

Торайғыров университетінің
ҒЫЛЫМИ ЖУРНАЛ

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
Торайғыров университета

ТОРАЙҒЫРОВ УНИВЕРСИТЕТІНІҢ ХАБАРШЫСЫ

Физика, математика және компьютерлік
ғылымдар сериясы
1997 жылдан бастап шығады



ВЕСТНИК ТОРАЙҒЫРОВ УНИВЕРСИТЕТА

Серия: Физика, математика
и компьютерные науки
Издается с 1997 года

ISSN 2959-068X

№ 1 (2022)
Павлодар

**НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ
ТОРАЙГЫРОВ УНИВЕРСИТЕТА**

Серия: Физика, математика и компьютерные науки
выходит 4 раза в год

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о постановке на переучет периодического печатного издания,
информационного агентства и сетевого издания
№ KZ91VPY00046988

выдано

Министерством информации и общественного развития
Республики Казахстан

Тематическая направленность

публикация материалов в области физики, математики,
механики и информатики

Подписной индекс – 76208

<https://doi.org/10.48081/JZXO4819>

Бас редакторы – главный редактор

Тлеуменов С. К., *ф.-м.г.д., профессор*

Заместитель главного редактора

Испулов Н. А., *ф.-м.г.к., профессор*

Ответственный секретарь

Жумабеков А. Ж., *магистр*

Редакция алқасы – Редакционная коллегия

Esref Adali,

PhD докторы, профессор (Турция);

Qadir Abdul,

PhD докторы, профессор (Пакистан);

Домбаев К. М.,

ф.-м.г.д., профессор;

Демкин В. П.,

ф.-м.г.д., профессор (Российская Федерация);

Жумадиллаева А. К.,

т.г.к., кауымд. профессор;

Ибраев Н. Х.,

ф.-м.г.д., профессор;

Косов В. Н.,

ф.-м.г.д., профессор;

Сентова С. М.,

пед.г.д., профессор;

Шоканов А. К.,

ф.-м.г.к., профессор

Омарова А. Р.,

технический редактор

За достоверность материалов и рекламы ответственность несут авторы и рекламодатели

Редакция оставляет за собой право на отклонение материалов

При использовании материалов журнала ссылка на

«Вестник Торайгыров университета» обязательна

СЕКЦИЯ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА»

МРНТИ 29.19.03

<https://doi.org/10.48081/AUH1416>

***А. Е. Альжанова¹, Ю. П. Быкова²**

^{1,2}Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
Республика Казахстан, г. Нур-Султан

ТЕОРИЯ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ПО АДсорбЦИИ МОНОСЛОЯ ZNO НА Si (111) ПОВЕРХНОСТИ

Данная работа позволила провести сравнительный анализ результатов реального эксперимента с вычислительным экспериментом. Вычислительный эксперимент проводился посредством программы Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP), которая основана на расчетах из первых принципов. Посчитана энергия адсорбции при осаждении монослоя нанокластеров ZnO на Si (111) терминированную поверхность открытого типа. Вычислительный эксперимент проведенный посредством Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) позволил спрогнозировать жизнеспособность исследуемой системы, а также посчитать параметр недоступный для измерения при проведении реального эксперимента. Процесс адсорбции монослоя оксида цинка был рассмотрен на Si терминированной (111) поверхности открытого типа. Были определены наиболее выгодные положения атомов оксида цинка для последующей адсорбции монослоя нанокластеров ZnO и определена энергия связи с поверхностью. Была посчитана энергия адсорбции. Отрицательное значение энергии адсорбции, полученное в работе, указывает на механическую стабильность и хорошую осаждаемость монослоя нанокластеров ZnO на поверхности Si. Таким образом, вычислительный эксперимент подтвердил, что система ZnO/SiO₂/Si является устойчивой и жизнеспособной, что позволяет предположить возможность роста нанопроволок из ZnO на поверхности Si.

Ключевые слова: оксид цинка, адсорбция, поверхность, функционал плотности, кремний, нанокластер, наноматериал

Введение

Система SiO_2/Si с нанокластерами ZnO , рассмотренная в настоящем исследовании является очень перспективным наноматериалом для опто-, микро- и наноэлектроники, т.к. сформирована на кремниевой подложке, что дает возможность хорошей интеграции в традиционные кремниевые технологии. Оксид цинка (ZnO) – это материал с шириной запрещенной зоны ($\sim 3,4$ эВ) и большой электронной проводимостью, также он является одним из широко изученных оксидных полупроводников благодаря своему потенциалу его применение очень перспективно в качестве электронных, оптоэлектронных, пьезоэлектрических датчиках [1–9].

Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) является своеобразной коммерческой платформой для проведения вычислительного эксперимента из первых принципов в рамках теории функционала плотности. Посредством использования данного программного комплекса можно рассчитывать электронные структуры и многие другие различные физико-химические параметры для периодических структур. В основе теории используется разложение одноэлектронных волновых функций по плоским волнам, т. е. метод проектирования присоединенных волн (PAW) [10]. Метод псевдопотенциала позволяет ограничить изучение многоэлектронной системы, состоящей из большого числа атомов, рассмотрением только тех электронов, которые дают существенный вклад в межатомное взаимодействие, в частности, валентных электронов, находящихся на внешних электронных оболочках.

Ранее в работах [11–14], в ходе экспериментального исследования было показано, что электрохимическое и химическое осаждение Zn в нанопоры системы SiO_2/Si приводит к их полному заполнению. В свою очередь, проведенный рентгеноструктурный анализ показал формирование нанокластеров ZnO с поликристаллической структурой и гексаганальной примитивной фазой с индексами Миллера (200) и (201) (PDF#361451-etalon).

Вычислительный эксперимент, проведенный в данном исследовании, помог сделать прогноз возможности формирования ZnO на Si терминированной (111) поверхности «открытого» типа и подтвердил ее жизнеспособность. Вычислительный эксперимент позволил рассчитать энергию адсорбции системы, которая была не доступна для измерения в ходе экспериментального исследования.

Материалы и методы

В проведенном экспериментальном исследовании наибольший интерес представляет место контакта нанокластеров ZnO с подложкой Si , т.к. SiO_2 в системе выступает, как диэлектрическая матрица. Наноструктурированные системы SiO_2/Si с нанокластерами ZnO являются перспективным

наноматериалом для создания активных и пассивных элементов опто-, микро- и нанoeлектроники, т. е. имеют хороший прикладной потенциал.

На рисунке 1 показаны снимки со сканирующего электронного микроскопа JSM-7500F наноструктурированной системы SiO_2/Si с нанокластерами ZnO в нанопорах, полученных в результате электрохимического осаждения [11]. Как видно из рисунка 1 (б), нанопоры сохраняют правильную коническую форму после электрохимического осаждения. Как видно из результатов проведенного экспериментального исследования, нанокластеры ZnO хорошо заполняют нанопоры системы SiO_2/Si .

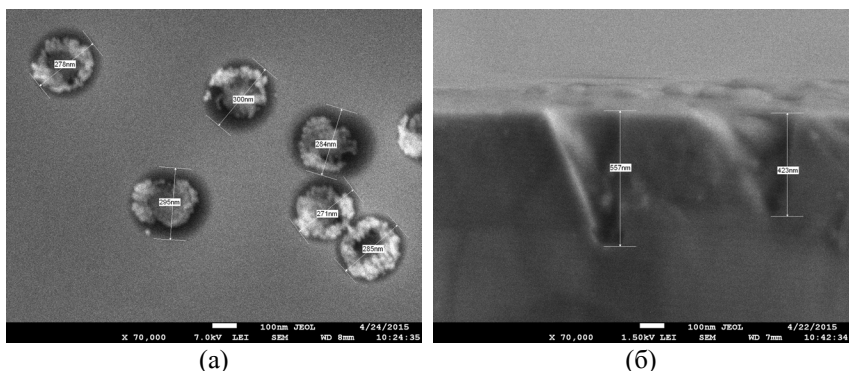


Рисунок 1 – СЭМ изображения SiO_2/Si , электрохимическое осаждение (Xe, 200 МэВ, $1 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$) 7 минут (а), (б) СЭМ изображение поперечного скола $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{ZnO}$, (Xe, 200 МэВ, $1 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$) [11]

В данной работе методом вычислительного эксперимента была оценена вероятность формирования монослоя ZnO на поверхности кремния и он показал свою жизнеспособность.

Прежде чем начать вычислительный эксперимент, был изучен процесс адсорбции ZnO на Si терминированной (111) поверхности, т.е. были определены наиболее выгодные позиции на которых адсорбируются атомы ZnO и энергия связи с поверхностью. Энергия адсорбции является критерием для определения стабильности структур $\text{ZnO}/\text{SiO}_2/\text{Si}$ и оценки их поверхностной подвижности.

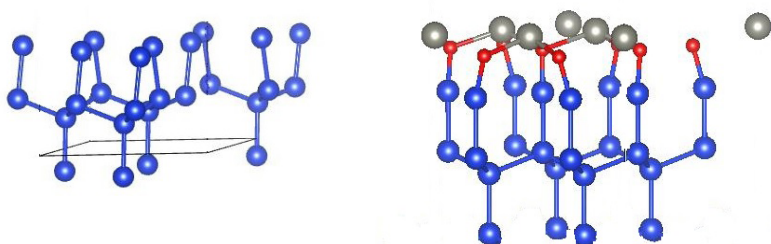
Результаты и обсуждение

Энергия связи монослоя ZnO была рассчитана как разность полных энергий систем Si и ZnO . Согласно формуле по расчету энергии адсорбции,

отрицательное значение E_{ads} свидетельствует о том, что конфигурация адсорбции ZnO на поверхности Si является энергетически выгодной, что

подтверждает жизнеспособность такой системы. Для Si терминированной (111) поверхности энергия адсорбции ZnO равна -2,97эВ на один атом. Этот показатель указывает на механическую стабильность и хорошую осаждаемость на поверхности Si.

Для получения адсорбции монослоя ZnO было рассмотрено так называемый «открытый» тип терминации для поверхности Si (111). На рисунке 2 показаны оптимизированные структуры для чистой поверхности (а) и адсорбированной монослоем ZnO поверхность (б). Как видно, в случае терминированной поверхности Si с открытым типом адсорбция возможна, т.е. система устойчива: адсорбция возможна и система жизнеспособна.



(а)

(б)

Рисунок 2 – Оптимизированная структура поверхности (111) Si («открытая» терминация): чистая поверхность (а) [15], (б) адсорбированная монослоем ZnO поверхность

Таким образом, в результате вычислительного эксперимента установлено, что энергетически наиболее выгодными позициями для адсорбции монослоя ZnO на Si терминированной (111) поверхности является позиция междоузлия с энергией адсорбции -2,97эВ.

Проведенный вычислительный эксперимент позволил спрогнозировать возможность получения нанокластеров ZnO в порах наноструктурированной системы SiO_2/Si поликристаллической структуры, доказанной в рамках экспериментального исследования. Более того, анализ полученных результатов показал, что система $\text{Zn}/\text{SiO}_2/\text{Si}$ является очень перспективным наноматериалом, т.к. представляет собой хороший проводник.

Выводы

Посчитанное значение энергии адсорбции показало, что система устойчива и жизнеспособна, более того монослой ZnO хорошо адсорбируется на Si. Таким образом, выполненный вычислительный эксперимент, предложил

альтернативу реальному эксперименту для расчета некоторых параметров системы, которые сложно получить в рамках экспериментального исследования и подтвердил возможность формирования монослоя нанокластеров ZnO на поверхности кремния в случае терминации открытого типа.

Благодарности

Работа выполнена на основе гранта государственной стипендии, полученной доктором философии (PhD) по физике Альжановой А.Е. на научные исследования для молодых ученых со степенью от Государственного Агентства Развития Образования Республики Латвия, Вердикт комиссии от 12.06.2019 №1.-50.3/2867 (г. Рига, Латвия).

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Alias, S., Mohamad, A. Springer 16, 102829, 2014.
- 2 Harun, K., Hussain, F., Purwanto A. et.al, Mater Res. Express, 4, 2017.
- 3 M. Huang, S. Mao, H. Feick et.al, Science. 292, 1897-9, 2001.
- 4 U. Ozgur, Y. Alivov, C. Liu et.al, J. Appl. Phys., 98, 041301, 2005.
- 5 C. Ong, L. Ng, A. Mohamad, Renew Sustain Energy Rev., 81, 536/51, 2018.
- 6 Klingshirn, C. Chem. Phys. Chem., 8, 782/803, 2007.
- 7 Ozgur, U., Hofstetter, D., Morkoc, H. Proc. IEEE, 98, 1255/68, 2010.
- 8 A. Zawadzka, P. Plociennik, E. Kouari et. al Jour. Lumin, 169, 483/91, 2016.
- 9 F. Azmi, B. Sahraoui, S. Muzakir et.al, Makara J. Technol., 23, 11/5, 2019.
- 10 Kresse, G., Joubert, D. Phys. Rev., 59, 1758. 1999.
- 11 Dauletbekova, A., Alzhanova, A., Akilbekov, A. AIP Conf. Proc., 1767, 2016.
- 12 Dauletbekova, A. Alzhanova, A. Akylbekov, A. et.al. KnE Engineering (RFYS), 2018.
- 13 Dauletbekova, A. Kozlovskiy, A. et.al. Surface & Coatings Technology, 355, 2018.
- 14 Vlasukova, L. A., Komarov, F. F. et.al, A new nanoporous material based on amorphous silicon dioxide // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. – 2012. – V. 76. – P. 582–587.
- 15 Alzhanova, A. AIP Conf. Proc., 2313, 2020.

Материал поступил в редакцию 10.03.22.

*А. Е. Альжанова¹, Ю. П. Быкова²

^{1,2}Л. Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті,
Қазақстан Республикасы, Нұр-Сұлтан қ.
Материал 10.03.22 баспаға түсті.

ZNO МОНОҚАБАТЫНЫҢ Si (111) БЕТІНДЕГІ АДСОРБЦИЯСЫ БОЙЫНША ТЫҒЫЗДЫҚ ФУНКЦИОНАЛЫНЫҢ ТЕОРИЯСЫ

Бұл жұмыс есептеу экспериментімен нақты эксперимент нәтижелеріне салыстырмалы талдау жүргізуге мүмкіндік берді. Есептеу эксперименті алғашқы принциптердің есептеулеріне негізделген Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) бағдарламасы арқылы жүргізілді. ZnO нанокластерлерінің моноқабатын Si (111) ашық типті терминирленген бетке тұндыру кезіндегі адсорбция энергиясы есептелді. Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) арқылы жүргізілген есептеу эксперименті зерттелетін жүйенің өміршеңдігін болжауға, сондай-ақ нақты эксперимент жүргізу кезінде өлшеу мүмкін емес параметрді есептеуге мүмкіндік берді. Мырыш оксиді моноқабатын адсорбциялау процесі Si (111) терминирленген бетінде қарастырылды. ZnO нанокластерлерінің моноқабатын кейіннен адсорбциялау үшін мырыш оксиді атомдарының ең тиімді позициялары анықталды, сондай-ақ бетпен байланыс энергиясы анықталды. Адсорбция энергиясы есептелді. Жұмыста алынған адсорбция энергиясының теріс мәні механикалық тұрақтылықты және Si бетіндегі ZnO нанокластерлерінің моноқабатының жақсы тұндырғыштығын көрсетеді. Осылайша, есептеу эксперименті ZnO/SiO₂/Si жүйесінің тұрақты және өміршең екенін растады, бұл Si бетіндегі ZnO наносымдарының осу мүмкіндігін ұсынады.

Кілтті сөздер: мырыш оксиді, адсорбция, бет, тығыздық функционалы, кремний, нанокластер, наноматериал

**A. Ye. Alzhanova¹, Yu. P. Bykova²*

*^{1,2}L. N. Gumilyov Eurasian National University,
Republic of Kazakhstan, Nur-Sultan.*

Material received on 10.03.22.

DENSITY FUNCTIONAL THEORY BASED ON THE ADSORPTION OF THE ZNO MONOLAYER ON Si (111) SURFACES

This work made it possible to conduct a comparative analysis of the results of a real experiment with a computational experiment. The computational experiment was carried out using the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) program, which is based on calculations from first principles. The adsorption energy during the deposition of the

ZnO nanoclusters monolayer on Si (111) terminated open type surface is calculated. The computational experiment carried out using the Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) made it possible to predict the viability of the system of interest, as well as to calculate the parameter which is not available for measurement during a real experiment. The process of adsorption of the zinc oxide monolayer was considered on Si (111) terminated open type surface. The most favorable positions of zinc oxide atoms for the subsequent adsorption of the ZnO nanoclusters monolayer were determined, and the binding energy with the surface was defined as well. The adsorption energy was calculated. The negative value of the adsorption energy obtained in this work indicates the mechanical stability and good deposition of the ZnO nanoclusters monolayer on the Si surface. Thus, the computational experiment confirmed that the ZnO/SiO₂/Si system is stable and viable, which suggests the possibility of growing ZnO nanowires on the Si surface.

Keywords: zinc oxide, adsorption, surface, density functional, silicon, nanocluster, nanomaterial.

Теруге 10.03.2022 ж. жіберілді. Басуға 28.03.2022 ж. қол қойылды.

Электрондық баспа

8,30 Mb RAM

Шартты баспа табағы 7,99. Таралымы 300 дана. Бағасы келісім бойынша.

Компьютерде беттеген З. С. Исакова

Корректор: А. Р. Омарова

Тапсырыс № 3960

Сдано в набор 10.03.2022 г. Подписано в печать 28.03.2022 г.

Электронное издание

8,30 Mb RAM

Усл.печ.л. 7,99. Тираж 300 экз. Цена договорная.

Компьютерная верстка З. С. Исакова

Корректор: А. Р. Омарова

Заказ № 3960

«Toraighyrov University» баспасынан басылып шығарылған

«Торайғыров университеті» КЕ АҚ

140008, Павлодар қ., Ломов к., 64, 137 каб.

«Toraighyrov University» баспасы

«Торайғыров университеті» КЕ АҚ

140008, Павлодар қ., Ломов к., 64, 137 каб.

67-36-69

e-mail: kereku@tou.edu.kz

www.vestnik.tou.edu.kz

<https://vestnik-pm.tou.edu.kz/>