

*Ю. В. Терентьева, Л. В. Фомина, С. А. Безносюк***Компьютерное моделирование квантовой релаксации электромеханических наночипов состава  $A^3B^5:Mn$** *Yu.V. Terentyeva, L.V. Fomina, S.A. Beznosjuk***Computer Simulation of Quantum Relaxation of Electromechanical Nanochips Consisting of  $A^3B^5:Mn$** 

Приведены результаты, полученные в компьютерном эксперименте фемтосекундного процессинга нанослоев AlAs, GaAs, InAs, легированных Mn. Представлены кинетические кривые релаксации полупроводниковых  $A^3B^5:Mn$  нанослоев и влияние температуры на такие параметры указанных систем, как энергия релаксированного нанослоя, время релаксации и амплитуда флуктуации энергии исследуемых наносистем.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, квантовая релаксация, термополевые динамические флуктуации, полупроводники, легирование марганцем.

DOI 10.14258/izvasu(2013)3.2-44

**Введение**

В настоящий момент в ведущих исследовательских коллективах разных стран ставятся задачи разработки нанотехнологий нового поколения, выполняющих в реальном времени процессинг многоуровневых открытых неравновесных наносистем. Эти сложные наносистемы включают в себя множество корпоративно действующих квантовых наноэлементов. Такие энергонасыщенные, корпоративно действующие электромеханические наночастицы требуют особого изучения на современном этапе развития наноинжиниринга и нанотехнологий [1, с. 56–61]. Фемтосекундная корпоративная динамика определяет процессы само сборки и самоорганизации адаптивных к изменению внешних условий электромеханических наносистем в процессе их релаксации из энергонасыщенных активированных неравновесных состояний. Поэтому требуется детальное исследование фундаментальных основ наноинжиниринга электромеханических наносистем, в частности, компьютерных методов имитирования квантовой релаксации биомиметических наночастиц [2, с. 409–416].

Мультикинетические процессы в электромеханической наносистеме имеют сложный стохастический характер, распадаясь на цепочку дискретных актов сверхбыстрой диссипации энергии и сравнительно медленных элементарных актов трансформаций, за-

In this article the results obtained in computer simulation of femtosecond processing of AlAs, GaAs, InAs nanolayers are given. Kinetic curves of  $A^3B^5:Mn$  semiconductor layers relaxation are presented as well as temperature influence on such parameters of mentioned systems as the relaxed nanolayer energy, relaxation time and the amplitude of energy fluctuations of considered systems.

**Key words:** computer simulation, quantum relaxation, thermofield dynamic fluctuations, semiconductors, doping manganese.

давая квантовые флуктуации энергии и необычные по сравнению с кристаллом и молекулой свойства. Последовательное описание такой мультикинетики — одна из фундаментальных задач современной теории и эксперимента.

**Релаксация наночастиц в методе электромеханической нанодинамики**

Введение временной переменной в процесс эволюции, изображающей точки в конфигурационном пространстве ядер R, реализовано в методе электромеханической нанодинамики [1, с. 55–61; 2, с. 409–416]. В этом методе внутренняя энергия U наночастицы с B атомами определяется вкладами их парного эффективного взаимодействия:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^B S_{ij} \varepsilon_{ij}(r_{ij}). \quad (1)$$

Здесь  $\varepsilon_{ij}(r_{ij})$  — энергия взаимодействия атомов внутри наносистемы;  $S_{ij}$  — топологическая матрица связей атомов. Временная эволюция системы атомов описывается специальными уравнениями электромеханической нанодинамики.

**Компьютерное моделирование нанослоев  $A^3B^5:Mn$** 

Структуры GaAs, AlAs, InAs и MnAs представляли собой пленки с размерами 20x20x2 элемен-

тарных ячеек, что составило 6400 атомов. Для моделирования малых концентраций легирующего элемента в матрицу  $A^3B^5$  вместо атомов  $A^3$  было введено от 48 до 400 атомов марганца разными способами замены:

1) атомов  $A^3$  в структурах  $A^3B^5$ . Замена осуществлялась при сохранении алмазоподобной структуры в слоях (модель 1);

2) фрагментов структур  $A^3B^5$  на фрагменты структуры MnAs. Замена происходила как с равномерным распределением фрагментов решетки MnAs по решетке полупроводника, так и с образованием более крупных зародышей, до полного собирания всего марганца, введенного в структуру в единый кластер, со структурой MnAs (модель 2) [3, с. 467].

Использованные при вычислении внутренней энергии нанослоя U [4, с. 81] и рассчитанные мето-

дом нелокального функционала плотности [5, с. 691–698] потенциальные кривые энергии связи  $\epsilon_{ij}(r_{ij})$  пар атомов можно характеризовать их физическими наблюдаемыми. Три основные наблюдаемые характеристики этих связей: равновесная энергия  $\epsilon$ , равновесная длина связи R и энергия нулевых колебаний длины связи  $\omega$  в основном электронном состоянии. Релаксация наноструктур методом электромеханической нанодинамики проводилась с использованием средств программного комплекса «Компьютерный нанотехнологический инженеринг» [6].

**Анализ результатов компьютерного моделирования фемтосекундного процессинга нанослоев  $A^3B^5$ :Mn**

Результаты полученные в компьютерном эксперименте фемтосекундного процессинга нанослоев AlAs:Mn, GaAs:Mn, InAs:Mn, представлены в таблицах 1–3.

Таблица 1

Показатели фемтосекундного процессинга нанослоев AlAs:Mn при различных температурах

Размер кластера, э.я. <sup>1</sup>	Содержание Mn, атом. %	Показатели фемтосекундного процессинга						
		$E_0^2$ кДж/моль	$E_{77}^2$ кДж/моль	$t_{77}^3$ пс	$A_{77}^4$ кДж/моль	$E_{298}^2$ кДж/моль	$t_{298}^3$ пс	$A_{298}^4$ кДж/моль
1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0	-390,37	-389,98	0,17–0,20	1,03	-388,88	0,07–0,10	2,62
Модель 1								
2	0,75	-390,05	-389,66	0,21–0,24	0,88	-388,56	0,07–0,10	2,51
	1,56	-389,70	-389,31	0,26–0,29	0,77	-388,20	0,07–0,10	2,61
	2,31	-389,37	-388,98	0,22–0,24	0,91	-387,88	0,07–0,10	2,52
	3,13	-389,02	-388,63	0,26–0,29	0,77	-387,52	0,07–0,10	2,61
	3,88	-388,69	-388,30	0,36–0,38	0,63	-387,20	0,07–0,10	2,61
	4,69	-388,34	-387,96	0,36–0,38	0,67	-386,85	0,12–0,15	2,49
	5,44	-388,02	-387,63	0,31–0,33	0,74	-386,53	0,12–0,15	2,57
	6,25	-387,66	-387,28	0,36–0,38	0,67	-386,17	0,10–0,12	2,56
4	0,75	-390,05	-389,66	0,17–0,20	1,04	-388,56	0,07–0,10	2,49
	1,56	-389,70	-389,31	0,22–0,24	0,91	-388,20	0,07–0,10	2,53
	2,31	-389,37	-388,99	0,26–0,29	0,81	-387,87	0,08–0,10	2,57
	3,13	-389,02	-388,63	0,26–0,29	0,61	-387,52	0,07–0,10	2,57
	3,88	-388,69	-388,31	0,37–0,40	0,59	-387,19	0,07–0,10	2,61
	4,69	-388,34	-387,96	0,36–0,39	0,65	-386,85	0,08–0,10	2,53
	5,44	-388,02	-387,63	0,31–0,34	0,76	-386,52	0,12–0,15	2,52
	6,25	-387,66	-387,28	0,31–0,34	0,77	-386,16	0,17–0,19	2,63
12	0,75	-390,05	-389,66	0,22–0,24	0,85	-388,56	0,07–0,10	2,62
24	1,56	-389,70	-389,31	0,31–0,34	0,65	-388,20	0,07–0,10	2,54
36	2,31	-389,37	-388,99	0,26–0,29	0,81	-387,88	0,08–0,10	2,59
50	3,13	-389,02	-388,63	0,38–0,41	0,65	-387,52	0,08–0,10	2,57
62	3,88	-388,69	-388,31	0,31–0,34	0,67	-387,20	0,08–0,10	2,49
74	4,69	-388,34	-387,96	0,31–0,34	0,75	-386,85	0,08–0,10	2,54
86	5,44	-388,02	-387,63	0,29–0,32	0,74	-386,52	0,08–0,10	2,47
100	6,25	-387,66	-387,28	0,55–0,58	0,61	-386,16	0,08–0,10	2,54

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Модель 2								
2	0,75	389,82	-389,44	0,35-0,37	0,63	-388,33	0,03-0,05	2,85
	1,56	388,43	-388,04	0,28-0,31	0,72	-386,94	0,03-0,05	3,07
	2,31	387,64	-387,25	0,32-0,34	0,66	-386,15	0,09-0,12	2,62
	3,13	386,42	-386,04	0,34-0,36	0,63	-384,94	0,09-0,11	2,53
	3,88	385,70	-385,32	0,35-0,37	0,62	-384,21	0,10-0,12	2,60
	4,69	384,59	-384,21	0,38-0,40	0,63	-383,11	0,10-0,12	2,63
	5,44	383,58	-383,19	0,37-0,39	0,65	-382,10	0,12-0,14	2,63
	6,25	382,85	-382,47	0,46-0,48	0,66	-381,37	0,12-0,14	2,66
4	0,75	389,81	-389,43	0,22-0,24	0,90	-388,32	0,02-0,05	3,54
	1,56	389,59	-389,21	0,36-0,39	0,65	-388,10	0,07-0,09	2,55
	2,31	389,59	-389,21	0,32-0,35	0,71	-388,10	0,04-0,06	2,90
	3,13	389,10	-388,71	0,33-0,36	0,64	-387,61	0,15-0,17	2,60
	3,88	388,61	-388,23	0,38-0,41	0,64	-387,13	0,13-0,16	2,73
	4,69	388,28	-387,89	0,38-0,41	0,64	-386,79	0,10-0,13	2,56
	5,44	388,14	-387,76	0,34-0,37	0,67	-386,65	0,11-0,14	2,58
	6,25	387,96	-387,58	0,34-0,37	0,68	-386,47	0,11-0,14	2,63
12	0,75	391,48	-391,09	0,26-0,29	0,77	-390,00	0,02-0,05	2,73
24	1,56	393,90	-393,52	0,30-0,33	0,73	-392,41	0,04-0,06	2,89
36	2,31	395,94	-395,55	0,37-0,39	0,66	-394,44	0,04-0,07	2,78
50	3,13	398,06	-397,68	0,30-0,32	0,92	-396,58	0,09-0,11	2,50
62	3,88	401,17	-400,79	0,35-0,38	0,74	-399,68	0,10-0,12	2,62
74	4,69	403,19	-402,81	0,34-0,37	0,85	-401,69	0,10-0,13	2,73
86	5,44	405,51	-405,12	0,41-0,44	0,75	-404,01	0,15-0,18	2,50
100	6,25	408,11	-407,72	0,37-0,39	1,00	-406,61	0,13-0,15	2,73

<sup>1</sup>Элементарная ячейка, <sup>2</sup> энергия релаксированного нанослоя при 0, 77 и 298 К, <sup>3</sup> время релаксации при 77 и 298 К, <sup>4</sup> амплитуда флуктуации энергии при 77 и 298 К.

Для полупроводниковых нанослоев фемтосекундная релаксация из активированного состояния при  $T = 0\text{K}$  приводит к аттрактору, вырожденному с точной нижней границей энергии, но с малоамплитудными атомными смещениями от базовой плоскости. Значения величин энергии релаксированного полупроводникового нанослоя при 0K находятся в третьей колонке таблиц 1–3. Причем устойчивость нелегированных нанослоев уменьшается при переходе AlAs — GaAs — InAs.

Для систем AlAs, легированных марганцем по модели 1, с увеличением содержания марганца в системах устойчивость нанослоев уменьшается (энергия релаксированного нанослоя AlAs:Mn изменяется от -390,37 кДж/моль для систем с содержанием марганца 0,75 атом.% до -387,66 кДж/моль для систем с содержанием марганца 6,25 атом.%) вне зависимости от размера кластера MnAs. Причем энергия нанослоев одинакова для одинакового содержания марганца в системе.

Для систем AlAs, легированных марганцем по модели 2, устойчивость нанослоев уменьшается для систем с размером кластера 2 элементарные ячейки (от -389,82 кДж/моль для 0,75 атом.% Mn, до -382,85 кДж/моль для 6,25 атом.% Mn). Для систем AlAs:Mn с размером кластера 4 элементарные ячейки наблюдается более плавное изменение энергии релаксации нанослоев: от -389,81 кДж/моль для содержания марганца в нанослое 0,75 атом.%, до -387,96 кДж/моль для содержания марганца 6,25 атом.%. Для систем же с максимальным размером кластера для данного содержания марганца в системе наблюдается увеличение устойчивости нанослоев: энергия релаксированного нанослоя изменяется от -398,48 кДж/моль для кластера размером 12 элементарных ячеек и содержанием марганца 0,75 атом.% до -408,11 кДж/моль для кластера MnAs размером 100 элементарных ячеек с содержанием марганца 6,25 атом.%. Более того, устойчивость систем AlAs:Mn, соответствующих модели 2, возрастает с увеличением размера кластера при равном содержании марганца.

Показатели фемтосекундного процессинга нанослоев GaAs:Mn при различных температурах

Размер кластера, э.я. <sup>1</sup>	Содержание Mn, атом. %	Показатели фемтосекундного процессинга							
		$E_0^2$ кДж/моль	$E_{77}^2$ кДж/моль	$t_{77}^3$ пс	$A_{77}^4$ кДж/моль	$E_{298}^2$ кДж/моль	$t_{298}^3$ пс	$A_{298}^4$ кДж/моль	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	
0	0	-358,48	-358,13	1,49–1,53	0,56	-357,12	0,67–0,71	2,49	
Модель 1									
2	0,75	-358,64	-358,29	1,36–1,39	0,55	-357,29	0,88–0,92	2,41	
	1,56	-358,82	-358,47	1,30–1,33	0,57	-357,47	0,74–0,78	2,31	
	2,31	-358,98	-358,63	1,20–1,24	0,79	-357,64	0,67–0,71	2,30	
	3,13	-359,17	-358,82	1,35–1,39	0,56	-357,81	0,74–0,87	2,31	
	3,88	-359,33	-358,98	1,51–1,53	0,56	-358,04	0,78–0,82	3,00	
	4,69	-359,51	-359,16	1,34–1,37	0,57	-358,16	0,74–0,78	2,34	
	5,44	-359,67	-359,32	1,31–1,35	0,61	-358,31	0,68–0,72	2,31	
4	6,25	-359,86	-359,51	1,43–1,46	0,58	-358,50	0,78–0,81	2,40	
	0,75	-358,64	-358,29	1,38–1,42	0,57	-357,30	0,82–0,85	2,40	
	1,56	-358,82	-358,47	1,44–1,48	0,56	-357,47	0,78–0,82	2,31	
	2,31	-358,98	-358,64	1,41–1,45	0,57	-357,63	0,92–0,96	2,30	
	3,13	-359,17	-358,82	1,39–1,43	0,57	-357,81	0,68–0,72	2,36	
	3,88	-359,33	-358,98	1,33–1,36	0,56	-357,98	0,88–0,92	2,31	
	4,69	-359,51	-359,16	1,38–1,41	0,55	-358,15	0,85–0,88	2,36	
12	5,44	-359,67	-359,33	1,32–1,35	0,56	-358,32	0,71–0,75	2,29	
	6,25	-359,86	-359,51	1,32–1,36	0,58	-358,49	0,75–0,78	2,30	
	0,75	-358,64	-358,29	1,61–1,65	0,55	-357,29	0,71–0,75	2,35	
	24	1,56	-358,82	-358,47	1,44–1,48	0,58	-357,47	0,71–0,75	2,35
	36	2,31	-358,98	-358,64	1,38–1,42	0,57	-357,63	0,82–0,86	2,28
	50	3,13	-359,17	-358,82	1,40–1,44	0,57	-357,82	0,72–0,75	2,28
	62	3,88	-359,33	-358,98	1,48–1,52	0,55	-357,98	0,82–0,86	2,26
74	4,69	-359,51	-359,16	1,38–1,42	0,55	-358,15	0,72–0,75	2,30	
86	5,44	-359,67	-359,32	1,33–1,36	0,57	-358,32	0,89–0,93	2,27	
100	6,25	-359,86	-359,51	1,30–1,34	0,56	-358,50	0,65–0,69	2,31	
Модель 2									
2	0,75	-358,37	-358,03	1,35–1,39	0,57	-357,05	0,76–0,79	2,40	
	1,56	-358,04	-357,71	1,43–1,43	0,59	-356,71	0,72–0,75	2,26	
	2,31	-357,57	-357,23	1,32–1,36	0,65	-356,23	0,67–0,70	2,23	
	3,13	-357,12	-356,77	1,30–1,34	0,63	-355,41	0,64–0,68	2,35	
	3,88	-356,75	-356,40	1,28–1,32	0,62	-355,17	0,86–0,90	2,36	
	4,69	-356,52	-356,17	1,29–1,32	0,63	-354,17	0,60–0,63	2,43	
	5,44	-355,91	-355,57	1,23–1,26	0,65	-354,57	0,66–0,70	2,44	
4	6,25	-355,69	-355,35	1,09–1,13	0,70	-354,34	0,61–0,65	2,49	
	0,75	-358,67	-358,32	1,56–1,60	0,55	-357,33	0,83–0,87	2,28	
	1,56	-358,71	-358,36	1,39–1,43	0,57	-357,38	0,74–0,78	2,33	
	2,31	-359,17	-358,83	1,30–1,33	0,65	-357,84	0,91–0,95	2,29	
	3,13	-359,65	-359,30	1,37–1,40	0,64	-358,32	0,76–0,80	2,28	
	3,88	-359,77	-359,43	1,34–1,37	0,62	-358,44	0,65–0,69	2,45	
	4,69	-359,79	-359,44	1,28–1,32	0,61	-358,44	0,68–0,72	2,39	
100	5,44	-360,28	-359,93	1,32–1,36	0,63	-358,92	0,72–0,75	2,47	
	6,25	-360,89	-360,54	1,33–1,36	0,64	-359,54	0,65–0,69	2,44	

1	2	3	4	5	6	7	8	9
12	0,75	-360,10	-359,76	1,48-1,52	0,57	-358,78	0,71-0,75	2,27
24	1,56	-362,99	-362,64	1,45-1,49	0,65	-361,66	0,75-0,78	2,81
36	2,31	-365,39	-365,04	1,36-1,39	0,67	-364,05	0,77-0,80	2,37
50	3,13	-367,90	-367,55	1,38-1,41	0,64	-366,55	0,74-0,77	2,34
62	3,88	-370,57	-370,21	1,43-1,46	0,68	-369,21	0,74-0,77	2,70
74	4,69	-374,21	-373,86	1,51-1,54	0,63	-372,85	0,69-0,72	2,41
86	5,44	-377,08	-376,72	1,43-1,46	0,64	-375,71	0,75-0,78	2,43
100	6,25	-380,10	-379,74	1,48-1,51	0,68	-378,72	0,70-0,74	2,44

<sup>1</sup>Элементарная ячейка, <sup>2</sup> энергия релаксированного нанослоя при 0, 77 и 298 К, <sup>3</sup> время релаксации при 77 и 298 К, <sup>4</sup> амплитуда флуктуации энергии при 77 и 298 К.

Для систем GaAs, легированных марганцем по модели 1, с увеличением содержания марганца в системах устойчивость нанослоев возрастает (энергия релаксированного нанослоя GaAs:Mn изменяется от -358,64 кДж/моль для систем с содержанием марганца 0,75 атом.% до -359,67 кДж/моль для систем с содержанием марганца 6,25 атом.%) вне зависимости от размера кластера MnAs. Энергия нанослоев одинакова для одинакового содержания марганца в системе и не зависит от размера кластера, а зависит только от содержания марганца.

Системы GaAs, легированные марганцем по модели 2, проявляют различную степень устойчивости в зависимости от размера кластера и содержания марганца. Так, для систем с размером кластера 2 элементарные ячейки наблюдается снижение устойчивости (энергия релаксированной системы изменяется от -358,67 кДж/моль для 0,75 атом.% Mn, до -360,89 кДж/моль для 6,25 атом.% Mn). Для систем GaAs:Mn с размером кластера 4 элементарные ячейки наблюдается плавное изменение энергии релаксации нанослоев с тенденцией увеличения устойчивости: от -358,71 кДж/моль для содержания марганца в нанослое 0,75 атом.%, до -360,89 кДж/моль для содержания марганца 6,25 атом.%. Для систем с максимальным размером кластера для данного содержания марганца в системе наблюдается увеличение устойчивости нанослоев: энергия релаксированного нанослоя изменяется от -360,10 кДж/моль для кластера размером 12 элементарных ячеек и содержанием марганца 0,75 атом.% до -380,10 кДж/моль для кластера MnAs размером 100 элементарных ячеек с содержанием марганца 6,25 атом.%. При увеличении размера кластера в системе GaAs:Mn с одинаковым содержанием марганца устойчивость релаксированных нанослоев возрастает.

Для систем InAs, легированных марганцем по модели 1, с увеличением содержания марганца в системах устойчивость нанослоев возрастает (энергия релаксированного нанослоя InAs:Mn изменяется от -312,91 кДж/моль для систем с содержанием марганца 0,75 атом.% до -319,36 кДж/моль для систем с содер-

жением марганца 6,25 атом.%) вне зависимости от размера кластера MnAs. Энергия нанослоев одинакова для одинакового содержания марганца в системе и не зависит от размера кластера, а зависит только от содержания марганца.

Системы InAs, легированные марганцем по модели 2, проявляют различную степень устойчивости в зависимости от размера кластера и содержания марганца. Так, для систем с размером кластера 2 элементарные ячейки наблюдается снижение устойчивости (энергия релаксированной системы изменяется от -312,06 кДж/моль для 0,75 атом.% Mn, до -310,38 кДж/моль для 6,25 атом.% Mn). Для систем InAs:Mn с размером кластера 4 элементарные ячейки наблюдается плавное изменение энергии релаксации нанослоев с тенденцией увеличения устойчивости: от -312,36 кДж/моль для содержания марганца в нанослое 0,75 атом.%, до -314,95 кДж/моль для содержания марганца 6,25 атом.%. Для систем с максимальным размером кластера для данного содержания марганца в системе наблюдается увеличение устойчивости нанослоев: энергия релаксированного нанослоя изменяется от -313,59 кДж/моль для кластера размером 12 элементарных ячеек и содержанием марганца 0,75 атом.% до -334,99 кДж/моль для кластера MnAs размером 100 элементарных ячеек с содержанием марганца 6,25 атом.%. При увеличении размера кластера в системе InAs:Mn с одинаковым содержанием марганца устойчивость релаксированных нанослоев возрастает.

Кинетические кривые изменения энергии системы в фемтосекундном диссипативном процессе релаксации неравновесных полупроводниковых нанослоев A<sup>3</sup>B<sup>5</sup>:Mn при двух температурах 77 и 298 К, на примере системы GaAs:Mn, с содержанием марганца 3,88 атом.%, с размером кластера MnAs 4 элементарные ячейки, соответствующей модели 1, показаны на рисунке 1. По данным рисунка 1 и аналогичным кинетическим кривым, построенным в ходе исследования полупроводниковых систем и таблиц 1-3, можно сделать следующие выводы. Видно, что выход изначально активированного полупроводникового нанослоя на «плато» аттрактора сильно зависит от температуры. При этом квантовая стохастическая эволюция нерав-

новесных полупроводниковых нанослоев достигает релаксации за разное время (например, для системы, чьи кинетические кривые представлены на рисунке 1,  $t_{77} \approx 1,35$  пс и  $t_{298} \approx 0,90$  пс). Из рисунка 1 видно, что при высокой температуре насыщенность энергией ( $-357,98$  кДж/моль) и амплитуда флуктуаций энергии ( $2,31$  кДж/моль) значительно выше, чем при криогенной температуре ( $-358,98$  кДж/моль и  $0,56$  кДж/моль

соответственно). Но при этой отдаленности от состояния равновесия режим релаксационного движения в аттракторе по прошествии длительного (десятки пикосекунд) времени эволюции сохраняется квазистационарным. Из таблиц 1–3 видно, что релаксированные полупроводниковые нанослои при комнатной температуре имеют запас энергии на  $\sim 0,98$ – $1,12$  кДж/моль выше, чем при криогенной температуре.

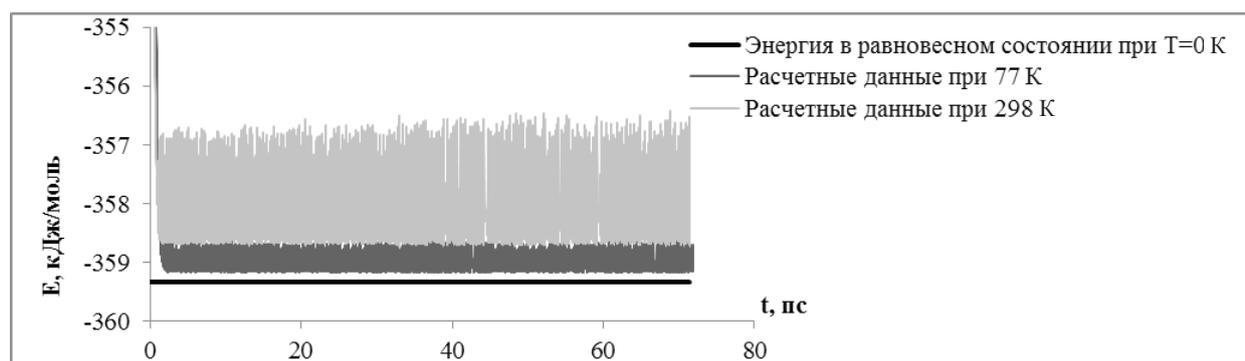
Таблица 3

Показатели фемтосекундного процессинга нанослоев InAs:Mn при различных температурах

Размер кластера, э.я. <sup>1</sup>	Содержание Mn, атом. %	Показатели фемтосекундного процессинга						
		$E_0$ <sup>2</sup> кДж/моль	$E_{77}$ <sup>2</sup> кДж/моль	$t_{77}$ <sup>3</sup> пс	$A_{77}$ <sup>4</sup> кДж/моль	$E_{298}$ <sup>2</sup> кДж/моль	$t_{298}$ <sup>3</sup> пс	$A_{298}$ <sup>4</sup> кДж/моль
1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	0	-312,03	-311,67	2,06–2,11	0,58	-310,65	1,12–1,16	2,35
Модель 1								
2	0,75	-312,91	-312,55	2,03–2,06	0,59	-311,53	1,08–1,12	2,30
	1,56	-313,85	-313,49	2,05–2,09	0,6	-312,47	1,14–1,18	2,32
	2,31	-314,73	-314,37	1,93–1,97	0,6	-313,35	1,03–1,07	2,33
	3,13	-315,69	-315,33	1,85–1,89	0,6	-314,30	0,99–1,03	2,32
	3,88	-316,57	-316,21	1,87–1,91	0,58	-315,18	1,06–1,10	2,32
	4,69	-317,52	-317,16	1,86–1,89	0,59	-316,13	0,99–1,03	2,30
	5,44	-318,40	-318,04	1,95–1,98	0,63	-317,01	1,06–1,09	2,41
	6,25	-319,36	-319,00	1,69–1,73	0,63	-317,98	0,89–0,93	2,36
4	0,75	-312,91	-312,55	2,04–2,08	0,59	-311,53	1,12–1,16	2,31
	1,56	-313,85	-313,49	2,10–2,14	0,58	-312,47	1,11–1,16	2,30
	2,31	-314,73	-314,37	1,94–1,98	0,59	-313,34	1,08–1,12	2,37
	3,13	-315,69	-315,33	1,90–1,94	0,57	-314,31	1,04–1,08	2,30
	3,88	-316,57	-316,21	2,15–2,19	0,59	-315,19	1,05–1,09	2,42
	4,69	-317,52	-317,16	1,89–1,93	0,59	-316,13	0,98–1,02	2,32
	5,44	-318,40	-318,04	1,81–1,85	0,6	-317,01	1,01–1,05	2,35
	6,25	-319,34	-319,00	1,69–1,73	0,65	-317,97	1,12–1,16	2,45
12	0,75	-312,91	-312,55	2,10–2,15	0,57	-311,53	1,08–1,13	2,38
24	1,56	-313,85	-313,49	2,07–2,11	0,57	-312,47	1,09–1,13	2,40
36	2,31	-314,73	-314,37	2,00–2,03	0,57	-313,35	1,18–1,22	2,31
50	3,13	-315,69	-315,33	2,00–2,04	0,58	-314,30	1,15–1,19	2,41
62	3,88	-316,57	-316,21	1,96–2,00	0,58	-315,19	1,16–1,20	2,37
74	4,69	-317,52	-317,16	2,05–2,09	0,60	-316,13	1,10–1,14	2,35
86	5,44	-318,40	-318,04	1,90–1,94	0,58	-317,01	1,02–1,06	2,36
100	6,25	-319,36	-319,00	1,90–1,94	0,58	-317,97	1,03–1,07	2,44
Модель 2								
2	0,75	-311,73	-311,38	2,09–2,13	0,57	-310,37	1,30–1,34	2,38
	1,56	-312,06	-311,71	1,90–1,95	0,72	-310,70	1,14–1,18	2,28
	2,31	-311,41	-311,05	1,89–1,93	0,64	-310,05	0,97–1,01	2,36
	3,13	-311,31	310,96	1,94–1,98	0,64	-309,95	1,09–1,13	2,45
	3,88	-311,21	-310,86	1,79–1,83	0,66	-309,83	1,04–1,08	2,47
	4,69	-310,91	-310,55	1,86–1,89	0,67	-309,52	0,98–1,02	2,57
	5,44	-310,66	-310,31	1,80–1,84	0,70	-309,28	0,91–0,95	2,59
	6,25	-310,38	-310,02	1,73–1,77	0,68	-309,00	0,88–0,92	2,61

4	0,75	-312,36	-312,01	2,15-2,19	0,59	-311,00	1,17-1,21	3,02
	1,56	-312,59	-312,23	2,07-2,11	0,59	-311,22	1,17-1,21	2,29
	2,31	-312,98	312,63	1,96-2,04	0,63	-311,61	1,14-1,18	2,33
	3,13	-313,32	-312,96	1,98-2,02	0,63	-311,95	1,04-1,08	2,51
	3,88	-313,60	-313,24	1,90-1,93	0,66	-312,23	1,10-1,14	3,05
	4,69	-314,10	-313,75	1,86-1,89	0,69	-312,73	1,16-1,20	2,60
	5,44	-314,16	-313,80	1,90-1,94	0,66	-312,77	1,13-1,17	2,70
	6,25	-314,95	-314,59	1,93-1,95	0,69	-313,55	0,97-1,01	2,62
12	0,75	-313,59	-313,24	2,08-2,12	0,59	-312,24	0,93-0,97	2,97
24	1,56	-316,36	-316,00	1,99-2,03	0,62	-314,99	1,26-1,30	3,14
36	2,31	-319,16	-318,81	2,13-2,17	0,66	-317,79	1,08-1,12	2,67
50	3,13	-322,51	-322,15	1,91-1,94	0,68	-321,11	1,19-1,23	2,64
62	3,88	-325,32	-324,96	1,87-1,91	0,69	-323,92	1,00-1,04	2,58
74	4,69	-328,62	-328,26	1,91-1,94	0,70	-327,20	1,04-1,08	2,70
86	5,44	-331,71	-331,35	1,85-1,89	0,68	-330,31	1,05-1,08	2,65
100	6,25	-334,99	-334,62	1,97-2,00	0,73	-333,57	1,08-1,12	2,71

<sup>1</sup>Элементарная ячейка, <sup>2</sup> энергия релаксированного нанослоя при 0, 77 и 298 К, <sup>3</sup> время релаксации при 77 и 298 К, <sup>4</sup> амплитуда флуктуации энергии при 77 и 298 К.



Кинетические кривые релаксации энергии системы GaAs:Mn, с содержанием марганца 3,88 атом.%, с размером кластера MnAs 4 элементарные ячейки, соответствующей модели 1

### Заключение

В ходе работы методами компьютерного моделирования были исследованы наносистемы арсенида алюминия, галлия и индия, легированные марганцем. Полученные результаты могут быть полезны при решении ряда до сих пор неразрешимых проблем в области самосборки и самоорганизации электромеханических наноустройств (НЭМС), имитирующих и превосхо-

дящих многие функциональные признаки типичных биосистем, но созданных на основе использования нанозлементной базы, включающей в том числе наночастицы полупроводников. Использование более широкой нанозлементной базы позволяет модифицировать и улучшать эксплуатационные функциональные характеристики электромеханических наносистем материалов по сравнению с имитируемыми биосистемами.

### Библиографический список

1. Безносюк С. А., Жуковский М. С., Потекаев А. И. Теория движения в конденсированном состоянии квантовых электромеханических плазмидных наноботов // Изв. вузов. Физика. — 2013. — Т. 56, № 5.

2. Безносюк С. А., Жуковский М. С., Жуковская Т. М. Основы теории наноэлектромеханических систем плазмодных наноботов // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2013. — Т. 10, № 3.
3. Земцова Ю. В., Безносюк С. А., Жуковский М. С. Компьютерное моделирование нанослоев  $A^3B^5$ , допированных марганцем // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2012. — Т. 9, № 4.
4. Безносюк С. А., Потекаев А. И., Жуковский М. С., Жуковская Т. М., Фомина Л. В. Многоуровневое строение, физико-химические и информационные свойства вещества. — Томск, 2005.
5. Beznosjuk S. A., Dajanov R. D., Kuljanov A. T. Density functional calculation of transition metal cluster energy surfaces // International Journal of Quantum Chemistry. — 1990. — V. 38, № 5.
6. Безносюк С. А., Жуковский М. С., Важенин С. В. Компьютерный наноинжиниринг / Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2010612461 от 07.04.2010.