

ДОСЛІДЖЕННЯ З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ СТРУКТУРИ ТА ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАНОКЛАСТЕРІВ β -Ga₂O₃

Ростислав Бовгира

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

Проведено розрахунки, з перших принципів, методом теорії функціонала електронної густини енергетичного спектру та параметрів основного стану нанокластерів β -Ga₂O₃. Розрахунки були виконані 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 Пердю, Бурке, Ернценхофа (PBE). Оптимізація структури нанокластерів проводилась методом спряжених градієнтів, в процесі оптимізації структури не використовувалося обмеження симетрії.

Для того, щоб визначити найбільш стабільну структуру для нанокластерів β -Ga₂O₃ було досліджено ряд ізомерів, серед них були кільцеподібні структури, ланцюгові структури, порожнисті сфероїди, структури типу «клітка» тощо. Усі досліджувані структури задовільняють умову трансляційної симетрії у досліджуваних атомних системах.

Для встановлення найбільш стабільних ізомерів нанокластерів β -Ga₂O₃ було проаналізовано значення ширини забороненої зони досліджуваних наносистем. Аналіз значень енергії показує, що у випадку нанокластерів β -Ga₂O₃ побудованих із трьох формульних одиниць Ga₂O₃ найбільш енергетично вигідними є кільцеподібні структури (рис. 1в). Підтвердженням високої стабільності цих кластерів є вище значення ширини забороненої зони у порівнянні з іншими досліджуваними ізомерами даного розміру. Зі збільшенням кількості формульних одиниць Ga₂O₃ відбувається зміщення до структур типу двошарового кільця (чотири формульні одиниці Ga₂O₃) (рис. 1г), з подальшим переходом до структур у формі гексагонального ящика (п'ять-шість формульних одиниць Ga₂O₃) (рис. 1д-е).

Таблиця 1. Електронні властивості нанокластерів β -Ga₂O₃

Isomer	E _{total} /Ga ₂ O ₃ , eV	Bond length, Å	E _g , eV
(Ga ₂ O ₃) ₁	-5454.8	1,683-1,973	3,399
(Ga ₂ O ₃) ₂	-11222.6	1,762-2,238	0,643

$(\text{Ga}_2\text{O}_3)_3$	-16835.2	1,810-2,988	4,168
$(\text{Ga}_2\text{O}_3)_4$	-22446,4	1,503-2,979	3,477
$(\text{Ga}_2\text{O}_3)_5$	-28159,8	1,621-2,918	4,273
$(\text{Ga}_2\text{O}_3)_6$	-33872,6	1,576-2,983	3,892

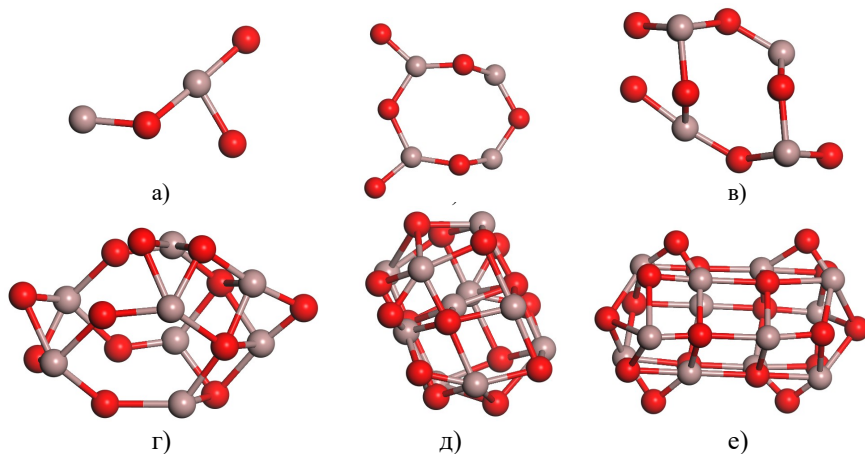


Рисунок 1. Оптимізовані структури найбільш стабільних нанокластерів $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$

1. *Bovhyra 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**, P. 76-82.

AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONICAL PROPERTIES OF $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ NANOCCLUSERS

We present results of ab initio density functional theory studies of energy spectrum and ground stage parameters of small $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ nanoclusters.). Calculations were performed using ultrasoft pseudopotentials in the basis of plane waves. Structure geometry optimizations (relaxation) and band structure research were carried out for a number of isomers. Among them were ring structures, chain structures, sphere structures, all of which satisfy the assumption of the presence of translational symmetry in the studied atomic systems. Analysis of the obtained results for the binding energy shows that for $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ nanoclusters built from three formula units the most energetically favorable are ring-like structures. All such structures have approximately the same binding energy. With increase of formula units in the researched systems the shift to ring structures (four Ga_2O_3 formula units), then to compact hexagonal box structure (five and six Ga_2O_3 formula units) was observed.