

## АННОТАЦИЯ

диссертации на соискание ученой степени доктора философии (PhD)  
6D060400 – Физика

УСЕИНОВ АБАЙ БАКЫТЖАНОВИЧ

### **Расчеты атомных и электронных свойств оксида цинка из первых принципов**

#### **Актуальность работы**

За последнее десятилетие, исследования атомарной и электронной структуры оксида цинка (ZnO) привлекло огромное внимание, так как этот полупроводник оказался сравнительно дешевым материалом с хорошими оптоэлектронными свойствами, и который может заменить более дорогие оптоэлектронные материалы. Современная техника получения ZnO дает возможность его легирования, создания *p-n* переходов, а также его использования в гетероструктурных переходах. Отсюда следует важность понимания влияния различных примесей на атомное и электронное строение оксида цинка. В этой связи водород особо важен, так как он всегда присутствует в ZnO при его выращивании методом магнетронного распыления, и согласно предварительным экспериментальным данным повышает электронную проводимость ZnO, что принципиально важно для создания прозрачных проводящих покрытий в микроэлектронике. Понимание роли водорода требует атомистического моделирования.

В настоящей работе для описания кристаллической структуры и электронных свойств оксида цинка с примесью водорода на атомарном уровне, проведено квантово – химическое моделирование с использованием теории функционала плотности.

**Целью работы** является исследование влияния примеси водорода на атомные и электронные свойства ZnO в объеме и на поверхности.

#### **Задачи исследования:**

- Рассчитать влияние на энергетику и электронные свойства ZnO примеси водорода в междоузлии;
- Оценить влияние на энергетику и электронные свойства ZnO примеси водорода в вакансии кислорода;
- Проанализировать релаксацию бездефектных неполярных поверхностей ZnO;
- Исследовать процессы адсорбции водорода на неполярной поверхности ZnO.

**Объектом исследования** является полупроводниковый кристалл оксида цинка (ZnO) с примесью водорода. Объект исследования соответствует теме диссертации, поставленной цели и задачам исследования.

**Предметом научно-исследовательской работы** являлось теоретическое изучение влияния атомарного водорода на объемные и поверхностные свойства ZnO

**Научная новизна** состоит в следующих научных результатах:

1. Водород эффективно создает донорные уровни вблизи дна зоны проводимости;
2. На поверхности ZnO водород адсорбируется преимущественно на поверхностных ионах кислорода;
3. Междоузельная позиция атома водорода (*hollow*) на поверхности является стабильной;
4. Адсорбция водорода приводит к уменьшению энергии релаксации (1  $\bar{1}$ 00) поверхности;
5. Внедрение вглубь кристалла требует значительной затраты энергии.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Минимальная энергия внедрения водорода соответствует позиции атома H около иона кислорода, (которая будет показана ниже), с образованием сильной химической связи с длиной 0.978 Å. Водород в объеме кристалла ZnO является донорной примесью с низким потенциалом ионизации. Водород отдает часть электронной плотности на ближайшие соседние ионы Zn и O;
2. Расчеты для бездефектных неполярных (1-100) и (11-20) поверхностей показали, что ковалентный вклад в Zn-O связи на поверхности больше, чем в объеме кристалла. Среди неполярных (1-100) и (11-20) поверхностей более стабильной является (1-100) поверхность;
3. Установлено, что адсорбция водорода на поверхности ZnO энергетически выгодна в позиции над поверхностными ионами кислорода и приводит к ее «металлизации». Слабая физическая адсорбция наблюдается в междоузельной позиции (*hollow*). В результате адсорбции снижается поверхностная энергия.

**Научно-практическая значимость:** Результаты данных неэмпирических расчетов объясняют физико-химические свойства чистого и с примесью водорода кристалла ZnO на атомарном уровне, и могут быть использованы для создания прозрачных проводящих покрытий в микроэлектронике, в производстве элементов солнечных батарей и транзисторов.

**Объем и структура диссертации:** Диссертация состоит из содержания, введения, четырех разделов, заключения, и списка использованной литературы. Объем диссертации составил 108 страниц, включающий 31 рисунок, 14 таблиц, 173 литературных источника.

**Заключение:**

Проведенные квантово-химические расчеты атомных и электронных свойств кристалла ZnO с водородом, который неизбежно попадает в материал из плазмы во время выращивания методом магнетронного распыления, демонстрируют возможности современных теоретических методов

моделирования и надежного предсказания эффектов допирования технологических материалов. В частности нами:

1. Установлено, что энергетически выгодной позицией атома водорода внутри ZnO является положение вблизи атома кислорода ( $AB_{O,\perp}$ ), в которой формируется сильная химическая связь с длиной 0.978 Å;
2. Показано, что водород внутри кристалла ZnO является мелким донором;
3. Показано, что ковалентный вклад в Zn-O связи на поверхности больше, чем в объеме кристалла. Среди неполярных  $(1\bar{1}00)$  и  $(11\bar{2}0)$  поверхностей более стабильной является  $(1\bar{1}00)$  поверхность.
4. Выявлено, что адсорбция водорода энергетически выгодна в позиции над поверхностным атомом кислорода. Также слабая физическая адсорбция наблюдается в междоузельной позиции (*hollow*). В результате адсорбции снижается поверхностная энергия.
5. Установлено, что адсорбция водорода на  $(1\bar{1}00)$  поверхности ZnO приводит к ее «металлизации». С ростом концентрации примеси водорода на поверхности зонная структура поверхности исчезает.

#### **Апробация работы и публикации:**

В результате проведенных расчетов было опубликовано 19 печатных работ, из них две входят в базу Thomson Reuters, одна в базу Scopus, 6 публикаций рекомендованных ККСОН МОН РК, 10 тезисов в Международных конференциях.