

АННОТАЦИЯСЫ

6D060400 – Физика

УСЕИНОВ АБАЙ БАХЫТЖАНОВИЧ

Алғашқы принциптерден мырыш оксидінің атомдық және электрондық қасиеттерін есептеу

Жұмыстың өзектілігі

Соңғы онжылдықта мырыш оксидінің (ZnO) атомдық және электронды құрылымын зерттеуге деген қызығушылық күрт артты. Өйткені ол жақсы оптоэлектронды қасиетке ие, салыстырмалы тұрғыда арзан материал екендігі анықталды және қазіргі қымбат оптоэлектронды материалдардың орнына қолданылуы мүмкін. ZnO-ны алудың қазіргі заманғы техникасы оны легирлеуге, *p-n* ауысулар жасауға, сонымен қатар гетероқұрылымды ауысуларда қолдануға мүмкіндік береді. Осыдан, мырыш оксидінің атомды және электронды құрылымына әртүрлі қоспалар әсерінің қандай болатынын білудің маңыздылығы туады. Әсіресе, ZnO құрамындағы сутегі қоспасы өте маңызды. Себебі, ZnO кристалын магнетронды бүрку әдісімен өсіру кезінде әрқашан да сутегі қоспасы болады. Ал алдыңғы тәжірибелік нәтижелерге сәйкес сутегі қоспасы ZnO-ның электронды өткізгіштігін арттырады. Ал бұл микроэлектроникада мөлдір өткізгіш беттер жасауда өте маңызды. Атомды модельдеу сутегінің рөлін анықтауға зор мүмкіндік береді.

Осы жұмыста сутегі қоспалы мырыш оксидінің кристалл құрылымы мен электронды қасиеттерін сипаттау үшін тығыздық функционалы теориясын қолдана отырып квантты-химиялық моделдеу жасалды.

Жұмыстың мақсаты: Жұмыстың мақсаты сутегі атомының ZnO кристалының көлеміндегі және бетіндегі қасиеттер зерттеу болып табылады.

Зерттеудің міндеттері:

- 1) ZnO-ның көлемді суперұяшығы моделінің атомды орбиталдары базасы мен геометриялық параметрлерін оптимизациялау;
- 2) Түйінаралығында орналасқан сутегі қоспасының квантты-химиялық есептеулері;
- 3) Оттегі вакансиясында орналасқан сутегі қоспасының квантты-химиялық есептеулері;
- 4) ZnO-ның ақаусыз, полярсыз беттерін модельдеу;
- 5) ZnO-ның полярсыз (1100) бетіндегі сутегі адсорбциясының квантты-химиялық есептеулері;

Зерттеу объектісі сутегі қоспалы жартылайөткізгішті мырыш оксиді (ZnO) кристалы. Зерттеу объектісі диссертация тақырыбына, зерттеуге қойылған мақсаттар мен міндеттерге сәйкес келеді.

Ғылыми-зерттеу жұмысының пәні: ZnO-ның көлемдік және беттік қасиеттеріне сутегі атомының әсерін теориялық зерттеу.

Ғылыми жаңалық атомдық деңгейдегі сутегінің абсорбциясы мен адсорбциясы процестерін теориялық модельдеу және де ZnO-ның беттік құрылымына сутегінің әсерін зерттеу жұмыстың ғылыми жаңалығы болып табылады. Жалпы келесі ғылыми нәтижелерді атап көрсетуге болады:

1. Сутегінің өткізгіштік зонаға жақын маңда донорлы деңгейлерлі түзу тиімділігі жоғары;
2. ZnO бетінде сутегі көбіне беттік оттегі иондарында адсорбцияланады;
3. Беттегі сутегі адсорбциясының басқа да тұрақты позициялары алынды;
4. Сутегі адсорбциясы бет релаксациясы энергиясының азаюына алып келеді;
5. Кристалл ішіне терең ендіру үшін айтарлықтай энергия қажет.

Қорғауға шығарылған негізгі жайттар

1. ZnO ішінде сутегі атомы үшін оттегі атомы ионының маңы ($AB_{O,\perp}$) энергетикалық тұрғыда тиімді орын болып табылады. Қоспалы сутегі атомы мен қалыпты оттегі ионы арасында ұзындығы 0.978 \AA байланыс орнайды. Сутегі ZnO кристалы көлемінде майда донор болып табылады. Ол өзінің электрон тығыздығының біраз бөлігін көрші орналасқан Zn және O атомдарына береді.
2. Ақаусыз полярсыз беттер үшін жүргізілген есептеулер Zn-O байланысында ковалентті байланыстың үлесі кристалл көлеміне қарағанда берінде көбірек болады. Полярсыз $(1\bar{1}00)$ және $(11\bar{2}0)$ беттерінің ішінде $(1\bar{1}00)$ бетінің тұрақтылығы жоғары болады.
3. ZnO-ның $(1\bar{1}00)$ бетіндегі сутегі адсорбциясы оттегі ионының үстіндегі позицияда орналасуы энергиялық тұрғыда тиімді және оның «металдануын» тудырады. Түйінаралық позицияда (*hollow*) әлсіз физикалық адсорбция байқалады. Адсорбция нәтижесінде беттік энергия азаяды.

Ғылыми-практикалық маңыздылығы: Эмпирикалық емес есептеулердің нәтижесі таза және сутегі қоспасы бар ZnO кристалының атомдық дейгейдегі физика-химиялық қасиеттерін түсіндіреді және микроэлектроникада мөлдір өткізгіш беттерді жасауда, күн батареяларының элементтері мен транзисторлар жасауда қолданылуы мүмкін.

Диссертацияның көлемі мен құрылымы: Диссертация мазмұннан, кіріспеден, төрт бөлімнен, қорытындыдан және қолданылған әдебиеттер тізімінен тұрады. Диссертация көлемі 108 бет. 31 сурет, 14 кесте, 173 әдебиет көздері қолданылған.

Қорытынды:

Сутекті ZnO кристалы қасиеттеріне жүргізілген квантты-химиялық есептеулерқазіргі заманғы теориялық модельдеу әдістерінің мүмкіндіктері ментехнологиялық материалдарының допирлерну эффектiлерiн сенiмдi болжау мүмкiндiгiн демонстрациялайды. Атап айтқанда:

1. ZnO ішінде сутегі атомы үшін оттегі атомы ионының маңы ($AB_{O,\uparrow}$) энергетикалық тұрғыда тиімді орын болып табылады. Мұнда күшті ОН химиялық байланыс орнайды.
2. Сутегі ZnO кристалы көлемінде майда донор болып табылады. Ол өзінің электрон тығыздығының біраз бөлігін көрші орналасқан Zn және O атомдарына береді (заряд деколонизациясы).
3. Ақаусыз полярсыз беттер үшін жүргізілген есептеулер Zn-O байланысында ковалентті байланыстың үлесі кристалл көлеміне қарағанда бетінде көбірек болатындығы анықталды. Полярсыз $(1\bar{1}00)$ және $(11\bar{2}0)$ беттерінің ішінде $(1\bar{1}00)$ бетінің тұрақтылығы жоғары болады.
4. Сутегі адсорбциясы беттік оттегі ионының үстіндегі позицияда орналасуы энергиялық тұрғыда тиімділігі анықталды. Сонымен қатар, түйінаралық позицияда (*hollow*) әлсіз физикалық адсорбция байқалатындығы анықталды. Адсорбция нәтижесінде беттік энергия азаяды.
5. Сутегінің ZnO-ның $(1\bar{1}00)$ бетіндегі адсорбциясы $(10\bar{1}0)$ бетіндегідей «металдануын» тудыратындығы тағайындалды. Сутегі қоспасының концентрациясы артқан сайын беттегі зоналық құрылым жойылып кетеді, ал Zn және O атомдарының барлық үзілген байланыстары толығымен қаныққан кезде қайтадан изоляторға айналады.

Жұмыстың апробациясы және публикациялар:

Жүргізілген есептеулер нәтижесінде 19 баспа жұмысы жарыққа шықты, оның ішіндегі біреуі Thomson Reuters базасына кіреді, екеу Scopus базасында, 6 ҚР БҒМ БҒСБК ұсынған публикациясы, 10 Халықаралық конференцияларда жарияланған.