

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РЕЛАКСАЦИИ НЭМС СЛОЕВ СОСТАВА $\text{LiB}^{\text{III}}\text{Se}_2$ ($\text{B}^{\text{III}} = \text{Ga}, \text{Al}, \text{In}$) И СЕРИИ ИХ НЕПРЕРЫВНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ

Акберова Т.Б., Терентьева Ю.В., Безносюк С.А.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный университет»

Введение. Полупроводниковые соединения с кристаллической структурой халькопирита привлекают к себе особое внимание из-за целого набора уникальных физических и физико-химических свойств [1-5]. Тройные полупроводники LiGaSe_2 , LiAlSe_2 и LiInSe_2 представляют собой соединения типа $\text{LiB}^{\text{III}}\text{Se}_2$ ($\text{B}^{\text{III}} = \text{Ga}, \text{Al}, \text{In}$), которые имеют структуру халькопирита, тесно связанную со структурой цинковой обманки. В структуре халькопирита (CuFeS_2) в позицию атомов меди (Cu) встают атомы лития (Li), в позицию атомов железа – атомы B^{III} , а атомы серы заменяются атомами селена (Se). Компьютерное моделирование устойчивости квантовых нанoeлектромеханических систем (НЭМС) слоёвых многокомпонентных полупроводниковых соединений под воздействием мощного аттосекундного ($1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ c}$) импульса является актуальной задачей.

Релаксация электромеханических нанослоев и серии непрерывных твердых растворов. Процесс релаксации для каждой из структур проводился при температурах 77К и 298К. Данным методом был анализирован процесс релаксации нанослоев состава LiGaSe_2 , LiAlSe_2 , LiInSe_2 , LiInSe_2 (Ga), LiGaSe_2 (In), LiAlSe_2 (In) и серии непрерывных твердых растворов состава $\text{LiGa}_{1-x}\text{In}_x\text{Se}_2$, $\text{LiAl}_{1-x}\text{In}_x\text{Se}_2$, $\text{LiGa}_{1-x}\text{Al}_x\text{Se}_2$, $\text{LiIn}_{1-x}\text{Al}_x\text{Se}_2$, $\text{LiIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$. Были построены кинетические кривые изменения энергии системы в процессе релаксации неравновесных полупроводниковых НЭМС для всех структур. В качестве примера, на рисунке 1, приведены кинетические кривые структур состава LiGaSe_2 , LiAlSe_2 , $\text{LiGa}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{Se}_2$.

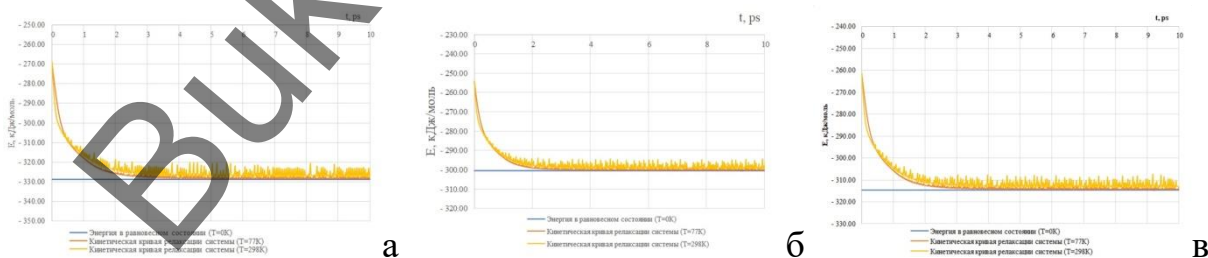


Рисунок 1 – Кинетические кривые релаксации систем а) LiGaSe_2 , б) LiAlSe_2 в) $\text{LiGa}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{Se}_2$

Все результаты исследования процесса релаксации методом квантовой нанокинетики и конечной устойчивости изучаемых нанослоев, полученных из кинетических кривых, представлены в таблице 1.

Проанализировав данные таблицы 1, был сделан общий вывод для всех изученных систем. Для нанослоев атто-фемтосекундная релаксация при температуре 0К приводит к вырожденному аттрактору с энергией, которая задается точным значением, но даже при таком состоянии в системе имеются малоамплитудные атомные смещения. Данные значения отображены во втором столбце таблицы 1. Далее можно заметить, что полученное в результате компьютерного эксперимента время выхода аттрактора начально активированного состояния на «плато» зависит от температуры. При этом квантовая эволюция неравновесных нанослоев достигает релаксации в разные промежутки времени (колонки 4 и 7 в таблице 1).

Таблица 1 – Показатели фемтосекундного процессинга нанослоев переменного состава $\text{LiGa}_{1-x}\text{Al}_x\text{Se}_2$, $\text{LiGa}(\text{Al})_{1-x}\text{In}_x\text{Se}_2$, $\text{LiIn}_{1-x}\text{Ga}(\text{Al})_x\text{Se}_2$ и нанослоев состава LiInSe_2 (Ga), LiAlSe_2 (In), LiGaSe_2 (In) при различных температурах

Состав нанослоя	Показатели фемтосекундного процессинга						
	E_0^1 , кДж/моль	E_{77}^1 , кДж/моль	t_{77}^2 , пс	A_{77}^3 , кДж/моль	E_{298}^1 , кДж/моль	t_{298}^2 , пс	A_{298}^3 , кДж/моль
LiGaSe_2	-328,75	-327,96	3,23	2,16	-325,65	3,02	8,48
$\text{LiGa}_{0,5}\text{Al}_{0,5}\text{Se}_2$	-314,62	-313,95	2,83	1,73	-311,94	2,07	6,68
LiAlSe_2	-300,50	-299,90	2,46	1,50	-298,12	1,95	6,10
$\text{LiGa}_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{Se}_2$	-357,70	-356,85	3,89	2,37	-354,37	3,50	9,23
LiInSe_2 (Ga)	-386,64	-385,72	4,09	2,53	-383,00	3,45	10,20
$\text{LiAl}_{0,5}\text{In}_{0,5}\text{Se}_2$	-343,57	-342,80	2,94	1,92	-340,60	2,34	7,26
LiInSe_2	-386,64	-385,48	11,1	3,10	-382,62	10,7	10,82
$\text{LiIn}_{0,5}\text{Al}_{0,5}\text{Se}_2$	-343,56	-342,70	6,19	2,99	-340,36	7,20	8,47
LiAlSe_2 (In)	-300,49	-299,82	5,03	2,05	-297,89	4,00	7,05
$\text{LiIn}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{Se}_2$	-357,69	-356,71	9,97	3,03	-354,00	8,36	10,44
LiGaSe_2 (In)	-328,75	-327,83	6,04	3,10	-325,31	5,73	8,91

¹ Энергия релаксированного нанослоя при 0К, 77К и 298К
² Время релаксации при 77К и 298К
³ Амплитуда флуктуации энергии при 77К и 298К

Также по результатам компьютерного моделирования методом квантовой кинетики при температурах 77К и 298К были построены радиальные функции распределения атомов нанослоев переменного состава $\text{LiGa}_{1-x}\text{Al}_x\text{Se}_2$, $\text{LiGa}(\text{Al})_{1-x}\text{In}_x\text{Se}_2$, $\text{LiIn}_{1-x}\text{Ga}(\text{Al})_x\text{Se}_2$. При температурах 77К и 298К в исследуемых структурах наблюдается четкий пик на первой координационной сфере, у второй координационной сферы наблюдается разрушение и смещение пиков.

Закключение. При криогенных ($T = 77\text{K}$) и нормальных ($T = 298\text{K}$) условиях наблюдается сильное разрушение второй координационной сферы с

ростом температуры. Также с повышением температуры релаксации от криогенных до нормальных условий средняя энергия наноэлектромеханических систем повышается на 2-3 кДж/моль, в зависимости от состава нанослоя, а квантовые флуктуации (амплитуды колебаний) с повышением температуры релаксации от криогенных до нормальных условий увеличиваются с 1,5 кДж/моль до 10,8 кДж/моль.

Литература

1. Kasama T. et al. Magnetic microstructure of iron sulfide crystals in magnetotactic bacteria from off-axis electron holography // *Phys. B Condens. Matter*, 2006. Vol. 384, № 1–2. – P. 249-252.
2. Фонаш С., Ротворф А., Казмерски Л. и др. Современные проблемы полупроводниковой фотоэнергетики / под ред. Т. Коутса, Дж. Микина. М.: Мир, 1988. – 263 с.
3. Rashkeev S.N., Limpijumnong S., Lambrecht W. Second-harmonic generation and birefringence of some ternary pnictide semiconductors // *Physical Review B*. 1999. Vol. 59. No.4. Pp. 2737–2748.
4. Kochura A., Fedorenko I., Laiho R. Growth and magnetic properties of Mn-doped ZnSiAs₂/Si heterostructures // *Physica Status Solidi*. 2009. Vol. 5. No.6. Pp. 1336-1338.
5. Neumann H. Lattice dynamics and related properties of A^IB^{III} and A^{II}B^{IV} compounds, I. Elastic constants // *Crystal Research and Technology*. 2004. Vol 11. No. 39. Pp. 939-958.

СИНТЕЗ И ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ ИЗОКСАЗОЛИЛМОЧЕВИН С ФРАГМЕНТАМИ АЛКАЛОИДОВ АНАБАЗИНА И ЦИТИЗИНА

Акишина Е.А.¹, Дикусар Е.А.¹, Мукушева Г.К.², Жасымбекова А.Р.²,
Кульчицкий В.А.³, Поткин В.И.¹

¹Институт физико-органической химии Национальной академии наук
Беларуси, Минск, Беларусь; che.semenovaea@mail.ru

²Карагандинский университет им. академика Е.А. Букетова, Караганда,
Казахстан

³Институт физиологии Национальной академии наук Беларуси, Минск,
Беларусь

Введение. В настоящее время синтетические трансформации природных соединений прочно утвердились в качестве основного пути создания новых биологически активных соединений [1].