



ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ
БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН
MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN



Л. Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ
ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ
ЕВРАЗИЙСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Л. Н. ГУМИЛЕВА
GUMILYOV EURASIAN
NATIONAL UNIVERSITY



Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2015»
атты X Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
X Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2015»

PROCEEDINGS
of the X International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2015»

УДК 001:37.0
ББК72+74.04
Ғ 96

Ғ96

«Ғылым және білім – 2015» атты студенттер мен жас ғалымдардың X Халық. ғыл. конф. = X Межд. науч. конф. студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2015» = The X International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2015». – Астана: <http://www.eni.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie-2015/>, 2015. – 7419 стр. қазақша, орысша, ағылшынша.

ISBN 978-9965-31-695-1

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 001:37.0
ББК 72+74.04

ISBN 978-9965-31-695-1

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2015

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУРЫ КРЕМНИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ PM7

¹Молданазарова У., ¹Нұрмахамбет Ә., ²Муртазин А., ³Әлібай Т.,
³Кабельдинов В., ³Бекмуратова С.

Ulyajan-9263@mail.ru

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан

¹магистранты 2-курса специальности 6М060400-физика; ²магистрант 2-курса специальности 6М072300-техническая физика; ³студенты специальности 5В072300-техническая физика

Научный руководитель – к.ф.м.н., доцент кафедры технической физики
 Ж.М. Салиходжа

Введение. Известно, что кристаллический кремний является основным материалом электроники, а также на его основе изготавливаются современные солнечные панели. Использование кристаллического кремния в качестве источника света ограничено тем, что экстремумы зоны проводимости находятся вблизи края зоны Бриллюэна, а вершина валентной зоны – в центре этой зоны. В квантовых структурах подавляется закон сохранения импульса и, следовательно, в наноструктурах кремния открывается возможность прямых оптических переходов [1]. В настоящее время тонкие пленки, состоящие из аморфного гидрогенизированного кремния (α -Si : H) или из наночастиц кремния (nc-Si), рассматриваются как весьма перспективные элементы солнечных батарей на монокристаллическом кремнии (c-Si), способные повысить эффективность их преобразования [2].

Метод исследования. В настоящее время для моделирования процессов в полупроводниковых наноструктурах успешно применяются квантово-химические методы из первых принципов (*ab initio*), методы молекулярной механики и полуэмпирические методы.

В настоящей статье представлены результаты моделирования полуэмпирическим квантово-химическим методом PM7, реализованного в программном комплексе MOPAC (Molecular Orbital PACkage). Метод PM7 на данный момент является последним по времени создания в этом семействе методов NDDO. В методе NDDO матрица перекрывания заменяется единичной матрицей, что позволяет существенно сократить количество требуемых к вычислению интегралов, поскольку в этом случае нулю приравняются интегралы, описывающие перекрывание атомных орбиталей, центрированные на разных атомах. Полная энергия системы выражается формулой

$$E_{tot} = E_0 + \sum_A \sum_{B>A} \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}, \quad (1)$$

где суммирование ведется по всем атомам A и всем атомам B > A, Z_A и Z_B – заряды ядер, а E₀ – электронная энергия молекулы на каждом шаге итераций:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} P_{\nu\mu} (H_{\mu\nu}^{core} + F_{\mu\nu}(\vec{P})) \quad (2)$$

Для вычисления оставшихся интегралов в полуэмпирических методах используются формулы, содержащие эмпирические параметры, и параметризация проводится таким образом, чтобы воспроизводить экспериментальные данные. В результате исследования метода PM6 [3] на модельных системах, включающих в себя биологические макромолекулы и кристаллические решетки, были выявлены некоторые ошибки. Метод PM7 [4]

параметризовался так, чтобы эти ошибки не возникали. Кроме того, этот метод позволил ввести более аккуратное согласование дальних и ближних взаимодействий [5].

Объект исследования. Нами построены наноструктуры кремния разных размеров с постоянной решетки $a=b=c=5.43 \text{ \AA}$ с кубической решеткой. Количество атомов кремния в рассматриваемых наноструктурах составляли 30, 50, 90, 130 и 188 атомов. Элементарная ячейка наноструктуры состоит из 18 атомов кремния и каждый атом кремния связан с четырьмя другими атомами, находящимися на вершинах тетраэдра (см. рис. 1). Расстояния между ближайшими атомами составляли $2,35 \text{ \AA}$. В таблице 1 приведены размеры рассматриваемых наноструктур по трем направлениям.

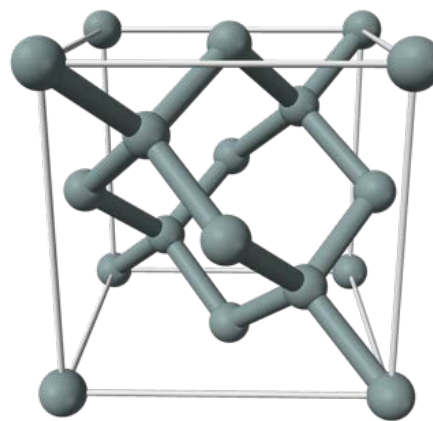


Рисунок 1. Элементарная

Таблица 1.

№	Кол-во атомов	Размеры наноструктур, в ангстремах		
1	30	13.84562	9.22359	8.15208
2	50	15.36034	15.36034	5.43070
3	90	16.29210	16.29210	16.29210
4	130	20.31982	19.47278	14.57210
5	188	23.67187	23.63906	15.45604

Результаты и обсуждение. Целью нашей работы является исследование квантово-размерного эффекта для наноструктур кремния, имеющих разные размеры, т.е. зависимость ширины запрещенной зоны от размеров наноструктур. В нашей работе ширина запрещенной зоны определяется как разность энергий верхней занятой молекулярной орбитали и нижней свободной молекулярной орбитали (ВЗМО и НСМО). Известно, что зависимость энергии оптических переходов в полупроводниковых нанокристаллах от геометрических размеров открывает возможность развития новейших люминесцентных материалов. Из экспериментальных работ известно [1], что положения максимумов фотолюминесценции также зависят от размеров наноструктур, т.е. с увеличением размеров наноструктур происходит так называемый голубой сдвиг пиков фотолюминесценции.

Для наноструктуры кремния, состоящей из 30 атомов с объемом $\sim 1,12 \text{ нм}^3$ ширина запрещенной зоны составляет 4,238 эВ, размеры данной структуры показаны в таблице 1. В данной структуре содержится две элементарные ячейки. Наноструктура кремния, содержащая 50 атомов состоит из четырех элементарных ячеек с объемом $\sim 1,72 \text{ нм}^3$, а ширина запрещенной зоны составила 3,374 эВ, соответственно для структуры из 90 атомов – 3,21 эВ, 130 – 2,931 эВ, 188 – 2,458 эВ. По результатам моделирования этих структур построена зависимость ширины запрещенных энергий от количества атомов в структуре (см. рисунок 2.). Из зависимости ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноструктуре видно, что наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны по мере увеличения числа атомов. Такой характер зависимости ширины запрещенной зоны по нашему предположению связано с небольшим количеством атомов в наноструктурах. Как

известно, четкая экспоненциальная зависимость ширины запрещенной зоны от размера наноструктур наблюдается при их размерах более 2 нм.

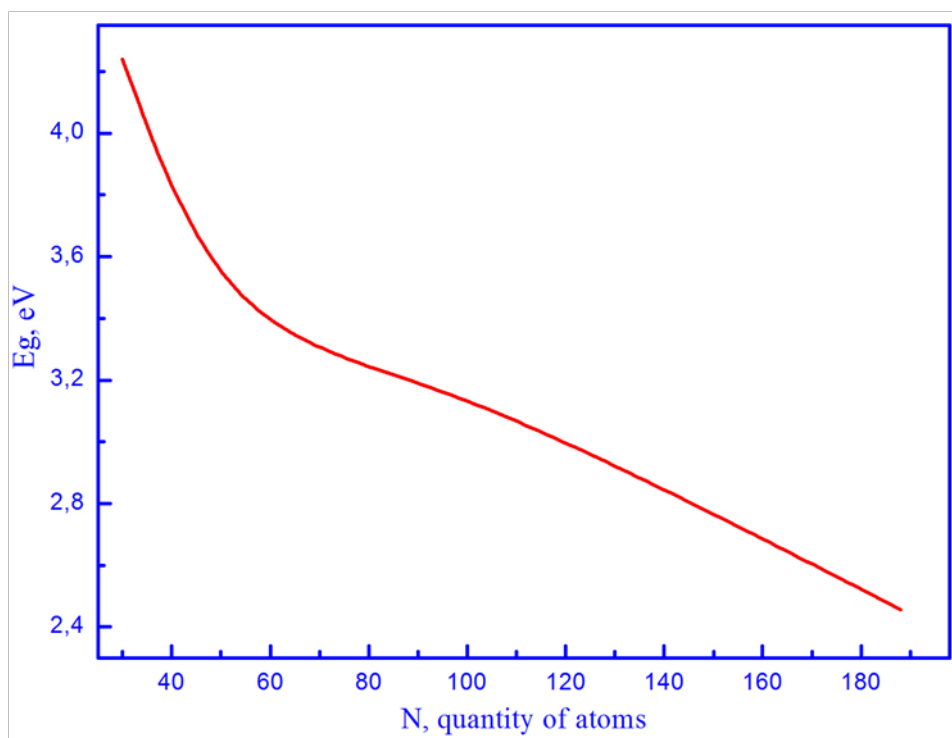


Рисунок 2. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноструктуре кремния.

Нами также рассматриваются модели наноструктур кремния, содержащие вакансии, разные примесные атомы, а также модели, пассивированные водородом и CH_3 - группами.

Список использованных источников

1. О.Б. Гусев, А.Н. Поддубный, А.А. Прокофьев, И.Н. Ясиевич Излучение кремниевых нанокристаллов. //Физика и техника полупроводников, 2013, том 47, вып. 2. –С. 147-167.
2. С.Г. Дорофеев, Н.Н. Кононов, В.М. Звероловлев, К.В. Зиновьев, В.Н. Суханов, Н.М. Суханов, Б.Г. Грибов Применение тонких пленок из наночастиц кремния для увеличения эффективности солнечных элементов. //Физика и техника полупроводников, 2014, том 48, вып. 3. –С. 375-383.
3. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods V: modification of NDDO approximations and application to 70 elements // J. Mol. Modeling. 2007. 13, N 12. 1173–1213.
4. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters // J. Mol. Modeling. 2013. 19, N 1. 1–32.
5. Каткова Е.В., Офёркин И.В., Сулимов В.Б. Применение квантово-химического полуэмпирического метода PM7 для разработки новых ингибиторов урокиназы. //Вычислительные методы и программирование. 2014. Т. 15. –С. 258-273.