

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ КЛАСТЕРНЫХ АППАРАТНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СПИН-ЗАВИСИМЫХ СВОЙСТВ НАНОСТРУКТУРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

О.А. Козлова, В.В. Нелаев, В.Р. Стемпицкий, С.В. Медведев

Материальные и финансовые трудности, связанные с экспериментальными и технологическими исследованиями наноструктурированных материалов, проблемы оптимизации технологии их изготовления, выбора их химического и фазового состава, кристаллической структуры могут быть решены посредством использования методов и средств моделирования из первых принципов (*ab initio*), реализуемых на основе высокопроизводительных кластерных вычислительных комплексов (суперкомпьютеров) в грид-среде.

Грид-технология, одно из современных направлений информационной технологии, предназначена для расширения возможностей суперкомпьютеров как в пределах одного региона (например, национальная грид-сеть Республики Беларусь), так и в более глобальных масштабах (BalticGrid, EuroGrid, WorldGrid) за счет объединения и распределения вычислительных ресурсов, расположенных в разных организациях, странах и континентах. Такая технология особенно эффективна при проведении расчетов физических свойств наноструктурированных материалов первопринципными (*ab initio*) методами в приближении методов молекулярной динамики и квантовой химии, требующих колоссальных вычислительных ресурсов.

Вкладом в Национальную грид-сеть является установка лицензионного программного пакета VASP на сервер многопроцессорной вычислительной системы СКИФ Объединенного института проблем информатики НАН Б [1]. Реализация Национальной грид-сети позволит Беларуси создать в рамках программы «СКИФ-ГРИД» совместную со странами СНГ федерацию суперкомпьютерных центров и интегрироваться в европейскую, а затем и во всемирную грид-инфраструктуру.

Вычисления проводились с использованием суперкомпьютерного вычислительного комплекса «СКИФ К-1000», разработанного в рамках программы «Триада» Союзного государства России и Белоруссии по развитию суперкомпьютеров. Среда моделирования — пакет VASP (Vienna Ab initio Simulation Package). Одна из задач, решаемых при разработке экспериментального образца грид-системы моделирования из первых принципов наноструктурированных материалов состоит в создании технических и вычислительных условий для эффективной адаптации (гридификации) программного пакета VASP [2].

Цель работы заключалась в исследовании электронных характеристик наноструктурированных материалов, их функциональных спин-зависимых свойств в условиях внешней (всестороннее или двухосное/одноосное сжатие или растяжение) и внутренней (обусловленной наличием дефектов кристаллической решетки и их комплексов) упругой деформации.

Изучено влияние немагнитных примесей (вакансий) на проявление магнетизма в графене [3]. Расчеты проводились для систем "графен + вакансионный кластер", состоящий от одного до шести вакансий. Установлено, что при таких условиях в графене проявляются эффект спиновой поляризации, в частности, его магнитные свойства усиливаются при введении в кристалл дефектов (моновакансий и их кластеров). Проведен систематический анализ с целью оценки состояния спиновой поляризации в зависимости от числа вакансий в кластере и от его конфигурации. Показано, что значение магнитного момента монотонно увеличивается в зависимости от числа вакансий ( $V$ ) в кластере. Пример исследуемой системы "графен + кластер из трех вакансий", представлен на рис. 1.

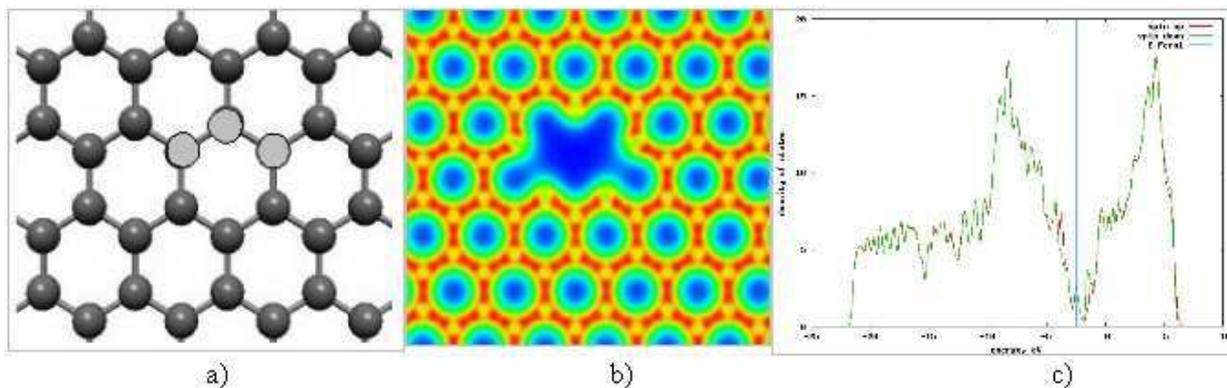


Рис. 1. Результаты моделирования системы "графен + 3V кластер" (а): распределение плотности электронов около кластера (b), распределение плотности электронных состояний системы (c)

Исследованы электронные свойства трехмерной (3D), двухмерной (2D) и одномерной (1D) структур дисульфида молибдена ( $\text{MoS}_2$ ). Соединения типа  $\text{MoS}_2$ , представляющие собой низкоразмерные кристаллические структуры с гетерометаллическими фрагментами, имеют большой потенциал для решения задач современной микроэлектроники и создания новых магнитных материалов, поскольку они обладают значительной анизотропией электрических и магнитных свойств, что позволяет достичь в них высоких значений магнитострикции и проявить магнитокалорический эффект. Экспериментальные и теоретические исследования показывают, что  $\text{MoS}_2$  является перспективным материалом для приборов нанoeлектроники и солнечной энергетики, в частности, для создания широкого класса датчиков, транзисторов, диодов и солнечных батарей.

В работе установлено, что электронные свойства 2D-структуры  $\text{MoS}_2$  подобны свойствам 3D-структуры. Однако показаны существенные различия в энергетических свойствах исследованных структур. С уменьшением размерности структуры ширина запрещенной зоны значительно увеличивается. Обнаруженные особенности подтверждают возможное наличие в  $\text{MoS}_2$ , как и в графене, исключительных электронных и магнитных свойств, которые определяют перспективы применения исследованной 2D-структуры в нанoeлектронике [4]. 1D-структура  $\text{MoS}_2$  значительно отличается от двух других повышенной подвижностью носителей заряда (рис. 2). Факт появления дополнительных подуровней в указанной структуре делает возможной ее использование при формировании ловушечных уровней в элементах приборов лазерной техники.

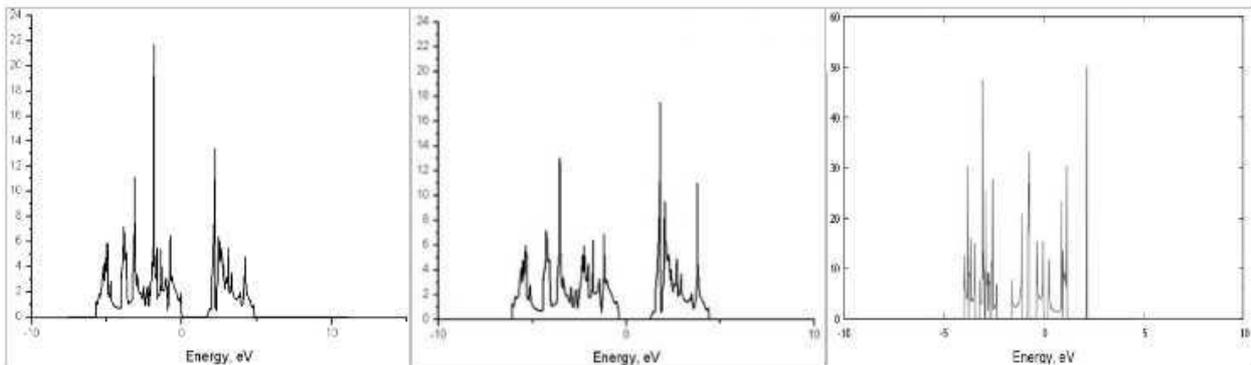


Рис. 2. Плотность электронных состояний для 3D (a), 2D (b), 1D (c) структур  $\text{MoS}_2$

Обнаруженный в  $\text{MoS}_2$  прямозонный перенос носителей заряда открывает возможности этого двумерного соединения в сенсорике, оптике и нанoeлектронике. Важно отметить возможность варьирования значения ширины запрещенной зоны посредством изменения размерности структуры, что может быть использовано при выборе материала и его пространственной конфигурации для структурных элементов приборов спинтроники, оптики, микро- и нанoeлектроники.

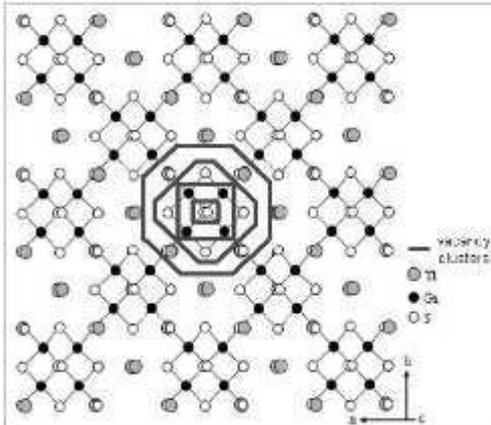


Рис. 3. Кристаллическая структура  $\text{TlGaS}_2$  с вакансионными кластерами

Исследованы электронные и магнитные свойства тройных соединений типа  $\text{TlMeX}_2$  ( $\text{Me} = \text{Ga}, \text{In}, \text{Tl}, \text{X} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$ ) (рис. 3). Установлено, что реструктуризация кристалла  $\text{TlGaS}_2$  посредством введения в него вакансий и их кластеров приводит к проявлению ферромагнитных свойств. При увеличении числа вакансий в кластере значение спиновой поляризации возрастает приблизительно до 22% [5]. Выявленный эффект может быть использован в приложениях сенсорики.

Исследования параллельной эффективности моделирования в среде программного комплекса VASP не проводились.

Таким образом, посредством использования многопроцессорной вычислительной системы «СКИФ К-1000» исследованы спин-зависимые параметры таких наноструктурных материалов, как графен, дисульфид молибдена и тройные соединения типа  $\text{TlMeX}_2$ . Уменьшение размерности в структуре  $\text{MoS}_2$  приводит к тому, что перенос носителей заряда становится прямозонным. Кроме того, выявленные дополнительные подуровни

в запрещенной зоне одномерной структуры также позволяют соединению  $\text{MoS}_2$  найти применение в областях оптики, сенсорики и нанoeлектроники. Установлено, что значение магнитного момента графена монотонно изменяется в зависимости от числа вакансий в кластере, что также справедливо по отношению к тройным соединениям. Вышеуказанный эффект усиливается при увеличении размеров вакансионного кластера, что позволяет использовать подобные структуры в областях спинтроники и сенсорики.

Исследования проводились при поддержке государственной программы научных исследований «Научные основы и инструментальные средства информационных и космических технологий» («Информатика и космос») в рамках задания 1.6.06 «Разработка научных основ моделирования физических свойств

наноструктурированных и функциональных материалов, создание экспериментального образца грид-сегмента системы моделирования микро- и наноэлектромеханических устройств».

ЛИТЕРАТУРА:

1. Суперкомпьютерный комплекс СКИФ К-1000 [Электронный ресурс]. – <http://skif.bas-net.by>
2. G. Kresse. “Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set” // Comput. Mat. Sci. – 1996 – Vol. 6 – P. 15-19.
3. V. Nelayev, A. Mironchik. “Magnetism of graphene with vacancy clusters” // Mater.Phys.Mech. – 2010 – Vol. 9 – P.26-34.
4. O. Kozlova, N. Levchenko. “Electronic properties of nanostructured MoS<sub>2</sub> and Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> compounds” // MEMSTECH’2012 – P. 111-114.
5. O. Kozlova, V. Lyskouski, V. Nelayev. “Electronic properties of ternary compounds with vacancy clusters: ab initio simulation” // MPM e-journal – 2011 –No 2, Vol. 13, 2012 – P. 124-129.