

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21. № 1. С. 59–67
Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS)). 2024; 1(21): 59–67

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.2; 536.77; 544.27

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.007

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ АРСЕНИДА-АНТИМОНИДА ГАЛЛИЯ

Юлия Владимировна Терентьева¹, Сергей Александрович Безносюк^{2†}

^{1,2} Алтайский государственный университет, пр. Ленина, 61, 656049, Барнаул, Россия

¹ zyv1985@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5328-1841>

² bsa1953@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4945-7197>

Аннотация. В работе представлены результаты компьютерного моделирования алмазоподобных полупроводниковых наночастиц, построенных на базе арсенида галлия и на базе антимонида галлия. В работе были исследованы модели наночастиц размером $3 \times 3 \times 3$ элементарные ячейки и размером $5 \times 5 \times 5$ элементарных ячеек с различным содержанием атомов сурьмы в подрешетке B^V . Методом нелокального орбитально-оболочечного функционала плотности были получены равновесные параметры связей пар атомов, входящих в состав кристаллической структуры исследуемых нанoeлектромеханических систем (НЭМС). Методами молекулярной механики была изучена зависимость энергии наночастиц антимонида – арсенида галлия от размера наночастицы и содержания сурьмы в ее составе. Было показано незначительное изменение межатомного расстояния в полупроводниковых системах с алмазоподобной структурой и в НЭМС состоянии. Показано, что при введении атомов сурьмы в систему арсенида галлия система стабилизируется, а при введении атомов мышьяка в систему антимонида галлия система дестабилизируется.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, НЭМС, арсенид галлия, антимонид галлия, алмазоподобные полупроводники, метод молекулярной механики.

Для цитирования: Терентьева Ю.В., Безносюк С.А. Компьютерное моделирование нанoeлектромеханических систем арсенида-антимонида галлия // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 1. С. 59–67. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.007.

Original article

COMPUTER SIMULATION OF NANOELECTROMECHANICAL SYSTEMS OF GALLIUM ARSENIDE-ANTIMONIDE

Yulia V. Terentyeva¹, Sergey A. Beznosyuk^{2†}

^{1,2} Altai State University, Lenin Pr., 61, Barnaul, 656049, Russia

¹ zyv1985@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5328-1841>

² bsa1953@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-4945-7197>

Abstract. The paper presents the results of computer modeling of diamond-like semiconductor nanoparticles based on gallium arsenide and on the basis of gallium antimonide. In this work, models of nanoparticles with dimensions of $3 \times 3 \times 3$ unit cells and sizes of $5 \times 5 \times 5$ unit cells with different contents of antimony atoms in the B^V sublattice were studied. Using the nonlocal orbital-shell density functional method, the equilibrium parameters of the bonds of pairs of atoms included in the crystal structure of the studied nanoelectromechanical systems (NEMS) were obtained. The dependence of the energy of gallium arsenide-antimonide nanoparticles on the size of the nanoparticle and the antimony content in its composition was studied using molecular mechanics methods. A slight change in the interatomic distance was shown in semiconductor systems with a diamond-like structure and in the NEMS state. It has been shown that when antimony atoms are introduced into the gallium arsenide system, the system is stabilized, and when arsenic atoms are introduced into the gallium antimonide system, the system is destabilized.

Keywords: computer simulation, NEMS, gallium arsenide, gallium antimonide, diamond-like semiconductors, molecular mechanics method.

For citation: Terentyeva, Yu.V. & Beznosyuk, S. A. (2024). Computer simulation of nanoelectromechanical systems of gallium arsenide-antimonide. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(1), 59–67. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.007.

Введение

Кристаллическое строение наночастиц арсенидов и антимонидов галлия является важной темой для современной науки и технологии. В настоящее время полупроводники $A^{III}B^V$ широко используются в электронике, оптоэлектронике и фотонике благодаря их уникальным оптическим и электрическим свойствам [1-3]. Кристаллическая структура этих материалов играет важную роль в определении их свойств и, таким образом, определения способов улучшения этих свойств для практического использования [4-5]. Результаты исследований имеют важное значение для понимания и оптимизации свойств наночастиц $A^{III}B^V$. Они могут помочь в разработке более эффективных полупроводниковых устройств и оптоэлектронных приборов, таких как фотодетекторы, светодиоды и лазеры. Кроме того, знание кристаллической структуры наночастиц полупроводников может быть применено в области нанoeлектроники и наномеханики для создания новых устройств и материалов с высокой производительностью и функциональностью [6-7].

Таким образом, исследование кристаллической структуры наночастиц арсенидов и антимонидов галлия является важной темой для современной науки и технологии, которая может существенно повлиять на развитие новых материалов и устройств [8]. Новые результаты и открытия в этой области могут иметь огромный потенциал для применения в широком спектре областей, от электроники и оптоэлектроники до наномеханики и биотехнологии [9, 10].

Актуальность работы связана с их применением в электронике и нанoeлектронике. Эти материалы обладают высокой электропроводностью, светочувствительностью и фоторезистивными свойствами, что делает их привлекательными для создания электронных компонентов, таких как приборы для оптической связи, светодиоды высокой яркости, инфракрасные диоды и многие другие.

В настоящее время особое внимание привлекают к себе физикохимические эффекты

воздействия аттосекундных импульсов фотонов синхротронных и лазерных электромагнитных излучений на материалы. При попадании в материал сверхкороткого импульса в исходном материале возникают топологические дефекты – нанoeлектромеханические системы (НЭМС) [10]. При формировании НЭМС из-за квантовых эффектов конфинмента электронов внутри дефекта наночастицы межатомные потенциалы изменяются по сравнению с аналогичными потенциалами связей как в молекулах, так и в кристаллах. Устойчивость НЭМС представляет собой важную задачу для изучения. В работе рассматривается компьютерное моделирование НЭМС в кристаллах сфелеритной структуры на основе арсенида и антимонида галлия.

Методика компьютерного моделирования

1. Компьютерное моделирование нанoeлектромеханических систем полупроводниковых частиц арсенида-антимонида галлия.

Для исследования устойчивости НЭМС арсенида-антимонида галлия необходимо построить компьютерные модели наночастиц. Методика построения моделей с алмазоподобной кристаллической решеткой была описана в работе [11, 12]. Для построения точной геометрической модели необходимы данные по параметрам кристаллических решеток арсенида и антимонида галлия ($a_{GaAs} = 0,565$ нм [13-17], $a_{GaSb} = 0,609$ нм [18]). В качестве исходной структуры была выбрана наночастица, состоящая из 1000 атомов размером $5 \times 5 \times 5$ элементарных ячеек и наночастица состоящая их 216 атомов размером $3 \times 3 \times 3$ элементарных ячеек. Таким образом, были построены структуры на основе мышьяка ($GaAs_{(1-x)}Sb_x$): GaAs, $GaAs_{0,75}Sb_{0,25}$, $GaAs_{0,5}Sb_{0,5}$, $GaAs_{0,25}Sb_{0,75}$, GaSb, а также на основе сурьмы ($GaSb_{(1-x)}As_x$): GaSb, $GaSb_{0,75}As_{0,25}$, $GaSb_{0,5}As_{0,5}$, $GaSb_{0,25}As_{0,75}$, GaAs.

На рис.1 представлена структура $3 \times 3 \times 3$ элементарной ячейки $GaAs_{0,5}Sb_{0,5}$. Наглядно была изображена структура в шаровом представлении, а также в виде связевого графа.

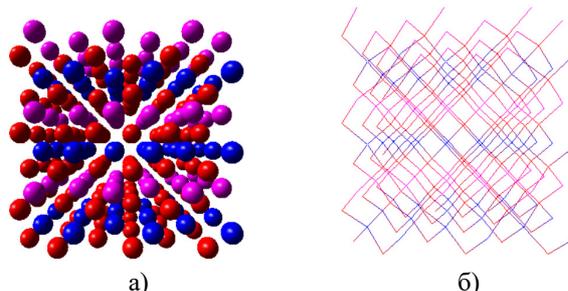


Рис.1. Компьютерная модель исследуемой структуры (а) в шаровом представлении и (б) со связевым графом

Fig.1. Computer model of the structure under study (a) in a spherical representation and (b) with a connection graph

Методом нелокального функционала плотности [19, 20] были получены параметры связи для пар разных атомов, входящих в состав исследуемых нанoeлектромеханических систем. Параметры связей представлены в таблице 1.

Таблица 1. Параметры связей пар атомов входящих в состав полупроводниковых структур

Table 1. Bond parameters of pairs of atoms included in semiconductor structures

Димер	Равновесная энергия связи U_0 , кДж/моль	Равновесная длина связи R_0 , нм	Частота нулевых колебаний ω_0 , см ⁻¹
Ga-As	-218	0,26	240
Ga-Sb	-221	0,27	212

2. Анализ устойчивости полупроводниковых наноструктур арсенида-антимонида галлия исследованных методом молекулярной механики.

Результаты компьютерного моделирования процессов релаксации наночастиц переменного

состава $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ и $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ размером элементарной ячейки $3 \times 3 \times 3$ и $5 \times 5 \times 5$ представлены в таблицах 2 и 3 и на рисунках 1 и 2 приведены модели оптимизированных структур GaAs и GaSb.

Таблица 2. Энергия наночастиц переменного состава $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ и $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ размером $3 \times 3 \times 3$ элементарные ячейки

Table 2. Energy of nanoparticles of variable composition $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ and $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ with dimensions $3 \times 3 \times 3$ unit cells

Состав $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$	Энергия наночастицы, кДж/моль	Состав $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$	Энергия наночастицы, кДж/моль
GaAs	-323,52	GaAs	-323,48
$\text{GaAs}_{0,75}\text{Sb}_{0,25}$	-325,51	$\text{GaSb}_{0,25}\text{As}_{0,75}$	-325,06
$\text{GaAs}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$	-326,96	$\text{GaSb}_{0,5}\text{As}_{0,5}$	-326,55
$\text{GaAs}_{0,25}\text{Sb}_{0,75}$	-328,53	$\text{GaSb}_{0,75}\text{As}_{0,25}$	-328,05
GaSb	-330,20	GaSb	-330,20

Таблица 3. Энергия наночастиц переменного состава $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ и $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ размером $5 \times 5 \times 5$ элементарные ячейки

Table 3. Energy of nanoparticles of variable composition $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ and $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ with dimensions $5 \times 5 \times 5$ unit cells

Состав $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$	Энергия наночастицы, кДж/моль	Состав $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$	Энергия наночастицы, кДж/моль
GaAs	-360,24	GaAs	-360,21
$\text{GaAs}_{0,75}\text{Sb}_{0,25}$	-362,36	$\text{GaSb}_{0,25}\text{As}_{0,75}$	-361,95
$\text{GaAs}_{0,5}\text{Sb}_{0,5}$	-364,04	$\text{GaSb}_{0,5}\text{As}_{0,5}$	-363,69
$\text{GaAs}_{0,25}\text{Sb}_{0,75}$	-365,74	$\text{GaSb}_{0,75}\text{As}_{0,25}$	-365,69
GaSb	-367,59	GaSb	-367,43

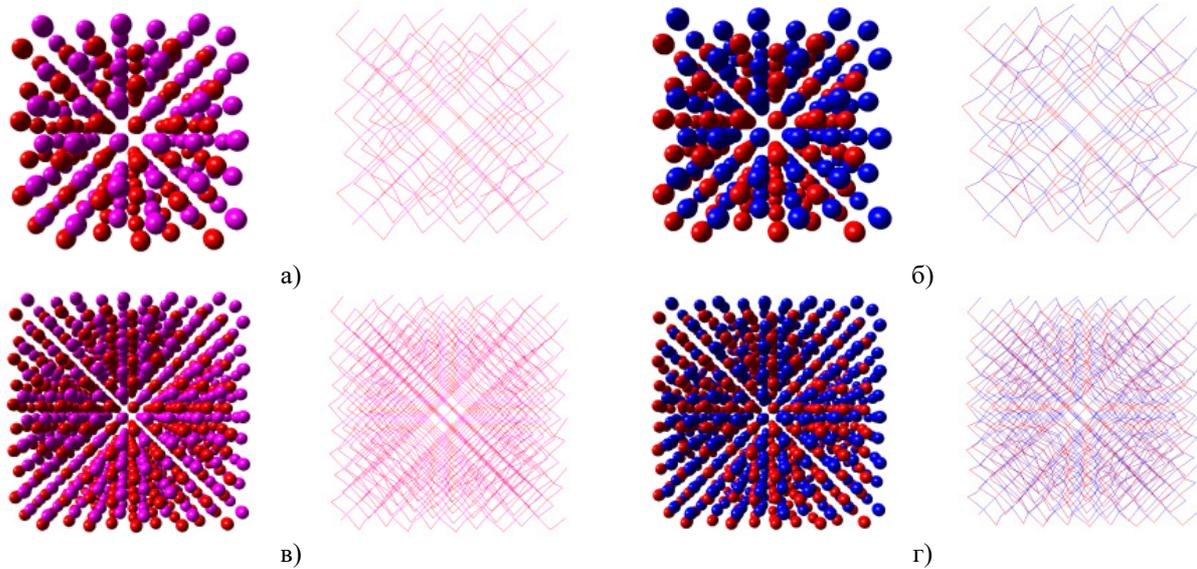


Рис.2. Модель наночастиц размером элементарной ячейки $3 \times 3 \times 3$ и ее связевый граф (а – GaAs, б – GaSb) и наночастиц размером элементарной ячейки $5 \times 5 \times 5$ и ее связевый граф (в – GaAs, г – GaSb)

Fig.2. Model of nanoparticles with unit cell size $3 \times 3 \times 3$ and its connection graph (a – GaAs, b – GaSb) and nanoparticles with unit cell size $5 \times 5 \times 5$ and its connection graph (c – GaAs, d – GaSb)

При моделировании структур были использованы две базовые структуры: антимонид галлия и арсенид галлия. Результаты, полученные в процессе релаксации при 0 К, отражены в таблицах 2 и 3. По данным таблицам видно, что соответствующие системы являются вырожденные по энергиям, поскольку различия в энергиях не превышает 1 кДж/моль (т.е. не превышают ошибку эксперимента).

При формировании НЭМС из-за эффектов конфинмента электронов внутри наночастицы межатомные потенциалы изменяются по сравнению с аналогичными потенциалами связей как в молекулах, так и в кристаллах со структурой сфалерита. В случае арсенидов и антимонидов галлия, потенциалы внутри НЭМС оказались выше по энергии, чем в молекулах и кристаллах. Это дестабилизирует НЭМС после облучения кристалла однофотонным жесткого ультрафиолета или мягкого рентгена.

На радиальных функциях распределения атомов в наночастицах арсенида и антимонида галлия первый пик соответствует первой координационной сфере на расстоянии $4,6a_0$ в GaAs (а) и на расстоянии $4,9a_0$ в GaSb (б). Второй и третий пик – вторая и третья координационная сфера, на расстоянии $7,5a_0$ и $8,9a_0$ в GaAs (а) и на расстоянии $8,1a_0$ и $9,5a_0$ в GaSb (б).

Интенсивность пиков в антимониде галлия выше, что может указывать на более высокую

плотность атомов в этом материале. Кроме того, все три координационные сферы сдвинуты в сторону увеличения длин связи, что может указывать на большие равновесные длины связи между атомами в антимониде галлия по сравнению с арсенидом галлия. Это может иметь важные последствия для свойств материала, таких как его электронные, механические и оптические свойства.

На рис.3а выделяется 1 четкий пик – 1 координационная сфера (на расстоянии $5,0a_0$) и 2 размытых пика – это 2 и 3 координационная сфера ($8,0a_0$ и $9,5a_0$).

На рис.3б происходит незначительное расщепление каждой координационной сферы на два пика, за счет введения атомов сурьмы в систему арсенида галлия.

На рис.3в видно расщепление первой координационной сферы на два пика (на расстояниях $4,9a_0$ и $5,1a_0$), что соответствует связям Ga–As и Ga–Sb. Атомы на второй и третьей координационной сфере перераспределяются от положения равновесия, а пики третьей и второй координационной сферы уширяются, оставляя суммарную долю атомов неизменной.

На рис.3г на первой координационной сфере уменьшается первый пик, соответствующий мышьяку, и увеличивается второй пик, соответствующий сурьме.

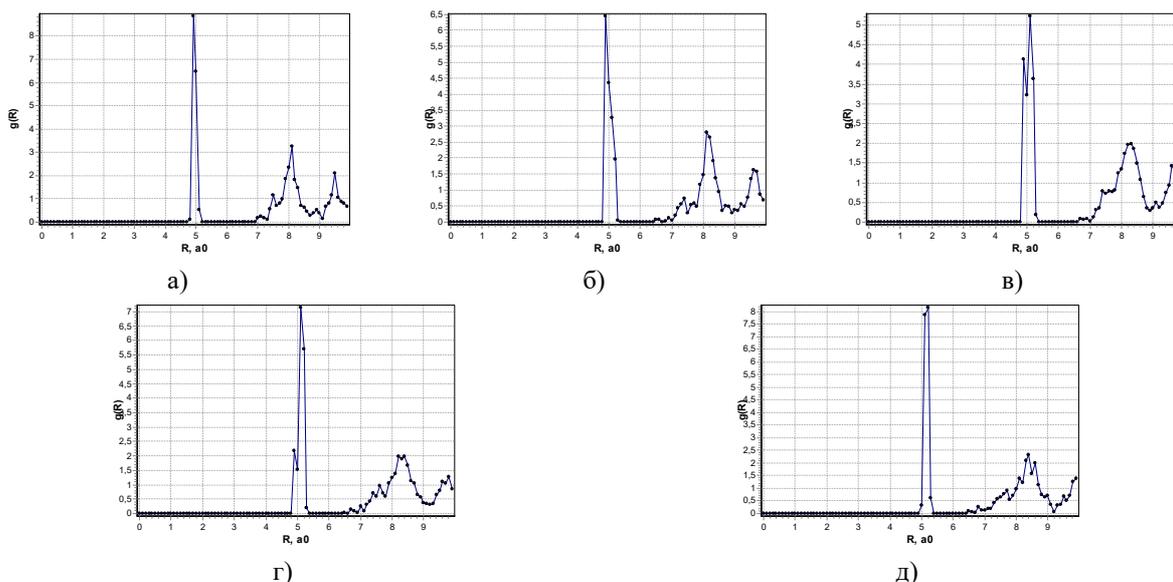


Рис.3. Радиальная функция распределения атомов в наночастице $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ после оптимизации размером $3 \times 3 \times 3$ э.я. (а – GaAs; б – $\text{GaAs}_{0.75}\text{Sb}_{0.25}$; в – $\text{GaAs}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$; г – $\text{GaAs}_{0.25}\text{Sb}_{0.75}$; д – GaSb)

Fig.3. Radial distribution function of atoms in a $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ nanoparticle after optimization with a size of $3 \times 3 \times 3$ u.c. (a – GaAs; b – $\text{GaAs}_{0.75}\text{Sb}_{0.25}$; c – $\text{GaAs}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$; d – $\text{GaAs}_{0.25}\text{Sb}_{0.75}$; e – GaSb)

На рис.3д при полной замене мышьяка на сурьму происходит смещение всех пиков: 1 координационная сфера (на расстоянии $5,1a_0$) и 2 размытых пика – это 2 и 3 координационная сфера ($8,3a_0$ и $10,0a_0$).

На рис.4а выделяется 1 четкий пик – 1 координационная сфера (на расстоянии $5,1a_0$) и ещё 2 пика – это 2 и 3 координационная сфера ($8,3a_0$ и $10,0a_0$).

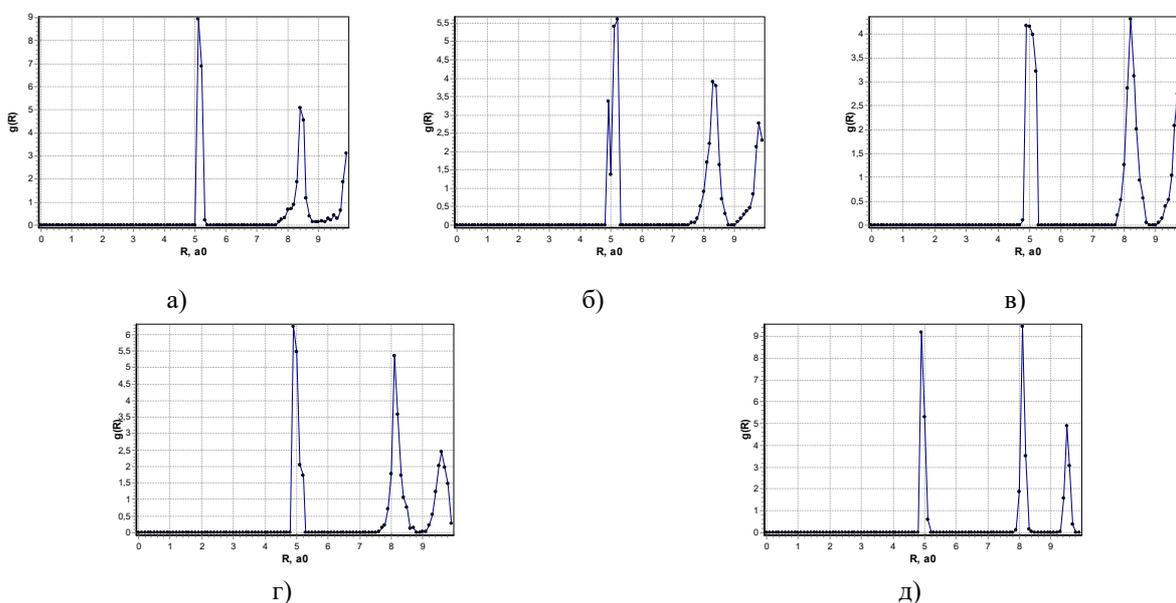


Рис.4. Радиальная функция распределения атомов в наночастице $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ после оптимизации размером $3 \times 3 \times 3$ э.я. (а – GaSb; б – $\text{GaSb}_{0.75}\text{As}_{0.25}$; в – $\text{GaSb}_{0.5}\text{As}_{0.5}$; г – $\text{GaSb}_{0.25}\text{As}_{0.75}$; д – GaAs)

Fig.4. Radial distribution function of atoms in a $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ nanoparticle after optimization with a size of $3 \times 3 \times 3$ u.c. (a – GaSb; b – $\text{GaSb}_{0.75}\text{As}_{0.25}$; c – $\text{GaSb}_{0.5}\text{As}_{0.5}$; d – $\text{GaSb}_{0.25}\text{As}_{0.75}$; e – GaAs)

На рис.4б происходит незначительное расщепление каждой координационной сферы на

два пика, за счет введения атомов мышьяка в систему арсенида галлия.

На рис.4в происходит снижение интенсивности пиков и расщепление первой координационной сферы на два пика (на расстояниях $4,9a_0$ и $5,1a_0$), что соответствует связям Ga–As и Ga–Sb. Атомы на второй и третьей координационной сфере перераспределяются от положения равновесия, а пики третьей и второй координационной сферы уширяются, оставляя суммарную долю атомов неизменной.

На рис.4г на первой координационной сфере уменьшается первый пик, соответствующий сурьме, и увеличивается второй пик, соответствующий мышьяку.

На рис.4д при полной замене мышьяка на сурьму происходит смещение всех пиков: 1 координационная сфера (на расстоянии $4,9a_0$) и 2 размытых пика – это 2 и 3 координационная сфера ($8,1a_0$ и $9,5a_0$).

Аналогично были исследованы структуры $\text{GaSb}_{(1-x)}\text{As}_x$ и $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ с размером элементарной ячейки $5 \times 5 \times 5$.

Сравним радиальные функции распределения атомов в наночастицах одинакового состава, но разных систем. Для этого возьмем соединение GaAs полученный из подрешетки арсенида галлия (рис.3а) и из подрешетки антимонида галлия (рис.4д). На обеих функциях виден один четкий пик – первая координационная сфера (на расстоянии $5,1a_0$), остальные два пика – вторая и третья координационная сфера отличаются друг от друга, за счёт того что данные системы имеют разные равновесные потенциалы.

Радиальная функция наночастицы арсенида галлия построенного из антимонида галлия (рис.4д) имеет три четких пика. Поскольку равновесный потенциал первой координационной сферы в молекулярной системе составляет $0,2641$ нм, а в нанoeлектромеханической системе $0,2704$ нм, т.е. разница между ними незначительная ($0,0063$ нм), следовательно, чтобы перейти из молекулярной системы в НЭМС,

структуре необходимо слегка перестроиться. Поэтому на радиальной функции распределения не происходит размытия второй и третьей координационной сферы в отличие от GaAs полученного из подрешетки арсенида галлия (рис.3а). Полученный равновесный потенциал для первой координационной сферы арсенида галлия в НЭМС составляет $0,2645$ нм и отличается от молекулярной системы ($0,2425$ нм) на $0,022$ нм, следовательно, для того, чтобы молекулярной системе из арсенида галлия перестроиться в НЭМС необходимо преодолеть большие расстояния, поэтому пики второй и третьей координационной сферы разрушаются в более значительной степени, что и видно на рис.3а.

Изменение содержания сурьмы (от 0 до 1) приводит к монотонному изменению энергии наночастицы $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$, зависящей от парной корреляционной функции распределения ядер. Линейный вклад в данную зависимость обусловлен незначительной трансформацией первой координационной сферы, в то время как отклонения от линейности объясняются более сложными трансформациями координационных сфер: второй и третьей. Тем не менее, основной вклад в энергию наночастицы вносит первая координационная сфера атомов, что приводит к квазилинейной зависимости от концентрации элементов по правилу Вегарда. Наибольшее отклонение от линейности наблюдается для содержания сурьмы $x = 0,25$ из-за разупорядочения расположения атомов второй и третьей координационной сферы. Факт наличия максимума на кривой зависимости устойчивости наночастицы $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ от содержания сурьмы в области $x = 0,25$ указывает на стабилизирующий вклад, который связан со сложными трансформациями распределения атомов. Общая зависимость энергии от содержания сурьмы показана на рис.5 синим цветом, а линейный вклад – красным.

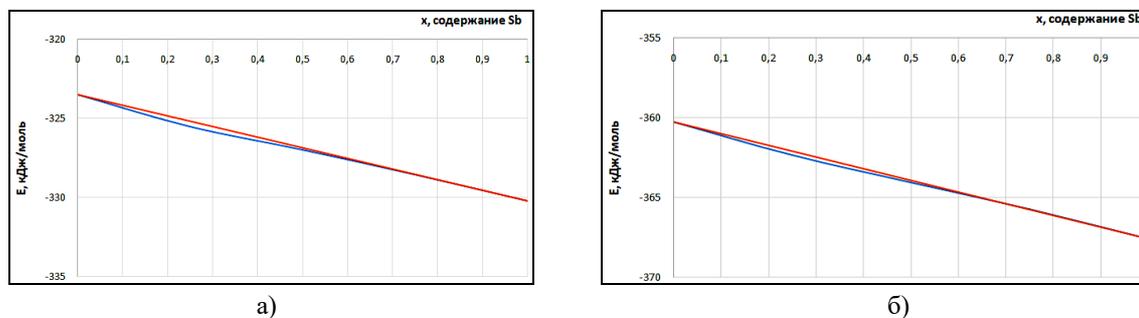


Рис.5. Концентрационная зависимость энергии полупроводниковой наночастицы переменного состава $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ размером $3 \times 3 \times 3$ элементарные ячейки (а) и размером $5 \times 5 \times 5$ элементарные ячейки (б)

Fig.5. Concentration dependence of the energy of a semiconductor nanoparticle of variable composition $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ with a size of $3 \times 3 \times 3$ unit cells (a) and a size of $5 \times 5 \times 5$ unit cells (b)

Выводы

В работе были построены компьютерные модели кубов нуклеарностью 1000 и 216 атомов НЭМС полупроводников арсенида-антимонида галлия двух типов наночастиц с параметрами исходных кристаллических решеток арсенида и антимонида галлия. Поглощение наночастицей аттосекундного электромагнитного импульса капсулировало её в состояние НЭМС. Методом нелокального функционала плотности с учетом эффектов конфинмента в капсуле НЭМС были получены измененные межатомные потенциалы и проведен методом молекулярной механики поиск устойчивых конфигураций в исследуемых наночастицах после облучения. В результате обнаружено, что устойчивые структуры НЭМС одинаковой нуклеарности и одинакового химического состава являются вырожденными по энергии. Показано, что при введении атомов сурьмы в систему арсенида галлия система стабилизируется, а при введении атомов мышьяка в систему антимонида галлия система незначительно, но дестабилизируется. Были получены значения энергии исследуемых систем и показано, что НЭМС GaAs менее стабильна, чем НЭМС GaSb. Образование непрерывных твердых растворов замещения на подрешетке V соединений состава $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ согласуется с правилом Вегарда. Отклонения от него обусловлены трансформациями второй и третьей координационных сфер распределения атомов при изменении концентрации x сурьмы. При этом, в системе $\text{GaAs}_{(1-x)}\text{Sb}_x$ наблюдается максимальный стабилизирующий вклад в энергию НЭМС при концентрации сурьмы $x = 0,25$.

Список литературы

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я. Теория строения молекул : учеб. пособие для ун-тов. М.: Высш. шк., 1979. С. 405.
2. Федоров П.И. Галлия арсенид. Химическая энциклопедия. М.: Советская энциклопедия, 2001. Т. 1. С. 481.
3. Мильвидский М.Г., Пелевин О.В., Сахаров Б.А. Физикохимические основы получения разлагающихся полупроводниковых соединений (на примере арсенида галлия). М.: Мир, 2007. С. 238.
4. Goetzberger A., Hebling C., Schock H.-W. Photovoltaic materials, history, status and outlook // Mater. Sci. Eng. R. 2003. V. 40, Is. 1. P. 1–46.

5. Simkiene I., Sabataityte J., Kinduryus A., Treideris M. Formation of porous $n\text{A}^3\text{B}^5$ compounds // Acta Physica Polonica A. 2008. 113(3). P. 1085–1090.

6. Bosi M., Pelosi C. Optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ superlattice solar cells // Res. Appl. 2007. V. 15. P. 51–68.

7. Notten P.H.L., J.E.A.M. van den Meeraker, Kelly J.J. Etching of III-V semiconductors: An electrochemical approach. Elsevier Advanced Technology: Oxford. 1991. 349 p.

8. Riza D., Caldiran Z. Schottky diode performance of an Au/Pd/GaAs device fabricated by deposition of monodisperse palladium nanoparticles over a p-type GaAs substrate // Materials Science in Semiconductor Processing. 2014. N 27. P. 163–169.

9. Escano M., Nguyen Q. Does GaAs bulk lattice really expand due to defects in the low concentration regime? // Solid State Communications. 2018. N 13. P. 316–317.

10. Zhukovsky M.S., Beznosyuk S.A., Potekaev A.I., Starostenkov M.D. Theoretical foundations of computer nanoengineering of biomimetic nanosystems. Tomsk: Publishing House Scientific and Technical Literature, 2011. 236 p.

11. Безносюк С.А., Терентьева Ю.В., Фомина Л.В. Устойчивость квантовых точек соединений переменного состава $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ // В сб. материалов Всероссийской научно-технической конференции «Химия и химическая технология». 2016. С. 18–22.

12. Безносюк С.А., Терентьева Ю.В., Придчина С.А. Компьютерное моделирование устойчивости нанoeлектромеханических чипов полупроводниковых соединений переменного состава $\text{ZnS}_{1-x}\text{Se}_x$ // Известия Алтайского государственного университета. 2016. № 1(89). С. 16–21.

13. Родерик Э.Х. Контакты металл-полупроводник: Пер. с англ. / Под ред. Г.В. Степанова. М.: Радио и связь, 1982. 210 с.

14. Gudovskikh A.S., Kleider J.P., Chouffot R. et. al. Study of GaInP heterojunction solar cell interface properties by admittance spectroscopy // Proceedings of the 23th European Photovoltaic Solar Energy Conf. Valencia, Spain, 2008. P. 358–363.

15. Fetzer C., Liu X., Chang J. Progress in large area organometallic vapor phase epitaxy for III–V multijunction photovoltaics // Journal of Crystal Growth. 2012. P. 180–184.

16. Вяткин А.П., Вилисов А.А. Развитие физико-технологических основ создания полу-

проводниковых приборов // Вестник Томского университета. 2005. № 8. С. 33–39.

17. Оксанич А.П., Притчин С.Э., Тербан В.А. Разработка устройств и систем выращивания слитков арсенида галлия для изделий микро-, нано электроники и фотовольтаики // Вестник нац. тех. ун-та Украины. 2013. № 8. С. 40–48.

18. Yahia I.S., Farag A.A.M., Jafer R. Electrical, photovoltaic and photosensitivity characteristics of p-ZnTe:N/CdTe:Mg/n-CdTe:I/GaAs for photodiode applications // Materials science in Semiconductor Processing, 2017. N 8. P. 33–40.

19. Beznoyuk S.A., Minaev B.F., Dajanov R.F., Muldakhmetov Z.M. Approximating quasiparticle density functional calculations of small active clusters: strong electron correlation effects // International Journal of Quantum Chemistry. 1990. N 6. P. 779–797.

20. Жуковский М.С. Физико-химические аспекты электронной теории и компьютерное моделирование мультиструктур наноматериалов: дис. ... канд. хим. наук. Барнаул, 2004. 180 с.

Информация об авторах

Ю. В. Терентьева – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.

С. А. Безносюк – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физической и неорганической химии Алтайского государственного университета.

References

1. Minkin, V. I. & Simkin, B. Ya. (1979). Theory of the Origin of Molecules: ucheb. posobie dlya un-tov. M.: Vyssh. shk. P. 405. (In Russ.).

2. Fedorov, P. I. (2001). Gallium Arsenide. Himicheskaya enciklopediya. M.: Sovetskaya enciklopediya. T. 1. P. 481. (In Russ.).

3. Mil'vidskij, M. G., Pelevin, O. V. & Saharov, B. A. (2007). Physicochemical basis for the production of decomposing semiconductor compounds (using the example of gallium arsenide). M.: Mir. P. 238. (In Russ.).

4. Goetzberger, A., Hebling, C. & Schock, H.-W. (2003). Photovoltaic materials, history, status and outlook. Mater. Sci. Eng. R., 40(1), 1–46.

5. Simkiene, I. Sabataityte, J., Kindurys, A. & Treideris, M. (2008). Formation of porous nA³B⁵

compounds. Acta Physica Polonica A., 113(3), 1085–1090.

6. Bosi, M. & Pelosi, C. (2007). Optical properties of Al_xGa_{1-x}As/GaAs superlattice solar cells. Res. Appl., 15, 51–68.

7. Notten, P. H. L., J. E. A. M. van den Meerakker & Kelly, J. J. (1991). Etching of III-V semiconductors: an electrochemical approach. Elsevier Advanced Technology: Oxford. P. 349.

8. Riza, D. & Caldiran, Z. (2014). Schottky diode performance of an Au/Pd/GaAs Device Fabricated by deposition of monodisperse palladium nanoparticles over a p-type GaAs substrate. Materials Science in Semiconductor Processing, (27), 163–169.

9. Escano, M. & Nguyen, Q. (2018). Does GaAs bulk lattice really expand due to defects in the low concentration regime? Solid State Communications, (13), 316–317.

10. Zhukovsky, M. S., Beznoyuk, S. A., Potekaev, A. I. & Starostenkov, M. D. (2011). Theoretical foundations of computer nanoengineering of biomimetic nanosystems. Tomsk: Publishing House Scientific and Technical Literature. P. 236.

11. Beznoyuk, S. A., Terent'eva, Yu. V. & Fomina, L. V. (2016). Stability of quantum dots of compounds of variable composition GaP_xAs_{1-x}. V sb. materialov Vserossiyskoy nauchno-tekhnicheskoy konferentsii «Khimiya i khimicheskaya tekhnologiya», 18–22. (In Russ.).

12. Beznoyuk, S. A., Terent'eva, Yu. V. & Pridchina, S. A. (2016). Computer Simulation of the Stability of Nanoelectromechanical Chips of Semiconductor Compounds of Variable Composition ZnS_{1-x}Se_x. Izvestiya Altayskogo gosudarstvennogo universiteta, 89(1), 16–21. (In Russ.).

13. Roderik, E. H. (1982). Metal-semiconductor contacts: Per. s angl. / Pod red. G.V. Stepanova. M.: Radio i svyaz'. P. 210. (In Russ.).

14. Gudovskikh, A. S., Kleider, J. P. & Chouffot, R. et. al. (2008). Study of GaInP heterojunction solar cell interface properties by admittance spectroscopy. Proceedings of the 23th European Photovoltaic Solar Energy Conf. Valencia, Spain, 358–363.

15. Fetzer, C., Liu, X. & Chang, J. (2012). Progress in large area organometallic vapor phase epitaxy for III–V multijunction photovoltaics. Journal of Crystal Growth, 180–184.

16. Vyatkin, A. P. & Vilisov, A. A. (2005). Development of physical and technological foundations for the creation of semiconductor devices.

Bulletin of Tomsk University, (8), 33–39. (In Russ.).

17. Oksanich, A. P., Pritchkin, S. E. & Terban V. A. (2013). Development of devices and systems for growing gallium arsenide ingots for micro-, nanoelectronics and photovoltaics products. *Bulletin of the National Technical University of Ukraine*, (8), 40–48. (In Russ.).

18. Yahia, I. S., Farag, A. A. M. & Jafer, R. (2017). Electrical, photovoltaic and photosensitivity characteristics of p-ZnTe:N/CdTe:Mg/n-CdTe:I/GaAs for photodiode applications. *Materials science in Semiconductor Processing*, (8), 33–40.

19. Beznosjuk, S. A., Minaev, B. F., Dajanov, R. F. & Muldakhmetov, Z. M. (1990). Approximating quasiparticle density functional calculations of small active clusters: strong electron correlation

effects. *International Journal of Quantum Chemistry*, (6), 779–797.

20. Zhukovsky, M. S. (2004). Physicochemical aspects of electronic theory and computer modeling of multistructures of nanomaterials: dis. ... kand. him.nauk. Barnaul. P. 180. (In Russ.).

Information about the authors

Yu. V. Terentyeva – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University.

S. A. Beznosyuk – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the Department of Physical and Inorganic Chemistry, Altai State University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 14.11.2023; одобрена после рецензирования 17.01.2024; принята к публикации 01.02.2024.

The article was received by the editorial board on 14 Nov. 23; approved after reviewing 17 Jan. 24; accepted for publication 01 Feb. 24.