

Abstract:

The dynamic development of technology and the growing demand for innovative materials necessitate the search for new, cost-effective, and yet functional solutions. Among the many available compounds, aluminium oxide (Al_2O_3) stands out due to its low cost, availability, and a range of advantageous physicochemical properties, which make it an attractive material for functional applications.

This work addresses the fabrication and characterisation of thin aluminium oxide films obtained by the sol–gel method. The main objective of the research was to optimise the technological process and determine the impact of structural and chemical defects on the electronic and chemical properties of thin alumina films.

Complementary experimental and theoretical techniques were applied in the study. The electronic structure and surface chemical properties were analysed using photoemission spectroscopy in the X-ray (XPS) and ultraviolet (UPS) ranges. Surface topography was examined by atomic force microscopy (AFM). The experimental investigations were supported by quantum chemistry calculations based on density functional theory (DFT), which allowed the confirmation of additional defect levels and a more accurate assignment of components in the valence band.

The conducted studies demonstrated that sol-gel process parameters, i.g, such as annealing temperature, spin-rate, and water content in the sol, significantly affect the physicochemical properties, surface grain size, and the formation of defect levels within the band gap or near the valence band edge, showing high consistency with DFT data.

The obtained results prove that the sol–gel method enables the fabrication of controllable and repeatable sol-gel technology of thin alumina films. By selecting the appropriate technological parameters, it is possible to design materials with precisely tailored properties.

Streszczenie:

Dynamiczny rozwój technologii oraz rosnące zapotrzebowanie na innowacyjne materiały wymuszają poszukiwanie nowych, ekonomicznych, a zarazem funkcjonalnych rozwiązań. Spośród wielu dostępnych związków, tlenek glinu (Al_2O_3) wyróżnia się niskim kosztem, dostępnością oraz szeregiem korzystnych cech fizykochemicznych, co czyni go interesującym materiałem dla zastosowań funkcjonalnych.

W pracy podjęto problematykę wytwarzania oraz charakterystyki cienkich warstw tlenku glinu otrzymywanych metodą zolowo-żelową. Głównym celem badań była optymalizacja procesu technologicznego oraz określenie wpływu defektów strukturalnych i chemicznych na właściwości elektronowe oraz chemiczne cienkich warstw tlenku glinu.

W realizacji badań wykorzystano komplementarne techniki eksperymentalne i teoretyczne. Strukturę elektronową i właściwości chemiczne powierzchni analizowano za pomocą spektroskopii fotoemisyjnej w zakresie promieniowania rentgenowskiego (XPS) oraz ultrafioletowego (UPS). Topografię badano za pomocą mikroskopii sił atomowych (AFM). W badaniach wspierano się obliczeniami opartymi na metodach chemii kwantowej – teorii funkcjonału gęstości (DFT), które pozwoliły potwierdzić obecność dodatkowych poziomów defektowych oraz precyzyjnie przypisać komponenty w paśmie walencyjnym.

Przeprowadzone badania wykazały, że parametry procesu zolowo-żelowego – takie jak temperatura wygrzewania, częstotliwość obrotów w technice rozwirowania (spin-coatingu) czy zawartość wody w zolu mają istotny wpływ na zmianę właściwości fizykochemicznych, stopień uziarnienia powierzchni, a także tworzenia się poziomów defektowych w przerwie energetycznej lub przy krawędzi pasma walencyjnego, przy wysokiej zgodności z danymi DFT.

Uzyskane wyniki dowodzą, że proces zolowo-żelowy pozwala otrzymać sterowalną i powtarzalną technologię zolowo-żelową cienkich warstw tlenku glinu. Poprzez dobór odpowiednich parametrów technologicznych można projektować materiały o precyzyjnie zadanych właściwościach.