

**Дефекты кристаллической структуры оксида индия-олова:
кристаллохимические особенности и их влияние на физические свойства**

Научный руководитель – Марченко Екатерина Игоревна

Кобелева Елена Алексеевна

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии, Москва, Россия

E-mail: dinka.lenooo@gmail.com

Оксид индия-олова (ИТО) является структурным аналогом минерала биксбита и на сегодняшний день наиболее востребован в качестве материала в современной оптоэлектронике благодаря уникальному сочетанию высокой прозрачности в видимом спектре и хорошей электропроводности [1]. Эти свойства делают ИТО незаменимым для применения в сенсорных экранах, солнечных батареях и других устройствах [2,3]. Однако его функциональные характеристики сильно зависят от структурных особенностей, таких как распределение атомов олова (Sn^{2+}) и наличие кислородных вакансий [4]. В связи с этим актуальной задачей является моделирование и кристаллохимический анализ структуры ИТО для понимания влияния допирования на свойства материала.

Целью данной работы стало исследование влияния замещения атомов индия (In^{3+}) на атомы олова (Sn^{2+}) в кристаллической структуре оксида индия (In_2O_3) и сравнение двух подходов к моделированию: полуэмпирического метода с использованием программного пакета GULP и электростатического метода с применением программы Supercell.

По результатам расчетов, атомные конфигурации, в которых атомы Sn^{2+} занимают октаэдрические позиции являются более выгодными по энергии. Это согласуется с экспериментальными данными, показывающими, что такие структуры обладают высокой стабильностью. Внедрение Sn^{2+} в междоузлия кислорода приводит к увеличению деформации кристаллической решетки, что подтверждается расчетами в GULP.

Для интерпретации структуры ИТО в анионоцентрированном аспекте были рассмотрены тетраэдры OIn_4 . Нарушение симметрии этих тетраэдров при замещении In^{3+} на Sn^{2+} подтверждает роль кислородных вакансий в компенсации зарядового дисбаланса и стабилизации структуры.

Источники и литература

- 1) Kim M.G., Kanatzidis M.G., Facchetti A., Marks T.J. Low-temperature fabrication of high-performance metal oxide thin-film electronics via combustion processing. *Nat Mater.* 2011 May;10(5):382-8. doi: 10.1038/nmat3011. Epub 2011 Apr 17. PMID: 21499311.
- 2) Granqvist, C.G., & Hultåker, A. (2002). Transparent and conducting ITO films: new developments and applications. *Thin Solid Films*, 411, 1-5.
- 3) Li, S., Tian, M., Gao, Q., Wang, M., Li, T., Hu, Q., Li, X., & Wu, Y. (2019). Nanometre-thin indium tin oxide for advanced high-performance electronics. *Nature Materials*, 1-7.
- 4) Cho I, Song Y, Cheong S, Kim Y, Cho J. Layer-by-Layer Assembled Oxide Nanoparticle Electrodes with High Transparency, Electrical Conductivity, and Electrochemical Activity by Reducing Organic Linker-Induced Oxygen Vacancies. *Small.* 2020 Feb;16(8):e1906768. doi: 10.1002/smll.201906768. Epub 2020 Jan 22. PMID: 31967718.