

# БЛОЧНО-РЕГУЛЯРНЫЙ МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТРИЦАХ

А. Т. Власов, Н. А. Поклонский

Белорусский государственный университет, г. Минск

В квантовой электронике актуальным является поиск способов создания активных сред путем формирования в полупроводниковой матрице наноразмерных кластеров [1]. Существует размер нанокластера, начиная с которого он не “растворяется”, а становится зародышем новой фазы конденсированного состояния вещества [2].

Экспериментально установлено множество стабильных локальных атомных конфигураций. Например, для углерода это локальные блоки (структуры): центрированный тетраэдр в алмазе, центрированный треугольник в графене (углеродном монослое с гексагональной структурой), центрированный отрезок в карбине [3].

Авторами развиваются идеи Делоне (см. [4]) о локально регулярных системах. Введены блочно-регулярные системы точек. Атом в нанокластере взаимодействует только с ближайшими соседями, но это взаимодействие зависит и от более удаленных соседей. Вместе они образуют блок – это конечное подмножество  $B = \{b_0, b_1, \dots, b_n\}$  с выделенной точкой  $b_0 \in B$ , центральным атомом. Зависимость приходящейся на центральный атом энергии  $U$  блока  $B$  от взаимного расположения соседей может быть найдена из уравнения Шредингера, решение которого дает функцию  $U = U(B)$ . Предлагаемый метод основан на разложении энергии кластера из блоков на (приблизительно) независимые слагаемые, отвечающие деформированным блокам. В [5] деформация блока характеризуется кривизной поверхности нанотрубки, чем она больше, тем больше энергия, связанная с деформацией С–С связей. Но кривизну поверхности (вместо используемого нами понятия деформации блока) можно использовать лишь в двумерном случае. Предлагаемый метод позволяет моделировать образование нанокластеров с учетом начальных и граничных условий.

1. Мильвидский М. Г., Чалдышев В. В. ФТП. 1998. Т. 32, № 5. Р. 513–522.
2. Стафеев В. И. Материалы I Межрегионального семинара. Йошкар-Ола – Москва, МарГТУ, 2003. С. 131–143.
3. Inagaki M., Radovic L. R. Carbon. 2002. Vol. 40. Р. 2263–2284.
4. Делоне Б. Н., Долбиллин Н. П., Штогрин М. И., Галулин Р. В. Докл. АН СССР, 1976. Т. 227, № 1. С. 19–21.
5. Роткин В. В., Сурис Р. А. ФТТ. 1999. Т. 41, № 5. С. 809–812.