

ISSN (Print) 2616-6836
ISSN (Online) 2663-1296

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

ХАБАРШЫСЫ

BULLETIN

of L.N. Gumilyov Eurasian
National University

ВЕСТНИК

Евразийского национального
университета имени Л.Н. Гумилева

ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

PHYSICS. ASTRONOMY Series

Серия **ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ**

№3(132)/2020

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Нұр-Сұлтан, 2020

Nur-Sultan, 2020

Нур-Султан, 2020

Бас редакторы:
ф.-м.ғ.д., профессор, Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ
А.Т. Ақылбеков (Қазақстан)

Бас редактордың орынбасары

Гиниятова Ш.Г. ф.-м.ғ.к., доцент
Л.Н. Гумилев атындағы ЕҰУ (Қазақстан)

Редакция алқасы

Арынгазин А.Қ.
Алдонгаров А.А.
Балапанов М.Х.
Бахтизин Р.З.
Даулетбекова А.Қ.
Ержанов Қ.Қ.
Жұмаділов Қ.Ш.
Здоровец М.
Қадыржанов Қ.Қ.
Кайнарбай А.Ж.
Козловский А.Л.
Кутербеков Қ.А.
Луцкий А.Ч.
Попов А.И.
Морзабаев А.К.
Мырзақұлов Р.Қ.
Нұрахметов Т.Н.
Сауытбеков С.С.
Салиходжа Ж.М.
Скуратов В.А.
Тлеуенов С.К.
Усеинов А.Б.
Хоши М.
Шункеев Қ.Ш.

ф.-м.ғ. докторы, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Башқұрт мемлекеттік университеті (Ресей)
ф.-м.ғ.д., проф., Башқұрт мемлекеттік университеті (Ресей)
ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.к., PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Тарту университеті (Эстония)
ф.-м.ғ.д., проф., Латвия университеті (Латвия)
ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ(Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.к., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
ф.-м.ғ.д., проф., Біріккен ядролық зерттеулер институты (Ресей)
ф.-м.ғ.д., проф., Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
PhD, Л.Н. Гумилев ат. ЕҰУ (Қазақстан)
PhD, проф., Коши университеті (Жапония)
ф.-м.ғ.д., проф., Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе мемлекеттік университеті (Қазақстан)

Редакцияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Сәтбаев к-сі, 2, 402 б., Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті.
Тел.: +7(7172) 709-500 (ішкі 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Журнал менеджері: Г. Мендыбаева

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы.
ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы

Меншіктенуші: "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" Коммерциялық емес акционерлік қоғам

Мерзімділігі: жылына 4 рет. Басуға 28.09.2020 ж. қол қойылды. Жазылу индексі: 76093

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігінде 27.03.2018ж.

№16999-ж тіркеу куәлігімен тіркелген.

Ашық қолданудағы электрондық нұсқа: <http://bulphysast.enu.kz/>

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан қ., Қажымұқан к-сі, 12/1, 102 б., Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті. Тел.: +7(7172)709-500 (ішкі 31-428)

Editor-in-Chief

Doctor of Phys.-Math. Sciences, Professor, ENU
A.T. Akilbekov (Kazakhstan)

Deputy Editor-in-Chief

Giniyatova Sh.G., Candidate of Phys.-Math. Sciences,
Assoc. Prof., ENU (Kazakhstan)

Editorial Board

Aryngazin A.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Aldongarov A.A.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Balapanov M.Kh.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., BashSU (Russia)
Bakhtizin R.Z.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., BashSU (Russia)
Dauletbekova A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sci., PhD, ENU (Kazakhstan)
Hoshi M.	PhD, Prof., Kyushu University (Japan)
Kadyrzhanov K.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Kainarbay A.Zh.	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Kozlovskiy A.L.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Kuterbekov K.A.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Lushchik A.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., University of Tartu (Estonia)
Morzabayev A.K.	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Myrzakulov R.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Nurakhmetov T.N.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Popov A.I.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., University of Latvia (Latvia)
Sautbekov S.S.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., KazNU (Kazakhstan)
Salikhodzha Z. M	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Skuratov V.A.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., Joint Institute for Nuclear Research (Russia)
Tleukenov S.K.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., ENU (Kazakhstan)
Useinov A.B.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Yerzhanov K.K.	Candidate of Phys.-Math. Sci., PhD, ENU (Kazakhstan)
Zdorovets M.	Candidate of Phys.-Math. Sci., ENU (Kazakhstan)
Zhumadilov K.Sh.	PhD, ENU (Kazakhstan)
Shunkeyev K.Sh.	Doctor of Phys.-Math. Sci., Prof., Zhubanov University (Kazakhstan)

Editorial address: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2, Satpayev str., of. 402,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008
Tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Managing Editor: G. Mendybayeva

Bulletin of L.N. Gumilyov Eurasian National University.
PHYSICS. ASTRONOMY Series

Owner: Non-profit joint-stock company "L.N. Gumilyov Eurasian National University"

Periodicity: 4 times a year. Signed in print 28.09.2020. Subscription index: 76093

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan.

Registration certificate №16999-ж from 27.03.2018.

Available at: <http://bulphysast.enu.kz/>

Address of printing house: L.N. Gumilyov Eurasian National University, 12/1 Kazhimukan str.,
Nur-Sultan, Kazakhstan 010008;

tel.: +7(7172) 709-500 (ext. 31-428)

Главный редактор:
доктор ф.-м.н., профессор
А.Т. Акилбеков, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)

Зам. главного редактора

Ш.Г. Гиниятова к.ф.-м.н., доцент
ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)

Редакционная коллегия

Арынгазин А.К.	д.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Алдонгаров А.А.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Балапанов М.Х.	д.ф.-м.н., проф., БашГУ (Россия)
Бахтизин Р.З.	д.ф.-м.н., проф., БашГУ (Россия)
Даулетбекова А.К.	д.ф.-м.н., PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Ержанов К.К.	к.ф.-м.н., PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Жумадилов К.Ш.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Здоровец М.	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Кадыржанов К.К.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Кайнарбай А.Ж.	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Козловский А.Л.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Кутербеков К.А.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Лущик А.Ч.	д.ф.-м.н., проф., Тартуский университет (Эстония)
Морзабаев А.К.	д.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Мырзакулов Р.К.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Нурахметов Т.Н.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Попов А.И.	д.ф.-м.н., проф., Латвийский университет (Латвия)
Сауытбеков С.С.	д.ф.-м.н., проф., КазНУ им. аль-Фараби (Казахстан)
Салиходжа Ж.М.	к.ф.-м.н., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Скуратов В.А.	д.ф.-м.н., проф., Объединенный институт ядерных исследований (Россия)
Тлеукинов С.К.	д.ф.-м.н., проф., ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Усеинов А.Б.	PhD, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева (Казахстан)
Хоши М.	PhD, проф., Коши университет (Япония)
Шункеев К.Ш.	д.ф.-м.н., проф., АРГУ имени К. Жубанова (Казахстан)

Адрес редакции: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, каб. 402, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева.
Тел.: (7172) 709-500 (вн. 31-428)
E-mail: vest_phys@enu.kz

Менеджер журнала: Г. Мендыбаева

Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева.

Серия ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ

Собственник Некоммерческое акционерное общество "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева"

Периодичность: 4 раза в год. Подписано в печать 28.09.2020 г. Подписной индекс: 76093

Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16999-ж от 27.03.2018г.

Электронная версия в открытом доступе: <http://bulphysast.enu.kz/>

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Кажимукана, 12/1, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева. тел.: +7(7172)709-500 (вн. 31-428)

**Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ
ХАБАРШЫСЫ. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ сериясы**

№3(132)/2020

МАЗМҰНЫ

<i>Жасыбаева М.Б., Есмаханова К.Р.</i> Дарбу түрлендіруі және Фокас-Ленэллс теңдеуінің нақты бір солитонды шешімі	8
<i>Горлачев И., Глуценко Н., Иванов И., Киреев А., Курахмедов А., Платов А., Самбаев У., Здоровец М.</i> Нысаналы атомдарды ауыр иондармен қоздыруға арналған РІХЕ әдісінің шектері	14
<i>Ерғалиев Д.С., Әбдірашев Ө.К., Жумабаева А.С.</i> Робототехникалық құрылғылар кешенін ақпараттық-метрологиялық қамтамасыз ету	25
<i>Қаптағай Г., Сандибаева Н., Байқадамова Л., Утебаева А.</i> Сутегін өндірудегі кобальт шпинелінің энергетикалық сипаттамаларын жақсартудағы азоттың рөлі	30
<i>Әбуова А.Ү., Инербаев Т.М., Әбуова Ф.Ү., Сазанбай А., Нураканов А.</i> Төмен өлшемді допирленген термоэлектрикте зарядтау динамикасы	36
<i>Ногай А.А., Стефанович С.Ю., Салиходжа Ж.М., Ногай А.С.</i> Қатты ерітінділеріндегі иондық өткізгіштік және фазалық ауысулар $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Ногай А.С., Ускенбаев Д.Е.</i> Платинасыз катализаторлары бар Nafion мембраналарында поляризациялық және өткізгіш қасиеттері	51
<i>Бимуханов А.Н., Алдонгаров А.А.</i> $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ бейтарап гексакоординация кешенінің дұрыс геометриялық параметрлерін болжау үшін функционалдық үйлесімділік пен тығыздықтың функционалды теориясының негіз жиынтықтарын сынау	59
<i>Базарбек А.Б., Сағатов Н.Е., Инербаев Т.М., Акилбеков А.Т.</i> Жоғары қысымда никель фосфидтерінің тұрақтылығын алғашқы принципті есептеу	67
<i>Карипбаев Ж.Т., Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Алпысова Г.К., Куженова А., Усеинов А.Б., Абдрахметова А.А., Байжуманов М.Ж.</i> Радиация өрісінде синтезделген YAG:Ce негізіндегі люминофорлардың импульстік фотолюминесценциясы	74

**BULLETIN OF L.N. GUMILYOV EURASIAN NATIONAL UNIVERSITY. PHYSICS.
ASTRONOMY SERIES**

№3(132)/2020

CONTENTS

<i>Zhassymbayeva M.B., Yesmakhanova K.R.</i> Darboux transformation and exact one-soliton solution of the Fokas-Lenells equation	8
<i>Gorlachev I., Gluchshenko N., Ivanov I., Kireev A., Kurakhmedov A., Platov A., Sambayev Ye., Zdorovets M.V.</i> The limits of the PIXE method for excitation of target atoms by heavy ions	14
<i>Yergaliyev D.S., Abdirashev O.K., Zhumabaeva A.S.</i> Information and metrological support for the complex of robotic devices	25
<i>Kaptagay G., Sandibaeva N., Baikadamova L., Utebaeva A.</i> Role of nitrogen for enhancement energetically characteristics in producing hydrogen	30
<i>Abuova A.U., Inerbaev T.M., Abuova F.U., Sazanbay A., Nurakanov A.</i> Charging dynamics in a low-dimensional doped thermoelectric	36
<i>Nogai A.A., Stefanovich S.Yu., Salikhodja J.M., Nogai A.S.</i> Ionic conductivity and phase transitions in solid solutions $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Nogai A.S., Uskenbayev D.E.</i> Polarizing and conductive properties in Nafion membranes with platinum-free catalysts	51
<i>Bimukhanov A.N., Aldongarov A.A.</i> Testing of combinations of Density Functional Theory functionals and basis sets for predicting correct geometrical parameters of neutral hexacoordinated $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$ complex	59
<i>Bazarbek A.B., Sagatov N.E., Inerbaev T.M., Akilbekov A.T.</i> First principle calculations of the stability of nickel phosphides at high pressures	67
<i>Karipbaev Zh., Musahanov D., Lisitsyn V., Alpyssova G., Kukenova A., Usseinov A., Abdrahmetova A., Baizhumanov M.</i> Pulsed photoluminescence of YAG: Ce phosphors synthesized in the radiation field	74

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Жасыбаева М.Б., Есмаханова К.Р.</i> Преобразование Дарбу и точное односолитонное решение уравнения Фокаса-Ленэлла	8
<i>Горлачев И., Глущенко Н., Иванов И., Киреев А., Курахмедов А., Платов А., Самбаев Е., Здоровец М.</i> Пределы определения РИХЕ метода при возбуждении атомов мишени тяжелыми ионами	14
<i>Ергалиев Д.С., Абдирашев О.К., Жумабаева А.С.</i> Информационно-метрологическое обеспечение комплекса робототехнических устройств	25
<i>Каптагай Г., Сандибаева Н., Байкадамова Л., Утебаева А.</i> Роль азота в совершенствовании энергетических характеристик шпинели кобальта для производства водорода	30
<i>Абуова А.У., Инербаев Т.М., Абуова Ф.У., Сазанбай А., Нураканов А.</i> Зарядовая динамика в низкоразмерном допированном термоэлектрике	36
<i>Ногай А.А., Стефанович С.Ю., Салиходжа Ж.М., Ногай А.С.</i> Ионная проводимость и фазовые переходы в твердых растворах $\text{Na}_3\text{Sc}_{2(1-x)}\text{Yb}_{2x}(\text{PO}_4)_3$	44
<i>Ногай А.С., Ускенбаев Д.Е.</i> Поляризационные и проводящие свойства в мембранах типа NaFop с безплатиновыми катализаторами	51
<i>Бимуханов А.Н., Алдонгаров А.А.</i> Тестирование комбинаций функционалов и базисных наборов теории функционала плотности для предсказания правильных геометрических параметров нейтрального гексакоординационного комплекса $\text{Si}(\text{bzimpy})_2$	59
<i>Базарбек А.Б., Сагатов Н.Е., Инербаев Т.М., Акилбеков А.Т.</i> Первопринципные расчеты стабильности фосфидов никеля при высоких давлениях	67
<i>Карипбаев Ж.Т., Мусаханов Д.А., Лисицын В.М., Алпысова Г.К., Куженова А., Усеинов А.Б., Абдрахметова А.А., Байжуманов М.Ж.</i> Импульсная фотолуминесценция синтезированных в поле радиации люминофоров на основе YAG:Ce	74

МРНТИ: 535.37

А.У. Абуова, Т.М. Инербаев, Ф.У. Абуова, А. Сазанбай, А. Нураканов

Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
(E-mail: Fatika_82@mail.ru)

Зарядовая динамика в низкоразмерном допированном термоэлектрике

Аннотация: материалы, которые преобразуют тепло в электричество, необходимы для решения проблем глобального потепления и других климатических проблем. Термоэлектрические нанопроволоки являются новыми метаматериалами для таких применений. Неадиабатические расчеты связи имеют решающее значение для понимания термически активированного переноса заряда в термоэлектрических материалах. В данной работе расчеты неадиабатической электронной динамики используются для оценки скоростей релаксации электронов в нанопроводах теллурида свинца. Расчеты выполнены на основе теории функционала плотности основного состояния. Переходы между состояниями моделируются в терминах уравнения движения Редфилда, параметризованного на лету неадиабатическими связями вдоль термализованной траектории молекулярной динамики. Начальное и возбужденное состояния аппроксимируются переходом электрона с занятой на незанятую орбиту Кона-Шэма. При каждом переходе рассчитывалось изменение значений энергии и ожидаемого положения относительно времени. Тенденции скорости релаксации электронов и дырок были проанализированы путем исследования их зависимости от начальной энергии возбуждения и температуры. В данной работе предоставлены вычислительные доказательства в поддержку исходной гипотезы о том, что скорости релаксации электронов соответствуют закону запрещенной зоны.

Ключевые слова: термоэлектрические материалы, эффект Зеебека, уравнение Кона-Шэма, зарядовая динамика, полупроводники.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6836-2020-132-3-36-43>

Поступила: 17.08.2020/ Допущена к опубликованию: 21.09.2020

Введение. Применение термоэлектрических материалов к полупроводникам может преобразовать их избыточное отработанное тепло в электричество, повышая тем самым их эффективность. Термоэлектрические материалы - это материалы, в которых для создания тока используется градиент температуры. Явление, при котором электрический потенциал (напряжение) создается разностью температур, называется эффектом Зеебека. Этот эффект измеряется показателем добротности материала, определяемым как $zT = (\sigma S_2 T) / \kappa$, где S – коэффициент Зеебека, κ – теплопроводность, σ – электропроводность, и T – температура [1]. Для достижения наиболее эффективного преобразования тепловой энергии в электрическую энергию, необходимо максимизировать этот параметр. Часто такие улучшения достигаются путем легирования (добавления примесей) различных материалов [2]. Если свободные заряды положительные (материал p-типа), положительный заряд будет накапливаться на холодном конце, что будет иметь положительный потенциал. Точно так же отрицательные свободные заряды (материал n-типа) будут создавать отрицательный потенциал на холодном конце.

Благодаря выраженным электронным свойствам и запасенному потенциалу, многие ученые считают, что теллурид свинца (PbTe) является идеальным материалом для преобразования тепловой энергии в электрическую. Heremans и соавт. (2008) достигли показателя добротности в 1.5 при 773K для PbTe, легированным таллием [3]. Снайдер и соавт. (2011) получили показатель добротности 1,4 при 750 K для PbTe, легированным натрием [4], и добротность 1,8 при 850 K с сплавом $PbTe_{1-x}Se_x$, легированным натрием [5]. Кроме того, другая группа исследователей создала показатель добротности 2.2 с материалом [6, 7].

Основой вычислительной и теоретической химии является зависящее от времени молекулярное уравнение Шредингера. Поскольку масса ионов намного больше, чем электронов, молекулярное уравнение Шредингера решается путем разделения уравнения на электронную и ионную части. Эти уравнения затем решаются с помощью одного из установленных методов. Примеры включают метод Хартри-Фока, методы конфигурационного взаимодействия, связанных кластеров или теорию функционала плотности (ТФП) для расчета электронных свойств. Хотя ТФП является достаточно точным для свойств основного состояния, можно обнаружить, что для анализа динамики возбужденного состояния требуются более совершенные и вычислительно более дорогие методы.

Это сложное моделирование помогает исследователям получать более точные прогнозы свойств состояний возбуждения. Электронные возбуждения могут быть двух типов в зависимости от способа их получения: оптические и тепловые. Фотоны вызывают оптические возбуждения, которые изменяют электронное состояние системы. Тепловые возбуждения – фононы, изменяют положение ионов вблизи положения равновесия. Термализованная молекулярная динамика моделирует движение атомов/ионов вместе с их изменением энергии во времени. Движение атомов определяется уравнением движения Ньютона, а потенциальная энергия и сила включаются с использованием силовых полей или пересчитываются на каждом шаге с помощью методов электронной структуры и с использованием теоремы Хеллмана-Фейнмана.

Важной задачей является оценка изменений электронных степеней свободы, вызванных взаимодействием с ядерными степенями свободы. Явный контроль как электронных, так и ядерных степеней свободы часто запрещен из-за высоких вычислительных затрат. Существует популярный способ решения этой проблемы с использованием так называемого подхода «открытой квантовой системы», когда основная интересующая система испытывает влияние окружающей среды в тепловом равновесии. Часто первичная система представлена электронными степенями свободы, а среда в тепловом равновесии представлена ядерной степенью свободы. Этот подход расширяет понятие оператора плотности от статической области к динамической области.

Оператор плотности характеризует квантовое состояние системы и является более общим понятием, чем волновая функция. Оператор плотности можно использовать для вычисления среднего значения любой наблюдаемой величины: $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho_{\text{tot}} A)$. Оператор плотности всей системы может быть преобразован в приведенный оператор плотности электронных степеней свободы при помощи усреднения по всем ядерным степеням свободы, которые, как предполагается, находятся в тепловом равновесии. Наиболее интересным и полезным является применение концепции оператора плотности к ситуациям, когда система находится в неравновесном состоянии и релаксируется временем. Существует несколько практических реализаций для описания такой динамики. При тепловом равновесии поглощенная энергия может потенциально вызывать возбуждения, которые лучше всего изучать и анализировать с помощью уравнения Редфилда [9]. Приближение Борна-Оппенгеймера имеет ограниченную применимость к важным процессам, таким как перенос заряда и релаксация в одномерных нанопроволоках теллурида свинца, что обусловлено потоком энергии между электронной и ядерной подсистемами [10]. Процесс электронной релаксации, основанный на перескоке поверхности между поверхностями потенциальной энергии, был успешно завершён несколькими группами. Различные методы, начиная от теории функционала плотности и заканчивая высокоточной неадиабатической молекулярной динамикой в возбужденном состоянии, использовались для моделирования этого процесса в других структурах. Применение метода неадиабатической молекулярной динамики для расчета связи электронов с решеткой в полупроводниках представляется весьма эффективным [11]. Недавно было доказано, что интеграция зависящей от времени ТФП и методов молекулярной динамики является перспективным подходом.

Согласно результатам Егоровой и др. [12], многоуровневая теория Редфилда является полезным подходом для электронной релаксации. Эта теория эффективна в пределах длительной динамики, слабых связей и множественных электронных состояний. Теория

дополнительно поддерживается разумным компромиссом между точностью и практической эффективностью. При выборе метода в данной работе учитывался баланс между следующими преимуществами, недостатками и особенностями теории Редфилда: (i) теория Редфилда - это конкретное применение уравнения движения матрицы плотности, и поэтому она предсказывает электронные свойства более точно в отличие от волновой функции, скачкообразного изменения поверхности или уравнения Паули; (ii) теория Редфилда легко используется в тандеме с ab-initio методами. Понятно, какие параметры должны быть вычислены и использованы с эффективным алгоритмом вычисления. (iii) теория Редфилда может быть не самой точной. Например, метод неравновесной функции Грина является более общим и потенциально более точным, но гораздо менее практичным [13]. Существует попытка объединить теорию Редфилда с взаимодействием электронов с решеткой, чтобы достичь релаксации электронов и дырок на лету. Оптимальные результаты ожидаются в следующих условиях: 1) ионы рассматриваются как точечные заряды; 2) колебания решетки мгновенно уравниваются с термостатом; 3) автокорреляционная функция связи резко падает, приводя к марковскому приближению; 4) колебательная реорганизация игнорируется, и предполагается, что поверхности потенциальной энергии возбужденного состояния имеют ту же форму, что и основное состояние.

Полученные результаты. В этом исследовании была исследована периодическая нанопроволока PbTe, легированная натрием и йодом (рис. 1).



Рисунок 1 – Прямоугольная нанопроволочка PbTe в горизонтальном положении, легированная йодом (фиолетовый) и натрием (синий). Натрий замещает атомы свинца из-за избытка электронов в их валентной зоне. И, наоборот, йод заменяет теллурид из-за избытка дырок в их зоне проводимости. В этом исследовании проверяется, улучшает ли данная допинговая конфигурация перенос заряда

Длина элементарной ячейки составляет 110 ангстрем и обладает кубической структурой с 288 атомами. Свинец и теллурид встречаются в соотношении 1:1 с двумя атомами йода и натрия. Свинец отдает свои два избыточных электрона теллуриду, чтобы он мог завершить свою валентную оболочку.

Необходимо иметь понимание балансировки заряда при легировании, легирование - это процесс введения примесей в полупроводник для изменения его свойств. Например, легирование натрием зарядовое состояние описывается следующим уравнением:

$$[\text{Na}^{(0)} \rightarrow \text{Na}^{(1+)} + 1e^-] - [\text{Pb}^{(0)} \rightarrow \text{Pb}^{(2+)} + 2e^-] = \text{Na}^{(0)} - \text{Pb}^{(0)} \rightarrow 1e^- - 2e^- = -1e^- \quad (1)$$

В уравнении (1) натрий имеет один дополнительный электрон в своей валентной зоне. Напротив, у свинца есть два дополнительных электрона. Когда натрий замещает свинец в процессе легирования, один электрон вытесняется из валентной зоны:

$$[\text{I}^{(0)} \rightarrow \text{I}^{(1-)} - 1e^-] - [\text{Te}^{(0)} \rightarrow \text{Te}^{(2-)} - 2e^-] = \text{I}^{(0)} - \text{Te}^{(0)} \rightarrow -1e^- - (-2e^-) = 1e^- \quad (2)$$

В уравнении (2) йод имеет незаполненную валентную оболочку (нехватает 1-го электрона), а у теллура в кристалле недостает 2-х электронов для полного заполнения валентной оболочки. При легировании, йод заменяет ион теллура и одна дырка удаляется из зоны проводимости.

На рисунке 2 показаны рассчитанные элементы тензоров Редфилда. Рисунок 2 показывает, что скорости переходов между орбиталями увеличиваются, если мы поместим систему на термостат с большей температурой. Одна из интерпретаций этого заключается в следующем. При более высоких температурах амплитуда флуктуаций увеличивается, и межорбитальные энергетические щели/подщели временно закрываются. Это может быть одним из основных механизмов повышения скорости перехода. Другой основной механизм заключается в том, что большая амплитуда движения ядра дает большее нарушение ортогональности. Стоит отметить, что колебания температуры, как показано на предыдущем рисунке, способствуют повышению скорости релаксации.

При более низких температурах скорости перехода вблизи запрещенной зоны близки к нулю. Также следует обратить внимание, что на рисунке 2 показана положительная корреляция между температурой и скоростью перехода, и это является естественным. По мере повышения температуры электроны будут иметь больше энергии, чтобы совершать переходы между орбиталями. Обратите внимание, что это также связано с изменением во времени. Кроме того, по мере увеличения температуры зазор между зонами проводимости и валентной зоной уменьшается. Другая интересная особенность заключается в том, что при более низких температурах большинство орбиталей вблизи высшей занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и наинизшей незанятой молекулярной орбитали (ННМО) имеют незначительные скорости перехода. Однако с повышением температуры скорости перехода более равномерно распределяются по орбиталям. Состояния в середине вносят вклад в переходы $\text{PbTe} \rightarrow \text{PbTe}$, состояния в верхнем правом углу - это переходы $\text{PbTe} \rightarrow \text{I}$, а состояния в верхнем левом углу - это переходы $\text{PbTe} \rightarrow \text{Na}$.

Кроме того, орбитали, наиболее удаленные от ВЗМО и ННМО, имеют очень высокие скорости перехода, как показано на рисунке 2. В начале временного шага запрещенная зона составляет около 1 эВ. Однако с течением времени и увеличением температуры запрещенная зона уменьшается, и скорости перехода для орбиталей, соседствующих с ВЗМО и ННМО, увеличиваются. Есть две причины: повышение температуры и неравновесная динамика. Второй совпадает с различиями в панелях а и е. При 1100 К (рис. 2(е)) скорости перехода между орбиталями несколько более совпадают, чем на рисунке 2(а). Однако при более поздних температурах эти скорости перехода возрастают.

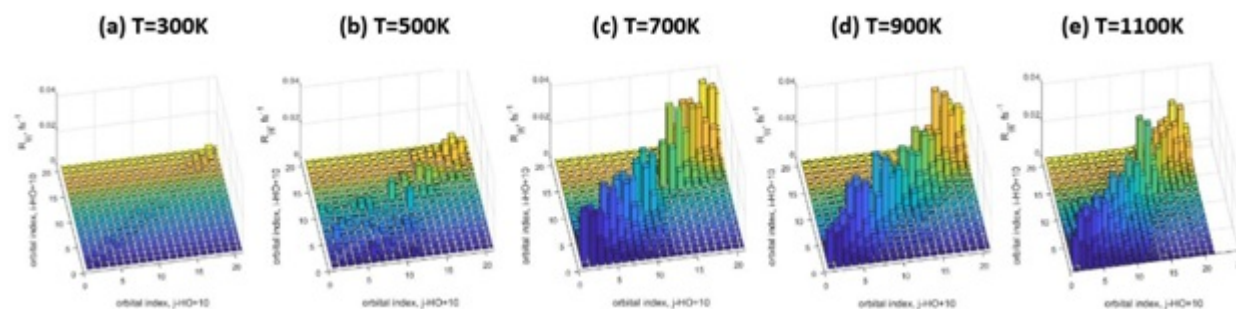


Рисунок 2 – Компоненты тензора Редфилда при различных температурах. На этом рисунке показаны скорости перехода орбиты $i\text{-HO} + 10$ и орбиты $j\text{-HO} + 10$. Скорости релаксации претерпевают значительное увеличение при 700 К

На рисунке 3 показаны скорости релаксации возбуждений для разных начальных условий модели и при разных температурах. Скорости релаксации изучаются в зависимости от энергии. Изучение рисунка 3(а) показывает, что закон запрещенной зоны ($K_-(e/h) = Ae^{(-\alpha\Delta E)}$), по-видимому, применим только к орбитальным переходам при более высоких температурах.

Также наблюдается незначительное изменение скорости релаксации с энергией при более низких температурах. Возможно, одна из причин этого связана с уменьшением запрещенной зоны по отношению к температуре. Когда запрещенная зона уменьшается при более высоких температурах, «энергия», которую электрон должен излучать, уменьшается. В результате электрону легче спуститься по орбите. Рисунок 3(b) показывает ограниченную корреляцию дыры с законом запрещенной зоны.

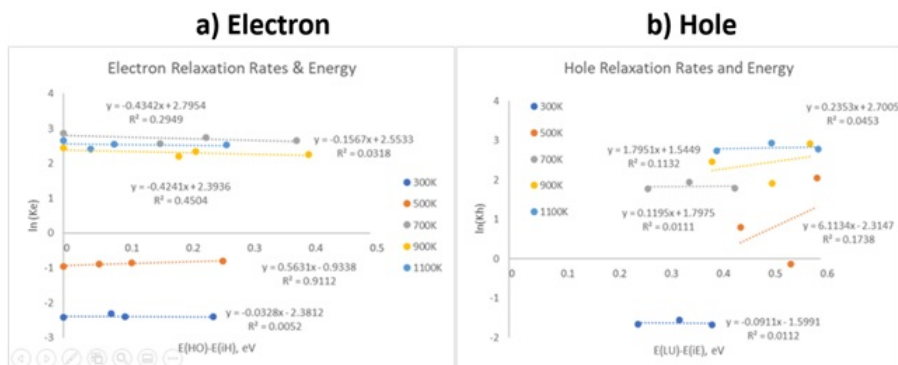


Рисунок 3 – Скорость релаксации как функция энергии. Скорости релаксации как для электрона, так и для дырки были адаптированы к закону запрещенной зоны, чтобы количественно определить их корреляцию. Результаты демонстрируют умеренную корреляцию для электрона и небольшую корреляцию для дырки.

Кроме того, рисунок 4 показывает, что зависимость моей скорости релаксации электронов и дырок от температуры не зависит от орбитальных переходов. Проще говоря, все орбитальные переходы возвращаются в свое исходное состояние с одинаковой скоростью, независимо от того, какая температура проверяется. Качественное рассмотрение этих рисунков показывает, что эти фигуры представляют собой распределения Больцмана, где скорости релаксации имеют экспоненциальное отношение к температуре. В частности, это доказывает, что $\alpha = 1/k_B T$, где T - температура, а k_B - постоянная Больцмана.

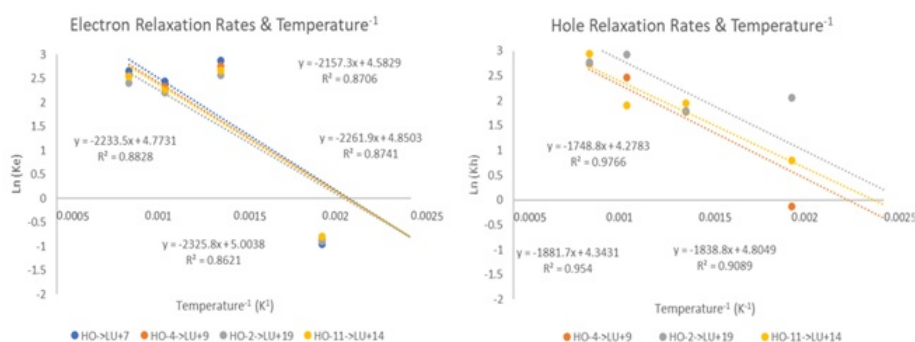


Рисунок 4 – Скорость релаксации как функция обратной температуры. Результаты показывают, что изменения скоростей релаксации по температуре очень похожи, независимо от начальных орбитальных условий

Результаты. В заключение этот первый принцип численного эксперимента дал несколько интересных результатов. Одним из таких результатов является то, что легирование улучшает способность нанопроволоки из теллурида свинца к переносу заряда. В частности, замена двух ионов свинца и двух ионов теллура на ионы натрия и йода, соответственно, обеспечивает перенос заряда. Если сравнивать результаты для легированной и нелегированной модели, то обнаруживается, что совмещенный теллурид свинца имеет более низкую скорость поглощения фотоэнергии в запрещенной зоне. Обратите внимание, что он все еще может быть эффективным выше разрыва. Это в свою очередь приводит к быстрым фононным индуцированным безызлучательным переходам между зоной проводимости и валентностью.

Наиболее важным аспектом этого исследования является то, насколько хорошо скорости релаксации энергии коррелируют с законом запрещенной зоны. Расчеты показывают две моды релаксации: последующую и параллельную. Только последующий путь релаксации следует закону энергетической щели. Параллельный путь часто нарушает закон зазора, поскольку появляется все больше и больше параллельных каналов и один увеличивает энергию возбуждения. Это атомистическое вычислительное исследование показывает, что в исследуемом материале/наноструктурах закон запрещенной зоны применим только к электронам при более высоких температурах и показывает меньшую корреляцию с тенденциями скоростей релаксации дырок. Кроме того, это исследование показало, что общая тенденция зависимости скоростей релаксации от температуры не зависит от начального выбора возбужденных орбиталей/начальных условий.

Однако в будущем может возникнуть интерес к анализу переходов, начиная с начальных условий, представленных суперпозицией орбиталей, чтобы определить, применяется ли закон энергетической щели в этой ситуации. Это важно, поскольку в реальных приложениях этот тип исходного фотовозбуждения. Другое направление будущих исследований заключается в сопоставлении результатов этого численного эксперимента с исследованиями других моделей, таких как легирование и нелегирование, соответствующих нанопроволокам, выращенным в направлении $\langle 111 \rangle$. Скорости релаксации, плотность состояний, спектры поглощения и другие наблюдаемые, возможно, потребуется вычислить, чтобы сравнить с этим исследованием. Обратите внимание, что предыдущие исследования показали, что нет дисперсии импульса для $\langle 111 \rangle$ нанопроволоки. Кроме того, легирование спиральной нанопроволоки, как ожидается, повлияет на ее запрещенную зону.

Результаты, наблюдения и тенденции, полученные в этом атомистическом вычислительном моделировании фотоиндуцированной динамики в определенных классах наноструктур, имеют потенциал применения в промышленности. Во-первых, эта работа представляет собой численное доказательство интуитивно ожидаемой тенденции, что допинг облегчает перенос заряда. Во-вторых, долгое время исследователям и производителям приходилось проводить длительные и кропотливые исследования для расчета степени релаксации материала. Однако если будущие исследования подтвердят выводы этой работы и докажут, что закон о запрещенной зоне имеет по меньшей мере ограниченную применимость, тогда время для исследований и разработок в промышленности может быть значительно сокращено. Кроме того, чем больше корреляция между скоростями релаксации и законом запрещенной зоны, тем эффективнее термоэлектрический материал.

Список литературы

- 1 Snyder G.J. Figure of merit ZT of a thermoelectric device defined from materials properties // *Energy and Environmental Science*. - 2017. - № 11. - P. 2280 - 2283.
- 2 Kong Ling Bing. Waste Energy Harvesting // *Lecture Notes in Energy*. Springer. - 2014. - № 24. - P. 263 - 403.
- 3 Heremans J. P., Jovovic V., Toberer E. S., Saramat A., Kurosaki K., Charoenphakdee A., Yamanaka S., Snyder G. J. Enhancement of Thermoelectric Efficiency in PbTe by Distortion of the Electronic Density of States // *Science*. - 2008. - T. 5888. - № 321. - P. 554 - 7.
- 4 Pei Yanzhong, Lalonde Aaron, Iwanaga Shiho, Snyder G. Jeffrey. High thermoelectric figure of merit in heavy hole dominated PbTe // *Energy & Environmental Science*. - 2011. - T. 4. - № 6. - P. 2085.
- 5 Pei Yanzhong, Shi Xiaoya, Lalonde Aaron, Wang Heng, Chen Lidong, Snyder G. Jeffrey. Convergence of electronic bands for high performance bulk thermoelectrics // *Nature*. - 2011. - T. 7345. - № 473. - P. 66 - 9.
- 6 Quick Darren. World's most efficient thermoelectric material developed // *Gizmag*. - 2012.
- 7 Biswas K., He J., Blum I.D., Wu C.I., Hogan T.P., Seidman D.N., Dvaid V.P., Kanatzidis M.G. High-performance bulk thermoelectrics with all-scale hierarchical architectures // *Nature*. - 2018. - T. 7416. - № 489. - P. 414 - 418.
- 8 Voudoukis N. Photovoltaic Technology and Innovative Solar Cells // *European Journal of Electrical Engineering and Computer Science*. - 2018. - T.2. - № 1.
- 9 Redfield A.G. On the theory of relaxation processes // *IBM Journal of Research and Development*. - 1957. - T. 1. - № 1. - P. 19 - 31.
- 10 Nitzan A. Chemical Dynamics in Condensed Phases: Relaxation, Transfer and Reactions in Condensed Molecular Systems. - OUP Oxford, 2006.

- 11 Webb S.P., Iordanov T. and Hammes-Schiffer S. Multiconfigurational nuclear-electronic orbital approach: Incorporation of nuclear quantum effects in electronic structure calculations // Journal of Chemical Physics. - 2002. - Т. 117. - № 9. - P. 4106 - 4118.
- 12 Hammes-Schiffer S. Avoiding the Born-Oppenheimer separation between electrons and nuclei: Explicitly correlated wavefunctions and multicomponent density functional theory // Abstracts of Papers of the American Chemical Society. - 2011. - № 242.
- 13 Tully J.C. Molecular-dynamics with electronic-transitions // Journal of Chemical Physics. - 1990. - Т. 93. - № 2. - P. 1061 - 1071.

А.Ү. Әбуова, Т.М. Инербаев, Ф.Ү. Әбуова, А. Сазанбай, А. Нураканов

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Төмен өлшемді допирленген термоэлектрикте зарядтау динамикасы

Аннотация. Жылу энергиясын электр энергиясына айналдыратын материалдар жаһандық жылыну мен климаттың басқа да мәселелерін шешу үшін қажет. Термоэлектрлік нановирлер – мұндай қосымшалар үшін жаңа метаматериалдар. Адиабатикалық емес байланыс есептеулері термоэлектрлік материалдардағы термиялық активтендірілген зарядтың берілуін түсіну үшін өте маңызды. Бұл жұмыста қорғасын теллуридтің нановирлеріндегі электрондардың релаксация жылдамдығын есептеуде электронды емес динамиканың есептеулері қолданылады. Есептеулер жердің тығыздығының функционалды теориясының негізінде жүргізілді. Мемлекеттік ауысулар молекулалық динамиканың термиялық жолымен адиабатикалық емес шектеулер арқылы шапшаңда параметрлендірілген Редфилд қозғалысының теңдеуі тұрғысынан модельденді. Бастапқы және қозған күйлер электронды басып алынғаннан бос тұрған Кон-Шам орбитасына жылжытуға жақындайды. Әр ауысу кезінде уақыт мәніне қатысты энергия мәндері мен күтілетін позицияның өзгерісі есептелді. Электрондар мен тесіктердің релаксация жылдамдығының тенденциялары олардың алғашқы қозу энергиясы мен температураға тәуелділігін зерттей отырып талданды. Бұл жұмыс электронды релаксация жылдамдығы диапазондағы бос орынмен жүреді деген гипотезаны растайтын есептеу дәлелдерімен қамтамасыз етеді.

Түйін сөздер: термоэлектрлік материалдар, Зеебек эффектісі, Кон-Шам, заряд динамикасы, жартылай өткізгіштер.

A.U. Abuova, T.M. Inerbaev, F.U. Abuova, A. Sazanbay, A. Nurakanov

L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

Charging dynamics in a low-dimensional doped thermoelectric

Abstract. Materials that convert heat into electricity are needed to tackle global warming and other climate concerns. Thermoelectric nanowires are new metamaterials for such applications. Non-adiabatic bond calculations are critical to understanding thermally activated charge transfer in thermoelectric materials. In this work, the calculations of nonadiabatic electron dynamics are used to estimate the electron relaxation rates in lead telluride nanowires. The calculations were performed on the basis of the ground state density functional theory. State transitions are modeled in terms of the Redfield equation of motion, parametrized on the fly by non-adiabatic constraints along the thermalized path of molecular dynamics. The initial and excited states are approximated by the advancement of an electron from an occupied to an unoccupied Kon-Sham orbit. With each transition, the change in energy values and expected position with respect to time was calculated. The trends in the relaxation rate of electrons and holes were analyzed by studying their dependence on the initial excitation energy and temperature. This work provides computational evidence to support the original hypothesis that electron relaxation rates follow a band gap.

Keywords: thermoelectric materials, Seebeck effect, Kon-Sham, charge dynamics, semiconductors.

References

- 1 Snyder G.J. Figure of merit ZT of a thermoelectric device defined from materials properties, Energy and Environmental Science, 10(11), 2280 - 2283 (2017).
- 2 Kong Ling Bing. Waste Energy Harvesting, Lecture Notes in Energy, Springer, 24, 263 - 403 (2014).
- 3 Heremans J.P., Jovovic V., Toberer E.S., Saramat A., Kurosaki K., Charoenphakdee A., Yamanaka S., Snyder G. J. Enhancement of Thermoelectric Efficiency in PbTe by Distortion of the Electronic Density of States, Science, 321(5888), 554 - 7 (2008).
- 4 Pei Yanzhong, Lalonde Aaron, Iwanaga Shiho, Snyder G. Jeffrey. High thermoelectric figure of merit in heavy hole dominated PbTe, Energy & Environmental Science, 4(6), 2085 (2011).
- 5 Pei Yanzhong, Shi Xiaoya, Lalonde Aaron, Wang Heng Chen Lidong, Snyder G. Jeffrey. Convergence of electronic bands for high performance bulk thermoelectrics, Nature, 473(7345), 66 - 9 (2011).
- 6 Quick Darren. World's most efficient thermoelectric material developed, Gizmag, (2012).
- 7 Biswas K., He J., Blum I.D., Wu C.I., Hogan T.P., Seidman D.N., Dravid V.P., Kanatzidis M.G. High-performance bulk thermoelectrics with all-scale hierarchical architectures, Nature, 489(7416), 414 - 418 (2018).
- 8 Voudoukis N. Photovoltaic Technology and Innovative Solar Cells, European Journal of Electrical Engineering and Computer Science, 2(1), (2018).
- 9 Redfield A.G. On the theory of relaxation processes, IBM Journal of Research and Development, 1(1), 19 - 31 (1957).

- 10 Nitzan A. Chemical Dynamics in Condensed Phases: Relaxation, Transfer and Reactions in Condensed Molecular Systems (OUP Oxford, 2006).
- 11 Webb S.P., Iordanov T. and Hammes-Schiffer S. Multiconfigurational nuclear-electronic orbital approach: Incorporation of nuclear quantum effects in electronic structure calculations, Journal of Chemical Physics, 117(9), 4106 - 4118 (2002).
- 12 Hammes-Schiffer S. Avoiding the Born-Oppenheimer separation between electrons and nuclei: Explicitly correlated wavefunctions and multicomponent density functional theory, Abstracts of Papers of the American Chemical Society, 242, (2011).
- 13 Tully J.C. Molecular-dynamics with electronic-transitions, Journal of Chemical Physics, 93(2), 1061 - 1071 (1990).

Сведения об авторах:

Абуова А.У. - **основной автор**, PhD, и.о. доцента кафедры Технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Абуова Ф.У. - PhD, доцент кафедры Ядерной физики, новых материалов и технологии, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Инербаев Т.М. - к.ф.-м.н., доцент кафедры технической физики, Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Сазанбай А. - магистрант 2 года обучения специальности "Наноматериалы и нанотехнологии", Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Нураканов А. - магистрант 2 года обучения специальности "Технической физики", Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, ул. Кажымукана, 13, Нур-Султан, Казахстан.

Абуова А.У. - **main author**, PhD, Acting Associate Professor of the Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, K. Munaitpasov St., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Абуова Ф.У. - PhD, Acting Associate Professor of Nuclear Physics, New Materials and Technologies, L.N. Gumilyov Eurasian National University, K. Munaitpasov St., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Инербаев Т.М. - Candidate of Physical-Mathematical Speciality, Acting Associate Professor of the Department of Technical Physics, L.N. Gumilyov Eurasian National University, K. Munaitpasov St., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Сазанбай А. - 2nd year Master student of the specialty «Nanotechnical and nanomaterials», L.N. Gumilyov Eurasian National University, K. Munaitpasov St., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

Нураканов А. - 2nd year Master student of the specialty «Technical Physics», L.N. Gumilyov Eurasian National University, K. Munaitpasov St., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.