

СОЗДАНИЕ МОНОФАЗНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ $ZnSeO_3$ С ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ГРУППОЙ $Pnma$

Сарсехан Гүлназ Галымқызы

gulnaz_sarsekhan@mail.ru

Докторант I курса международной кафедры Ядерной физики и новых материалов и Технологий, ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан
Научные руководители – А.Б. Усеинов, А.Д. Акылбекова

Синтез, характеристики и применение нанопроводов, наностержней, нанотрубок и нанопленок (также часто называемых одномерными наноструктурами) являются важными областями современных исследований в области нанотехнологий [1]. Одномерные наноструктурные материалы очень привлекательны благодаря своим электронным и оптическим свойствам, зависящим от их размера [2]. Исследование кристаллитов нанометрового размера дает возможность наблюдать эволюцию свойств материала с увеличением размера [3,4]. Благодаря эффектам квантового удержания полупроводниковые наночастицы проявляют физические и химические свойства, значительно отличающиеся от свойств отдельных молекул или объемных частиц [5]. Было разработано множество методов изготовления наночастиц, начиная от литографических методов и заканчивая химическими методами. В этой работе используется метод темплэйтного синтеза, называемый синтезом шаблонов, для получения мембран, используемых из различных микро- и наноматериалов [8,9]. Целью данной работы является получение наноструктур $ZnSeO_3$ путём химического осаждения в трековый темплэйт $a-SiO_2/Si-n$.

Экспериментальная часть

Структуры SiO_2/Si , облучались ионами Хе с энергией 200 МэВ до флюенса 10^8 ионов/ cm^2 с последующим химическим травлением в 4% водном растворе HF, в состав травителя входил $m(Pd)=0,025$ г, время травления 15 минут, температура травления $T=25^\circ C$. Контроль за формой и размерами нанопор осуществлялся временем травления. В настоящем эксперименте нанопоры имели диаметры от 699 нм до 779 нм. Форма наноканалов была в виде усеченного конуса.

Химическое травление n и p-типа проводили в течение 20 мин вытяжном шкафу в 4 % водном фтороводородном растворе, в состав травителя входил палладий массой $m=0,025$ г, температура травления $T=25^\circ C$. Перед травлением треков проводилась ультразвуковая очистка поверхности образцов в изопропанол в течение 15 минут в ультразвуковом очистителе 6.SB25-12DTS. После обработки образцы промывались в деионизованной воде (18,2 МОм). Для химического осаждения использовался следующий состав: $ZnCl_2 - 3,4$ г/л, $SeO_2 - 0.2$ г/л, время осаждения – 60 мин. Хлорид цинка и диоксид селена растворяли в 100 мл дистиллированной воде с помощью магнитной мешалки. Химическое осаждения n и p – типа проводили в течении 30 мин при температуре $40^\circ C$. После осаждения образцы высушивали при комнатной температуре на воздухе.

На рисунке 1 представлены СЭМ снимки поверхности образцов после химического осаждения. СЭМ исследование показали, метод химического осаждения отлично подходит для выращивания с контролируемой морфологией и высокой степенью упорядоченности. В настоящем эксперименте нанопоры имели диаметры от 699 нм до 779 нм.

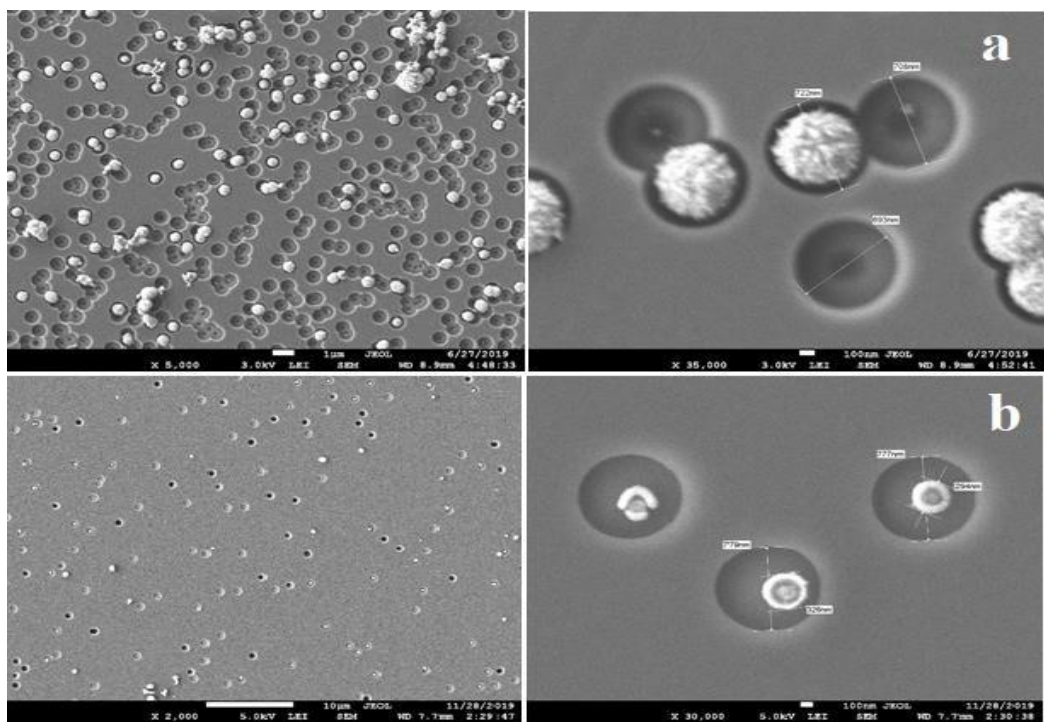


Рисунок 1 - СЭМ-снимки поверхности образцов после осаждения: а) n – типа, $D = 699$ $D = 722$ нм; б) р – типа; $D = 777$ нм, $D = 779$ нм.

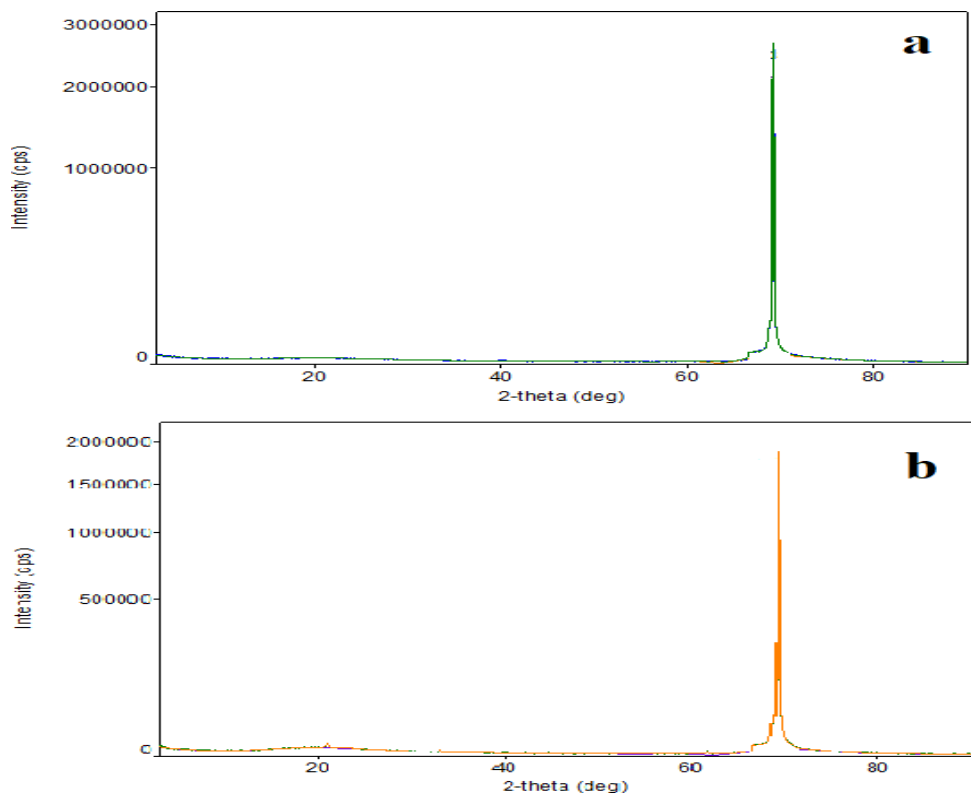


Рисунок 2 - Рентгенограммы полученных образцов $ZnSeO_3$ при химическом осаждении из хлоридного раствора: а) n – типа; б) р - типа. Рентгеноструктурный анализ (РСА) образцов проводили на установке Miniflex 600, X-ray Diffraction (XRD) Analyzer (Rigaku) с использованием рентгеновской трубки с медным анодом в диапазоне углов 2θ 0° - 90° с шагом $0,02$ град.

Параметры съемки: ток катода 15 мА, ускоряющее напряжение 40 кВ, скорость развертки 10 град./мин. РСА образцов, полученных с помощью ХО, показал создание нанокристаллов ZnSeO₃ в орторомбической структуре с пространственной группой Pnma (таблица 1).

Таблица-1 – Результаты рентгеноструктурного анализа полученные при одинаковой температуре для двух образцов ZnSeO₃ выращенных на SiO₂/Si подложке. Всем образцам соответствует орторомбическая структура с пространственной группой симметрии Pnma (62).

№	Фаза	(hkl)	2θ°	d, Å	L, Å	Параметр ячейки, Å	FWHM	Плотность, (g/cm ³)
1	ZnSeO ₃ – n type	242	69.1369	1.357610	61.296623	5.906720 7.753907 5.041927	0.0637	5.584
2	ZnSeO ₃ – p type	242	69.1773	1.356917	42	5.981129 7.704250 4.953133	0.06261	5.584

Рентгеноструктурное исследование образцов установило создание монофазных нанокристаллов ZnSeO₃ с орторомбической кристаллической структурой и пространственной группой Pnma(62).

Заключение

Настоящая работа посвящена синтезу и исследованию нанокристаллов ZnSeO₃ в трековом темплайте SiO₂/Si. В экспериментальной части проведен темплайтный синтез с химическим осаждением с использованием хлорид цинка и диоксид селена. Нанокристаллы ZnSeO₃, полученные методом химического осаждения в трековый темплайт a-SiO₂/Si-n, имеют орторомбическую кристаллическую структуру и пространственной группой Pnma.

Таким образом, впервые были получены нанокристаллы селенита цинка методом химического осаждения в трековый темплайт a-SiO₂/Si-n.

Список использованных источников

1. Sabar D. Hutagalung, Siew T. Eng, Zainal A. Ahmad, Ishak Mat., From zinc selenate to zinc selenide nanostructures synthesized by reduction process // Journal of nuclear and related technologies, 2009, Vol. 6, №1, P. 147-149.
2. Che J., Yao X., Jian H., Wang M., Application and preparation of ZnSe nanometer powder by reduction process // Ceram. International 30, 2004, P. 1935-1938.
3. Hao E., Zhang, H., Yang B., Ren H., Shen J., Preparation of luminescent polyelectrolyte/Cu-doped ZnSe nanoparticle multilayer composite films // J. Colloids Interf. Sci. 238. 2005, P. 285-290.
4. Jiang H., Yao X., Che J., Wang M., Kong F., Preparation of ZnSe quantum dots embedded in SiO₂ thin films by sol-gel process // Ceram. International 30. 2004, P. 1685-1689.
5. Jiao Y., Yu D., Wang Z., Tang K., Sun X., Synthesis, nonlinear optical properties and photoluminescence of ZnSe quantum dots in stable solution // Mater. Lett. 61. 2007, P.1541- 1543.
6. Jun Y. W., Koo J.E., Cheon J., One-step synthesis of size tuned zinc selenide quantum dots via a temperature controlled molecular precursor approach, // Chem. Commun. 14. 2000, P: 1243-1244.
7. Kumaresan, R., Ichimura M., Arai, E., Photochemical deposition of ZnSe polycrystalline thin films and their characterization // Thin Solid Films 414. 2002, P: 25-30.
8. Leppert V. J., Mahamuni, S., Kumbhojkar N. R., Risbud S. H., Structural and optical characteristics of ZnSe nanocrystals synthesized in the presence of a polymer capping agent // Mater. Sci. Eng. B 52. 1998, P. 89-92.
9. Hulteen J.C., Martin C.R., A general template-based method for the preparation of nanomaterials // J. Mater. Chem. 1997, Vol. 7, №7. P. 1075-1087.

10. Shang H., Cao G. Template-based synthesis of nanorod or nanowire arrays // In book: Springer handbook of nanotechnology, 2010, P. 169-186.

ӘӨЖ 29.19.22

ОРТОРОМБИЯЛЫҚ SrRuO₃ КРИСТАЛДЫ ҚҰРЫЛЫМЫ ТУРАЛЫ DFT ФУНКЦИОНАЛДЫҒЫН БАҚЫЛАУ

Сатанова Б.М.¹, Жомартова А.А.²

Clever_s.balzhan@mail.ru

¹Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялархалықаралық кафедрасы докторанты, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

²Өл-Фараби атындағы ҚҰУ 3-курс студенті, Алматы, Қазақстан

Ғылыми жетекшісі – Абуова Ф.У.

SrRuO₃-бұл пайдалы электрлік және магниттік қасиеттері ба, жылу және химиялық тұрақтылығы, атомдық тегістігі үшін жоғары бағаланатын перовскит типті металл ферромагнит тік рутенаты тор беті және функционалдық оксидтердің кең спектрін жақсы сәйке скеледі [1]. Соңғы жылдары SrRuO₃ күрделі оксид гетероструктуралары үшін ең танымал эпитаксиалды электродқа айналды және ол ферроэлектрикте, магнитокалорикте және магнитоэлектрика да қолданылады [2-5]. Сонымен қатар, бұл супер өткізгіштер мен спинтроника қауымдастықтарының назарын аударды[6-8]. Осы үлкен қызығушылықты көрсету,соңғы екі онжылдықта физика, материалтану да SrRuO₃қосымшаларына қатысты 1000-нан астам жұмыс жарияланды [1]. Бірақ, зерттелгеннің бәріне қарамастан, кейбір мәселелер әлі де бар толығымен шешілмеген. Қоршаған орта жағдайында көлемді SrRuO₃ орторомб (P bnm) құрылымында кристалдана ды ал қызған кезде фазалы қауысулар тетрагональға өтеді (820 К-де I4/mkm), содан кейін 950 К текше (Pm3m) жүйелері [9]. Алдыңғы бірнеше теориялық зерттеулерді табуға болады [10-16], онда негізгі күйдің орторомбиялық ұрылымы жергілікті тығыздықты жуықтау (LDA), жалпыланған градиент жуықтауы (GGA), гибридтік функционалдылық және тіпті Lda + U немесе GGA+ U жұмыс шеңберінің бөлігі ретінде тығыздық функциясы теориясын (DFT) есептеу арқылы көбейтіледі. Енді бұл білімнің айқын алшақтығы сияқты, өйткені геометрияны оңтайландырудың маңыздылығы жақында тәжірибелік серпілі сарқылы жаңа деңгейгекөтерілді сыртқы қысымды қолдану арқылы бөлме температурасын да srRuO₃ тетрагональды және оноклиндік фазаларды тұрақтандыру [17], оттегі бос орындарын енгізу [18, 19] және сығымдауды қолдану және созылу кернеулері. Бұл зерттеуде біз Кристалл құрылымын жүйелі түрде зерттедік SrRuO₃ P bnm және нәтижелерді төмен температуралы эксперименттер деректерімен салыстырдық. Теориялы құрғыдан біз Якоб баспалдақтарының үш сатысын енгіздік DFT [33] – бірінші, екінші және төртінші-LDA, GGAs және гибридті қолдану арқылы қатты күйдегі есептеу үшін кеңінен қолданылатын функционалдар. Баспалдақтың үшінші сатысы мета газдарына арналған, олар өз кезегінде кинетикалық энергияның тығыздығын қосымша ретінде қарастырады айнымалы ескерілмеді, өйткені revTPSS сияқты қатты заттарға арналған Мета-газдар[34], көптеген танымал DFT кодтарында әлі де жоқ. Біз бөлді күш санатқа арналған құрылымдық параметрлер, атап айтқанда: (А) тор константалары және көлемі, (б) бұрыштар RuОбішіндегі ішкі бұрыштар мен байланысқа шықтықтары. Бір жағынан, тор константаларымен көлемі өте маңызды екендігі белгілі материалға тән көптеген қасиеттер үшін- фонондардың жиілігі, серпімді тұрақтылар, ферромагнетизм және құрылымдық фазалық ауысулар мүмкіндігі [35, 36] – сондықтан ерекше назар аударуға лайық. Екінші жағынан, бұл октаэдрлік SrRuO₃ жұқа қабықшаларындағы айналу және иілу оларды анықтаудың маңызды факторы болып табылады функционалдық мүмкіндіктер және ықтимал қолдану [19, 23, 25, 28]. Эпицентрлік тұрақтандырылған тетрагональды құрылымдарды октаэдрлік айналусыз, бірақ октаэдрлі қайналуысыз