

«В ходе выполнения проекта по Соглашению о предоставлении субсидии от 17 июня 2014 г. № 14.604.21.0006 с Минобрнауки России в рамках федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы» на этапе № 2 в период с 01 января по 30 июня 2015 г. выполнялись следующие работы:

1. Разработка математической модели распределения электронов проводимости внутри полупроводниковой металлоксидной наночастицы с учетом присутствия на её поверхности ловушек электронов адсорбированных атомов кислорода в соответствии с п. 3.3 ТЗ.

2. Разработка математической модели влияния температуры на проводимость в системах полупроводниковых металлоксидных наночастиц.

3. Разработка программы расчёта распределения плотности электронов проводимости, плотности положительно заряженных доноров и плотности поверхностных зарядов для различных температур и радиусов наночастицы.

4. Изготовление образцов сенсоров  $\text{In}_2\text{O}_3$  и исследование их структурных характеристик.

5. Проведение маркетинговых исследований.

При этом были получены следующие результаты:

1. Разработана математическая модель распределения электронов проводимости внутри полупроводниковой металлоксидной наночастицы с учетом присутствия на ее поверхности ловушек электронов и адсорбированных атомов кислорода в соответствии с п. 3.3 ТЗ. Развита теория распределения зарядов внутри квазисферической наночастицы полупроводника. Часть электронов захватывается ловушками на поверхности частицы, в результате чего, из-за избытка положительного заряда, внутри наночастицы возникает электрическое поле, приводящее к резко неоднородному распределению положительных и отрицательных зарядов. На основе уравнений, которые получаются при минимизации свободной энергии рассматриваемой системы, последовательно решена задача о пространственном и энергетическом распределении зарядов и потенциала в зависимости от радиуса наночастицы и температуры.

2. Разработана математическая модель влияния температуры на проводимость в системах полупроводниковых металлоксидных наночастиц. Показано, что зависимость проводимости в системе полупроводниковых наночастиц от температуры определяется температурной зависимостью плотности электронов проводимости вблизи поверхности наночастиц.

3. Разработана и выложена в интернете на сайте ИХФ им. Н.Н. Семенова «Программная документация на компьютерную программу расчета электронных свойств полупроводниковых наночастиц», позволяющая проводить расчёт распределения плотности электронов проводимости,

плотности положительно заряженных доноров и плотности поверхностных зарядов для различных температур и радиусов наночастицы

4. Изготовлены образцы сенсоров  $\text{In}_2\text{O}_3$  и исследованы их структурные характеристики. Показано, что средний размер кристаллов, входящих в состав чувствительных полупроводниковых пленок, практически не отличается от размера нанокристаллического порошка, используемого для получения сенсорных пленок, и составляет 50 – 80 нм. Кристаллы  $\text{In}_2\text{O}_3$  относятся к пространственной группе  $I\bar{a}3$  и имеют кубическую структуру с параметром решетки  $a = 10,117 \text{ \AA}$ . Толщина пленок достигает 1 – 2 мкм.

5. Проведено маркетинговое исследование вероятности коммерциализации результатов интеллектуальной деятельности, полученных в данном проекте. Показано, что смешанные металлоксидные сенсоры, разрабатываемые в данном проекте, обладают целым рядом преимуществ и после проведения дополнительных ОКР и ОТР найдут применение в различных областях промышленности.

Комиссия Минобрнауки России признала обязательства по Соглашению на отчетном этапе исполненными надлежащим образом.