

Литература

1. GISLAB, географические информационные системы и дистанционное зондирование [Электронный ресурс] / Расчеты коэффициента линейной корреляции. Дубин М., 2003–2013. – Режим доступа: <http://gis-lab.info/qa/correlation.html#sel=>, свободный. – Загл. с экрана. — Яз. рус., англ.

УДК 004.9

AB-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ФТОРИДОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

студентки гр. 103719 Романова А. Р., Мацук Н. А.,
магистрант Бобачёнок И. А.,

Научный руководитель - канд. техн. наук, доцент, Гулай А.В.

Белорусский национальный технический университет
Минск, Беларусь

В последние годы значительно возрос интерес к исследованиям фтористых соединений редкоземельных элементов (РЗЭ). Это объясняется появлением новых областей применения трифторидов РЗЭ и их соединении с фторидами других элементов, например таких, как лазерная техника и микроэлектроника.

Задачей исследования является проектирование и моделирование атомно-структурных и электронных свойств сенсорных материалов на основе фторидов редкоземельных элементов. В качестве среды моделирования используется программный пакет VASP (Vienna Ab-Initio Simulation Package), позволяющий выполнять расчеты из первых принципов методами квантовой механики и молекулярной динамики. Для определения поведения твердых, аморфных и жидких тел VASP использует различные алгоритмы расчета основного электронного состояния.

Для моделирования выбраны фториды редкоземельных элементов, а именно: NdF_3 , LaF_3 , YF_3 . Эти материалы представляют большой интерес для применения в сенсорной технике. Фторид неодима NdF_3 входит в цериевую подгруппу, элементы которой называются

лёгкими, а фториды иттрия и лантана входят в иттриевую подгруппу, элементы которой – тяжелые.

Фториды редкоземельных элементов при комнатной температуре могут образовывать кристаллические решетки двух типов — гексагональную (элементарная ячейка строится на трёх базовых векторах, два из которых равны и образуют угол 120° , а третий им перпендикулярен, три элементарных ячейки образуют правильную призму на шестигранном основании) и орторомбическую (определяется тремя базовыми векторами, все три вектора перпендикулярны друг к другу, но не равны между собой).

Выполнялись следующие процедуры моделирования оксидов ванадия: формирование входных файлов с заданием на моделирование; релаксация кристаллографической структуры; проведение анализа кристаллографической ячейки; определение электронной структуры фторидов редкоземельных элементов. Кристаллографические структуры показаны на рис. 1.

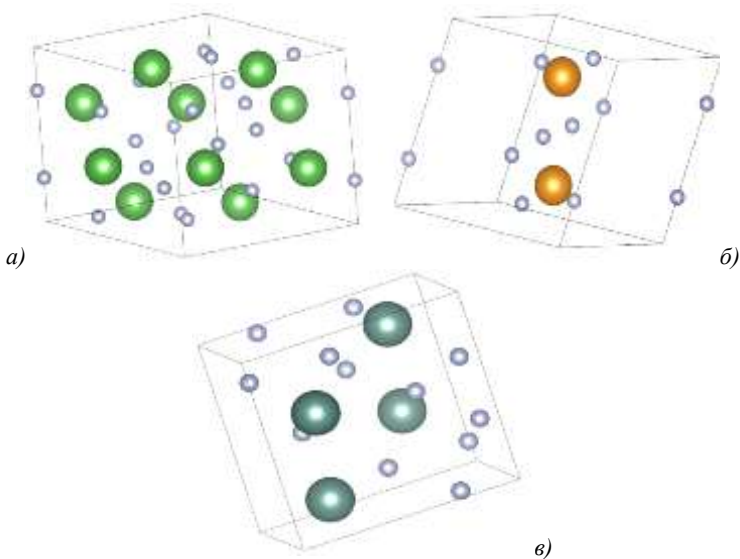
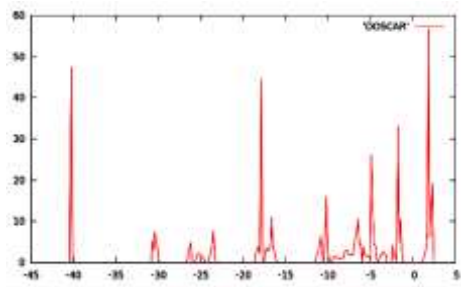
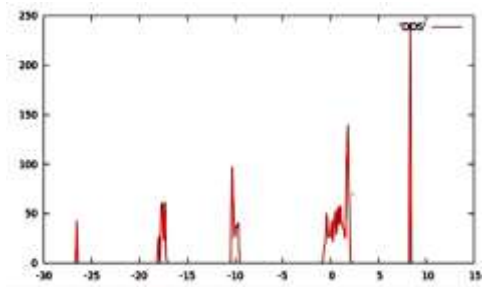


Рис. 1. Кристаллическая решетка: *a* – NdF_3 , *б* – LaF_3 , *в* – YF_3

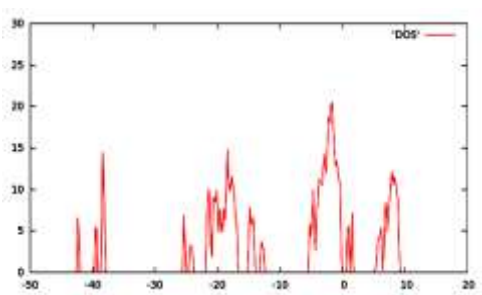
По результатам моделирования рассчитана и построена электронная плотность соединений. Установлено, что уровень Ферми имеет значения: $E_F(\text{NdF}_3) = 1,8260$ эВ, $E_F(\text{LaF}_3) = 2,1413$ эВ, $E_F(\text{YF}_3) = 5,9112$ эВ. Полученные электронные плотности представлены на рисунке 2.



а)



б)



в)

Рис. 2. Электронная плотность: а – NdF_3 , б – LaF_3 , в – YF_3 .