

АДСОРБЦИЯ НАНОКЛАСТЕРОВ ZnO НА Si ТЕРМИНИРОВАННОЙ (111) ПОВЕРХНОСТИ

Альжанова А.Е.¹, Мастриков Ю.²

¹) Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева,
г. Нур-Султан, Казахстан

²) Институт физики твердого тела Латвийского университета, г. Рига, Латвия
E-mail: aliya.alzhan@yandex.kz

ADSORPTION OF ZnO NANOCCLUSERS ON Si TERMINATED (111) SURFACE

Alzhanova A. Ye.¹, Mastrikov Yu.²

¹) L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

²) Institute of Solid States Physics Latvian University, Riga, Latvia

A computational experiment on the adsorption of ZnO nanoclusters on silicon from the first principles using VASP was performed. A comparative analysis of a computational experiment with a real one is shown. The adsorption energy of a complex system is calculated: ZnO nanoclusters on a Si-terminated

В последнее время все более актуальным становится использование вычислительного эксперимента, как инструмента, позволяющего исследователю смоделировать потенциально возможный эксперимент и при этом получить точный прогноз жизнеспособности системы. Более того, вычислительный эксперимент позволяет рассчитать многие параметры системы (энергию, потенциал, плотность и т.д.), что становится хорошей основой реального эксперимента. Таким образом, применение таких расчетов существенно сокращает время, ресурсы и сужает круг возможных вариантов проведения реального эксперимента для исследуемых систем, т.е. выдает наиболее выгодный вариант с точки зрения эксперимента в реальности.

Ранее нами был проведен эксперимент [1] по получению нанокластеров ZnO, вкрапленных в диэлектрическую матрицу SiO₂ на подложке Si. Рентгеноструктурный анализ системы показал, что при химическом и электрохимическом методах осаждения цинка, в нанопорах слоя SiO₂ формируются нанокластеры ZnO гексаганальной примитивной фазы с индексами Миллера (200) и (201) [2]. Таким образом, полученный новый наноматериал представляет собой сложную систему из нанокластеров ZnO в порах SiO₂, контактирующих с полупроводниковой подложкой Si и разделенных между собой диэлектрической матрицей SiO₂. Особый интерес вызывало место контакта нанокластеров ZnO с подложкой Si, т.к. от данного вопроса зависит потенциальное применение полученного материала, к примеру, в качестве активных (газовые сенсоры) или пассивных (транзисторы) элементов микроэлектроники.

В данной работе нами был проведен вычислительный эксперимент по адсорбции нанокластеров графеноподобного ZnO на Si терминированной (111) поверхности. Т.е. данным вычислительным экспериментом, мы хотели получить или опровергнуть жизнеспособность роста графеноподобного ZnO на подложке Si.

Посчитанное значение энергии адсорбции показало, что система жизнеспособна, более того графеноподобный ZnO хорошо адсорбируется на Si. Расчет плотности электронных состояний от энергии показал, что исследуемая система является проводником, т.е. в месте контакта графеноподобного ZnO с подложкой Si хорошая проводимость, что дает прогноз на возможное практическое применение такой системы. Таким образом, выполненный вычислительный эксперимент, предложил альтернативу реальному эксперименту и подтвердил возможность формирования нанокластеров ZnO графеноподобного типа на кремнии.

Исследование проведено в Институте физики твердого тела Латвийского университета (г. Рига, Латвия) на средства выигранной и.о. доцентом, PhD Альжановой А.Е. стипендии по программе Latvian State Scholarship for Research на 2019-2020 учебный год от Государственного Агентства по развитию образования Латвии.

1. Dauletbekova A., Alzhanova A., et.al., Surface and Coatings Technology J., Vol. 355., (2018).
2. Dauletbekova A., Alzhanova A., et.al., KnE Engineering J., Vol. 2018., (2018).

ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$

Андреев С.Н.¹, Мазуренко В.В.¹

- ¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия.
E-mail: s.n.andreev@urfu.ru

INVESTIGATION OF MAGNETIC INTERACTIONS IN $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$

Andreev S.N.¹, Mazurenko V.V.¹

- ¹) Ural Federal University, Russia

The work is devoted to the investigation of magnetic properties of $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$. While using superexchange theory we estimated the isotropic and anisotropic exchange interactions between iridium atoms.

5d оксиды переходных металлов привлекают значительное внимание исследователей, так как их свойства сильно зависят от спин-орбитального взаимодействия. В данной работе мы изучаем магнитные свойства $\text{Sr}_3\text{Ir}_2\text{O}_7$. Для этого построим следующий спиновый гамильтониан: