

დონორული დეფექტების კვლევა თუთიის ოქსიდში სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორიის (DFT) გამოყენებით

თეკლე მაჭარაძე

ელ-ფოსტა: tekle.macharadze1846@ens.tsu.edu.ge

ფიზიკის დეპარტამენტი, ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი
ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტი
ი. ჭავჭავაძის გამზ. 3, თბილისი, 0179, საქართველო

ნახევარგამტარებში წერტილოვანი დეფექტების თეორიული შესწავლისთვის ფართოდ გამოიყენება სიმკვრივის ფუნქციონალის თეორია (DFT), რომელიც მასალის ატომური და ელექტრონული სტრუქტურის საფუძველზე დოპანტების ენერგეტიკული სტაბილურობისა და ელექტრონული ეფექტების ანალიზის საშუალებას იძლევა. ამ ნაშრომში DFT გამოთვლები გამოყენებულია მოცულობით ZnO კრისტალში Ga-ისა და Al-ის ჩამნაცვლებელი მინარევების შესასწავლად. თუთიის ოქსიდს გააჩნია ფართო აკრძალული ზონა, რის გამოც დიდია მისი გამოყენების პერსპექტივები ოპტოელექტრონიკასა და გამჭვირვალე ელექტრონიკაში. მიუხედავად იმისა, რომ ZnO-ში Ga-ისა და Al-ის მინარევების დონორული ყოფაცეცა აშკარაა, DFT საშუალებას იძლევა შეფასდეს მინარევების მუხტური მდგომარეობების სტაბილურობა და თვით მინარევების იონიზაციის ენერგიები. ნაშრომში შესწავლილია ZnO-ის 32-ატომიან კრისტალში GaZn და AlZn ჩამნაცვლებელი მინარევული დეფექტების ნეიტრალური და +1 მუხტური მდგომარეობები სრული ენერგიებისა და ელექტრონული სტრუქტურის გამოთვლების საფუძველზე. შედეგები ადასტურებს, რომ ორივე მინარევი ავლენს დონორულ ყოფაცევას, იონიზებული კონფიგურაციები კი ენერგეტიკულად უფრო ხელსაყრელია და იწვევს ფერმის დონის n -ტიპის დოპირებისთვის დამახასიათებელ გადანაცვლებას. მიღებული შედეგები შეესაბამება ლიტერატურაში ცნობილ DFT-სთვის დამახასიათებელ ცდომილებას. აღნიშნული ცდომილებების შესასწორებლად გამოვიყენეთ ნახევრად ემპირიული მიდგომა და კვანტური შეშფოთების თეორია, რომელმაც ძალიან კარგი შედეგი მოგვცა მინარევული დეფექტების იონიზაციის ენერგიებისთვის. მთლიანობაში, წარმოდგენილი ანალიზი ნათლად წარმოაჩენს DFT გამოთვლების სარგებლიანობას ZnO-ში დონორული ლეგირების ტენდენციების გასაგებად.