

AB-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА VASP

Козлова О.А.

УО «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», г. Минск

Левченко Н.В.

УО «Белорусский национальный технический университет», г. Минск
Научный руководитель – Нелаев В.В., доктор физ.-мат. наук, профессор

Проведено исследование применимости программного комплекса VASP для *ab-initio* моделирования электронных свойств оксидов редкоземельного оксида иттрия и дисульфида молибдена как активных материалов сенсорных наносистем. Исследована электронная плотность и рассчитана зонная структура.

ВВЕДЕНИЕ

Развитие технологии наносистем требует использования принципиально новых материалов, свойства которых определяются процессами, протекающими на атомном и молекулярном уровне, в нанослоях и нанобъемах. Расчет и оптимизация электронных свойств наносистем возможны только на основе компьютерных, требующих колоссальных ресурсов, вычислений на основе первопринципных *ab-initio* физических приближений.

В качестве инструмента моделирования в данной работе использовался программный пакет VASP, который предназначен для моделирования эволюции атомно-молекулярных и электронно-ядерных систем методами квантовой механики и молекулярной динамики. Взаимодействие между ионами и электронами моделируемой системы описывается с помощью псевдопотенциального подхода или метода присоединенных плоских волн. В программном комплексе VASP решается уравнение Шредингера для электронно-ядерной системы и на основе полученного решения проводится оценка ее полной энергии, сил и других параметров и других физических величин, определяющих электронные свойства. Релаксация атомов осуществляется согласно градиентно-сопряженному алгоритму, основанному на необходимой настройке гамильтониана системы посредством варьирования плотности заряда в системе [1].

Работа выполнялась посредством высокопроизводительной кластерной вычислительной системы СКИФ К-1000. Исследованы электронные характеристики двухкомпонентных соединений Y_2O_3 и MoS_2 , используемые в качестве материалов структурных элементов приборов сенсорики и наноэлектроники.

КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Y_2O_3 И MoS_2

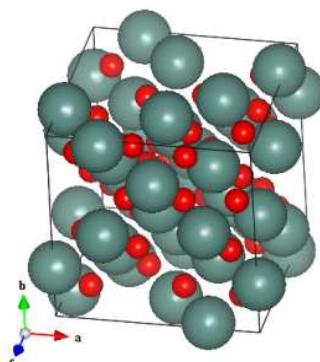
В кристаллической структуре положение атомов определяется кристаллофизическими параметрами, характеристикой и типом связи.

Для представления ячейки Y_2O_3 использовали кубическую кристаллографическую структуру пространственной группы – Ia-3 (№206). [2].

Элементарной ячейка Y_2O_3 представлена на рисунке:

Рисунок 1 – Кубическая ячейка Y_2O_3

Для описания ячейки MoS_2 использовалась тригональная кристаллографическая структура пространственной группы $R\bar{3}m$ (№160) [3].



Элементарная ячейка MoS_2 представлена на рис. 2:

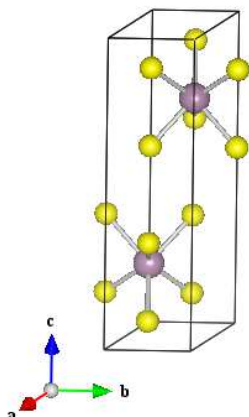


Рисунок 2 – Тригональная ячейка MoS_2

РЕЛАКСАЦИЯ Y_2O_3 И MoS_2

Для определения электронных свойств материалов Y_2O_3 и MoS_2 необходимо провести оптимизацию структуры.

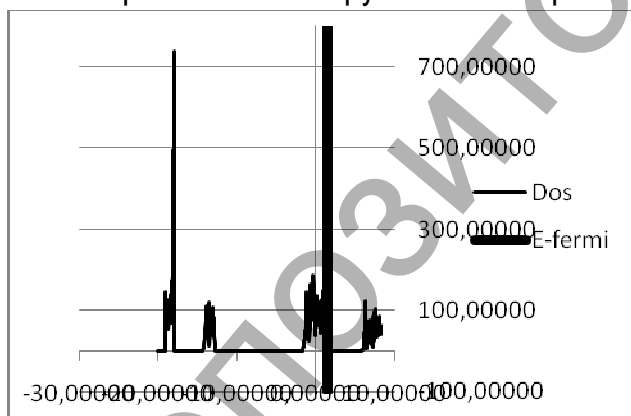
При проведении релаксации устанавливаются параметры для расчета сил, значений изменения объема и формы ячейки.

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА Y_2O_3 И MoS_2

В результате расчета электронных свойств используется метод присоединенных плоских волн (PAW-метода). PAW-метод состоит из набора основных функций и набора огибающих функций. Пространство разделено соответственно на две атомные сферы – атомную область и промежуточную область для связей. Частичные взаимопроникновения этих областей соответствуют границе раздела.

Провели расчет полной энергии и электронной плотности. Установили количество точек сетки для Y_2O_3 и MoS_2 , соответствующее 999, также определили минимальное и максимальное значение энергии. Для Y_2O_3 эти значения равны -20 и $8,3$ эВ соответственно, а для MoS_2 $-9,5$ и 9 эВ.

При моделировании электронных свойств получили электронную плотность — плотность вероятности обнаружения электронов в определенной точке пространства.



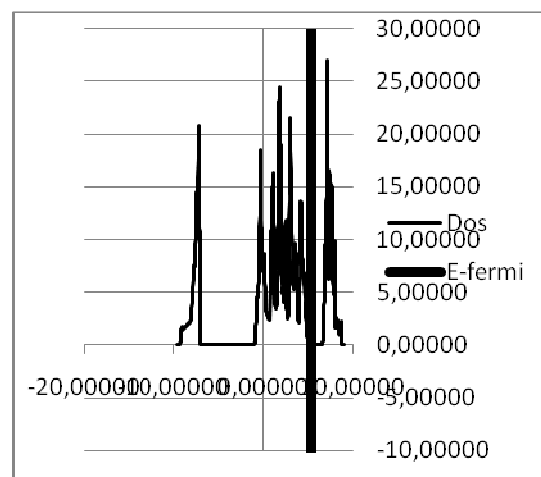
На рис. 4 представлена электронная плотность соединения MoS_2 :

Рисунок 4 – Электронная плотность MoS_2

При рассмотрении результатов электронной плотности определили значение ширины запрещенной зоны, для Y_2O_3 это значение составляет $4,31$ эВ, а для MoS_2 – $1,23$ эВ при уровне Ферми, равном для Y_2O_3 – $1,5298$ эВ, а для MoS_2 – $5,36$ эВ.

На рис. 3 представлена электронная плотность соединения Y_2O_3 :

Рисунок 3 – Электронная плотность Y_2O_3



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В процессе проведения работы рассмотрены используемые кристаллографические структуры, проведена релаксация и получены электронные плотности Y_2O_3 и MoS_2 . На основании моделирования электронных свойств построена электронная плотность элементарных ячеек Y_2O_3 и MoS_2 , определено значение ширины запрещенной зоны, которое для Y_2O_3 составляет 4,31 эВ, а для MoS_2 – 1,23 эВ. Можно отметить, что в исследуемых материалах отсутствует спиновая поляризация носителей, следовательно, они не обладают магнитными свойствами.

Список цитированных источников

1. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method: *Phys. Rev. B* / G. Kresse, J. Joubert. – 1999. – Vol., B 59. P. 1758-1765,
2. Baldinozzi, G. Rietveld refinement of two-phase Zr-doped Y_2O_3 : *Materials Science Forum* G. Baldinozzi, J.-F. Berar, G.P. Calvarin. – 1998. – 278. P. 680-685.
3. Schoenfeld, B. Anisotropic mean-square displacement (MSD) in single crystals of 2H- and 3R- MoS_2 : *Acta Crystallographica B*. – 1983. – 39. –P 404-407.

УДК: 51-77

МОДЕЛЬ КОНКУРЕНЦИИ КАФЕДР ЗА ТРУДОВОЙ РЕСУРС

Лысюк А.Н., Васильев Д.И.

УО «Брестский государственный технический университет», г. Брест
 Научный руководитель – Дереченник С.С., к.т.н., доцент

Основным типом деятельности вуза является образовательный процесс, для эффективного управления которым приходится решать ряд частных задач, среди которых формирование численности профессорско-преподавательского состава (ППС) кафедр является одной из основных [1]. Данную задачу можно отнести к планово-экономическим задачам, так как она заключается в эффективном распределении трудовых ресурсов вуза. Неэффективное и необоснованное распределение ставок ППС зачастую приводит к существенным проблемам, как на уровне отдельных кафедр, так и для вуза в целом, что негативно сказывается на образовательном процессе и, как следствие, на уровне подготовки конечных специалистов.

К числу существенных недостатков следует отнести рост среднегодовой нагрузки преподавателя и студентов из-за вполне естественного стремления кафедр в получении дополнительных ставок ППС.

Традиционная методика расчета, основанная на суммарной нагрузке вуза¹, может быть записана в виде следующей системы уравнений:

$$\begin{cases} H_{BV3} = \sum_{i=1}^N H_i \\ \langle H_{II} \rangle = H_{BV3} / \Pi_{BV3} \\ \Pi_i = \left[\frac{H_i}{\langle H_{II} \rangle} \right]_{0,25} \end{cases}, \quad (1)$$

¹ В частности, данная методика расчета используется в Брестском государственном техническом университете.