

Doceniamy metale szlachetne od blisko 6000 lat. Barwa, blask, duża gęstość, kowalność, stałość własności, odporność, ponadczasowość – to walory platynowców (ruten, rod, pallad, osm, iryd i platyna) i miedziowców (srebro i złoto), decydujące o wachlarzu ich zastosowań. Dzięki szczególnej odporności nawet na agresywne środowisko chemiczne i wysoką temperaturę, wysokie przewodnictwo elektryczne i cieplne, właściwości katalityczne, metale te są również bezcenne i dziś, w nanotechnologii. Stosuje się je w układach scalonych jako elektrody w pamięciach dynamicznych DRAM, elektrody w tranzystorach, jako barierę chroniącą miedziane złącza w układach elektronicznych, a także w katalizie, sensoryce i w szeregu innych zastosowań. Nanocienkie warstwy metali szlachetnych są więc ważnym elementem obecnej i przyszłej technologii.

Super-cienką strukturę materiału można uzyskać za pomocą nowoczesnej techniki osadzania warstw atomowych (ang. *atomic layer deposition*, ALD), która zapewnia idealne pokrycie skomplikowanych struktur trójwymiarowych. Technika ta oparta jest na zasadzie sekwencji reakcji chemicznych reagentów na stałym podłożu, w wyniku których materiał jest osadzany atomowa warstwa po atomowej warstwie. W związku z czym, osadzanie warstw metali szlachetnych, które z definicji są chemicznie inertne, stanowi wyzwanie.

Głównym wyzwaniem ALD metali jest proces redukcji prekursora metalu, zbudowanego zazwyczaj z kationu metalu otoczonego przez ujemnie naładowane ligandy organiczne, do metalu. Istniejące strategie polegają na użyciu reagenta redukującego lub, nieintuicyjnie, reagenta utleniającego. Użycie reduktora, np. plazmy  $H_2$  może prowadzić do bardzo wolnego tempa osadzania filmu lub wręcz zahamowania wzrostu, jeśli w czasie cyklu nie powstają stabilne półprodukty powierzchniowe. Natomiast w procesie używającym utleniacza, np. plazmy  $O_2$  redukcja centrum zachodzi poprzez reakcje ligandów z powierzchnią katalityczną, co może prowadzić do zanieczyszczeń lub nawet do osadzenia tlenku metalu zamiast metalu. W obu przypadkach, natura półproduktów powierzchniowych determinuje powodzenie procesu ALD.

Celem projektu badawczego jest komputerowe wspomaganie zaprojektowania procesów chemicznych, dzięki którym otrzymywanie nano-cienkich warstw metali szlachetnych stanie się efektywniejsze. Za pomocą modelowania molekularnego jesteśmy w stanie poznać mechanizmy reakcji chemicznych, w szczególności etapy pośrednie, których nie można łatwo zaobserwować w eksperymencie. Badane będą mechanizmy powstawania zarodków warstw metali szlachetnych oraz poszczególne etapy sekwencji osadzania warstwy. Zidentyfikowane zostaną czynniki, które ułatwiają tworzenie zarodków warstwy. Ponadto, wyjaśnione zostaną spekulacje dotyczące tworzenia niektórych produktów ubocznych, przejściowych struktur powierzchniowych i produktów pośrednich. Pozwoli to na zaproponowanie odpowiednich reagentów i procesów w celu kontroli i poprawy wydajności osadzania nano-cienkich warstw metali szlachetnych. Utoruje to drogę do komercyjnych zastosowań.