

ДОСЛІДЖЕННЯ З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОКЛАСТЕРІВ β - Ga_2O_3 ЛЕГОВАНИХ МЕТАЛІЧНИМИ ДОМІШКАМИ ПРИ АДСОРБЦІЇ ГАЗІВ

Ростислав Бовгира

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

Представлено результати розрахунків, з перших принципів, методом теорії функціонала електронної густини процесів адсорбції молекул газів (CO , O_2 , NO_2 , NH_3) на поверхні нанокластерів β - Ga_2O_3 легОВАНИХ різними металами (Co , Cu , Ni). Усі розрахунки, включаючи оптимізацію геометрії структур, енергетичні спектри та адсорбційні характеристики проводились з використанням ультрам'яких псевдопотенціалів в базисі плоских хвиль, на основі попередніх досліджень напівпровідників [1]. Для опису обмінно-кореляційної енергії електронів було використано функціонал у наближенні узагальненого градієнта із поправками Габбарда (GGA+U) в параметризації Пердюю, Бурке, Ернценхофа (PBE). Для точного опису електронного спектру досліджуваних систем було обрано поправку Хаббарда: для: d-орбіталей Ga (Ud_1), d-орбіталей легуючих металів M (Ud_2), p-орбіталей кисню O (Up_1), p-орбіталей азоту N (Up_2) та), p-орбіталей вуглецю C (Up_3). Основні електрони були описані з використанням ефективного потенціалу з урахуванням релятивістських поправок. Інтегрування в першій зоні Бріллюєна було проведено в наборі k-точок Монкхорста-Пака. Оптимізація структури нанокластерів проводилась методом спряжених градієнтів, в процесі оптимізації структури не використовувалося обмеження симетрії.

Оптимізація геометрії структур, розрахунки енергетичних спектрів та адсорбційних властивостей проводились для низки ізомерів нанокластерів β - Ga_2O_3 у конфігурації, де атоми Ga були заміщені атомами легуючої домішки (Co , Cu , Ni), та для різних конфігурацій розташування молекул газів над поверхнею нанокластерів. Після процедури релаксації спостерігалися зміни в структурній геометрії у всіх досліджуваних наноструктурах. Було одержано значення енергій адсорбції для всіх досліджуваних наносистем.

Для молекули CO вищі значення енергій адсорбції спостерігались для систем з домішками Co та Cu . У випадку молекули кисню найнижчі значення енергій адсорбції були отримані для легуючої домішки Cu . У випадку

Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2026», 27–29 травня 2026 р., Львів

молекули NO₂ найбільш енергетично вигідною геометричною конфігурацією була взаємодія обох атомів кисню молекули NO₂ з атомом легуючої домішки. Найвищі значення енергії адсорбції були отримані для молекули NH₃. Отримані значення енергій адсорбції підтверджують підвищення чутливості нанокластерів β-Ga₂O₃ завдяки легуванню металічними домішками.

1. *Bovgyra R.V., Venhryn Yu.I., Serednytski A.S. et al.* First principle study of electronic properties of ZnO nanoclusters with native point defects during gas adsorption. // Applied Nanoscience.-2022.-12, P.983-993.

НАЗВА АНГЛІЙСЬКОЮ МОВОЮ, ЯКЩО ОСНОВНИЙ ТЕКСТ УКРАЇНСЬКОЮ, АБО НАВПАКИ (Times New Roman, Bold, 10)

The results of first principle density functional theory studies of adsorption processes of gas molecules (CO, O₂, NO₂, NH₃) on a surface of β-Ga₂O₃ 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 obtained the values of the adsorption energy of molecules and the band gap of the nanoclusters after the adsorption and established the effect of adsorption on the electronic properties of metal doped nanoclusters as well as confirmed the effect the doping has on the sensitivity of the nanosystems. We determined for all doped systems that the fundamental band gap decreases with increased doping concentration. For CO molecule the strong adsorption was observed for Co- and Cu-doped nanoclusters. In case of the oxygen molecule the lowest adsorption energy values were obtained for Cu-doped nanoclusters. For NO₂, the most energy efficient geometry configuration of adsorption was through the interaction of both oxygen atoms of the NO₂ molecule with the doping atom. The highest adsorption energy values were obtained for the adsorption of the NH₃ molecule.