

ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2016» атты
XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2016»

PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«SCIENCE AND EDUCATION - 2016»

2016 жыл 14 сәуір
Астана

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2016»
атты XI Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XI Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2016»**

**PROCEEDINGS
of the XI International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2016»**

2016 жыл 14 сәуір

Астана

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

F 96

F96 «Ғылым және білім – 2016» атты студенттер мен жас ғалымдардың XI Халық. ғыл. конф. = XI Межд. науч. конф. студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2016» = The XI International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2016» . – Астана: <http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2016. – б. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-764-4

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

ӘӨЖ 001:37(063)

КБЖ 72:74

ISBN 978-9965-31-764-4

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2016

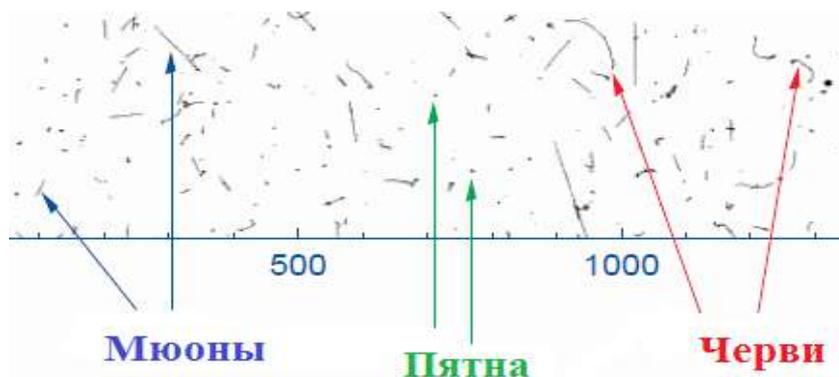


Рис.4. Снимок всех типов следов. Из работы исследователя Donald E. Groom.

Как указывает Donald E. Groom, в большинстве лабораторий частота регистрации "червей" и "пятен" в два раза превышает частоту регистрации мюонов, а экранирование свинцовым экраном толщиной 1 см снижает частоту регистрации "червей" и "пятен" до уровня меньшего, чем для мюонов.

Используя эти методы, мы можем в определенной степени исследовать физику космических мюонов, а учитывая легкодоступность некоторых из них, любой начинающий исследователь получает возможность приобщиться к общему делу людей по всему миру, внося свой собственный вклад в развитие науки в целом.

Список использованных источников

1. К. Групен. «Детекторы элементарных частиц» // Сибирский Хронограф. - Новосибирск, 1999.
2. Б.С. Ишханов, И.М. Капитонов, Э.И. Кэбин. «Частицы и ядра. Эксперимент». - М.: Издательство МГУ, 2005.
3. Н.М. Никитюк. Прецизионные микровершинные детекторы // ЭЧАЯ. 1997. Т. 28. Вып. 1. С. 191-242.
4. Smith, Alan R.; McDonald, et. all. Radiation events in astronomical CCD images. // Proc. SPIE 2002. Vol. 4669. P. 172-183
5. Francis Halzen, Dan Hooper. High-energy Neutrino Astronomy: The Cosmic Ray Connection. 2002
6. Parizot E. The Pierre Auger Observatory: status, results and perspective. 2007
7. H.E.S.S. Source of the month January report. 2005

УДК 538.971

РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ И ЭНЕРГЕТИКИ АКЦЕПТОРНЫХ ПРИМЕСЕЙ В ZNO

Сокабаева А.Ш. *, Ерболатова Г.Ж. *, Усеинов А.Б. **

* Магистрант, ** старший преподаватель
 ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
 Научный руководитель - А.Т. Акылбеков

Введение

Оксид цинка (ZnO) является перспективным полупроводниковым материалом в оптоэлектронике. Благодаря электронным свойствам, имеется интерес создания на его основе светодиодов, солнечных батарей, газовых сенсоров и многих других устройств.

Данные актуальные направления зависят от способности подготовки стабильных образцов ZnO р-типа. К сожалению, наряду с эффективным синтезированием электронного полупроводника ZnO, воспроизвести надежный дырочный полупроводник ZnO сегодня не удастся [1].

Одним из наиболее распространенных способов преодоления этой трудности было введение в структуру кристалла элементов V группы в надежде, что они смогут заменить кислород в ZnO и обеспечить достаточное количество неглубоких акцепторных уровней. В частности, азот рассматривался как наиболее подходящая примесь р-типа, так как размер атома близок к размеру атома кислорода. Несмотря на значительные экспериментальные усилия, посвященные данной теме исследования, лишь немногие работы указывают на успешное получение ZnO р-типа [2-5] и до сих пор данная проблема остается полностью не решенной.

С теоретической точки зрения, понимание этих результатов и предложение других способов получения ZnO р-типа с помощью методов теории функционала плотности является сложной задачей. По сути, проблема связана с недооценкой запрещенной зоны, которая связана с локальным или полулокальным приближением обменно-корреляционного функционала и лишь частично справедливо в случае ZnO (~0.8 эВ). Расчеты, проведенных в рамках этих приближений показали, к примеру, переходный уровень 0.4 эВ для N_O [6] и неглубокие уровни для комплексов вида X_{Zn}-2V_{Zn} [7], но, в свете серьезной недооценки запрещенной зоны, эти результаты следует рассматривать с осторожностью. Недавно, некоторые из таких расчетов были обновлены с введением гибридных функционалов, которые используют так называемую «подмешку» точного и локального обмена, дающие значения ширины запрещенной зоны близкие к экспериментальным и обеспечивая более надежные результаты. По последним гибридным расчетам с примесью элементов V группы [8-12] показано, что акцепторные уровни лежат гораздо глубже, чем это было показано из предыдущих вычислениях. Таким образом, расчеты с использованием гибридных функционалов дают предположение, что примеси V группы не являются хорошими кандидатами для достижения р-типа проводимости. С другой стороны, эти расчеты были проведены с различными приближениями и некоторые из возможных примесных дефектов не рассматривались, что не дает сделать однозначный вывод о влиянии на электронные свойства примесей V группы. Чтобы восполнить этот пробел, в этой работе, мы рассмотрим систему ZnO, легированную примесями N, P, и Sb, расположенные в наиболее подходящих конфигурациях, на основе гибридных функционалов. Как будет показано ниже, получение хорошего акцепторного уровня с такими примесями маловероятно. Кроме этого, мы обсудим возможность формирования комплексных, сложных дефектов в легированном образце.

Модели и детали расчетов

Для решения поставленной задачи были выполнены *ab initio* расчеты в приближении линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО) с использованием нелокального обменно-корреляционного функционала Пердю-Бюрке-Эрнзерхофа (PBE0) [13]. Все расчеты выполнены в программе *Crystal2009* [14]. Для описания атомных орбиталей атомов кристалла ZnO были выбраны полноэлектронные базисные наборы функций типа Гаусса, для атома O и Zn из [15], а для атомов примесей P, N, и Sb из [16], [17], [18], соответственно. В расчетах самосогласования (SCF) для кулоновских и обменных интегралов были выбраны следующие пределы точности 10⁻⁷, 10⁻⁷, 10⁻⁷, 10⁻⁷, 10⁻¹⁴. Эффективные заряды атомов на чистой поверхности и с примесью водорода были рассчитаны с помощью анализа заселенности Малликена [19]. Интегрирование зоны Бриллюэна в обратном пространстве кристаллической решетки из 72 атомов выполнено с численной сеткой Пэка-Монхорста – 2×2×2.

Вначале были рассчитаны основные параметры кристаллической структуры идеальной примитивной ячейки, которые показаны в таблице 1 вместе с аналогичными расчетными и экспериментальными данными. Полученные параметры решетки немного переоценены в сравнении с экспериментальными данными (≈ 1%). Для значения ширины

запрещенной зоны ошибка составила $\approx 3.6\%$, которая значительно меньше, чем в предыдущих GGA расчетах $\approx 21\%$ (0.74 эВ [8]). Анализ распределения заряда показал, что в химической связи между ионами Zn и O имеется высокий ковалентный вклад ($\pm 1e$).

Таблица 1. Параметры решетки – a , c ; $q(\text{Zn})$, $q(\text{O})$ – эффективные заряды на ионах Zn и O; и E_g – ширина запрещенной зоны.

Параметр	PBE0 (данная работа)	V3LYP [20]	Эксперимент [21]
a , Å	3.274	3.278	3.242
c , Å	5.267	5.287	5.187
E_g , эВ	3.57	3.38	3.44

В нашем моделировании, мы рассмотрели дефекты замещения X_{O} и X_{Zn} (рисунок 1, X = N, P, As, Sb), которые были определены в предыдущих исследованиях как перспективные для р-типа легирования и, как было показано, хорошо связываются с кристаллической структурой ZnO [7].

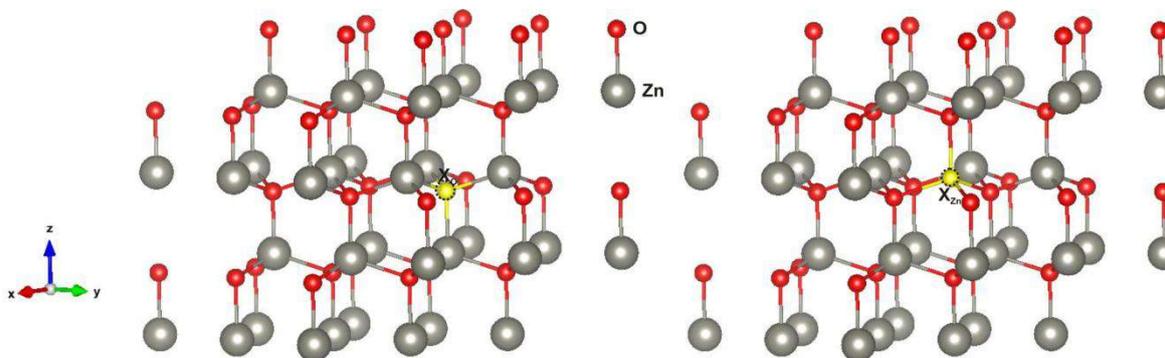


Рисунок 1. Модели 72-атомной суперячейки ZnO с дефектом замещения $X_{\text{O}(\text{Zn})}$

Одним из важнейших количественных характеристик в квантовой физике твердого тела и квантовой химии кристаллов является энергия образования дефекта. Энергия образования не является некоей постоянной величиной; она зависит от условий выращивания кристалла и его отжига. Например, энергия образования вакансии кислорода определяется относительно стехиометрии (обилия) атомов Zn или O, которая выражается через химические потенциалы соответствующих атомов Zn и O – μ_{Zn} , μ_{O} . Если вакансия заряжена, то энергия образования также зависит от энергии Ферми (E_F), т.е. уровня электронной энергии.

Энергия образования атома примесного дефекта D в зарядовом состоянии q определяется следующим образом:

$$E_f(D, q) = E_{\text{tot}}(D, q) - E(\text{bulk}) - \sum n_i \mu_i + q(\varepsilon_v + E_F + \Delta V) + \Delta E_{\text{el}}(q), \quad (1)$$

где $E_{\text{tot}}(D, q)$ – полная энергия суперячейки ZnO с дефектом; $E_{\text{tot}}(\text{bulk})$ – полная энергия чистой суперячейки ZnO; n_i – количество атомов примеси i -го сорта; μ_i – химический потенциал примеси i -го сорта, который ограничен условиями роста кристалла; ε_v – энергия вершины валентной зоны; E_F – энергия Ферми; ΔV – потенциал выравнивания [22]. Электростатическая коррекция $\Delta E_{\text{el}}(q)$ рассчитана как монополю Маделунга [23] в обобщенном виде, когда диэлектрическая константа ϵ заменяется на тензор $\bar{\epsilon}$ [24]. В случае ZnO, $\bar{\epsilon} = \text{diag}(\epsilon_{\perp}, \epsilon_{\perp}, \epsilon_{\parallel})$, где $\epsilon_{\perp} = 7.77$, $\epsilon_{\parallel} = 8.91$. В частности, условие повышенного потенциала атомов кислорода соответствует $\mu_{\text{Zn}} = \mu_{\text{Zn}}^0 + \Delta H_f$ и $\mu_{\text{O}} = \mu_{\text{O}_2}/2$, а повышенного потенциала атомов цинка $\mu_{\text{Zn}} = \mu_{\text{Zn}}^0$ и $\mu_{\text{O}} = \frac{\mu_{\text{O}_2}}{2} + \Delta H_f$ (здесь энтальпия образования ZnO $\Delta H_f = -2.96$ эВ).

Результаты и их анализ

Для того чтобы проанализировать относительную стабильность различных видов дефектов и их зарядно-переходных уровней, мы привели расчеты энергий образования E_f как функции от энергии Ферми E_F на рисунке 1 и 2. Формально установлено рассмотрение простых замещающих дефектов в условиях повышенного химического потенциала атомов Zn, а для сложных (комплексных) дефектов в условиях повышенного химического потенциала атомов O. Очевидно, что в большинстве случаев одни и те же дефекты качественно ведут себя одинаково, подобное качественное согласие наблюдается и для P, As и Sb. Таким образом, мы проанализировали каждый вид дефекта. Замещающий дефект X_O является одиночным акцептором за счет недостающего электрона в V группе элементов по сравнению с кислородом. Со структурной точки зрения при использовании гибридных функционалов, положительный заряд (дырка), присутствующая в нейтральном состоянии (положительный заряд скомпенсирован), локализована на одной из четырех химических связей и модулирует несимметричную конфигурацию. Было показано, что дефект N_O с дыркой, локализованной параллельно оси c ($N_{O\parallel}$), является наиболее стабильной конфигурацией и дает хорошее согласие с данными электронно-парамагнитного резонанса (ЭПР) [10,11].

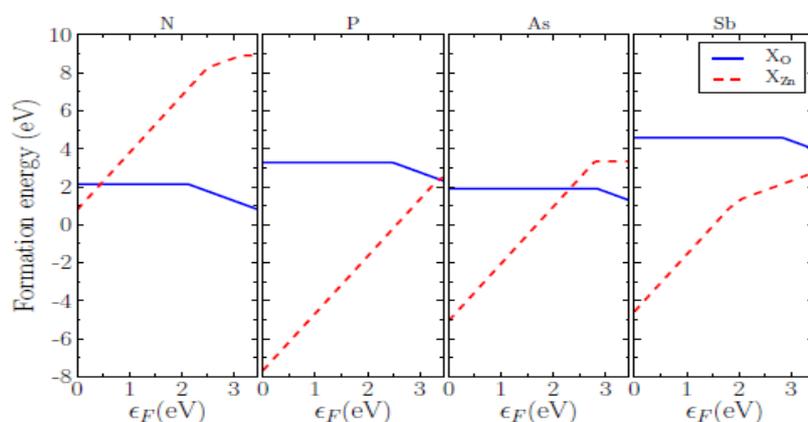


Рисунок 1. Энергия образования дефекта замещения $X_{O(ZN)}$ как функция энергии Ферми при повышенном потенциале атомов Zn. Повышенный потенциал атомов Zn выбран для стабилизации замещения кислорода. Энергия Ферми установлена на вершине валентной зоны.

Наши расчеты подтверждают эти результаты: $N_{O\parallel}$ имеет на 45 мэВ меньшую энергию, чем конфигурация $N_{O\perp}$, подтверждая способность гибридных функционалов правильно описывать такого рода дефекты. Для P_O , As_O и Sb_O мы нашли ту же тенденцию локализации дырки, правда с противоположной разницей, что конфигурация $X_{O\parallel}$ в данных случаях нестабильна, а наоборот наблюдаются только конфигураций типа $X_{O\perp}$ с гораздо меньшей симметрией длин связей. Дефекты такого рода имеют стабильный отрицательный заряд и не могут быть хорошими источниками положительного заряда. Действительно, за исключением N_O , все они имеют довольно высокую энергию образования по сравнению с другими видами, даже в условиях высокого химического потенциала Zn, особенно если уровень Ферми близок к вершине валентной зоны. Даже если такие дефекты могут быть стабилизированы, термический зарядно-переходный уровень $\epsilon(0/-)$ составляет 2.10 эВ, 2.58 эВ, 2.92 эВ и 3.37 эВ для N, P, As и Sb, соответственно, что делает их чрезвычайно глубокими акцепторами. Этого достаточно, чтобы игнорировать конфигурации X_O , как возможный источник p-типа легирования.

При замене атомов Zn, рассмотренные выше элементы V группы представляют тройные донорные примеси. Согласно нашим результатам, P и Sb находятся в положительно заряженном состоянии при всех значениях E_F что делает их хорошими донорами; это согласуется с некоторыми экспериментальными результатами [25], в то время как N и As

имеют довольно глубокие энергии перехода $\varepsilon(0/+)=0.39$ эВ и $\varepsilon(0/3+)$ 0.73 эВ от дна зоны проводимости, соответственно. Однако стоит отметить, что когда E_F близка к максимуму валентной зоны, X_{Zn}^{3+} имеют очень малую энергию образования и, следовательно, способствуют компенсированию акцепторных примесей.

Также, в этом случае, из-за меньшего радиуса атома, N_O имеет отличающуюся структуру по сравнению с P, As и Sb. Для 0 и + зарядовых состояний дефект образует изолированную молекулу NO, в то время как для 2+ и 3+ заряда образуется молекула NO_3 , связанная с одним из соседних атомов Zn. Остальные элементы образуют симметричную конфигурацию после релаксации, за исключением As_{Zn}^0 , где атом As прочно связан только с тремя атомами кислорода.

Выводы

В работе проведены ширококомасштабные *ab-initio* расчеты ZnO, допированного элементами V группы периодической таблицы. Как было показано, ни один из примесных дефектов, замещающих позицию атома кислорода, не является хорошим источником акцепторов, так как практически при всех значениях энергии Ферми зарядно-переходный уровень дефекта лежит глубоко от вершины валентной зоны либо наоборот – проявляет донорные свойства. Результаты наших вычислений качественно подтверждают наблюдаемые экспериментальные результаты.

Список использованных источников

1. Litton C.W., Reynolds D.C., Collins T.C. Zinc Oxide Materials for Electronic and Optoelectronic Device Applications. // John Wiley & Sons. 2011. P. 351 p.
2. Look D.C., Farlow G.C., Reunchan P., Limpijumnong S., Zhang S.B., Nordlund K. Evidence for Native-Defect Donors in n-Type ZnO // Phys. Rev. Lett. 2005. Vol.95. № 22. P. 1133-1136.
3. Ozgur U., Alivov YI., Liu C., Teke A., Reshchikov M.A., Dogan S., Avrutin V., Cho S-J., Morkoc H. A. Comprehensive review of ZnO materials and devices // J. Appl. Phys. 2005. Vol.98. № 4. P. 041301-041404.
4. Ogale S.B. Thin Films and Heterostructures for Oxide Electronics. – New York: Springer, 2005, 368 p.
5. Nickel N.H., Terukov E. Zinc Oxide-A Material for Micro- and Optoelectronic Applications. – Netherlands: Springer, 2005, 305 p.
6. Dulub O., Boatner L.A., Diebold U. STM study of the geometric and electronic structure of ZnO(001)-Zn, (00-1)-O, (100), and (110) surfaces // Surf. Science. 2002. Vol. 519. № 4. P. 201-217.
7. Kogure T., Bando Y. Bonds and Bands in Semiconductors // J. Electron Microsc. 1993. Vol. 47. № 5. P.7903-7906.
8. Ashrafi A.B.M.A., Ueta A., Avramescu A., Kumano H., Suemune I., Ok Y.W., Seong T.Y., Growth and characterization of hypothetical zinc-blende ZnO films on GaAs(001) substrates with ZnS buffer layers // Appl. Phys. Lett. 2000. Vol.76. № 5. P. 550-552.
9. Kim S.K., Seong S.Y., Cho C.R. Structural reconstruction of hexagonal to cubic ZnO films on Pt/Ti/SiO₂/Si substrate by annealing // Appl. Phys. Lett. 2003. Vol.82. № 4. P. 562-564.
10. Bates C.H., White W.B., Roy R. A phase behavior of simple compounds. – Science, 1962, 993 p.
11. Phillips J.C. Bonds and Bands in Semiconductors. – New York: Academic, 1973, 288 p.
12. Lide D.R. (Ed.). CRC Handbook of Chemistry and Physics. – New York: CRC Press, 1992, 285 p.
13. Duke C.B., Meyer R.J., Paton A., Mark P. Calculation of low-energy-electron-diffraction intensities from ZnO (10 $\bar{1}$ 0). II. Influence of calculation procedure, model potential, and second-layer structural distortions // Phys. Rev. B. 1978. Vol. 18. № 8. P. 4225-4240.
14. Gopel W., Pollmann J., Ivanov I., Reihl B. Angle-resolved photoemission from polar and nonpolar zinc oxide surfaces // Phys. Rev. B.-1982. Vol. 26. № 6. P. 3144-3150.

15. Jedrecy N., Gallini S., Sauvage-Simkin M., Pinchaux R. The ZnO non-polar (10 $\bar{1}0$) surface: an X-ray structural investigation // Surf. Science. 2000. Vol. 460. № 1. P.136-143.
16. Parker T.M., Condon N.G., Lindsay R., Leible F.M., Thornton G. Imaging the polar (00-1) and non-polar (100) surfaces of ZnO with STM // Surf. Science. 1998. Vol. 415. № 3. P. L1046- L1050.
17. Wang Y.R., Duke C.B. The electronic structure investigation of bulk and (10-10) surface // Surf. Science. 1987. Vol. 192. № 3. P. 309-312.
18. Ivanov I., Pollmann J. Electronic structure of ideal and relaxed surfaces of ZnO: A prototype ionic wurtzite semiconductor and its surface properties // Phys. Rev. B. 1981. Vol. 24. № 12. P. 7275-7296.
19. Whitmore L., Sokol A.A., Catlow C.R.A. Modeling the Growth of ZnO Nanoclusters in water // Surf. Science. 2002. Vol. 498. № 5. P.135-139.
20. Schroer P., Kruger P., Pollmann J. Self-consistent electronic-structure calculations of the (100) surfaces of the wurtzite compounds ZnO and CdS // Phys. Rev. B. 1994. Vol. 49. № 24. P.17092-17101.
21. Jaffe J.E., Harrison N.M., Hess A.C. Ab initio study of ZnO (10 $\bar{1}0$) surface relaxation. // Phys. Rev. 1994. Vol.49. № 16. P.11153-11158.
22. Wander A., Harrison N.M. An ab-initio study of ZnO //Surf. Science. 2000. Vol.457, № 3. P. L342- L348.
23. Filippetti A., Fiorentini V., Cappellini G., Bosin A. Anomalous relaxations and chemical trends at III-V semiconductor nitride nonpolar surfaces // Phys. Rev. B. 1999. Vol.59. P. 8026-8031.
24. Diebold U., Koplitz L.V., Dulub O. Atomic-scale properties of low-index ZnO surfaces // Applied Surface Science. 2004. Vol. 237. P.336-342.
25. Wander A., Harrison N.M. An ab-initio study of ZnO (11 $\bar{2}0$) // Surf. Science. 2000. Vol. 468. № 1. P. L851-L855.

УДК 621. 82

СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЕ АБРАЗИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Толеубай Гүлназ Қуанышқызы

Студентка 1 курса международной кафедры ядерной физики, новых материалов и технологий ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Научный руководитель-М. Мырзахмет

Шлифовка и доводка поверхностей осуществляется с помощью абразивных материалов, из которых производятся разнообразные абразивные изделия: наждачная бумага и ткань, шлифовальные и правочные бруски, керамические и вулканические головки и т. д. Качество абразивных материалов влияет на конечный результат выпускаемых производством изделий, поэтому контроль процесса изготовления и качества получаемых абразивных материалов является очень важным для современных производств.

Для оценки зернистости абразивных материалов применяют исключительно ручные методы, которые позволяют исследовать абразивные зерна только в несвязанном состоянии, но при этом оценить качество зерен, нанесенных на подложку они не могут, поэтому задача автоматизации оценки абразивной поверхности является актуальной.

Абразив –это зерна, классифицированные на узкие размерные фракции, которые используются для полировки, дальнейшего измельчения, изготовления жесткого и эластичного абразивного инструмента.