Получение солнечного кремния требует потребления большого количества энергии из-за высокой температуры кристаллизации кремния и проведения сложной обработки этого материала [1]. Однако чистый кремний может быть получен и при низких температурах в жидких расплавленных солях [2, 3].

Получение покрытий путем электролитического осаждения из расплава является перспективным методом синтеза новых материалов. Интерес к данному методу привлекают такие факторы как относительно низкие температуры электролиза, возможность получения покрытий в бескислородной среде расплава, состав и свойства покрытия могут варьироваться в зависимости от состава расплава и ориентации подложки, на которую производится осаждение [4]. В связи с этим, важно иметь представление о начальных стадиях процесса формирования покрытий, получаемых электролитическим осаждением из расплава.

В настоящей работе была разработана молекулярно-динамическая модель, описывающая процесс формирования тонкой пленки кремния на двух типах подложек. Разработанная модель имитирует начальную стадию осаждения кремния из расплава KF-KCl-KI на металлическую подложку (представленную поверхностью Ag(001)) и неметаллическую подложку (представленную поверхностью графита). Общий вид такой системы представлен на рисунке 1.

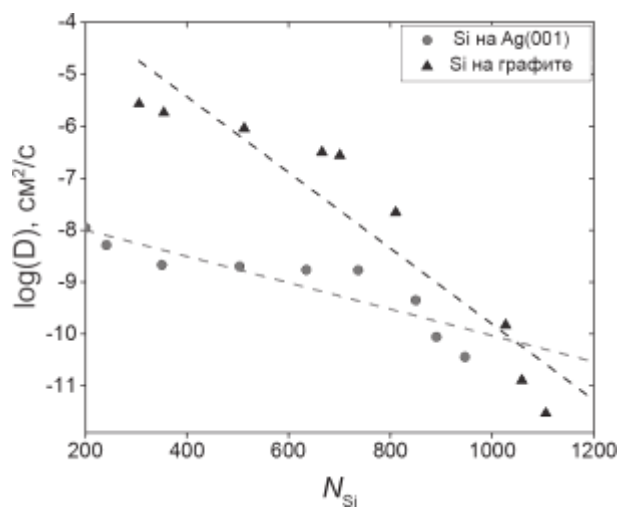
В результате было выявлено, что различие в материале подложки оказывает влияние на поверхностную диффузию кремния и, как

следствие, ведет к формированию разных двумерных структур на серебряной и графитовой подложках (рис. 2). Мы использовали упрощенную модель электроосаждения в расплавленной соли для получения пленок кремния одноатомной толщины. Моделирование показало возможность регулирования толщины получаемой пленки, т.к. процесс осаждения проходит преимущественно послойно, особенно при использовании серебряной подложки.

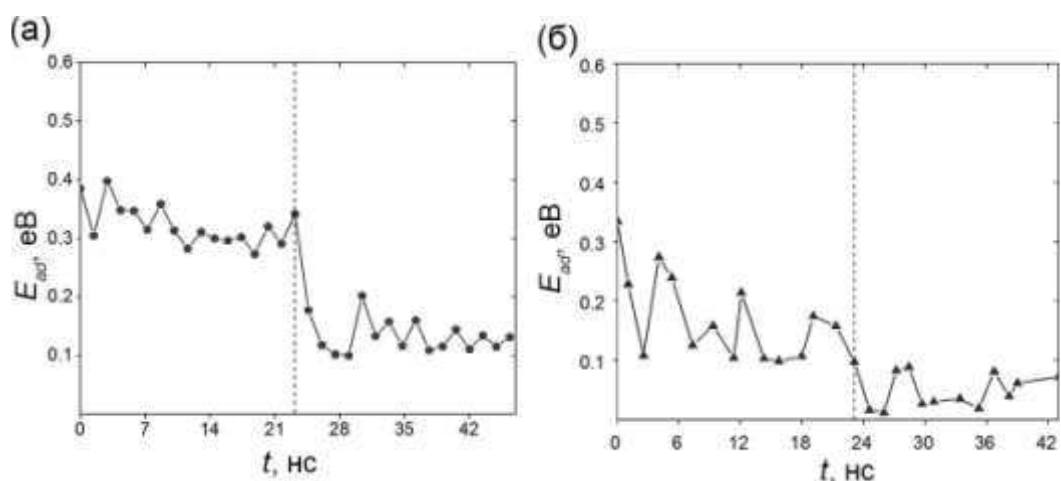


**Рисунок 1. – Общий вид исходной системы после формирования границы «расплав-подложка» в момент времени  $t = 1$  ns. Размеры системы: 7.7 x 7.7 x 11.7 нм.**

Была установлена корреляция между поверхностной диффузией кремния и величиной энергии адгезии кремниевого покрытия к материалам подложки (Рис. 3). Более низкое значение этой величины в случае графитовой подложки способствует появлению более высокой подвижности атомов кремния на графите. Различие в сцеплении пленки кремния с подложкой может оказывать влияние на процесс формирования кластеров на поверхности: на металлической подложке было обнаружено несколько центров роста кремниевой пленки, в то время как на графите наблюдался один активный центр роста. Высокая подвижность атомов Si на поверхности графита приводит к быстрому образованию пленки при осаждении кремния из расплава.



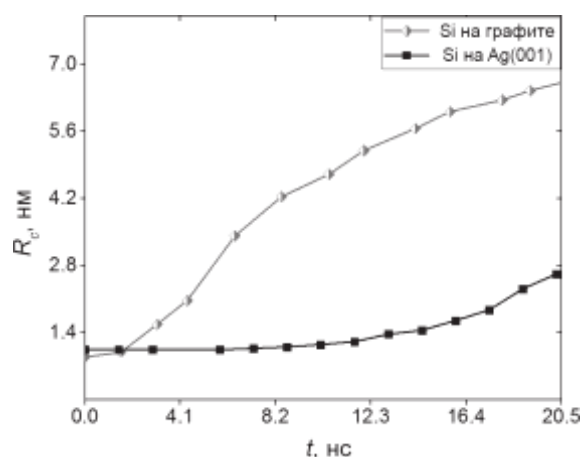
**Рисунок 2. – Поверхностная диффузия атомов кремния на серебряной и графитовой поверхностях, пунктирными линиями показана линейная аппроксимация этих зависимостей.**



**Рисунок 3. – Изменение энергии адгезии Si/Ag (а) и Si/C (б) в процессе осаждения кремния. Штрихпунктирная линия отделяет стадии роста пленки Si: левое поле – Si присутствует на подложках в форме отдельных кластеров; правое поле – подложка покрыта сплошной плёнкой; переход с левого поля на правое выражается в скачкообразном снижении энергии адгезии  $E_{adh}$ .**

Динамика роста кремниевых кластеров оценивалась на основе отслеживания среднего размера Si кластеров ( $R_c$ ), образующихся на подложке. На рисунке 4 показано изменение среднего радиуса образовавшихся кластеров во времени. Как можно видеть, характер

этой зависимости в случае использования серебряной и графитовой подложек существенно различен. В то время, как на поверхности металла наблюдается медленное, постепенное увеличение размера кластеров кремния, для графитовой подложки происходит быстрое увеличение размера, растущего Si кластера с постепенным снижением скорости роста во времени. Одной из причин различия в динамике роста кластеров кремния на различных поверхностях является неодинаковый характер поверхностной диффузии атомов кремния на подложках различных типов.



**Рисунок 4. – Средний радиус кластеров кремния, образующихся на поверхности серебра и графита, в зависимости от времени.**

#### ЛИТЕРАТУРА

1. L.C. Andreani, A. Bozzola, P. Kowalczewski, M. Liscidini, L. Redorici, Silicon solar cells: toward the efficiency limits // *Advances in Physics: X*, 2019, Vol. 4. P. 1548305.
2. W. Xiao, D. Wang, The electrochemical reduction processes of solid compounds in high temperature molten salts // *Chemical Society Reviews*, 2014, Vol. 43, P. 3215-3228.
3. K. Yasuda, K. Maeda, T. Nohira, R. Hagiwara, T. Homma, Silicon electrodeposition in water-soluble KF-KCl molten salt: optimization of electrolysis conditions at 923 K // *Journal of the Electrochemical Society*, 2016, Vol. 163. P. D95–D99.
4. J. Ustarroz, X. Ke, A. Hubin, S. Bals, H. Terryn, New Insights into the Early Stages of Nanoparticle Electrodeposition // *The Journal of Physical C*, 2012, Vol. 116. P. 2322-2329.