

ИННОВАЦИОННЫЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ КЛАСТЕРА КРЕМНИЯ

Исакулова Мукаддас Шукуровна

Ассистент Джизакский

Политехнический институт, г.Джизак

Аннотация: В данной статье представлены смоделированные наночастицы кремния на основе выводов квантово-химических расчетов.

Ключевые слова: Квантовая химия, полуэмпирический, неэмпирический, молекулярный орбиталь, молекулярно-динамического, кластер.

INNOVATIVE METHOD FOR SIMULATION OF SILICON CLUSTER

Isakulova Mukaddas Shukurovna

Assistant Jizzakh

Polytechnic Institute, Jizzakh

Annotation: This article presents simulated silicon nanoparticles based on the findings of quantum chemical calculations.

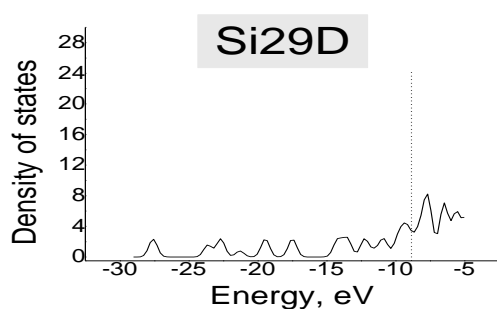
Keywords: Quantum chemistry, semi-empirical, nonempirical, molecular orbital, molecular dynamic, cluster.

Квантовая химия –это направление химии, рассматривающее строение и свойства химических соединений,реакционную способность, кинетику и механизм химических реакций на основе квантовой механики. Благодаря быстрому развитию квантовой химии были разработаны достаточно эффективные полуэмпирические и неэмпирические варианты метода молекулярных орбиталей (МО).

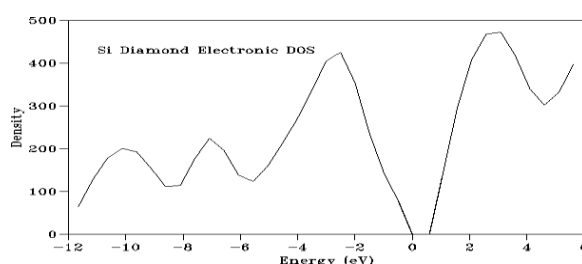
При рассмотрении плотности энергетических состояний димеризованного кластера и сравнении его с состояниями идеальной решетки кремния можно заметить, что большое количество состояний локализуется в верхней свободной области, которая соответствует разрыхляющим орбиталям. Также надо отметить, что занятые состояния

расположены более глубоко в валентной зоне и плотность на ВЗМО (верхняя занятая молекулярная орбиталь) менее выражена по сравнению с массивным кремнием, что в свою очередь, объясняется конечностью размера кластера или т.н. эффектом квантового конфайнмента.

Ширина запрещенной зоны димеризованного кластера остается равной примерно 0.2 эВ. Именно ненасыщенные связи поверхностных атомов кластера приводят к размыванию границ ВЗМО и НСМО и узкой щели между ними.



(a)



(б)

Рисунок – Сравнение плотностей электронных состояний кластера Si29D (a) и массивного кристаллического кремния (б).

Далее в таблице приводятся сравнение полной энергии атомизации и его компонентов кластера Si29 с учетом и без релаксации атомных позиций. Отсюда видно, что несмотря на увеличение значения энергии отталкивания между атомами и уменьшения энергии ковалентного связывания в результате учета релаксации атомов, полная энергия атомизации кластера повышается из-за выгодного изменения одноцентровой энергии отдельных атомов, что возможно происходит благодаря изменению состояний sp^3 -гибридизованных орбиталей поверхностных атомов кремния, участвующих в димеризации. В результате димеризации поверхностных атомов кремния выигрыш энергии составляет 8,957 эВ.

Si ₂₉	Энергия атомизац	Энергия отталкиван	Энергия связыван	Энергия ион-	Измене ние

	ии	ия атомов	ия	ионного взаимод ействия	одноце нтрово й энергии
С учетом релаксации	-121,4880	38,0775	-213,6644	0,2379	53,8611
Без учета релаксации	-112,5309	33,9423	-216,1007	0,8020	68,8254

Кластер Si_{29} нами рассмотрен в различных зарядовых состояниях. Это связано с тем, что кластер Si_{29} , возможно, в реакционной среде в процессе образования, находится в различных зарядовых состояниях, особенно при рассмотрении образования кластера плазмохимическими методами. Как видно из нижеследующей таблицы, ширина запрещенной зоны заряженных кластеров меняется в пределах от 0.09 до 0.21 эВ. При этом, уменьшение общего количества электронов в кластере приводит к расширению щели. Размеры кластера, также, несколько сжимаются в заряженных состояниях. Однако зарядовое состояние кластера не влияет на энергию атомизации кластеров.

Si₂₉	Энергия атомизации на атом, эВ	Диаметр кластера, А	Ширина запрещенной зоны, эВ
--	4.178	8.70	0.09
-	4.215	8.65	0.03
0	4.189	9.01	0.21
+	3.958	9.03	0.22
++	4.064	8.53	0

Из нижеследующей таблицы, где приведены компоненты полной энергии атомизации кластера в различных зарядовых состояниях, видно, что энергия отталкивания атомов заметно повышается в двукратно положительном состоянии, тогда как двукратно отрицательное состояние не приводит к каким-либо заметным изменениям. Однако энергия ковалентного связывания также резко повышается в состоянии (+2). Это, а также, повышение маделунговской энергии ион-ионного взаимодействия между атома возможно связано с увеличением эффективного заряда ядер. В конечном счете двукратно положительное зарядовое состояние в кластере становится невыгодным из-за резкого увеличения энергетических затрат на изменение внутренней конфигурации электронных оболочек атомов кремния, т.е. одноцентровой энергии.

Si₂₉	Энергия атомизации	Энергия отталкивания атомов	Энергия связывания	Энергия ион-ионного взаимодействия	Изменение одноцентровой энергии
--	- 123.94571 0	39.132738	- 217.30156 0	2.937211	51.285901

-	- 123.62605 7	39.849864	- 218.38396 9	0.725271	54.182777
0	- 121.487962	38.077492	- 213.664428	0.237896	53.861078
+	- 114.74491 0	37.622569	- 212.53898 9	2.365129	57.806381
++	- 101.57239 6	41.982696	- 220.88029 4	4.716168	72.609064

Нами рассмотрены стабильные конфигурации кластера Si_{29} и влияние его зарядового состояния на пространственную конфигурацию и поверхностную реконструкцию.

Показано, что в результате учета релаксации атомов кластера его поверхностные атомы подвергаются попарной димеризации и при этом выигрыш энергии составляет 8,957 эВ.

Литературы:

1. Harrison W. A., *Electronic Structure and the Properties of Solids* – San Francisco: Freeman, 1980; Харрисон У. Электронная структура и свойства твердых тел: Физика химической связи. В 2-х т. Т.1. – М.: Мир. 1983. – 381 с.
2. Slater J. C., Koster C. F. Simplified LCAO method for the periodic potential problem. //Phys. Rev. 1954. V.94. P.1498-1524; Podolskiy A.V. and Vogl P. Compact expression for the angular dependence of tight-binding Hamiltonian matrix elements. //Phys. Rev. 1954. V.69. P.23101(1-4).
3. Исакулова, М. Ш., Каримова, Ф. С., Ваккасов, С. С., & Мардонов, З. А. (2015). Компьютерное моделирование пассивации частных дефектов нанокластера кремния. *Молодой ученый*, (13), 119-121.