

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОСТРУКТУР СЕНСОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

студентка гр. 103711 Клепик А.И.

Научный руководитель – асс. И.А.Бобачёнок

Белорусский национальный технический университет
Минск, Республика Беларусь

3D-визуализаторы молекул (Molecular Visualization Programs), позволяют на основе содержащихся во входном файле данных построить модель и рассмотреть ее с разных сторон.

Одним из таких визуализаторов является программа VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis).

Рассмотрим визуализацию наноматериалов на примере 3D, 2D и 1D структур нитрида алюминия (AlN).

Нитрид алюминия (AlN) с высокой теплопроводностью предназначена для использования в электронике и электротехнике, в первую очередь, в качестве материала подложек мощных силовых и СВЧ полупроводниковых приборов, микросхем, микросборок и многокристальных модулей, термомодулей и подложек мощных светодиодов, а также других компонентов и устройств, где требуются высокие диэлектрические характеристики, прочность и теплопроводность материала.

Кристаллографические параметры нитрида алюминия сведены в таблицу 1.

Таблица 1 – Кристаллографические параметры AlN

Пространственная группа	Номер группы симметрии	Параметры решетки					
		Постоянные решетки			Углы между гранями		
		a, Å	b, Å	c, Å	$\alpha, ^\circ$	$\beta, ^\circ$	$\gamma, ^\circ$
P 63 m c	186	3.112	3.112	4.982	90	90	120

Элементарная ячейка нитрида алюминия в программе Vesta изображена на рисунке 1:

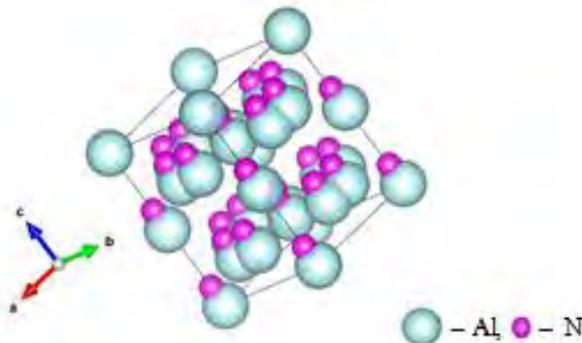


Рис. 1-Элементарная ячейка AlN

Наноразмерные объекты классифицируют по размерности: 1) объемные трехмерные (3D) структуры, их называют нанокластерами; 2) плоские двумерные (2D) объекты – нанопленки; 3) линейные одномерные (1D) структуры – нанонити, или наношнуры.

3D структуры состоят из атомов металлов или относительно простых молекул. Разновидность наночастиц, представляющая собой аморфную или поликристаллическую наноструктуру, хотя бы один характерный размер которой находится в пределах 1-10 нм. 2D структуры – объекты, у которых два характеристических размера больше 100 нм. 1D структуры – протяженные наноструктуры с сечением менее 10 нм. Размеры обычной проволоки во много раз больше расстояний между атомами, поэтому электроны свободно перемещаются во всех направлениях. В наношнуре электроны способны свободно двигаться лишь в одном направлении – вдоль шнура, но не поперек, т.к. ее диаметр всего лишь в несколько раз превышает расстояние между атомами.

На основе созданной элементарной ячейки нитрида алюминия были построены 3D, 2D, 1D структуры нитрида алюминия, представленные на рисунке 2:

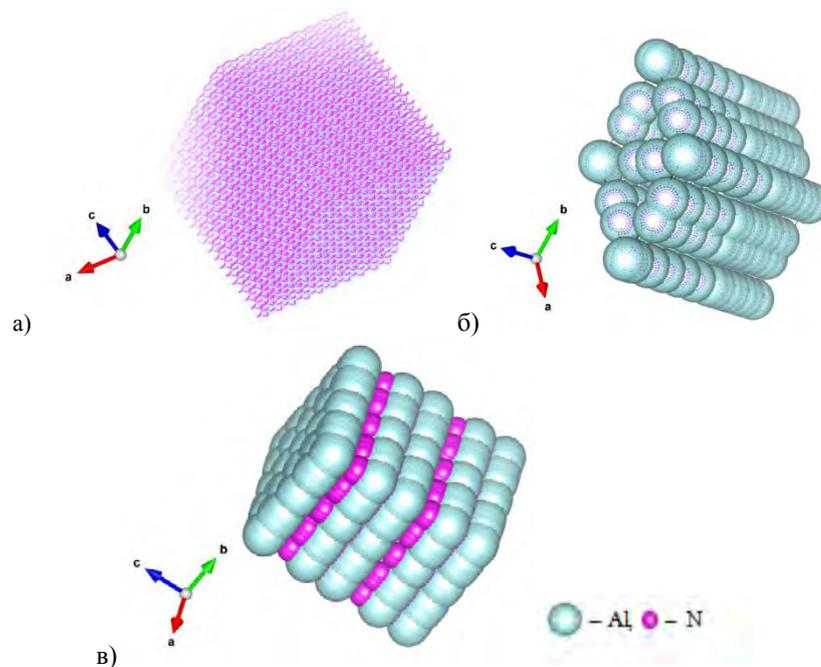


Рис. 2- Структуры нитрида алюминия
а) 3D, б) 2D, в) 1D

Литература

1. М. М. Рыбалкина Нанотехнологии для всех. М., 2005;
2. В. М. Колешко Визуализация структуры сенсорных наноматериалов с использованием программы VESTA [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие для студентов специальностей 1-55 01 01 «Интеллектуальные приборы, машины и производства», 1-55 01 02 «Интегральные сенсорные системы» / В. М. Колешко, А. В. Гулай, В. А. Гулай, Н. В. Левченко; Белорусский национальный технический университет, Кафедра «Интеллектуальные системы». - Электрон. дан.. – БНТУ, 2014