

Секция «Вычислительная математика и кибернетика»

Моделирование электронной структуры молекулярной системы при фазовом переходе второго рода в аморфном углероде.

Нижишин Николай Глебович

Студент

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет вычислительной математики и кибернетики, Москва, Россия

E-mail: truecoldfault@gmail.com

В последнее время различным формам углерода уделяется много внимания в приложениях, направленных на создание устройств памяти на фазовых переходах. Легко включаемый в матричную структуру аморфный углерод (а-С) особенно интересен и перспективен в данной области.

Последние эксперименты, выполненные в исследовательской лаборатории IBM в Цюрихе [1], показали, что свойства переключения сопротивления в тонких плёнках аморфного углерода аналогичны теллуридным сплавам. Существенное переключение проводимости углеродных наноточек происходит благодаря структурному фазовому переходу второго рода. Ячейки из материалов, меняющих сопротивление на наномасштабе, лежат в основе создания новой универсальной памяти компьютера, что является одним из важнейших направлений в наноэлектронике.

На основе квантовой молекулярной динамики Кар-Парринелло в [2] было показано переключение структуры ионов а-С в графитовую слоистую структуру и найден обобщенный структурный параметр такой перестройки. Однако, время релаксации электронов и быструю эволюцию электронной системы через возбужденные состояния, определяющие проводимость наноточки невозможно определить в приближении Борна-Оппенгеймера.

Настоящая работа посвящена численному моделированию релаксации электронной системы при фазовом структурном переходе второго рода в а-С и установлению критериев перехода электронной системы в новое состояние. В основу исследования выбрана квантовая молекулярная динамика Эрнфеста, в которой учитываются классические уравнения для ионов системы и динамические квантовые уравнения Шредингера для электронов. Предлагается концепция разделения медленной эволюции структурной перестройки ионов, полученной в [2] с найденными структурными параметрами и решения на этом фоне системы уравнений Шредингера для электронной системы. При этом используется набор возбужденных орбиталей Кона-Шэма, и энергии орбиталей, найденные в [2].

Основным результатом работы является нахождение условий на скорость роста структурного параметра перестройки системы ионов, величину внешнего потенциала электрического поля и величину перекрытия орбиталей Кона-Шэма. Найдено, что при малом внешнем электрическом поле электронная система испытывает локальные колебания около ловушек, определяемых ионной структурой. При увеличении поля и скорости роста структурного фактора происходит фазовый переход, при котором резко увеличивается ток, обусловленный электронной системой. При этом увеличиваются плотности электронов в возбужденных состояниях. Найденные зависимости сопоставляются с экспериментами, проведенными в [1].

Литература

1. Sebastian A., Pauza A., Rossel C., Shelby R.M., Rodriguez A.F., Pozidis H., Eleftheriou E. Resistance switching at the nanometer scale in amorphous carbon // *New Journal of Physics*, 2011, V. 13, P. 013020.
2. Г.Н.Шумкин, А.М.Попов. Моделирование из первых принципов фазового перехода в аморфном углероде // *Математическое моделирование*. 2012. Vol. 24. No. 10. С. 65-79.

Слова благодарности

Хочется выразить слова благодарности моему научному руководителю Попову Александру Михайловичу за чуткое руководство и всестороннюю помощь при изучении данной темы.