Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2025», 27–29 травня 2025 р., Львів

УДК 539.3

ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРИ ТА ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОКЛАСТЕРІВ β-Ga_2O_3 ЛЕГОВАНИХ МЕТАЛІЧНИМИ ДОМІШКАМИ МЕТОДОМ ТЕОРІЇ ФУНКЦІОНАЛУ ЕЛЕКТРОННОЇ ГУСТИНИ

Ростислав Бовгира

ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України, bovhyra@gmail.com

Проведено розрахунки, з перших принципів, методом теорії функціонала електронної густини енергетичного спектру та параметрів основного стану нанокластерів β-Ga_2O_3 легованих різними металами (Co, Cu, Ni). Розрахунки проводилися з використанням ультрам'яких псевдопотенціалів в базисі плоских хвиль, на основі попередніх досліджень напівпровідників [1]. Для обчислення обмінно-кореляційної енергії використано функціонал у наближенні узагальненого градієнта із поправками Габбарда (GGA+U) в параметризації Пердью, Бурке, Ернценхофа (PBE). Для сильно корельованих матеріалів, таких як Ga_2O_3, функціонал GGA (PBE) значно недооцінює ширину забороненої зони. Для точного опису електронного спектру для досліджуваних систем було обрано три поправки Хаббарда: для d-орбіталей Ga (Ud_1), d-орбіталей легуючих металів M (Ud_2) та p-орбіталей O (Up). Остовні електрони були описані з використанням ефективного потенціалу з урахуванням релятивістських поправок. Інтегрування в першій зоні Бріллюена було проведено в наборі k-точок Монкхорста-Пака. Оптимізація структури нанокластерів проводилась методом спряжених градієнтів, в процесі оптимізації структури не використовувалося обмеження симетрії.

Було проведено оптимізацію геометрії та енергетичні розрахунки для ряду ізомерів нанокластерів β-Ga_2O_3 у конфігурації, де атоми Ga були заміщені атомами легуючої домішки (Co, Cu, Ni). Після процедури релаксації спостерігалися зміни в структурній геометрії всіх досліджуваних наносистем. Оптимізовані структури нанокластерів $(\beta\text{-}Ga_2O_3)_6$ у різних конфігураціях зображені на рисунку 1 зліва. Для визначення впливу легування на електронні та оптичні властивості нанокластерів β-Ga_2O_3 було розраховано зміну зонної структури нанокластерів $(Ga_2O_3)_6$ легованих домішками атомів Co, Cu та Ni. Для кожного нанокластера було проаналізовано розраховану зонну структуру та парціальні густини станів.

Встановлено, що для всіх легованих систем фундаментальна ширина забороненої зони зменшується зі збільшенням концентрації легуючої домішки. У випадку наносистем легованих Co було встановлено, що легуючі стани створюють енергетичний бар'єр всередині зони провідності, який може сприяти зсуву енергетичної щілини у блакитну зону. Для нанокластерів $(Ga_2O_3)_6$, легованих Cu, легування збільшило кількість провідних носіїв заряду поблизу дна зони провідності. Нанокластери $(Ga_2O_3)_6$, леговані Ni, мають тенденцію до консолідації домішкових рівнів в областях вищих енергій, що може сприяти покращенню оптичних властивостей наноструктур $(Ga_2O_3)_6$. Всі легуючі атоми збільшують кількість носіїв заряду в системі, що може бути корисним для покращення газочутливих властивостей нанокластерів $(Ga_2O_3)_6$.

1. *R.V.Bovhyra, O.V.Bovgyra, D.I.Popovych, A.S.Serednytski, Kh.I.Serednytska, M.V.Kovalenko* First principle study of structure and electronic properties of $(ZnO)_n$ (n = 96, 120) nanoclusters // Journal of Physical Studies**.** – 2025. – 29, №1. – P.1702(8).

STUDY OF THE STRUCTURE AND ELECTRONIC PROPERTIES OF β-Ga_2O_3 NANOCLUSTERS DOPED WITH METAL IMPURITIES USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

The results of first principle density functional theory studies of energy spectrum and ground state parameters of β-Ga_2O_3 nanoclusters, doped with different metals (Co, Cu, Ni) are presented. Calculations were performed using ultrasoft pseudopotentials in the basis of plane waves. Optimization of the nanocluster structure was performed using conjugate gradient method. No symmetry restrictions were used during structure optimization. We determined for all doped systems that the fundamental band gap decreases with increased doping concentration. In the case of Co- doped nanosystems we established that the doping states create an energy barrier inside the conduction band that can contribute to the blue shift of the energy gap. For the Cu-doped $(Ga_2O_3)_6$ nanoclusters the doping increased the number of conductive carriers near the bottom of conduction band. The Ni-doped $(Ga_2O_3)_6$ nanoclusters have the tendency to cconsolidate in the higher energy regions, which can contribute to improving of the optical properties of the $(Ga_2O_3)_6$ nanostructures. All of the doping atoms increase the number of charge carriers in the system which can be useful for increasing the gas sensing properties of the $(Ga_2O_3)_6$ nanostructures.