

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ



ЖАС ҒАЛЫМДАР КЕҢЕСІ



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2016» атты
XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2016»

PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION - 2016»

2016 жыл 14 сәуір
Астана

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2016»
атты XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2016»**

**PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2016»**

2016 жыл 14 сәуір

Астана

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

Ғ 96

Ғ96 «Ғылым және білім – 2016» атты студенттер мен жас ғалымдардың XI Халық. ғыл. конф. = XI Межд. науч. конф. студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2016» = The XI International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2016» . – Астана: [http://www.enu.kz/ru/nauka/ nauka-i-obrazovanie/](http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/), 2016. – б. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-764-4

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.

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

ISBN 978-9965-31-764-4

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2016

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКА НАНОСТРУКТУРЫ В ПРИБЛИЖЕНИИ PM7

Толеков Д. *, Кабельдинов В. **, Алибай Т. **

Магистранты * 2-курса и ** 1-курса физико-технического факультета

ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

Научный руководитель – Салиходжа Ж. М.

Введение. Известно, что кристаллический кремний является основным материалом электроники, а также на его основе изготавливаются различные приборы, 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. Важной характеристикой наноструктур является возможность управлять свойствами наноразмерных структур путем изменения их геометрических размеров и конфигураций. В настоящее время кремниевые транзисторы переходят к размерам всего в несколько нанометров, и появились новые конструкции устройств (например, одноэлектронные транзисторы и плавающая ворота памяти (floating gate memory)), которые включают кремниевые нанокристаллы [1]. Также проводятся экспериментальные работы по исследованию квантового выхода люминесценции нанокристаллов кремния по сравнению с объемным кристаллом кремния [2]. Однако синтез монодисперсных однородных мелких нанокристаллов кремния остается трудной задачей.

Авторы статьи [3] квантово-химическим *ab initio* методом теории функционала плотности исследовали наноструктуры, содержащие до 87 атомов кремния, пассивированные атомами водорода, а также с примесными атомами. Показано, что химическая пассивация атомами водорода приводит к увеличению HOMO-LUMO щели, а внедрение атомов фосфора и алюминия в узлы решетки кремния создают донорные уровни нанокристалла и приводят к сдвигу уровня Ферми. В работе [4] в рамках формализма большой элементарной ячейки (LUC), используя полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием (complete neglect of differential overlap - CNDO) проводилось моделирование квантоворазмерного эффекта в нанокластерах ковалентной кристаллической алмазной структурированных полупроводников C, Si, Ge, и Sn, содержащие 8, 64 и 216 атомов. Результаты моделирования показали, что энергетическая щель уменьшается до 2 эВ от ультра-малых нанокластеров к наноструктурам с большими размерами. Авторы работы [5] методом из первых принципов, основанного на теории линейного отклика в нестационарной локальной плотности приближении (TDLDA) провели расчеты оптических спектров поглощения гидрированных кремниевых кластеров в присутствии кислорода на поверхности. Рассчитанные спектры показывают, что окисление существенно уменьшает размер оптических пробелов в кремниевых нанокристаллах.

Метод исследования. В данной статье представлены результаты применения полуэмпирического квантово-химического метода PM7, реализованного в программном комплексе MOPAC 2012 (Molecular Orbital PACkage), для моделирования наноструктур кремния. Для полуэмпирических методов используется приближение LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals), в котором молекулярные орбитали ψ_i представляют собой линейные комбинации атомных орбиталей ϕ_λ : $\psi_i = \sum_{\lambda=1}^M c_{\lambda i} \phi_\lambda$, где суммирование ведется по числу используемых атомных орбиталей M . Из-за взаимозависимости молекулярных орбиталей и матрицы Фока уравнения самосогласованного поля решаются методом итераций. Полуэмпирический квантово-химический метод PM7 основан на приближении NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap – пренебрежение двухатомным

дифференциальным перекрыванием) [5,6]. Метод PM7 параметризовался так, чтобы не возникали ошибки, которые допускаются методом PM6. Метод PM7 позволил ввести более хорошее согласование дальних и ближних взаимодействий и является последним в этом семействе методов NDDO.

Результаты моделирования и их обсуждение. Были построены кластеры, состоящие из 18; 30; 50; 90; 130; 172; 214 атомов кремния (Si), кубическая структура с постоянной решетки $a = b = c = 5,43 \text{ \AA}$. Каждый атом кремния является тетраэдрическим окружением ближайших атомов кремния. Расстояние Si - Si от 2,35 $\text{\AA}$. Размер 3D кластеров в трех измерениях, приведены в таблице.

Размеры нанокластеров Si_N

	Кл астеры	Размер наноструктуры, Ангстрем		
	Si_1	9.40625	8.86	7.6801
8			830	7
	Si_3	13.8456	9.22	8.1520
0		2	359	8
	Si_5	15.3603	15.3	5.4307
0		4	6034	0
	Si_9	16.2921	16.2	16.292
0		0	9210	10
	Si_1	20.3198	19.4	14.572
30		2	7278	10
	Si_1	24.8865	21.1	14.572
72		9	9928	10
	Si_2	29.7451	22.6	17.081
14		7	9660	37

Нанокластерные Si_{30} содержат две элементарные ячейки с объемом $\sim 1,12 \text{ нм}^3$. Ширина запрещенной зоны, определяется как разница между НОМО и LUMO состояний, для этой структуры была 4,238 эВ. Ширина запрещенной зоны в нанокластере Si_{50} равна 3,374 эВ, Si_{90} - 3,21 эВ; Si_{130} - 2,931 эВ; Si_{172} - 2,726 эВ и Si_{214} - 2,514 эВ. Известно, что значения ширины запрещенной зоны в полупроводниках равна 0,1 - 4 эВ. При комнатной температуре ширина запрещенной зоны кристалла кремния составляет около 1,12 эВ. На рисунке 1, на 1 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны нанокластеров Si_N с числом атомов N. Очевидно, что ширина запрещенной зоны кластера уменьшается, когда число атомов увеличивается.

Мы исследовали нанокластеры, содержащие вакансии в центральной части структуры. Число вакансий в зависимости от размеров, нанокластеры содержат от одного до пяти вакансий, например, Si_{18} - 1 вакансия, Si_{30} - 1 и 2 вакансий, Si_{50} - 1 и 2 вакансий, Si_{90} - 1,2 и 3-х вакансий, Si_{130} - 1,2,3 и 4, Si_{172} - 1,2,3 и 4, Si_{214} - 1,2,3,4,5 вакансий. На рисунке 1, кривая 2 показана зависимость ширины запрещенной зоны кластера Si_N , с одной вакансией. Из зависимости также видно, что ширина запрещенной зоны уменьшается с увеличением числа атомов в увеличивающемся кластере. На рисунке 2, на 1 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны к числу вакансий для кластера Si_{130} . Из графика видно, что с увеличением числа вакансий увеличивается ширина запрещенной зоны. Мы также рассмотрели нанокластеры кремния, содержащих такие элементы как В и As в III и V группах. Атомы мышьяка и бора были расположены на решетке. Количество внедренных атомов также зависит от размера нанокластеров.

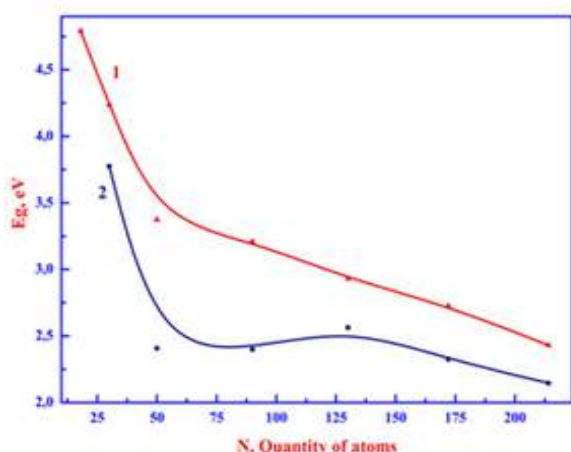


Рисунок 1. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноклстерах Si_N – кривая 1 и наноклстеров Si_N с 1 вакансией – кривая 2.

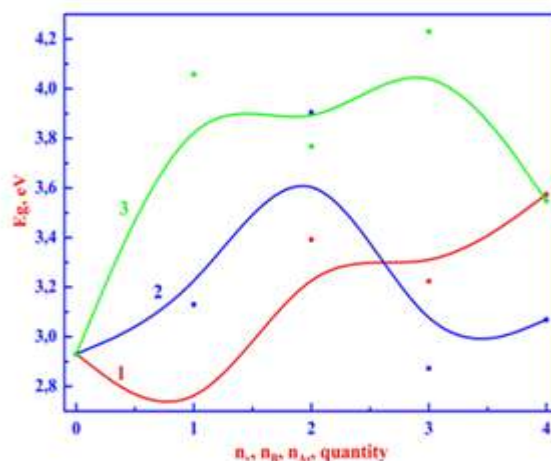


Рисунок 2. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества вакансий – кривая 1, замещающие атомы В – кривая 2 и As – кривая 3 в Si_{130} наноклстере.

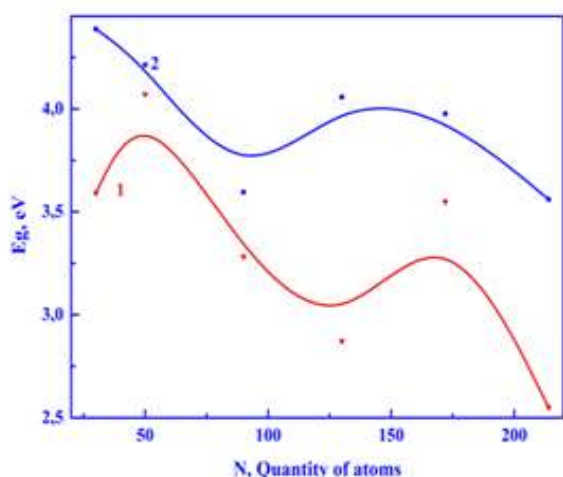


Рисунок 3. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов в наноклстерах Si_NB_1 – кривая 1 и Si_NAs_1 – кривая 2.

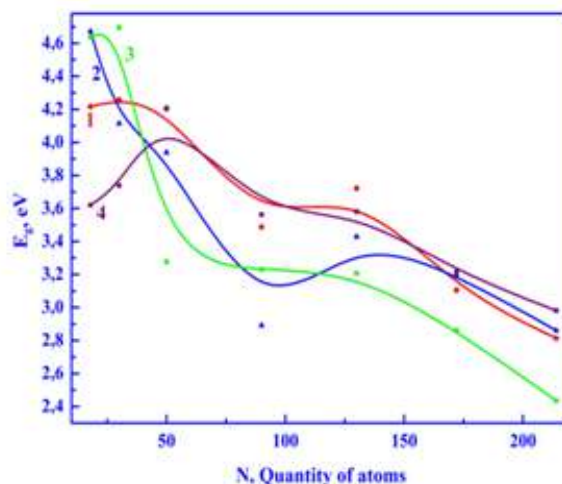


Рисунок 4. Зависимость ширины запрещенной зоны от количества атомов Si в наноклстерах $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ – кривая 1; и $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с вакансией – кривая 2; $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n\text{B}_1$ – кривая 3; и $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n\text{As}_1$ – кривая 4.

На рисунке 2, на 2 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны и числа атомов в кластере Si_N со встроенным единственным атомом бора. Можно видеть, что ширина запрещенной зоны уменьшается с увеличением числа атомов в наноклстерах. На рисунке 3, на 1 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны и количество имплантированных атомов бора. Существует интересная зависимость, ширина запрещенной зоны от 0 до 2 атомов бора увеличивается, а затем уменьшается до почти первоначального значения.

На рисунке 2, на 3 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны от числа атомов в кластере Si_NAs_1 . В целом добавление атомов As увеличивает значения запрещенной зоны. На рисунке 3, на 2 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны от числа внедренных атомов.

Кроме того, мы также провели моделирование наноклстеров окруженные алкилом CH_3 . Количество алкил – CH_3 в окружении также определяет размер Si_N , поэтому мы рассмотрели следующие наноклстеры: $\text{Si}_{14}(\text{CH}_3)_{10}$; $\text{Si}_{30}(\text{CH}_3)_{20}$; $\text{Si}_{50}(\text{CH}_3)_{28}$; $\text{Si}_{90}(\text{CH}_3)_{46}$;

$\text{Si}_{130}(\text{CH}_3)_{61}$; $\text{Si}_{172}(\text{CH}_3)_{77}$; $\text{Si}_{214}(\text{CH}_3)_{94}$. На рисунке 4, на 1 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны от нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с числом атомов. Мы можем видеть уменьшение ширины запрещенной зоны, когда число атомов Si увеличиваются.

На рисунке 4, на 2 кривой показана зависимость ширины запрещенной зоны нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с одной вакансией решетки кремния от количества атомов кремния. Наблюдается уменьшение ширины запрещенной зоны с увеличением числа атомов кремния.

На рисунке 4, на 3 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с одним атомом (V) замещения от количества атомов кремния, наблюдается так же снижение запрещенной зоны. На рисунке 4, на 4 кривой показано зависимость ширины запрещенной зоны нанокластера $\text{Si}_N(\text{CH}_3)_n$ с одним атомом (As) замещения от количества атомов кремния, так же наблюдается снижение запрещенной зоны.

Закключение. Таким образом, в данной работе моделированы нанокластеры кремния Si_{18} , Si_{30} , Si_{50} , Si_{90} , Si_{130} , Si_{172} , Si_{214} , имеющие различные количества атомов кремния и соответственно небольшие размеры (1~2 нм). Моделированы нанокластеры, включающие в себя вакансий, атомы замещения 3 и 5 групп. Эти кластеры также моделированы в окружении алкилов CH_3 . Результаты моделирования показали, что ширина запрещенной зоны в целом уменьшается с увеличением количества атомов. Создание вакансий и внедрение атомов замещения в кристаллической решетке приводит к деформации решетки и незначительному изменению ширины запрещенной зоны.

Список использованных источников

1. Ostraat, M.L.; De Blauwe, J.W.; Green, M.L.; Bell, L.D.; Brongersma, M.L.; Casperson, J.; Flagan, R.C.; Atwater, H.A. Synthesis and characterization of aerosol silicon nanocrystal nonvolatile floating-gate memory devices // Appl. Phys. Lett. 2001. Vol. 79. P. 433.
2. Lockwood, D., Ed.; Several reviews of nanocrystal optical properties appear in: Light Emission in Silicon of Semiconductors and Semimetals; // Academic Press: New York. 1998. Vol 49.
3. Z. Zhou, R.A. Friesner, and L. Brus, "Electronic structure of 1 to 2 nm diameter silicon core/shell nanocrystals: surface chemistry, optical spectra, charge transfer, and doping," // Journal of the American Chemical Society. 2003. Vol. 125. № 50. P. 15599-15607.
4. M.A. Abdulsattar, "Size effects of semiempirical large unit cell method in comparison with nanoclusters properties of diamond-structured covalent semiconductors," // Physica E. 2009. Vol. 41. № 9. P. 1679-1688.
5. I. Vasiliev, J.R. Chelikowsky, and R.M. Martin, Surface oxidation effects on the optical properties of silicon nanocrystals. // Phys. Rev. B 65. 2002. 121302(R).
6. J.J.P. Stewart, "Optimization of Parameters for Semiempirical Methods VI: More Modifications to the NDDO Approximations and Re-Optimization of Parameters," // J. Mol. Model. 2013. № 19 (1). P. 1–32.

УДК 538.9

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОКРИСТАЛЛА CDS/CDSE

Хусаинова Сабина Мараткызы

Магистрант 2-курса физико-технического факультета,
ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан
Научный руководитель - Салиходжа Ж. М.

Введение. Полупроводниковые нанокристаллы за счет квантового эффекта проявляют различные оптические свойства в отличие от их объемных аналогов. Известно, что при