

Для группы  $C_4$   $g_2$  и  $g_3$  зависят от  $x_1, x_2$ ,  $g_1 = y_1^4 - 2y_2^2 - y_2y_3 - 8y_3^2$  не зависит от  $x_1, x_2$ , значит,  $f_1(x_1, x_2) \in K[x_1, x_2]^{C_4}$ , а  $f_2(x_1, x_2) \notin K[x_1, x_2]^{C_4}$  и  $f_3(x_1, x_2) \notin K[x_1, x_2]^{C_4}$ .

Для группы  $V_4$   $g_1$  и  $g_3$  зависят от  $x_1, x_2$ ,  $g_2 = y_1^2y_2 + y_1y_2 - 2y_2^3 - 5y_2$  не зависит от  $x_1, x_2$ , значит,  $f_2(x_1, x_2) \in K[x_1, x_2]^{V_4}$ , а  $f_1(x_1, x_2) \notin K[x_1, x_2]^{V_4}$  и  $f_3(x_1, x_2) \notin K[x_1, x_2]^{V_4}$ .

#### Список литературы

1. Кокс, Д. Идеалы, многообразия и алгоритмы. Введение в вычислительные аспекты алгебраической геометрии и коммутативной алгебры / Д. Кокс, Дж. Литтл, Д. О'Ши; пер. с англ. – М.: Мир, 2000. – 687 с.

*Иванько Анастасия Николаевна*, студентка 5 курса факультета математики и информатики Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, Ivanko\_AN@mail.ru.

*Просвирнина Ирина Борисовна*, доцент кафедры алгебры, геометрии и методики преподавания математики факультета математики и информатики Гродненского государственного университета имени Янки Купалы, кандидат физико-математических наук, доцент.

УДК 621.3.084.2.017

В.М. КОЛЕШКО, А.В. ГУЛАЙ, В.В. ЛЫСКОВСКИЙ, В.А. ГУЛАЙ,  
Е.В. КРУПСКАЯ, Н.В. ЛЕВЧЕНКО

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ СЕНСОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ОКСИДОВ

*Выполнено моделирование атомно-структурных и электронных свойств редкоземельных оксидов как активных материалов сенсорных наносистем. Исследована электронная плотность, а также рассчитана зонная структура для оксидов самария и гольмия. Определена спиновая поляризация носителей заряда вблизи уровня Ферми, которая, например, для оксида самария составляет 48,72%.*

Развитие технологии сенсорных наносистем на основе использования сверхтонких диэлектрических пленок требует применения эффективных методов моделирования физических свойств диэлектриков. Одной из актуальных задач исследования диэлектриков как активных материалов сенсорики является компьютерное моделирование их электронных свойств и параметров элементарной ячейки. Компьютерное моделирование позволяет прогнозировать характеристики синтезируемых сложных соединений, определять динамику изменения их параметров при введении микродобавок, оптимизировать состав материала для получения приемлемых свойств сенсорных наноструктур.

В качестве активных материалов для квантовых сенсорных наносистем широко используются сверхтонкие пленки соединений (например, оксидов) редкоземельных элементов (РЗЭ). Применение оксидов РЗЭ обусловлено их высокими адсорбционными свойствами, в частности повышенной адсорбцией к кислороду и водороду, что обеспечивает получение оптимальных характеристик сенсорных наноструктур. На основе тонких пленок редкоземельных оксидов сформированы и исследованы многослойные наноструктуры типа металл-диэлектрик-металл и металл-диэлектрик-полупроводник для сенсорных наносистем, в том числе для сенсоров контроля многокомпонентных газовых сред.

В качестве среды моделирования использован программный пакет VASP/VAMP, в котором реализуется ab-initio подход для квантовомеханических расчетов в молекулярной динамике (MD) на основе псевдопотенциалов с наборами базисных элементов плоских волн. Указанный подход, осуществляемый в VASP/VAMP, базируется на конечно-температурном приближении локальной

плотности (со свободной энергией в качестве варьируемой величины), а также на точной оценке мгновенного электронного основного состояния в каждом MD-шаге.

Взаимодействие между ионами и электронами в используемом программном пакете описывается с помощью ультрамягких псевдопотенциалов Вандербилта (US-PP), или метода плоских присоединенных волн (PAW). Оба метода позволяют осуществлять значительное сокращение необходимого числа плоских волн в атомах переходных металлов. Кроме этого, в программе VASP/VAMP сравнительно просто рассчитываются силы и напряжения, которые возникают при релаксации атомов к их мгновенному основному состоянию.

Данная программа позволяет проследить за смещением отдельных частиц в изучаемой системе и вычислить коэффициенты их самодиффузии, рассчитать среднее время смены ближайших соседних частиц, а также определить ряд других характеристик. Особенно привлекательным в исследовании активных сенсорных материалов является моделирование зависимостей указанных характеристик от температуры и величины механических напряжений в образце.

Задача моделирования атомно-структурных и электронных свойств редкоземельных соединений в наиболее общем виде состоит в выборе оптимальных алгоритмов расчета в программе VASP/VAMP, подборе входных параметров моделируемой системы для достижения требуемой точности расчетов и выборе определенной методики адекватного определения свойств изучаемых сенсорных материалов. Главная цель методов, используемых в VASP, состоит в решении уравнения Шредингера для электронов в моделируемой структуре, а также в оценке полной энергии, сил и других параметров. В данной работе использован метод присоединенных плоских волн (PAW-метод), который позволяет корректно рассчитывать параметры кристаллической решетки, адекватно оценивать спиновую поляризацию и физические свойства материалов.

Идея применяемого алгоритма моделирования заключается в том, что расчет начинается с относительно малого числа атомов, а затем на основе полученных результатов с применением определенной методики производится трансляция до требуемых размеров структуры. Так, один из блоков алгоритма представляет собой модель структуры с малым числом атомов, в которой не учитывается температурная зависимость движения атомов, и расчет производится в объеме. В следующем блоке алгоритма полученные в результате расчета каждого отдельного слоя данные объединяются в одну систему. Далее выполняется удаление/добавление атомов для получения требуемого вида дефектов кристаллической решетки. На следующем этапе реализации алгоритма моделирования производится выбор процедуры по добавлению атомов в моделируемый массив.

Предварительно выполняется ряд тестов, в частности производится расчет оптимального количества точек, устанавливающих степень разбиения обратного пространства, а также определяется минимальная энергия моделируемой системы. От количества указанных точек зависит точность определения координат атомов кристаллической решетки: для диэлектриков достаточно десяти точек на одну элементарную ячейку. Для расчета зонной структуры определяется первая зона Бриллюэна кристаллической решетки. Первая зона Бриллюэна рассматривается в данном случае как элементарная ячейка обратной решетки, обладающая точечной симметрией этой решетки. Из этого, в частности, следует, что объем первой зоны Бриллюэна равен объему элементарной ячейки обратной решетки. Все зоны Бриллюэна являются репликами первой зоны: их получают, транслируя точки, принадлежащие первой зоне, на векторы обратной решетки.

Таблица 1 – Параметры кристаллической решетки редкоземельных оксидов

Оксид РЗЭ	Параметры решетки, Å			Запрещенная зона, эВ	Вид решетки	
	а, спр./мод.	б, спр./мод.	с, спр./мод.		Тип решетки	Простр. группа
Sm <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10,85/	10,85/	10,85/	5,1	ОЦК	Ia-3
	11,7180	11,7177	11,7111			
Ho <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10,61/	10,61/	10,61/	5,3	ОЦК	Ia-3
	10,6153	10,6153	10,6153			



В данной работе представлены результаты моделирования атомно-структурных и электронных свойств оксидов самария ( $\text{Sm}_2\text{O}_3$ ) и гольмия ( $\text{Ho}_2\text{O}_3$ ). Параметры кристаллической решетки этих соединений приведены в таблице 1. Отличие полученных при моделировании значений параметров зонной структуры от справочных величин является характерной особенностью большинства моделей. В данном случае указанное отличие связано с использованием определенных приближений при решении уравнения Шредингера.

Результаты расчета электронной плотности для оксида самария представлены на рис. 1, а его зонная структура приведена на рис. 2. Интегральное представление электронной плотности более наглядно отражает разницу в количестве электронов с разными спинами на подуровнях зоны проводимости и валентной зоны. Анализ зонной структуры позволяет высказать предположение, что для моделируемых материалов характерно наличие нескольких подуровней, которые замедляют релаксационные процессы. Вблизи зоны проводимости имеются ловушечные центры на расстоянии порядка 0,35 эВ (акцепторный уровень), а второй подуровень ловушечных центров относится к разряду глубоких уровней, что позволяет увеличить время жизни как электронов, так и дырок. В отличие от первого подуровня, на который могут переходить только электроны, на второй уровень равновероятен переход обоих носителей заряда.

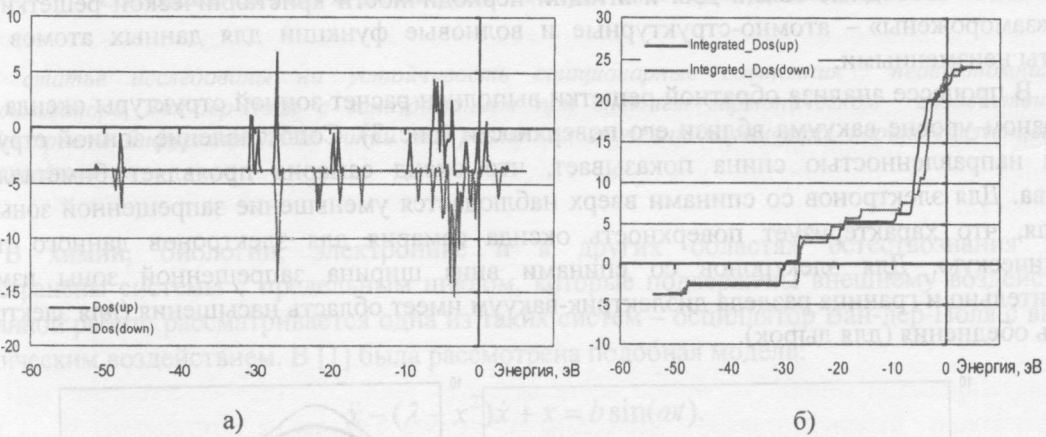


Рис. 1. Электронная плотность для оксида самария (а) и ее интегральное представление (б)

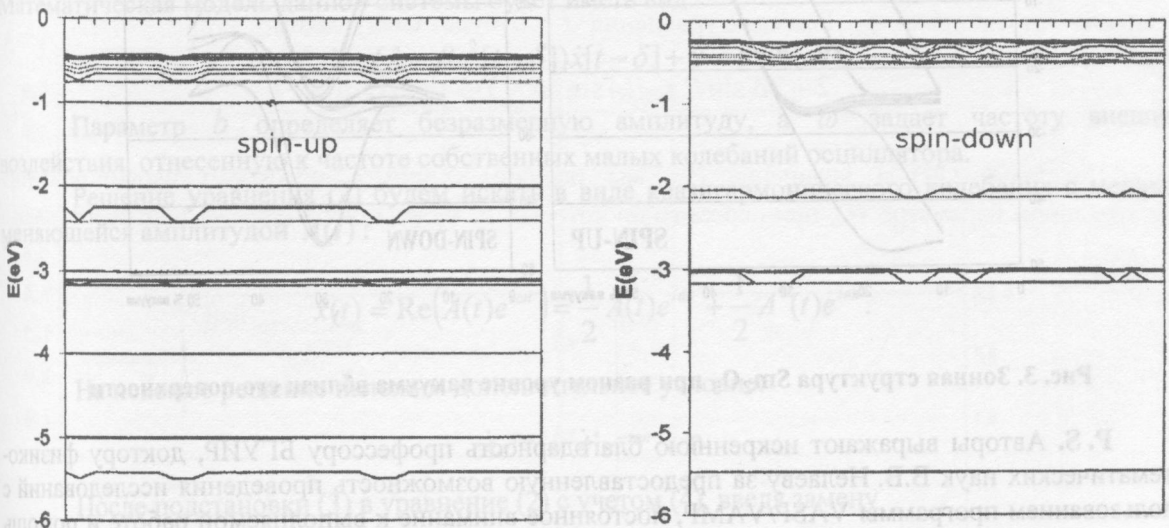


Рис. 2. Зонная структура оксида самария

Вид полученных волновых функций свидетельствует о низкой подвижности носителей заряда в исследуемых материалах. Наличие ловушечных уровней в области собственной проводимости материалов приводит к сильной зависимости удельной проводимости от возможных примесей и дефектов в кристалле. В результате моделирования установлено, что заряды в кристалле данных материалов имеют спиновую поляризацию. Запрещенная зона для

электронов со спином вверх имеет значение 4,5 эВ, а со спином вниз – 4,55 эВ. Наличие относительно малого числа носителей заряда вблизи уровня Ферми определяет особенности применения данных материалов в наносенсорике.

Особый интерес вызывает моделирование электронных свойств изучаемых материалов при имитации ограничения кристаллической структуры по одной из координатных осей. Данное представление приближает модель кристаллической решетки оксидов РЗЭ к реальной ситуации в технологии сенсорного контроля. Дело в том, что формирование сенсорных наноструктур предусматривает наличие свободной поверхности активного сенсорного материала для обеспечения взаимодействия ее с контролируемым газом.

Для изучения поверхностных свойств оксидов РЗЭ, в частности оксида самария, выполнена трансляция элементарной ячейки по осям X и Y для получения плоскости, а затем – по оси Z для получения необходимой структуры поверхности. После этого для имитации поверхностных свойств увеличиваем количество разорванных связей в кристалле по оси Z в пределах 10–50%. Поскольку для решения уравнения Шредингера одним из приближений программа VASP использует трансляцию электрофизических и атомно-структурных свойств, то во избежание взаимодействия атомов поверхности с нижним слоем добавлены атомы водорода, замыкающие свободные связи. Для имитации периодичности кристаллической решетки нижние слои «заморожены» – атомно-структурные и волновые функции для данных атомов условно приняты неизменными.

В процессе анализа обратной решетки выполнен расчет зонной структуры оксида самария при разном уровне вакуума вблизи его поверхности (рис. 3). Сопоставление зонной структуры с разной направленностью спина показывает, что оксид самария проявляет биметаллические свойства. Для электронов со спинами вверх наблюдается уменьшение запрещенной зоны вплоть до нуля, что характеризует поверхность оксида самария для электронов данного типа как металлическую. Для электронов со спинами вниз ширина запрещенной зоны изменяется незначительно и граница раздела диэлектрик-вакуум имеет область насыщения (для электронов) и область обеднения (для дырок).

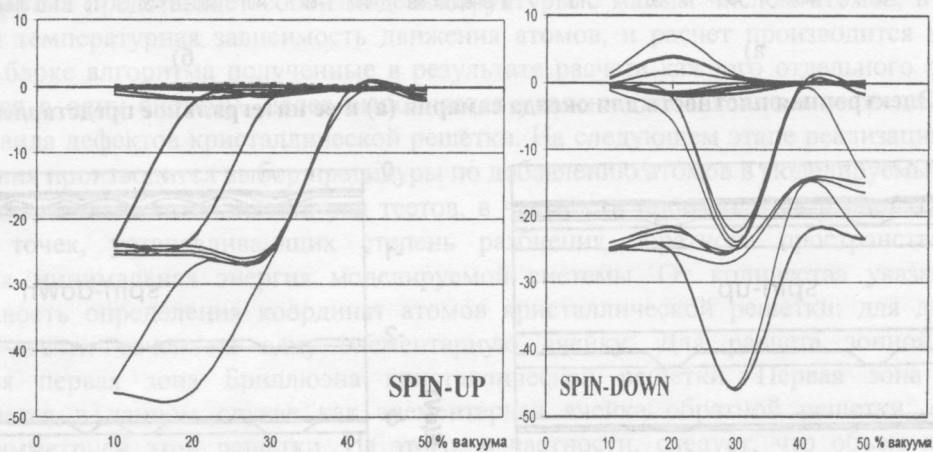


Рис. 3. Зонная структура  $\text{Sm}_2\text{O}_3$  при разном уровне вакуума вблизи его поверхности

Р. S. Авторы выражают искреннюю благодарность профессору БГУИР, доктору физико-математических наук В.В. Нелаеву за предоставленную возможность проведения исследований с использованием программы VASP/VAMP, постоянное внимание к выполняемой работе и помощь в интерпретации полученных результатов.

*Колешко Владимир Михайлович*, профессор, заведующий кафедрой «Интеллектуальные системы» Белорусского национального технического университета, доктор технических наук, лауреат Государственной премии, is@bntu.by.

*Гулай Анатолий Владимирович*, доцент кафедры «Интеллектуальные системы» Белорусского национального технического университета, кандидат технических наук, лауреат Государственной премии, altaj@tut.by.

Лысковский Вячеслав Викторович, аспирант кафедры микро- и наноэлектроники Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники, slawinner@gmail.com.

Гулай Вячеслав Анатольевич, ассистент кафедры «Интеллектуальные системы» Белорусского национального технического университета, altaj@tut.by.

Крупская Евгения Владимировна, студентка Белорусского национального технического университета.

Левченко Нина Владимировна, студентка Белорусского национального технического университета, arina.sweet@inbox.ru.

УДК 517.9+530.182

Р. И. КОРЖИК, С. П. ЖОГАЛЬ

## ИССЛЕДОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ СОСТОЯНИЙ В НЕАВТОНОМНОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ ВАН-ДЕР-ПОЛЯ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

*В статье исследованы на устойчивость стационарные состояния неавтономного осциллятора Ван-дер-Поля с запаздыванием при внешнем гармоническом воздействии. Построены бифуркационные линии для различных значений параметра, характеризующего запаздывание.*

В химии, биологии, электронике и в других областях естествознания широко распространены системы с предельным циклом, которые подвержены внешнему воздействию [1-3]. В данной работе рассматривается одна из таких систем – осциллятор Ван-дер-Поля с внешним периодическим воздействием. В [1] была рассмотрена подобная модель:

$$\ddot{x} - (\lambda - x^2)\dot{x} + x = b \sin(\omega t). \quad (1)$$

Рассмотрим более общий случай этой системы, введя в него запаздывание  $\delta$ . Математическая модель данной системы будет иметь вид:

$$\ddot{x} - (\lambda - \beta x^2[t - \delta])\dot{x}[t - \delta] + x = b \sin(\omega t). \quad (2)$$

Параметр  $b$  определяет безразмерную амплитуду, а  $\omega$  задает частоту внешнего воздействия, отнесенную к частоте собственных малых колебаний осциллятора.

Решение уравнения (2) будем искать в виде квазигармонического колебания с медленно меняющейся амплитудой  $A(t)$ :

$$x(t) = \operatorname{Re}(A(t)e^{i\omega t}) = \frac{1}{2} A(t)e^{i\omega t} + \frac{1}{2} A^*(t)e^{-i\omega t}. \quad (3)$$

На искомое решение наложим дополнительное условие:

$$\dot{A}e^{i\omega t} + \dot{A}^*e^{-i\omega t} = 0. \quad (4)$$

После подстановки (3) в уравнение (2) с учетом (4), введя замену

$$\tau = \frac{\lambda t}{2}, z = \frac{A}{2\sqrt{\lambda/\beta}}, \Delta = \frac{\omega^2 - 1}{\lambda\omega}, \varepsilon = \frac{b}{2\omega\lambda\sqrt{\lambda/\beta}}, \theta = \delta\omega, \quad (5)$$

получим уравнение с тремя параметрами:

$$\dot{z} + i\Delta e^{-i\theta} - z e^{-i\theta} + |z|^2 z e^{-i\theta} + \varepsilon = 0, \quad (6)$$