

Основные результаты Белорусско-Литовского сотрудничества в области теоретического исследования новых материалов

В.Р. Стемпицкий¹, М.С. Баранова¹, В.А. Скачкова¹, Е. Тамулене²

¹Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники

²Вильнюсский университет, Институт теоретической
физики и астрономии
e-mail: Baranova@bsuir.by

The article describes the positive experience of cooperation between Vilnius University (VU) and the Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (BSUIR). BSUIR researchers completed an internship at the VU, where precursors for FEBID technology were studied on the basis of computer simulation. The results of joint research within the framework of the BRFFR project are also presented.

В рамках сотрудничества Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники (БГУИР) и Института теоретической физики и астрономии Вильнюсского Университета (ВУ) сотрудниками научно-исследовательской лаборатории 4.4 (НИЛ) «Компьютерное проектирование микро- и наноэлектронных систем» пройдены стажировки на базе ВУ, а также успешно завершен совместный научно-исследовательский проект. Исследования были направлены на теоретическое компьютерное изучение фундаментальных свойств и перспектив использования наноматериалов.

Стажировки сотрудников НИЛ 4.4 составляли 2 месяца и проводились при финансовой поддержке Литовских государственных стипендий (Lithuanian State Scholarships) под научным руководством доктора Е. Тамулене. Научно-исследовательские задачи, поставленные перед стажерами, были направлены на моделирование методами квантовой химии прекурсоров, которые используются для формирования наноструктур осаждением с помощью сфокусированного электронного пучка (FEBID технология).

Во время первой командировки в ВУ проведено моделирование $\text{Ag}(1,1,1,5,5,5,\text{hexafluoropentanedioato})(\text{PMe}_3)$ молекул, которое подтвердило термическую и химическую стабильности объектов исследования, а также выполнен анализ токсичности наноструктур. Основными результатами научных исследований является обоснование возможности синтеза наноструктуры (исходя из энергетических показателей), а также подтверждение наличия необходимых физико-химических характеристик для использования молекулы на основе серебра в качестве прекурсора для FEBID технологии. Во время второй стажировки проведено исследование наночастиц с общей формулой Co_{18}O_n ($n=0-17$), которые также могут использоваться в качестве прекурсора технологии FEBID (рисунок 1).

Определены термическая и химическая стабильности, токсичность, твердость и мягкость исследуемых частиц. Установлено, что энергетически частицам выгодно иметь форму эллипса, а увеличение количества атомов кислорода приводит к стабилизации наночастиц. На основании полученных результатов высказаны предположения о низкой летучести и высокой вероятности адгезии частиц

Co₁₈O₁₇ на свободные поверхности Полученные результаты свидетельствуют о высоком потенциале использования наночастиц Co₁₈O₁₇ в качестве прекурсора.

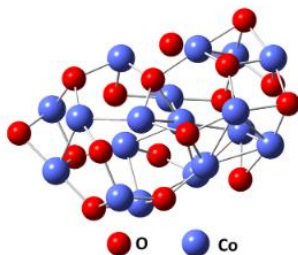


Рисунок 1 – Co₁₈O₁₇ частица

Компьютерное моделирование выполнялось с использованием программного комплекса Gaussian в центре цифровых расчетов ВУ и в рамках выполнения исследовательских задач по проекту COST Action CM1301 (CELINA).

При поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, в рамках совместных проектов с Литовской академией наук, выполнено исследование перспективных систем на основе двух и трехкомпонентных квазидвумерных структур переходных металлов 4-й и 5-й групп, а именно гетероструктур на основе графена и оксида цинка (сульфида цинка), однослойных структур халькогенидной шпинели с переходными металлами (CuCr₂Se₄) и дефектных соединений TiS₂. Установлены зависимости фундаментальных свойств от особенностей структур. Так, например, при переходе от трехмерного CuCr₂Se₄ к двумерной структуре, ширина запрещенной зоны увеличивается, что позволяет использовать соединение в МОП технологии спиновых транзисторов. Адгезия графена на поверхности ZnO и ZnS происходит с межслоевым расстоянием 3,16 Å и 3,45 Å соответственно, при этом в зонной диаграмме, в одном из случаев, возникает зазор (запрещенная зона) порядка 0,35 эВ из-за энергетического влияния ZnS.

Выполнение проектов в рамках совместного сотрудничества ВУ и БГУИР позволило получить конкурентные результаты теоретического исследования новых материалов соответствующие общемировому уровню. Сотрудники НИЛ 4.4 НИЧ БГУИР освоили методы компьютерного моделирования, которые ранее не использовались исследовательской группой. Также положительным оказался опыт работы на вычислительном кластере литовской стороны. В последующем навык проведения распределенных расчетов был использован в стенах БГУИР. Исследования в рамках проекта БРФФИ способствовало получению большому количеству научных результатов, что положительно отразилось на публикационной активности сотрудников.