

## РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ ЦИНКОСОДЕРЖАЩИХ ЧАСТИЦ В ПЛЕНКАХ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

Забокрицкая Е.С.<sup>1</sup>, Бунтов Е.А.<sup>1</sup>, Кащенко Н.М.<sup>1</sup>, Зацепин А.Ф.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия  
E-mail: Zabokritskaya\_e@mail.ru

## CALCULATION OF THE ENERGY STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF THE SURFACE OF ZINC-CONTAINING PARTICLES IN SILICON DIOXIDE FILMS

Zabokritskaya E.S.<sup>1</sup>, Buntov E.A.<sup>1</sup>, Kashchenko N.M.<sup>1</sup>, Zatsepin A.F.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The aim of this work is to study the optical properties of the nanoparticle-matrix interface for SiO<sub>2</sub> implanted with zinc ions. The structural models of the interfaces silica-Zn, silica-ZnO and silica-willemite are selected and their geometric optimization is carried out.

В настоящее время кремний является одним из базовых для электроники материалов. Диоксид кремния, являющийся широкозонным прозрачным изолятором, находит множество применений как в кристаллической, так и в аморфной фазах. Внедрение металлических и полупроводниковых частиц в основную матрицу диоксида кремния — это эффективный метод изменения его электронной структуры и физических свойств, в ходе которого, в частности, происходит внедрение центров свечения в матрицу оксида [1].

Система SiO<sub>2</sub>:Zn, полученная путем имплантации ионов Zn в диоксид кремния с последующим отжигом, может содержать различные цинкосодержащие фазы, включая металлический цинк, ZnO или Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub>. Определение типа нановключений в имплантированные и отожженные матрицы SiO<sub>2</sub> требует сочетания экспериментальных методов оптической спектроскопии и методов *ab initio* моделирования.

Целью данной работы является теоретическое исследование оптических свойств интерфейса наночастица-матрица для SiO<sub>2</sub>, имплантированного ионами цинка. В ходе работы выбраны структурные модели интерфейсов SiO<sub>2</sub>:Zn, SiO<sub>2</sub>:ZnO и SiO<sub>2</sub>:Zn<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> (см. Рис. 1), для которых было проведено моделирование оптических свойств методом DFT.

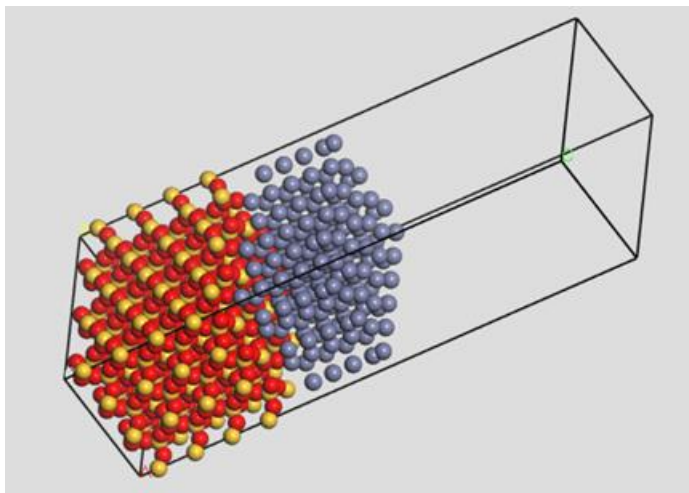


Рис. 1. Пример структуры интерфейса наночастица цинка - матрица  $\text{SiO}_2$

Сравнение полученных в ходе моделирования результатов с показателями реальных образцов показало, что модельный спектр оптического отражения структуры  $\text{SiO}_2:\text{ZnO}$  в целом соответствует среднему уровню отражения из литературных источников [2]. Таким образом, результаты численных экспериментов в сочетании с экспериментальными спектрами могут быть использованы для идентификации цинк-содержащих фаз в составе имплантированной системы  $\text{SiO}_2:\text{Zn}$ .

1. Zatsepin D.A., Zatsepin A.F., Boukhvalov D.W. Electronic structure and photoluminescence properties of Zn-ion implanted silica glass before and after thermal annealing, *Journal of Non-Crystalline Solids* 432, 2016, pp. 183-188.
2. Huaming Yang, Yu Xiao, Kun Liu, Qiming Feng Chemical Precipitation Synthesis and Optical Properties of ZnO/SiO<sub>2</sub> Nanocomposites // *Journal of the American Ceramic Society* 91(5):1591 – 1596, May 2008.