

Министерство образования и науки РФ
Томский государственный университет

ИННОВАТИКА – 2010

Сборник материалов

**VI Всероссийской научно-практической конференции
студентов, аспирантов и молодых ученых
с элементами научной школы**

12–16 апреля 2010 г.

г. Томск, Россия

Т. 1

Под ред. проф. А.Н. Солдатов, доц. С.Л. Минькова

Организаторы:

- Томский государственный университет
- Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
- Российский государственный университет инновационных технологий и предпринимательства
- Сургутский государственный университет
- ООО «ЛИТТ»

При поддержке Администрации г. Томска и Томской области,
Российского фонда фундаментальных исследований

**Томск
2010**

в г. Томске, но на данном этапе Томск не обладает технологией выращивания монокристаллов нитрида галлия, который используется для создания таких светодиодов.

Тем не менее, предполагается, что цена на такие светодиоды в ближайшем будущем будет снижаться, и это позволит в дальнейшем снизить цену на рассматриваемые осветители, что обеспечит на них более высокий спрос по сравнению со светильниками на люминесцентных лампах.

МАЛОПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛЫ В РАСЧЕТАХ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

А.П. Концев, А.В. Няро, В.Н. Черепанов

Томский государственный университет
rafting@sibmail.com

Тенденции технического прогресса сегодня привели к минимизации микроустройств до наноразмерного уровня. В этой связи увеличился интерес к новым наноматериалам (НМ), которые на этом уровне приобретают отличные от своих полноразмерных экземпляров свойства. Вполне очевидно не только фундаментальный характер проблем исследования свойств и структуры НМ, но и их тесная связь с технологией и эксплуатацией НМ. В связи с этим развитие теоретических и экспериментальных методов для исследования физических свойств нанообъектов является актуальным, поскольку нанотехнологии обещают в дальнейшем создание новых материалов, обладающих уникальными свойствами. В последнее время интенсивно развиваются различные технологии по созданию наноструктурных материалов. В настоящее время экспериментальные исследования таких материалов зачастую весьма дорогостоящи, трудны в реализации, и далеко не всегда оправдывают ожидания [1]. В связи с этим возникает необходимость развития теоретических методов, которые позволяют с единой позиции последовательно исследовать электронную структуру и физические свойства для различных соединений, в том числе наноразмерных, с различным элементарным составом.

Среди большого числа разновидностей НМ изучение наноструктур, состоящих из атомов углерода: наноалмазы, нанотрубки, графиты, явля-

ется исключительно важным, т.к. углерод – это материал, который является структурным для создания всех живых организмов, но при этом на нано-уровне он проявляет себя с неожиданной стороны – обладает некоторыми металлическими, полупроводниковыми и даже сверхпроводящими свойствами. В итоге можно получать структуры, которые являются связующим звеном между органическими и неорганическими соединениями.

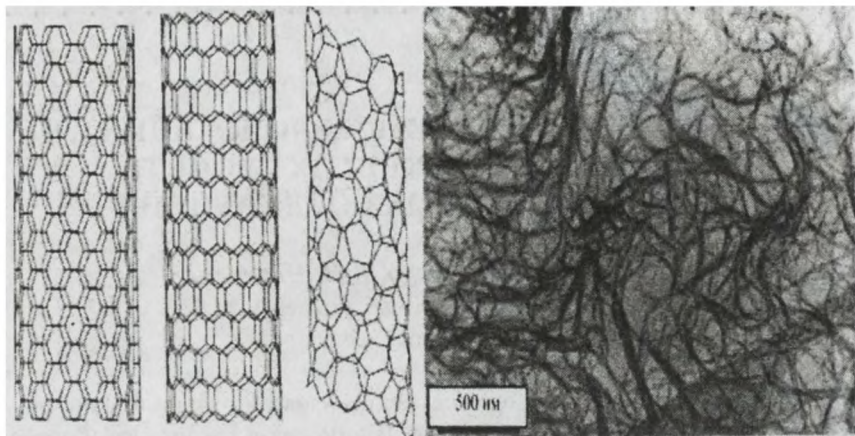


Рис. 1. Однослойные углеродные нанотрубки [2]

Также стоит отметить, что в последние годы возникла необходимость разработки физических основ формирования материалов на основе кремния, обладающих рядом свойств, которые обеспечили бы применение этого полупроводника при создании высокотехнологичных опто-, микро- и наноэлектронных приборов нового поколения, таких как светодиоды, лазеры и элементы памяти. А также наноструктуры на основе Si/Ge привлекают внимание технологов ввиду больших успехов в создании новых перспективных приборов с использованием квантовых эффектов [3]. Появляются светоизлучающие и фотоприемные кремний-германиевые устройства, позволяющие кремневой технологии успешно конкурировать с традиционно оптоэлектронными материалами. Для производства приборов с высокой степенью совершенства необходимо знать оптические и электронные свойства квантовых точек, которые зависят от таких параметров, как размер, форма, плотность, однородность распределения, величина механических напряженностей, компонентный состав. Одним из важнейших применений

полупроводниковых структур является возможность их использования для изготовления солнечных батарей. Новые возможности для дальнейшего увеличения КПД солнечных элементов открываются с применением нанотехнологий.

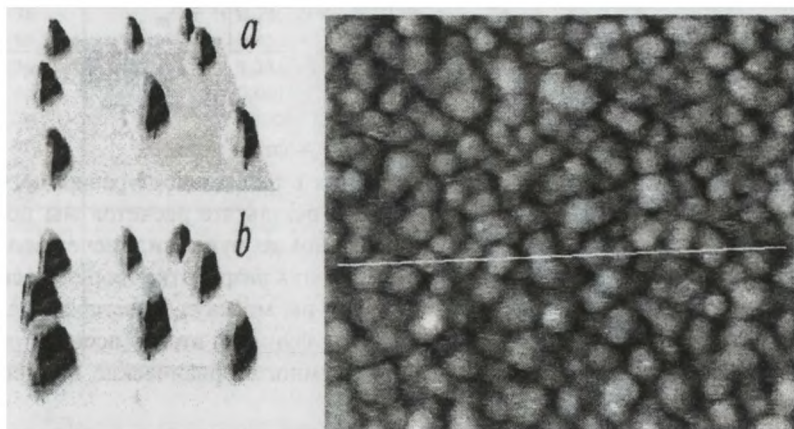


Рис. 2. Гетероструктуры Ge/Si с наноточками Ge на основе Si

В настоящее время существует ряд различных вариантов методов расчета молекул и нанокластеров, кристаллов. В любом из этих методов используется своя, оригинальная система вычисления. Наряду с вопросом точности расчетов также весьма актуальным является вопрос времени, и этот вопрос становится более острым при увеличении количества атомов в кластере.

Применяемые нами теоретические методы сочетают в себе:

- универсальность, способность рассматривать различные соединения в рамках одного подхода;
- обладают достаточной простотой, чтобы давать возможность исследования сложных систем;
- обеспечивают максимальное точное математическое решение задачи об электронном спектре в рамках заданной модели, так как только высокая точность расчёта спектра позволяет проводить исследование физических свойств сложных соединений на современном уровне.

Для исследования электронной структуры и физических свойств молекул и наноразмерных соединений предлагается использовать метод модельного псевдопотенциала.

Модельный ионный псевдопотенциал [4] имеет вид непрерывной функции, которая в области, ограниченной некоторым эффективным радиусом R_m , является параболической, а вне ее имеет кулоновский вид:

$$v_{ion}(r) = \begin{cases} V_0(1 - \frac{r}{R_m}) - Zr \left[\frac{1}{R_m^2} + C(r - R_m) \right], & r \leq R_m \\ -\frac{Z}{r}, & r > R_m \end{cases}, \quad (1)$$

где V_0 , R_m – параметры псевдопотенциала; Z – заряд иона.

Данный псевдопотенциал подставляется в радиальное уравнение, которое считается численными методами. В результате расчетов мы получаем собственные значения энергии и волновые функции. Расчет волновых функций атома представляет первый этап в разработке теоретических методов исследования электронной структуры молекул, кластеров, наноструктур и кристаллов, т.к. базис волновых функций атома (псевдоатома) позволяет естественным образом описать многие физические процессы в молекулах, кластерах и твердых телах.

В рамках данной работы нами найдены параметры псевдопотенциала и произведен расчет уровней энергии и плотностей электронов для ионов кремния, германия, углерода, кислорода и азота. Таким образом, с найденными параметрами псевдопотенциала можно производить расчет уровней энергии и волновых функций для соединений, содержащих данные ионы.

Т а б л и ц а 1

Параметры псевдопотенциала для C IV, N V, O VI, Si IV, Ge IV

		C IV	N V	O VI	Si IV	Ge IV
R_m , а.е.		1,172995	0,959791	0,81416	1,784239	2,423
V_0 , а.е.	ns	-4,32298	-11,7250	-18,8459	1,00675	4,320
	np	-5,271	-11,2741	-18,9053	-1,1740	1,717
	nd	-5,6984	-10,4379	-16,2185	-3,5718	-2,912

Т а б л и ц а 2

Одноэлектронные уровни энергии (а.е.) для Si IV

nl	Псевдопотенциальный расчет	Экспериментальные данные [5]
1	2	3
3s	1,6566	1,6566
4s	0,7825	0,7765

1	2	3
5s	0,4505	0,4489
6s	0,2932	0,2930
7s	0,2062	0,2063
8s	0,1530	0,1531
3p	1,3312	1,3312
4p	0,6611	0,6631
5p	0,3958	0,3983
6p	0,2640	0,2658
7p	0,1887	0,1900
8p	0,1417	0,1426
3d	0,9269	0,9269
4d	0,5127	0,5190
5d	0,3255	0,3303
6d	0,2251	0,2283
7d	0,1649	0,1671
8d	0,1261	0,1275

Рис. 3. Выбор параметра R_m для Si IV

ЛИТЕРАТУРА

1. Андреевский Р.А. Наноструктурные материалы. М.: Академия, 2005. 192 с.
2. Елецкий А.В. Углеродные нанотрубки // Успехи физических наук. 1997. Т. 167, № 9. 945 с.

3. *Пчеляков О.П.* Кремний-германиевые наноструктуры с квантовыми точками: механизмы образования и электростатические свойства // Физика и техника полупроводников. 2000. Т. 94, вып. 11. С. 1281–1298.

4. *Няеро А.В.* Теоретическое исследование электронных состояний атомов и атомных конденсатов методом Хартри – Фока с локальными обменно-корреляционными потенциалами: Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Томск: Томский государственный университет, 2007. 240 с.

5. *Электронный ресурс:* http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА БЕЗОПАСНОСТИ И УЧЕТА ЭНЕРГОРЕСУРСОВ

Г.И. Дворяткин

Томский государственный университет систем управления
и радиоэлектроники
adalstain@mail.ru

Проект «Автоматизированная система безопасности и учета энергоресурсов» направлен на разработку и реализацию устройств и программного обеспечения для беспроводных сенсорных сетей на основе технологии ZigBee™.

Предлагаемое беспроводное решение базируется на стандарте IEEE 802.15.4 в частотном диапазоне 2,4 ГГц и технологии ZigBee™ с авторскими модификациями на уровне приложений. В основе лежат положительные результаты, полученные альянсом ZigBee™ (<http://www.zigbee.org>) по применению этой технологии в сенсорных самоорганизующихся сетях, и собственные результаты по разработке приложений, направленных на энергосбережение устройств, составляющих сеть, и разработок, направленных на передачу данных от беспроводной сети к конечному потребителю.

Основу предлагаемого беспроводного решения составляют интеллектуальные беспроводные датчики (ИБД) и устройства, осуществляющие сбор данных для представления их потребителю в максимально удобном и информативном виде. ИБД отличается от беспроводных аналогов:

– наличием дополнительных встроенных датчиков (температура, влажность, «сухой контакт», ускорение, освещение, задымление – набор зависит от назначения ИБД);