———— МОДЕЛИРОВАНИЕ ———

УДК 535.317

# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ, СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ IrSi

© 2020 г. А. Г. Гасанов<sup>*a*</sup>, Э. А. Керимов<sup>*a*, *b*, \*, С. Н. Мусаева<sup>*c*</sup></sup>

<sup>а</sup>Военная академия вооруженных сил ул. Академика Ш. Мехтиева, 136, Баку, AZ 1065 Азербайджан <sup>b</sup>Государственная академия нефти и промышленности Пр. Азадлыг, 16/21, Баку, AZ 1010 Азербайджан <sup>c</sup>Азербайджанский технический университет пр. Г. Джавида, 25, Баку, 1073 Азербайджан \*e-mail: E\_Kerimov.fizik@mail.ru Поступила в редакцию 24.04.2019 г. После доработки 08.07.2019 г. Принята к публикации 16.08.2019 г.

Построены теоретические модели наночастиц IrSi и одним из вариантов метода молекулярных орбиталов исследовано электронное строение наночастиц IrSi полуэмпирическим Расширенным Методом Хюккеля (PMX). На основе теоретических моделей вычислены значения орбитальных энергий, потенциал ионизации, полной электронной энергии, модули Юнга и твердости наночастиц IrSi. Являясь электрофильными, полупроводниковыми и мягкими материалами они могут применяться в военном деле в будущем как фотоприемные приборы для различных целей.

*Ключевые слова:* математическое моделирование, квант-механические методы, фотоприемник, орбиталы, полупроводник

DOI: 10.31857/S054412692001007X

#### введение

Диоды Шоттки — перспективный класс полупроводниковых приборов, которые ввиду более высокого быстродействия и малых падений напряжения при прямом смещении обладают преимуществами перед диодами, имеющими *p-n* переходы, и это делает их привлекательными в качестве элементной базы силовой электроники.

В качестве барьеров Шоттки интерес представляют силициды платиновой группы, имеющие большую высоту потенциального барьера к кремнию, что обуславливает низкие токи утечки и снижает температурную зависимость электрических параметров приборов.

Тонкие пленки силицида иридия получены твердофазной реакцией пленки металлического иридия с кремниевой подложкой. Пленки иридия толщиной 0.1 мкм наносились на подложки монокристаллического кремния (111). Нанесение пленок производилось резистивным испарением высокочистого иридия при давлении 6 × 10<sup>-4</sup> Па и температуре 200°C на установке вакуумного напыления УВН РЭ.Э-60. Затем, 20 мин осуществлялся отжиг структур при температуре 450°С.

### ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ МЕТОД

Для изучения различных свойств наночастиц IrSi, огромную роль имеет применение математического моделирование [1—3] и исследование их квантмеханическими методами. Для этого сначала рассмотрим основные параметры наночастиц IrSi. Основными параметрами будем считать количество и размеры атомов.

Допустим, что наночастица IrSi имеет форму полого шара (рис. 1). В этом случае количество атомов определяется из формулы:

$$n = \frac{R^3 - r^3}{r_h^3}.$$
 (1)

В этой формуле  $r = R - 2r_h$ .

Из формулы (1) вычислим количество атомов в наночастице (IrSi)<sub>n</sub>. Имея формулу шара размер одного соединения IrSi может определятся как  $r_h \approx r_{Ir} + r_{Si}$  (рис. 1). Формуле  $r_{Ir}$  и  $r_{Si}$  ковалентные радиусы соответственно атомов Ir и Si. Для (IrSi)<sub>n</sub>  $r = R - 2r_h$ . R – радиус сферы внутри кото-

Сокращения: РМХ – Расширенный Метод Хюккеля; МО – молекулярные орбитали.



**Рис. 1.** Теоретические модели молекулы (*a*) IrSi и наночастицы ( $\delta$ ) (IrSi)<sub>*n*</sub>.



Рис. 2. Различные модели наночастиц IrSi.

рой сдерживается наночастица. R = D/2 и D – размер наночастицы. А  $r_h$  это радиус сферы внутри которой сдерживается соединение IrSi.

При  $r_{\rm lr} = 0.127$  нм и  $r_{\rm Si} = 0.111$  нм  $r_{\rm h} = 0.238$  нм и при D = 1.2 нм R = 0.6 нм. В этом случае для наночастицы (IrSi)<sub>n</sub> получаем  $n \approx 16$ . А общее количество всех атомов Ir и Si будет N = 32. В итоге в зависимости от *n* можно создать различные модели наночастиц (IrSi)<sub>n</sub>. Эти модели представлены на рис. 2.

На основе созданных моделей можно произвести теоретические вычисления и изучит свойства наночастиц. В частности такие вычисления производятся с помощью метода молекулярных орбиталей. Также известно, что Расширенный Метод Хюккеля (PMX) простой полуэмпрический вариант метода молекулярных орбиталей (MO). В

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 49 № 1 2020

методе МО считается, что электроны в молекуле в эффективных полях созданных ядрами и электронами двигаются независимо от других электронов. Состояние электрона в молекуле описывается одноэлектронной волновой функцией называемой молекулярный орбитал [5]. Эти функции являются многоцентравими функциями. Так как в формулах таких функций присутствуют расстояние электрона от различных ядер атомов. Существуют различные варианты нахождения молекулярных орбиталей. Одним из таких вариантов является метод нахождения U<sub>i</sub> молекулярных орбиталей в качестве линейных комбинаций атомных орбиталей атомов входящих в состав молекул (метод MOLCAO):

$$U_i = \sum_{q=1}^m c_{qi} \chi_q, \qquad (2)$$

в формуле  $c_{qi}$  – неизвестные коэффициенты,  $\chi_q$  – атомные орбиталы, выбранные как базисные функции. В статье использованы функции Гаусса в качестве атомных орбиталей [5]. Неизвестные коэффициенты  $c_{qi}$  находим из следующих систем уравнений:

$$\sum_{q} \left( H_{pq} - \varepsilon_i S_{pq} \right) c_{qi} = 0.$$
(3)

В формуле (2) обозначены:

$$H_{pq} = \int \chi_p^* \hat{H}_{ef} \chi_q dV, \qquad (4)$$

$$S_{pq} = \int \chi_p^* \chi_q dV.$$
 (5)

 $S_{pq}$  — интеграл перекрытие между атомными орбиталами  $\chi_q$  и  $\chi_p$ .  $\hat{H}_{ef}$  — оператор Гамильтона для одного электрона движущимся на некотором эффективном поле независимо от других электронов:

$$\hat{H}_{\rm ef} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + U(r).$$
 (6)

Так как U(r) не имеет четкого выражения, величины  $H_{pq}$  не могут вычисляться точно. Они оцениваются с помощью некоторых экспериментальных параметров. В Расширенном Методе Хюккеля диагональные элементы матрицы  $H_{pq}$  считается равными ионизационного потенциала соответствующих валентных состояний атомов. А не диагональные элементы матрицы  $H_{pq}$  вычисляются приближением [5]:

$$H_{pq} = 0.5KS_{pq}(H_{pp} + H_{qq}).$$
(7)

K — находим или из сравнения экспериментальных фактов или же из условия минимума энергии. На работе K = 1.75. Уравнения (2) система линейных однородных уравнений. Решая эти уравнения с общепризнанными правилами, находим численное значения для параметров  $\varepsilon_i$  и  $c_{qi}$ . Используя численные значения  $\varepsilon_i$ , определяются электронная энергия и потенциал ионизации наночастиц IrSi и исследуются механические, электрические, магнитные и др. свойства этих наночастиц.

## РАСЧЕТ И АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В предлагаемой работе значения орбитальных энергий, потенциала ионизации, полной электронной энергии наночастиц IrSi рассчитаны с помощью полуэмпирического метода PMX. PMX сохраняя простого варианта молекулярных орбиталей, метода Хюккеля, предполагает вычисления интегралов перекрытия и одновременно рассмотрит  $\pi$  и  $\sigma$  – электронов.

Для каждого объекта начиная с самого низшего уровня энергии, электроны находятся на уровнях которые расположены по две. Определена энергия наивысшего молекулярного орбитала в котором расположены электроны как –  $\varepsilon_{\text{HOMO}}$  и энергия низшего пустого молекулярного орбитала как –  $\varepsilon_{\text{LUMO}}$ . Потенциал ионизации определен из формулы:  $I_p = -\varepsilon_{\text{HOMO}}$ , значение запрещенной зоны  $E_g = \varepsilon_{\text{LUMO}} - \varepsilon_{\text{HOMO}}$ , а твердость с помощью формулы  $\eta = \frac{1}{2}E_g [1-4]$ . Длина волны фотона, которого излучает материал может вычислена из формулы

$$\lambda = \frac{ch}{1.6E_g} \times 10^{28} \text{ нм.}$$

Здесь h — постоянная Планка, c — скорость света в вакууме. При вычислении  $\lambda$  пользовались значениями эВ для  $E_g$ . При  $\eta < 1$  эВ материал считается мягким, а при  $\eta > 1$  эВ он твердый.

Стабильность материала получаем из формулы

$$\Delta E = E - \sum_{A} E_{A}.$$

Здесь E — полная энергия системы,  $E_A$  — энергия A — числа атомов входящих в систему,  $\Delta E$  — параметр характеризирующий стабильность системы. При  $\Delta E > 0$  система считается нестабильным, а при  $\Delta E < 0$  она стабильна. Полученные результаты даны в табл. 1.

В табл. 1 по расчетным значениям стабилизированный энергии можно вычислит модуль Юнга и другие механические параметры: G — модуль скольжения, K — объемно эластический модуль и HN — модуль твердости для наночастиц (IrSi)<sub>5</sub> [6, 7]. Для этого можно использовать следующую формулу:

$$Y = \frac{F}{S}, \quad F \approx \frac{\Delta E}{r}, \quad G = \frac{Y}{2 \times (1 + \nu)}, \quad K = \frac{Y}{3 \times (1 - 2\nu)}, \quad HN = GAe^{-BT}.$$
(8)

В формуле (8):

 $-F = 2.866 \times 10^{-8}$  Н сила распада наночастицы;

 $-S = 2.176195715539529 \times 10^{-9} \text{ м}^2$  поперечная площадь для (IrSi)<sub>5</sub>;

 $-r = 2.926 \times 10^{-10}$  м длина связи между атомами входящими в наночастицу;

 $-\nu=0.225$ коэффициент Пуассона, A=0.807,  $B=2.204\times 10^{-3}$  и T=300 К.

В табл. 2 показаны результаты расчетов.

N	Объект	омон <sub>з</sub>	6LUMO	Полная энергия $E\left(\mathrm{a.e.} ight)$	Параметр стабильности ΔE (a.e.)	Потенциал ионизации $I_p$ (3B)	Запрещенная зона $E_g$ (эВ)	Параметр твердости η (эВ)	Длина волны, Х (нм)
1	L.C:	-11.600	-9.0912	-6.28111	-0.30825	11 600	2 500060	1 254	405 402
	1151	008	10.0(7	9798	4393	11.600	2.308808	1.234	495.495
2	(IrSi) <sub>2</sub>	-11.842 59	-10.367 675	-12.7475 3132	-0.80180 0912	11.843	1.474915	0.737	842.845
3		-10.979	-10.458	-19.0221	-1.10357				
	(IrSi) <sub>3</sub>	948	483	7159	5985	10.980	0.521465	0.261	2383.909
4	(1.6')	-11.492	-10.769	-25.4492	-1.55782	11 402	0 700705	0.2(1	1720.052
	$(1rS1)_4$	561	836	9043	9613	11.493	0.722725	0.361	1/20.053
5	(IrSi) <sub>5</sub>	-10.746 609	-10.601 305	-31.7904 8026	-1.92615 4248	10.747	0.145304	0.073	8555.339

Таблица 1. Рассчитанные значения энергетических параметров для наночастиц (IrSi)<sub>n</sub>

Таблица 2. Расчетные значения механических параметров для (IrSi)5

N⁰	Модуль скольжения (ГПа)	Объемно эластический модуль (ГПа)	Модуль Юнга (ГПа)	Модуль твердости (ГПа)
1	53.76	79.83	131.7	22.4

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Одним из вариантов метода молекулярных орбиталов исследовано электронное строение наночастиц IrSi полуэмпирическим Расширенным Методом Хюккеля . На основе компьютерных расчетов вычислены орбитальные энергии, потенциал ионизации, полной электронной энергии, модули Юнга и твердости. Выводы показывают, что эти материалы могут быть использованы в будущем в военном промышленности в качестве фотоприемных устройств.

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

 Гасанов А.Г., Байрамов А.А. Моделирование электронной структуры композитного материала графен-поливинилиденфторид // Физика твердого тела. 2019. Т. 61. Вып. 1s. 194–200. https://doi.org/10.21883/FTT.2019.01.46913.116

- Gasanov A.G., Bayramov A.A., Hashimov E.G. Mathematical modeling of the electron structure of SiO<sub>2</sub> nanoparticle. FİZİKA Volume XXIII, Number 1, Section: En, April. 2017, s. 34–39.
- Pashaev F.G., Gasanov A.G., Mahmood A.T. The Study of Gold Nanoparticles in basis of Slater Functions // J. Nano. Adv. Mat. 2014. V. 2. № 1. P. 35–41.
- 4. *Gasanov A.G., Pashaev F.G.* The Computer Program for the Study of Nanoparticles in Basis of Slater Atomic Orbitals. Romanian // Journal of Information Science And Technology. 2016. V. 19. № 4. P. 331–337.
- 5. *Minkin V.I., Simkin B.Y., Minyaev R.M.* Theory ofstructure of molecule. Rostov at Don: Phoenix. 1997, 558 p.
- Черняева Т.П., Грицина В.М., Михайлов Е.А., Остапов А.В. Корреляция между упругостью и другими свойствами циркония. Научно-тех. комп. "Ядерный топливный цикл" Нац. науч. Центра "Харьковский физ.-тех. институт", Харьков, Украина, 2008.
- 7. Опенов Л.А., Подливаев А.И. // ФТТ. 2017. Т. 59. Вып. 6.