

Машиностроительный факультет

Кафедра «Интеллектуальные системы»

ДОПУЩЕН К ЗАЩИТЕ

Заведующий кафедрой



А.В.Гулай

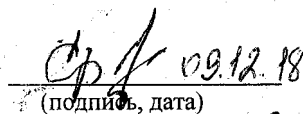
“09” 01 2019 г.

**РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА
ДИПЛОМНОГО ПРОЕКТА**

«Моделирование электронных свойств атомарных слоев диэлектрика для сенсорных наногетероструктур»

Специальность 1-55 01 02 «Интегральные сенсорные системы»

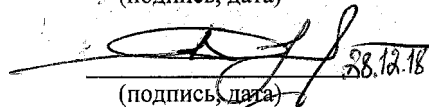
Обучающийся
группы 10307114



09.12.18
(подпись, дата)

Ермакова О.В.

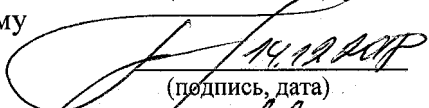
Руководитель проекта,
к.т.н. зав. кафедры



28.12.18
(подпись, дата)

Гулай А.В.

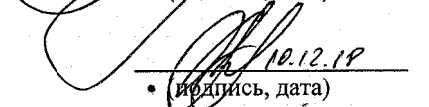
Консультант по экономическому
разделу, ст. преподаватель



14.12.2018
(подпись, дата)

Куневич О.В.

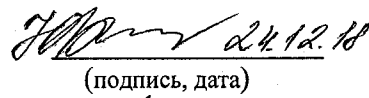
Консультант по охране труда,
к.т.н. доцент



10.12.18
(подпись, дата)

Пантелеенко Е.Ф.

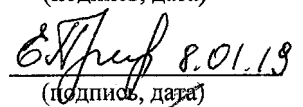
Консультант по переводу научно-
технической литературы,
ст. преподаватель



24.12.18
(подпись, дата)

Безнис Ю.В.

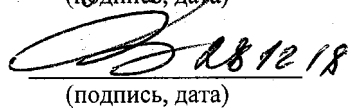
Консультант по электронной
презентации, ст. преподаватель



8.01.19
(подпись, дата)

Полынкova Е.В.

Ответственный за нормоконтроль
ведущий инженер



28.12.18
(подпись, дата)

Волкова З.Н.

Объем дипломного проекта:
расчетно-пояснительная записка - 77 страниц;
графическая часть - 9 листов;
магнитные (цифровые) носители - 1 единиц.

РЕФЕРАТ

Дипломный проект: 77 с., 5 ил., 28 табл., 39 источников.

ДИЭЛЕКТРИКИ, VASP, ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА, СЕНСОРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ.

Объектом исследования являются соединения группы BaR_2O_4 .

Цель проекта: моделирование электронных свойств атомарных слоев диэлектрика для сенсорных наногетероструктур.

В результате моделирования в программе VASP были рассчитаны электронные плотности и построены зонные диаграммы для исследуемых материалов: показано, что ширина запрещенной зоны для указанных материалов обратно пропорциональна, а энергия Ферми прямо пропорциональна порядковому номеру редкоземельного элемента в периодической таблице.

Областью практического применения исследуемых материалов является микроэлектроника, сенсорная техника.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТУРАТУРЫ

1. Диэлектрики. Виды и работа. Свойства и применение. Особенности [Электронный ресурс]. — Электронные данные. — Режим доступа: <https://electrosam.ru/glavnaja/jelektrotehnika/dielektriki/>.
2. Ржевская, С.П. Электрические материалы. Диэлектрики: курс лекций / С.П. Ржевская. — Минск: БНТУ, 2009. — 142 с.
3. Шмидт, В.В. Введение в физику сверхпроводников / В.В. Шмидт. — М.: МЦНМО, 2000. — 397 с.
4. Открытие высокотемпературной сверхпроводимости [Электронный ресурс]. — Электронные данные. — Режим доступа: <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/vtsp/01.html#1>.
5. Гудилин, Е.А. Направленный синтез сверхпроводящих керамических материалов на основе РЗЭ-бариевых купратов / Е.А. Гудилин. — М: МГУ, 2003. — 443 с.
6. Nanotechnology in Environmental Science. Volume 1 / John Wiley & Sons. — С.М. Hussain, А.К. Mishra, 2018.
7. Барий [Электронные свойства]. — Электронные данные. — Режим доступа: <https://ibrain.kz/himiya-svoystva-elementov/bariy>.
8. Carrillo, A. J. Revisiting the BaO₂/BaO redox cycle for solar thermochemical energy storage / A. J. Carrillo // Physical Chemistry Chemical Physics. — 2016. — № 11. — с 8039-8048.
9. Минакова, Т.С. Фториды и оксиды щелочноземельных металлов и магния. Поверхностные свойства. / Т.С. Минакова, И.А. Екимова. — Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2014. — 148 с.
10. Дэвидсон, С. Поверхностные (таммовские) состояния / С. Дэвидсон, Дж. Левин. — М.: Мир, 1973. 232 с.
11. Савинцев А.П., Темроков А.И. О поверхностных состояниях бария и магния // Журнал технической физики. — 2002. — Т.72, №4. — с. 126–127.
12. Редкоземельные металлы [Электронный ресурс]. — Электронные данные. — Режим доступа: <https://promplace.ru/vidy-metallov-i-klassifikaciya-staty/redkozemelnye-metally-1584.htm>.
13. Редкие земли [Электронный ресурс]. — Электронные данные. — Режим доступа: <http://rareearth.ru/ru/pub/20140414/00560.html>.
14. Xia X., Shao Y. Ab initio prediction of the electronic, magnetic and topological properties of Ln₂O₃ clusters // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2017. — V. 29, № 26. — P. 68-78.
15. Ковба Л.М., Лугин Л.И., Антипин Е.В. // Журнал неорганической химии. — 1983. — Т. 28е, № 3. — С. 724-727.

16. Frase K.J., Liniger E.G., Clarke D.R. // J. Amer. Ceram. Soc. — 1987. — Vol. 30, № 9. — P. 204-205.
17. Лопато Л.М., Лугин Л.И., Шевченко А.В. // Докл. АН УССР Геол., хим. и биол. науки. — 1970. — № 6. — С. 535-539.
18. Майстер И.М., Лопато Л.М. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. — 1973. — Т.9, № 1. — С.64-67
19. Лопато Л.М., Майстер И.М., Шевченко А.В. // Докл. АН УССР. Геол., хим. и биол. науки. — 1972. № 3. — С. 245-248.
20. Антипов Е.В., Лыкова Л.Н., Ковба Л.М. // Журн. Неорган. химии. — 1984. — Т.29, № 6. — С.1624-1625.
21. Лопато Л.М., Майстер Т.М., Шевченко А.В. // Изв. АН СССР. Неорган. материалы. — 1972. — Т.8, № 4. — С.861-864.
22. Hodorowicz S.A., Lasocha A., Lasocha W., Chodorowicz A. // Acta phys. pol. A. — 1989. — Vol.75, N 3. — P. 437-442.
23. Hodorowicz E., Hodorowicz S.A., Eick H.A. // Physica C. — 1989. — Vol.158, N 1/2. — P.127-136.
24. Kruger I., Muller-Buschbaum H. // Ztschr. Anorg. Chem. — 1984. — Bd. 512, N 1. — S.59-64.
25. Sun J. First-Principles Calculations of Novel Materials / Sun J. — Florida: Florida State University Libraries, 2015. — P. 166.
26. Pieper O, Lake B, Daoud-Aladine A, Reehuis M, Prokeš K, Klemke B, et al. Magnetic structure and interactions in the quasi-one-dimensional antiferromagnet CaV_2O_4 . Physical Review B. 2009, 79.
27. Chern G-W, Perkins N. Model for frustrated spin-orbital chains as applied to CaV_2O_4 . Physical Review B. 2009, 80.
28. Damay F, Martin C, Hardy V, Maignan A, André G, Knight K, et al. Zigzag ladders with staggered magnetic chirality in the $S=3/2$ compound $\beta\text{-CaCr}_2\text{O}_4$. Physical Review B. 2010, 81.
29. Chapon LC, Manuel P, Toledano P, Martin C. Helical magnetic state in the distorted triangular lattice of $\alpha\text{-CaCr}_2\text{O}_4$. Physical Review B. 2011, 83.
30. Kikuchi H, Chiba M, Kubo T. Possible gapless chiral phase in a frustrated $S = 1$ 1D antiferromagnet, CaV_2O_4 . Canadian Journal of Physics. 2001, 79.
31. Fukushima H, Kikuchi H, Chiba M, Fujii Y, Yamamoto Y, Hori H. NMR evidence of a gapless chiral phase in the $S = 1$ zigzag antiferromagnet CaV_2O_4 . Progress of Theoretical Physics Supplement. 2002, 145.
32. Doi Y, Nakamori W, Hinatsu Y. Crystal structures and magnetic properties of magnetically frustrated systems BaLn_2O_4 and $\text{Ba}_3\text{Ln}_4\text{O}_9$ ($\text{Ln} = \text{lanthanide}$). Journal of Physics: Condensed Matter. 2006, 18.

33. Karunadasa H, Huang Q, Ueland B, Lynn J, Schiffer P, Regan K, et al. Honeycombs of triangles and magnetic frustration in SrLn_2O_4 ($\text{Ln} = \text{Gd, Dy, Ho, Er, Tm, and Yb}$). *Physical Review B*. 2005, 71.
34. Lundberg M. Synthesis and magnetization of BaLn_2O_4 ($\text{Ln} = \text{lanthanide}$) / Lundberg M. — Florida: Florida State University Libraries, 2014. — P. 85.
35. Tsygankov V, Porotnikov N, Petrov K, Nosova E. Electric properties of BaLn_2O_4 ($\text{Ln} = \text{Y, Ce, In, and Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu}$) compounds. *Zhurnal Neorganicheskoi Khimii*. 1981, 26.
36. Kresse G. VASP the GUIDE / Kresse G, Marsman M., Furthmüller J. — Vienna: Universitat Wien. — 2012. — P. 188
37. The Materials Project. BaY_2O_4 [Электронный ресурс] — Электронные данные. — Режим доступа: <https://5896materialsproject.org/materials/mp-3952/>
38. The Materials Project. BaGd_2O_4 [Электронный ресурс] — Электронные данные. — Режим доступа: <https://materialsproject.org/materials/mp-17143/>
39. The Materials Project. BaLu_2O_4 [Электронный ресурс] — Электронные данные. — Режим доступа: <https://materialsproject.org/materials/mp-752442/>