

УДК 539.21

## СТРУКТУРА ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОКЛАСТЕРІВ ОКСИДУ ЦИНКУ (ZnO)<sub>n</sub>, (n=96, 120), ЛЕГОВАНИХ РІЗНИМИ МЕТАЛАМИ

**Ростислав Бовгира**

*Інститут прикладних проблем механіки і математики  
ім. Я.С. Підстригача НАН України*

bovhyra@gmail.com

Розраховано з перших принципів методом теорії функціонала електронної густини енергетичного спектру та параметрів основного стану нанокластерів (ZnO)<sub>n</sub> (n = 96, 120), легованих різними металами. Розрахунки виконано у базисі плоских хвиль з використанням ультрам'яких псевдопотенціалів на основі попередніх досліджень [1]. Для обчислення обмінно-кореляційної енергії використано функціонал у наближенні узагальненого градієнта із поправками Габбарда (GGA+U) в параметризації Пердью, Бурке, Ернценхофа (PBE). Оптимізація структури нанокластерів проводилась методом спряжених градієнтів, в процесі оптимізації структури не використовувалося обмеження симетрії.

Вплив легування металічними домішками на властивості визначався для найбільш стабільної структури нанокластерів – содаліт-подібних «магічних» нанокластерів (ZnO)<sub>96</sub> і (ZnO)<sub>120</sub>. Під час розрахунків розглядалися дві конфігурації: а) легуючий атом металу M = Co, Cu, Ni заміщає атом Zn у структурі; б) легуючий атом металу M = Co, Cu, Ni заміщає атом O в структурі. Заміщення одного атома Zn або O одним атомом легуючого металу еквівалентно концентрації домішок 1,04 ат.% для нанокластера (ZnO)<sub>96</sub> і 0,83 ат.% для нанокластера (ZnO)<sub>120</sub>. На рис. 1 наведено оптимізовані структури обох нанокластерних систем з легованими атомами.

Для визначення впливу легування на електронні та оптичні властивості оксиду цинку розраховано зміну зонної структури нанокластерів (ZnO)<sub>n</sub>, (n = 96, 120) з домішками атомів Co, Cu, Ni. Встановлено, що для всіх легованих систем, фундаментальна ширина забороненої зони зменшується зі збільшенням концентрації легуючої домішки. У випадку наносистем, легованих кобальтом, виявлено, що леговані стани створюють енергетичний бар'єр всередині зони провідності (3,2–3,6 eV), який може сприяти синьому зсуву енергетичної щілини. Для нанокластерів ZnO, легованих Cu, легування збільшило кількість основних носіїв заряду поблизу дна зони провідності.

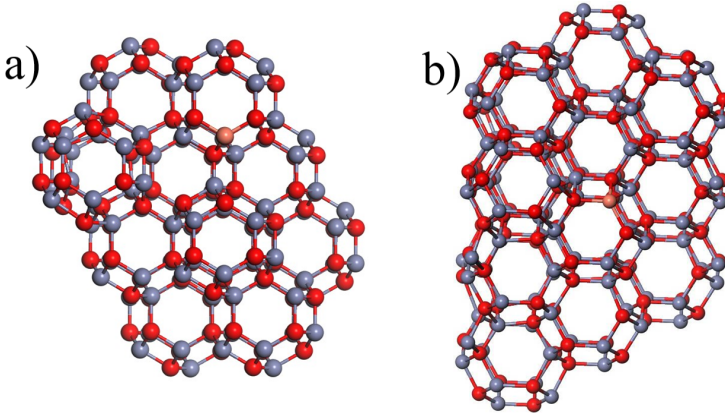


Рис. 1 Оптимізовані структури нанокластерів  $(\text{ZnO})_{96}$  (a) та  $(\text{ZnO})_{120}$  (b). Сірі кулі – атоми цинку, червоні – атоми кисню, світло-коричневі – атоми легуючої домішки

Нанокластери  $\text{ZnO}$ , леговані  $\text{Ni}$ , мають тенденцію до консолідації в областях вищої енергії, що може сприяти покращенню оптичних властивостей наноструктур  $\text{ZnO}$ . Усі легуючі атоми збільшують кількість основних носіїв заряду в системі, що може бути корисним для підвищення газочутливих властивостей наноструктур  $\text{ZnO}$ .

1. *Bovgyra R.V., Popovych D.I., Bovhyra O.V., Serednytski A.S.* Ab initio study of structural and electronic properties of  $(\text{ZnO})_n$  "magical" nanoclusters,  $n = (34, 60)$  // *Nanoscale Research Letters*. – 2017. – **12**. – A. 76.

#### STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF ZINC OXIDE $(\text{ZnO})_N$ ( $N = 96, 120$ ) NANOCCLUSERS DOPED WITH DIFFERENT METALS

*We investigated the structural and electronic properties of  $(\text{ZnO})_n$  ( $n = 96, 120$ ) nanoclusters doped with different metals in various configurations using the density functional theory method. Structure geometry optimizations (relaxation) and band structure research were carried out. We discovered that the fundamental band gap decreases with increasing doping concentration in all doped systems. In the case of Co-doped nanosystems, we discovered that the doping states create an energy barrier inside the conduction band (3,2 to 3,6 eV), which can contribute to the energy gap's blue shift. Doping increased the number of conductive carriers near the bottom of the conduction band in Cu-doped ZnO nanoclusters. Ni-doped ZnO nanoclusters tend to congregate in higher energy regions, which can help to improve the optical properties of ZnO nanostructures. All of the doping atoms increase the number of charge carriers in the system, which can improve the ZnO nanostructure's gas-sensing properties.*