

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОМАТЕРИАЛОВ В ПАКЕТЕ GAUSSIAN.

Никоноров Н.Ю., Жукалин Д.А.

Воронежский государственный университет, Россия, 394018, Воронеж,
Университетская пл. 1, +7-980-535-06-30, E-mail: kinodebate@gmail.com

Для изучения электронной структуры как основных, так и возбужденных, часто короткоживущих, состояний молекул применяется квантовомеханическое моделирование в специальных программных комплексах. В случае правильно выбранного метода моделирования данные, полученные в результате численных расчетов, хорошо согласуются с результатами экспериментов. Одним из самых распространенных программных пакетов является Gaussian

Основные возможности это – моделирование электронных структур молекул, кластеров, биологических соединений; моделирование периодических систем, таких как полимеры и кристаллы, посредством использования периодических граничных условий; моделирование широкого диапазона спектров и спектроскопических свойств молекул; расчет энергии связей и путей реакции; моделирование свойств молекул в растворах [1].

В последнее время наметилась тенденция перехода к некремниевой электронике [2]. Так в качестве альтернативы кремнию в силовой и некоторых областях СВЧ электроники рассматривается карбид кремния. Интерес к этому полупроводниковому соединению определяется высокой механической прочностью, широким диапазоном рабочих температур, высокой температурой Дебая (~1200 °С), наличием собственного окисла (SiO₂).

Карбид кремния в этих областях электроники постепенно вытесняет кремниевые устройства, обладая более привлекательными электрофизическими характеристиками, а уникальные свойства данного соединения позволяют создавать сенсоры и датчики новых типов.

В настоящей работе методами квантовой химии проведено исследование электронной структуры аллотропов 2D SiC с числом слоев $n = 1-3$. Установлено, что 2D структуры карбида кремния образуют семейство полупроводниковых материалов с шириной запрещенной зоны от 1.132 до 2.150 эВ, а послойный рост структур определяет изменение типа проводника от прямозонного однослойного SiC к непрямоzonному при числе слоев $n = 2, 3$. Исключением являются метастабильные структуры с шириной прямозонного перехода 1.339 и 1.132 эВ.

Литература

1. Тучин А.В., Битюцкая Л.А., Хухрянский М.Ю., Куликова Т.В., Бормонтов Е.Н. *Компьютерное моделирование электронной структуры фуллерена C60 : учебное пособие.* – Воронежский государственный университет.: Издательский дом ВГУ, 2018 – 76 с.
2. Тучин А.В., Битюцкая Л.А., Калашников А.В., Бормонтов Е.Н. *Квантово-химическое исследование 2D аллотропов карбида кремния. Конденсированные среды и межфазные границы, № 19, 2017, 577-584.*