

Список використаних джерел

1. Донець Н. В. Підготовка вчителів фізики до реалізації навчальних проєктів у шкільному курсі фізики / Наталія Володимирівна Донець, Олена Михайлівна Трифонова, Микола Ілліч Садовий // Наукові записки КДПУ. Серія: Педагогічні науки / ред. кол.: В. В. Радул [та ін.]. - Кіровоград : КДПУ ім. В. Винниченка, 2015. - Вип. 141, ч. 2. - С. 45-50.
2. Нова навчальна програма з фізики для 7-9 класів/Програма затверджена Наказом Міністерства освіти і науки України від 07.06.2017 № 804.

Соловйов В. М.

доктор фізико-математичних наук, професор,

Мерзликін О. В.

кандидат педагогічних наук, асистент

*Криворізький державний
педагогічний університет*

СУЧАСНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННОЇ СТРУКТУРИ ТА ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНОСУ В НАНОМОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМАХ

Прогрес у мініатюризації елементної бази сучасних електронних пристроїв призвів до того, що за сорок років характерні розміри робочої області приладу перейшли з мікронного до нано- діапазону. Подальше зменшення розмірів, окрім технічних складностей, стикається з фундаментальними проблемами розуміння власне самих механізмів переносу. У зв'язку з цим на зміну комплементарній технології «метал-оксид-напівпровідник» приходять наномолекулярна (одномолекулярна) електроніка, оскільки окремі молекули становлять найменші стабільні структури і легко можуть бути сформовані в необхідній кількості [1]. Очевидне розмаїття молекулярних структур, гнучкість хімічних конструкцій, неочікувані фундаментальні явища спричинює актуальність теоретичного дослідження структурно- динамічних властивостей та процесів переносу (тепла, заряду, спіну тощо).

Дослідження структури і динаміки нанооб'єктів в останні 20 років вийшло на якісно і кількісно новий рівень в першу чергу завдяки розвитку *ab initio* (з перших принципів) теорії функціоналу густини (Density Functional Theory) – ТФГ [2]. Методи моделювання «з перших принципів» ґрунтуються на розв'язку рівняння Шредінгера для системи частинок. Метод ТФГ пропонує шукати розв'язок рівняння Шредінгера у вигляді одночасткової хвильової функції, яка залежить від функціоналу локальної електронної густини. Ця хвильова функція може бути представлена як лінійна комбінація функцій деякого базису, і представлена як вектор, що складається з коефіцієнтів такого розкладу. В якості базисного набору функцій зручно

використовувати атомні орбіталі (з центрами на окремих атомах), або набір плоских хвиль. Такий опис електронної хвильової функції, однак, дуже незручний, якщо вона концентрується близько до ядра атома (т.зв. «остівні електрони»), - в цьому випадку виникають великі градієнти електронної густини, котрі можна описати таким розкладом хвильової функції тільки в разі істотного збільшення розмірів базису. Для таких електронів зазвичай використовується так званий ефективний потенціал, або псевдопотенціал, який заміщує в рівнянні Шредінгера кулонівське відштовхування остівних електронів.

На сьогодні створено достатньо програмних пакетів та комплексів, що реалізують ТФГ. Серед них найпопулярнішими є Wien2k, VASP, Quantum Espresso, SIESTA та ін. Вони відрізняються базисним набором і способом отримання псевдопотенціалу для електронів остову.

Ми віддаємо перевагу програмному пакету SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms) [3] завдячуючи наступним очевидним перевагам. Програмний пакет SIESTA реалізує самоузгоджений метод розв'язку рівняння Шредінгера, що базується на теорії функціоналу електронної щільності. В якості розрахункового базису використовувалися лінійні комбінації атомних орбіталей, причому кожній з них може відповідати одна або декілька базисних функцій. Періодична структура кристала враховується через граничні умови на межах елементарної комірки.

У розрахунках використовуються першопринципні нормо-зберігаючі псевдопотенціали атомних електронних конфігурацій Трульє і Мартінса, які переводяться в повністю нелокальну форму, запропоновану Клейнманом і Байлендером. Є можливість враховувати обмінно-кореляційну взаємодію в наближенні як локальної густини (LDA), так і в наближенні узагальненого градієнта (GGA). Електронна густина розрахована методом спеціальних точок на сітці в оберненому просторі. Передбачена ефективна процедура реалізації молекулярної динаміки, розгляд точкових та інших дефектів, розрахунок основного і збуджених станів, зонної структури, фононного спектру та ще багато чого, важливого для наноструктури.

Вказані та деякі інші особливості методу дозволяють поєднати високу точність розрахунків та лінійне зростання обчислювальних ресурсів з розміром системи.

Ще однією перевагою пакету SIESTA є можливість описувати процеси переносу в системах «електрод-молекула-електрод». Для цього застосовується як спеціальний додаток TranSIESTA [4], так і більш функціональний і перспективний пакет програм GOLLUM [5], що суттєво використовує дані розрахунків у SIESTA і достатньо точно моделює процеси переносу.

Об'єкт моделювання схематично представлений на рис. 1.

Далі задача зводиться до формування вхідного файлу спеціального виду, який описує вказану на рисунку структуру об'єкту дослідження. В результаті розрахунків ми отримуємо характеристики об'єкту, наприклад, вольт-амперну характеристику.

Варто зазначити, що для підготовки даних, обробки результатів моделювання та їх візуалізації використовується широкий спектр загальновідомих та спеціальних інструментів: GaussView, Denchar, Gnuplot, XCrySDen, Molekel, Deneb та інші.

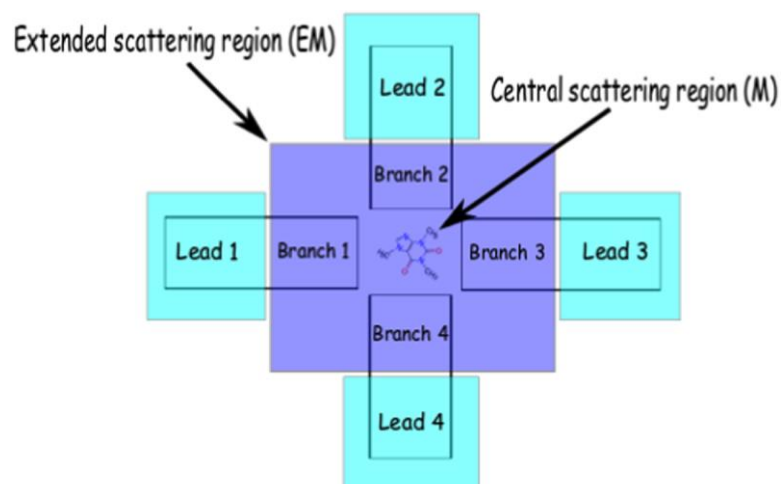


Рис. 1 – Схема 4-х контактної наномолекулярної пристрою з молекулою посередині на перехідних областях контактів, що входять до так званої узагальненої молекули

Обговорюються проблеми використання вказаного комплексу сучасних методів дослідження наноб'єктів у вищих навчальних закладах, реалізація та посилення між предметних зв'язків, активізація науково-дослідної роботи молодих науковців.

Список використаних джерел

1. Xiang D. Molecular-scale electronics: from concept to function / D. Xiang, X. Wang, C. Jia, T. Lee, X. Guo // Chem. Rev. – 2016. – Vol. 116. – P.4318-4440.
2. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии: учебное пособие / А.М. Попов. – М.: КНОРУС, 2014. – 312 с.
3. Soler J.M. The SIESTA method for *ab initio* order-N materials simulation / J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, D. Sanchez-Portal // J.Phys.: Condens. Matter. – 2002. – Vol. 14. – P.2745-2779.
4. Papior N. Improvements on non-equilibrium and transport Green function techniques: the next-generation TRANSIESTA / N. Papior, N. Lorente, T. Frederiksen, A. Garcia, M. Brandbyge // Computer Physics Communications. – 2017. – Vol. 212. – P.8-24.
5. Ferrer J. GOLLUM: a next-generation simulation tool for electron, thermal and spin transport / J. Ferrer et al // New J. Phys. – 2014. – Vol. 16. – P.1-67.