**Оценка параметров наноэлектронных элементов на основе расчётов методом линейных комбинаций атомных орбиталей**

***Шрамков Е.А.1,2***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*1Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана
энергомашиностроение факультет, Москва, Россия*

*2Научный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия.*

*E-mail: egor@shramkov.ru*

В классических приборах для хранения информации используются бинарные системы, способные находиться только в двух состояниях. В настоящее время ведутся работы по переходу к небинарным системам, и система на основе новых принципов [1] с целью увеличения объёмов памяти при сохранении физических размеров носителя, что является крайне актуальным вопросом наноэлектроники.

Одним из гипотетических решений данной задачи является использование C60F18. Данная молекула характеризуется высоким значением собственного электрического дипольного момента [2], который находясь на поверхности полупроводников теоретически способен вносить значимые изменения в распределение их электронной плотности. Для оценки описанного явления было проведено моделирование адсорбции молекул C60F18 на подложки монокристалла Ge (111) и монокристалла Ge (111) с оксидными слоями различной толщины.

В рамках данной работы численное решение уравнения Шредингера получалось путём представления атомных орбиталей в виде линейных функций. Основные уравнения, описывающие данный подход:

$Ψ\_{μ}=\sum\_{p}^{}c\_{pμ}∙χ\_{p}$ (1)

$\sum\_{q}^{}\left(<χ\_{p}|f|χ\_{q}>-ε\_{μ}∙<χ\_{p}|χ\_{q}>\right)∙c\_{pμ}=0$ (2)

где $Ψ\_{μ}$ – волновая функция молекулярной орбитали $μ$,

$χ\_{p}$ – вектор волновой функции атомной орбитали *p*,

$ε\_{μ}$ и $c\_{pμ}$ – энергии молекулярной орбитали,

f – эффективный одноэлектронный оператор Гамильтона.

Решение системы уравнений (1-2) осуществлялось при помощи кода, написанного на языке *Python* с применением библиотек *ASE* и *GPAW*, с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» [3].

Результатом проведения данной работы стало получение макроскопических параметров, характеризующих кластеры фторида фуллерена и германия в различных конфигурациях, а также решение о возможности применения их для задач наноэлектроники.

Рис. 1. Примеры рассчитываемых структур (монокристалл германия и адсорбированный фторид фуллерена; оксид германия и адсорбированный фторид фуллерена)

**Литература**

1. Demasius K. U. and others Energy-efficient memcapacitor devices for neuromorphic computing //Nature Electronics. – 2021. – Т. 4. – №. 10. – С. 748-756.

2. Goryachevskiy A. V. and others Modeling of the Electrical Properties of Self-Assembled Island-Type Films of Polar C60F18 Molecules on Chemically Inactive Surfaces //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. — 2022. — № 5. — С. 51-66.

3. Электронный ресурс: <http://ckp>.nrcki.ru/