

Research Paper

Structural, Electronic, and Optical Properties of Zinc Oxide Nanosheets in the Presence of Cadmium Impurities¹

Razieh Beiranvand²

Received: 2024.10.23

Revised: 2025.02.10

Accepted: 2025.03.01

1. Introduction

Zinc oxide (ZnO) nanosheets, with their wide bandgap of 3.3 eV, are highly sought after for applications in UV light absorption, including LEDs, solar cells, and UV sensors. Their unique structure and electronic properties make them ideal for use in optoelectronics, gas sensors, and photocatalysis. However, to optimize their performance, especially in optoelectronic devices, improving their intrinsic properties like band structure and optical absorption is necessary. One promising method for enhancement is cadmium (Cd) doping, which alters ZnO's crystal structure, electronic states, and optical behavior. This research utilizes Density Functional Theory (DFT) to investigate how Cd impurities affect the structural, electronic, and optical properties of ZnO nanosheets, to optimize ZnO-based materials for various applications, including energy harvesting and sensor technology.

2. Methodology

This study uses Density Functional Theory (DFT) and the WIEN2k code with the full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method to investigate the structural, electronic, and optical properties of pure and Cd-doped ZnO nanosheets. The analysis explores how varying concentrations of Cd doping affect the crystal lattice, bond lengths, and atomic arrangements, as well as the bandgap, magnetic moments, and optical properties like absorption and dielectric functions. By systematically examining the impact of Cd doping at different concentrations, the study aims to determine the optimal doping level for enhancing ZnO's performance in optoelectronic devices, providing insights for experimental research and the development of improved ZnO-based materials.

¹ <https://doi.org/10.22051/ijap.2025.48700.1432>

² Assistant Professor, Department of Basic Sciences, Ayatollah Borujerdi university, Borujerd, Iran.
Email: razieh.beiranvand@gmail.com

<https://jap.alzahra.ac.ir>



3. Results and Discussion

The results from the DFT calculations reveal several significant findings regarding the effects of Cd doping on ZnO nanosheets. First, the incorporation of Cd into the ZnO structure leads to notable changes in the crystal lattice. At lower concentrations of Cd, the lattice remains relatively stable, with only minor distortions. However, as the Cd concentration increases, the lattice undergoes more substantial modifications, which enhance the overall structural stability of the material. These changes are attributed to the ionic radii differences between Zn and Cd, which affect the bond lengths and angles in the lattice.

Furthermore, the presence of Cd impurities significantly impacts the electronic properties of ZnO nanosheets. In particular, the bandgap of the material decreases with increasing Cd concentration. For pure ZnO nanosheets, the calculated bandgap is around 3.3 eV, consistent with experimental values. However, as Cd is incorporated into the structure, the bandgap is reduced, which enhances the material's ability to absorb light in the visible and near-infrared regions. This reduction in the bandgap is beneficial for applications such as solar cells and photodetectors, where a narrower bandgap can lead to better light absorption and enhanced performance.

In addition to the bandgap reduction, the presence of Cd impurities also leads to the formation of new electronic states within the band structure. These new states are located near the Fermi level, and their introduction is thought to contribute to the improvement in the material's optical properties. The study shows that Cd doping leads to enhanced light absorption, particularly in the UV and visible regions, making Cd-doped ZnO nanosheets highly suitable for use in photovoltaic devices and light-emitting diodes (LEDs).

Another significant finding is the increase in the total magnetic moment of the material upon Cd doping. This result is particularly important for potential applications in magnetic and spintronic devices, where the magnetic properties of the material are crucial. The magnetic moment is attributed to the presence of magnetic centers created by the substitution of Zn with Cd, which has a different magnetic behavior. This observation suggests that Cd-doped ZnO nanosheets could be used in devices that require both optoelectronic and magnetic properties, such as spintronic devices and magnetic sensors.

The study also explores the optical properties of ZnO nanosheets, both with and without Cd impurities. The computed dielectric functions, absorption coefficients, and reflection spectra demonstrate that the optical characteristics of ZnO can be significantly tuned by the introduction of Cd. In particular, the absorption coefficient increases with Cd doping, especially in the UV and visible light regions. This enhancement in optical absorption is beneficial for applications in solar cells, where efficient light harvesting is essential.



4. Conclusion

This study highlights the significant impact of cadmium doping on the structural, electronic, and optical properties of ZnO nanosheets. Cd impurities enhance the material's structural stability by modifying the crystal lattice and reducing defects. The decrease in the bandgap and the formation of new electronic states improve light absorption, making the material suitable for optoelectronic applications like solar cells, LEDs, and photodetectors. Additionally, the increase in magnetic moments suggests potential applications in spintronics and magnetic devices. The findings provide a foundation for optimizing ZnO-based materials with tailored properties, and future experimental work will be crucial to validate and refine the doping process for enhanced performance across various applications, from energy harvesting to environmental monitoring.

Keywords: *Zinc Oxide, Nanosheets, Cadmium Impurity, Density Functional Theory, Optical Properties.*

References

- [1] Shanmugam, N., Suthakaran, S., Kannadasan, N. and Sathishkumar, K., "Synthesis and characterization of Te doped ZnO nanosheets for photocatalytic application", *Journal of Heterocyclics*, 105(6736182), 15-20, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhetchem.2015.05.021>
- [2] Yang, J., Wang, Y., Kong, J., Jia, H., and Wang, Z., " Synthesis of ZnO nanosheets via electrodeposition method and their optical properties, growth mechanism", *Optical Materials*, 46, 179-185, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.04.025>
- [3] Al-Hazmi, F., Aal, N.A., Al-Ghamdi, A.A., Alnowaiser, F., Gafer, Z.H., Al-Sehemi, A.G., El-Tantawy, F. and Yakuphanoglu, F., "Facile green synthesis, optical and photocatalytic properties of zinc oxide nanosheets via microwave assisted hydrothermal technique", *Journal of Electroceramics*, 31, 324-330, 2013. <https://doi.org/10.1007/s10832-013-9772-9>
- [4] Othman, A., Osman, M., Ibrahim, E., and Ali, M. A., "Sonochemically synthesized ZnO nanosheets and nanorods: Annealing temperature effects on the structure, and optical properties", *Ceramics International*, 43, 527-533, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.09.183>
- [5] Xie, J., Wang, H., Duan, M., and Zhang, L., "Synthesis and photocatalysis properties of ZnO structures with different morphologies via hydrothermal method", *Applied Surface Science*, 257, 6358-6363, 2011. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2011.01.045>

- [6] Jiang, J., Huang, Z., Tan, S., Li, Y., Wang, G., and Tan, X., "Preparation of ZnO nanosheets by a novel microemulsion-based hydrothermal method", *Materials Chemistry and Physics*, 132, 735-739, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2012.01.025>
- [7] Tsai, J.-K., Meen, T.-H., Wu, T.-C., Lai, Y.-D., and He, Y.-K., "Morphology and optical properties of ZnO microrods grown by high-temperature hydrothermal method", *Microelectronic Engineering*, 148, 55-58, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2015.03.016>
- [8] Ibrahim, K. M., Saleh, W. R., and Al-Sammarraie, A. M., "Structural and optical properties of ZnO nanostructures synthesized by hydrothermal method at different conditions", *Nano Hybrids and Composites*, 35, 75-83, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.nanhyb.2022.03.005>
- [9] Agarwal, S., Jangir, L. K., Rathore, K. S., Kumar, M., and Awasthi, K., "Morphology-dependent structural and optical properties of ZnO nanostructures", *Applied Physics A*, 125, 553, 2019. <https://doi.org/10.1007/s00339-019-2971-x>
- [10] Chen, S., Liu, Y., Shao, C., Mu, R., Lu, Y., Zhang, J., Shen, D., and Fan, X., "Structural and optical properties of uniform ZnO nanosheets", 2005. <https://doi.org/10.1007/s00339-005-3089-5>
- [11] Kang, Y., Yu, F., Zhang, L., Wang, W., Chen, L., and Li, Y., "Review of ZnO-based nanomaterials in gas sensors", *Solid State Ionics*, 360, 115544, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2021.115544>
- [12] Supraja, P., Kumar, R. R., Mishra, S., Haranath, D., Sankar, P. R., Prakash, K., Jayarambabu, N., Rao, T. V., and Kumar, K. U., "A simple and low-cost triboelectric nanogenerator based on two dimensional ZnO nanosheets and its application in portable electronics", *Sensors and Actuators A: Physical*, 335, 113368, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2022.113368>
- [13] Chu, L., Xu, C., Zeng, W., Nie, C., and Hu, Y., "Fabrication and application of different nanostructured ZnO in ultraviolet photodetectors: A review", *IEEE Sensors Journal*, 22, 7451-7462, 2022. <https://doi.org/10.1109/JSEN.2022.3149816>
- [14] Khun, K., Elhag, S., Ibupoto, Z. H., Khranovskyy, V., Nur, O., and Willander, M., "Supramolecules-assisted ZnO nanostructures growth and their UV photodetector application", *Solid State Sciences*, 41, 14-18, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2014.11.004>
- [15] Theerthagiri, J., Salla, S., Senthil, R., Nithyadharseni, P., Madankumar, A., Arunachalam, P., Maiyalagan, T., and Kim, H.-S., "A review on ZnO nanostructured materials: Energy, environmental and biological applications", *Nanotechnology*, 30, 392001, 2019. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab5e1a>
- [16] Gupta, M. K., Lee, J.-H., Lee, K. Y., and Kim, S.-W., "Two-dimensional vanadium-doped ZnO nanosheet-based flexible direct current



- nanogenerator", *ACS Nano*, 7, 8932-8939, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1021/nn4027006>
- [17] Haq, B. U., AlFaify, S., Alrebdi, T. A., Ahmed, R., Al-Qaisi, S., Taib, M., Naz, G., and Zahra, S., "Investigations of optoelectronic properties of novel ZnO monolayers: A first-principles study", *Materials Science and Engineering: B*, 265, 115043, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2020.115043>
- [18] Zheng, F.-b., Zhang, C.-w., Wang, P.-j., and Luan, H.-x., "Tuning the electronic and magnetic properties of carbon-doped ZnO nanosheets: First-principles prediction", *Journal of Applied Physics*, 111, 2012. <https://doi.org/10.1063/1.4725511>
- [19] Zheng, F.-b., Zhang, C.-w., Wang, P.-j., and Luan, H.-x., "First-principles prediction of the electronic and magnetic properties of nitrogen-doped ZnO nanosheets", *Solid State Communications*, 152, 1199-1202, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.02.020>
- [20] Wong, K. Mun, Alay-e-Abbas, S., Shaukat, A., Fang, Y., and Lei, Y., "First-principles investigation of the size-dependent structural stability and electronic properties of O-vacancies at the ZnO polar and non-polar surfaces", *Journal of Applied Physics*, 113, 2013. <https://doi.org/10.1063/1.4794977>
- [21] Zheng, F.-B., Zhang, C.-W., Wang, P.-J., and Luan, H.-X., "The electronic and magnetic properties with intrinsic defects in ZnO nanosheets: First-principles prediction", *Current Applied Physics*, 13, 799-802, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2012.09.013>
- [22] Ozugurlu, E., "Cd-doped ZnO nanoparticles: An experimental and first-principles DFT studies", *Journal of Alloys and Compounds*, 861, 158620, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.158620>
- [23] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G.K., Kvasnicka, D. and Luitz, J., "wien2k", *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties*, 60(1), 2001. ISBN: 3-9501031-1-2
- [24] Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M., "Generalized gradient approximation made simple", *Physical Review Letters*, 77, 3865, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [25] Özgür, Ü., Alivov, Y. I., Liu, C., Teke, A., Reshchikov, M. A., Doğan, S., Avrutin, V., Cho, S.-J., and Morkoç, H., "A comprehensive review of ZnO materials and devices", *Journal of Applied Physics*, 98(4), 2005. <https://doi.org/10.1063/1.1948481>
- [26] Klingshirn, C., "ZnO: Material, physics and applications", *ChemPhysChem*, 8, 782-803, 2007. <https://doi.org/10.1002/cphc.200700106>
- [27] Klingshirn, C., "ZnO: From basics towards applications", *Physica Status Solidi (b)*, 244, 3027-3073, 2007. <https://doi.org/10.1002/pssb.200645191>
- [28] Kochnev, N., Tkachenko, D., Kirsanov, D., Bobrysheva, N., Osmolowsky, M., Voznesenskiy, M., and Osmolovskaya, O., "Regulation

- and prediction of defect-related properties in ZnO nanosheets: Synthesis, morphological and structural parameters, DFT study and QSPR modelling", *Applied Surface Science*, 621, 156828, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.156828>
- [29] Gu, G., Xiang, G., Luo, J., Ren, H., Lan, M., He, D., and Zhang, X., "Magnetism in transition-metal-doped ZnO: A first-principles study", *Journal of Applied Physics*, 112, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4742863>
- [30] Abdel-Baset, T., Fang, Y.-W., Anis, B., Duan, C.-G., and Abdel-Hafiez, M., "Structural and magnetic properties of transition-metal-doped Zn_{1-x}FexO", *Nanoscale Research Letters*, 11, 1-12, 2016. <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1611-7>
- [31] Chen, L., Li, S., Cui, Y., Xiong, Z., Luo, H., and Gao, Y., "Manipulating the electronic and magnetic properties of ZnO monolayer by noble metal adsorption: A first-principles calculations", *Applied Surface Science*, 479, 440-448, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.02.236>
- [32] Coleman, V.A. and Jagadish, C., "Basic properties and applications of ZnO", In *Zinc oxide bulk, thin films and nanostructures*, pp. 1-20. Elsevier Science Ltd, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-008044722-3/50001-4>
- [33] Ambrosch-Draxl, C., and Sofo, J. O., "Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method", *Computer Physics Communications*, 175, 1-14, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005.07.010>
- [34] Zhang, X., Le, M.-Q., Zahhaf, O., Capsal, J.-F., Cottinet, P.-J., and Petit, L., "Enhancing dielectric and piezoelectric properties of micro-ZnO/PDMS composite-based dielectrophoresis", *Materials & Design*, 192, 108783, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2020.108783>



مطالعه ابتدا به ساکن ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی نانوصفحات اکسیدروی در حضور ناخالصی کادمیوم^۱

راضیه بیرانوند^۲

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۸/۰۲

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۱۱/۲۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۲/۱۱

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال پانزدهم، پیاپی ۴۰، بهار ۱۴۰۴

صص ۱۵ - ۳۴

چکیده:

نانوصفحه‌های اکسیدروی (ZnO) به‌عنوان یکی از مواد نیمه‌رسانا با ویژگی‌های منحصر به فرد، در سال‌های کنونی توجه بسیاری را در حوزه‌های مختلف علمی و صنعتی به خود جلب کرده‌اند. این ماده به دلیل شکاف انرژی نسبتاً زیاد (حدود ۳.۳ الکترون‌ولت) و توانایی جذب نور در ناحیه فرابنفش، در دیودهای نوری، حسگرها و سلول‌های خورشیدی به صورت گسترده‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مطالعه، طیف گسترده‌ای از ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی این ماده در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که حضور ناخالصی کادمیوم در نانوصفحات اکسیدروی تأثیرات قابل توجهی بر ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی این ماده دارد. افزودن کادمیوم به ساختار اکسیدروی می‌تواند منجر به تغییرات قابل توجهی در شبکه بلوری و بهبود پایداری ساختاری شود. این تغییرات می‌تواند به کاهش نقص‌های بلوری و افزایش نسبت سطح به حجم منجر شوند، که به نوبه خود تأثیر مثبتی بر روی ویژگی‌های نوری و الکترونی نانوصفحات دارد. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که ناخالصی کادمیوم می‌تواند موجب کاهش شکاف انرژی و افزایش میزان گشتاور مغناطیسی کل ماده شود. این تغییرات می‌تواند حالت‌های الکترونی جدیدی در ساختار نانوصفحه ایجاد کند که به بهبود ویژگی‌های نوری، از جمله جذب و گسیل نور برای کاربرد در ابزارهای فوتوولتائیک کمک می‌کند.

واژگان کلیدی: نظریه تابعی چگالی، ویژگی‌های ساختاری، ویژگی‌های الکترواپتیکی، نانوصفحات اکسیدروی.

^۱ <https://doi.org/10.22051/ijap.2025.48700.1432>

^۲ استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه آیت اله بروجردی (ره)، بروجرد، لرستان، ایران. Email: razieh.beiranvand@gmail.com



۱. مقدمه

اکسید روی یک ترکیب شیمیایی با فرمول ZnO است که به عنوان نیمه رسانایی با ویژگی‌های منحصر به فرد و گسترده، در علوم و صنایع مختلف مورد توجه قرار گرفته است. این ماده در حالت طبیعی به صورت پودری سفید رنگ وجود دارد و در دماهای بالا به عنوان یک بلور شفاف و بی‌رنگ نمایان می‌شود. اکسید روی دارای دو ساختار بلوری اصلی هگزاگونال^۱ و مکعبی^۲ است. ساختار هگزاگونال به ویژه در دماهای پایین پایدارتر است و این ویژگی بر ویژگی‌های الکترونیکی و نوری آن تأثیر بسزایی دارد. این ساختار منجر به ایجاد پیوندهای قوی و استحکام بالای ماده می‌شود [۱-۶]. اکسید روی دارای شکاف انرژی زیاد ۳/۳ الکترون‌ولت است که آن را به یک نیمه رسانای ایده آل در ادوات اپتوالکترونیکی تبدیل می‌کند. ویژگی‌های نوری اکسید روی سبب می‌شوند که این ماده در دماهای مختلف عملکرد بهینه‌ای داشته باشد و به عنوان یک ماده مؤثر در دیودهای نوری، لیزرها و ترانزیستورهای اثر میدان استفاده شود. افزون بر این، اکسید روی به دلیل توانایی بالای خود در جذب و انتشار نور در ناحیه فرابنفش، در تولید حسگرها و سلول‌های خورشیدی کاربرد فراوانی دارد. این ماده به عنوان یک فلورسانس قوی در ناحیه UV عمل کرده و می‌تواند در فناوری‌های نانو و اپتوالکترونیک به کار گرفته شود [۷-۱۰].

اکسید روی در صنایع گوناگونی از جمله تولید رنگ، سرامیک، لاستیک، و حتی در پزشکی به عنوان یک عامل ضدباکتریایی و ضدالتهابی به کار می‌رود. همچنین از آن به عنوان یک ماده کلیدی در فناوری‌های نوین مانند حسگرهای گازی [۱۱]، نانوکامپوزیت‌ها و سامانه‌های انرژی تجدیدپذیر استفاده می‌شود [۱۲-۱۶]. در مجموع، اکسید روی به عنوان یک ماده چندمنظوره با پتانسیل‌های بالا در زمینه‌های مختلف علمی و صنعتی، توجه زیادی را به خود جلب کرده و همچنان در حال پژوهش و توسعه برای کاربردهای جدید و نوآورانه است. این ترکیب، با ویژگی‌های خاص خود، افق‌های جدیدی را در زمینه‌های فناوری و علم باز کرده است.

پژوهشگران نشان داده‌اند که نانوصفحات اکسید روی دارای ساختارهای بلوری منظم و پایداری هستند که به شدت به ضخامت و شرایط سنتز وابسته‌اند. نتایج تجربی نشان می‌دهد که کاهش ضخامت نانوصفحات منجر به افزایش نسبت سطح به حجم و در نتیجه بهبود ویژگی‌های نوری و الکترونی می‌شود. افزون بر نتایج تجربی، کارهای محاسباتی و نظری نیز در درک عمیق‌تر ویژگی‌های نانو ساختارهای اکسید روی دارای اهمیت هستند. به عنوان نمونه، مطالعاتی که با استفاده

¹ Wurtzite

² Zinc Blende



از روش‌های نظری مانند نظریه تابعی چگالی انجام شده‌اند، نشان می‌دهند که نانو صفحه‌های اکسید روی دارای حالت‌های الکترونی ویژه و منحصر به فردی هستند که به دلیل وجود نوارهای انرژی جدید در نانو مقیاس ایجاد می‌شوند. همچنین، بررسی‌های انجام شده بر روی نانوصفحات با نقص‌های ساختاری مختلف نشان داده‌اند که این نقص‌ها می‌توانند تأثیر قابل توجهی بر روی ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی این مواد داشته باشند و منجر به تغییرات قابل توجهی در ویژگی‌های اپتیکی و افزایش بازدهی و بهبود در عملکرد سامانه‌های اپتوالکترونیکی شود [۲۱-۱۷]. در مطالعه‌ای که به تازگی بر روی نانوذرات اکسیدروی انجام شده است، به روش‌های سنتز و ویژگی‌های نانوذرات افزوده شده^۱ با ناخالصی کادمیوم با استفاده از روش سل-ژل پرداخته و غلظت‌های مختلف ناخالصی را مورد ارزیابی قرار داده است. نتایج پراش اشعه ایکس نشان داده است که تمام ساختارها دارای پایداری قابل توجهی هستند. تحلیل‌های SEM و EDS موفقیت در افزودن^۲ کادمیوم را تأیید کردند که کاربرد این ساختارها را در ابزارهای اپتوالکترونیک و فوتوکاتالیست‌ها افزایش می‌دهد [۲۲].

در این پژوهش، مطالعه کاملی بر روی ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی نانوصفحات اکسید روی در حضور و غیاب ناخالصی کادمیوم (Cd) انجام شده است. این محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از کد محاسباتی Wien2k صورت گرفته است [۲۳]. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که حضور ناخالصی کادمیوم در ساختار نانوصفحات اکسیدروی منجر به تغییر در شبکه بلوری و بهبود پایداری ساختار می‌شود. با افزایش غلظت کادمیوم، ساختار بلوری اکسید روی به سمت فازهای پایداری تغییر می‌کند و این ویژگی‌ها به نوبه خود تأثیر مثبتی بر روی ویژگی‌های نوری و الکترونی نانوصفحات دارند. افزون بر این نتایج نشان دهنده آن است که ناخالصی کادمیوم می‌تواند منجر به کاهش شکاف انرژی و ایجاد حالت‌های الکترونی جدید شود که به بهبود ویژگی‌های نوری مانند ضریب جذب کمک می‌کند. نانوصفحات اکسید روی شامل کادمیوم دارای جذب بالاتر و ویژگی‌های اپتیکی قابل هدایتی در محدوده انرژی کمتر از ۳ الکترون ولت هستند. این ویژگی‌ها در طراحی و بهینه‌سازی سلول‌های خورشیدی برای جذب نور و تبدیل آن به انرژی الکتریکی، ساخت سنسورهای نوری حساس به تغییرات محیطی، تولید دیویدهای ساطع کننده نور (LED) با رنگ‌های مختلف، و توسعه دستگاه‌های فوتونیک مانند فیلترها و تقویت کننده‌ها به کار می‌روند.

¹ Dope

² Doping

۲. روش انجام محاسبات

محاسبات بر پایه نظریه تابعی چگالی و با به کارگیری روش امواج تخت بهساخته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب کد محاسباتی Wien2k انجام شده است. در این مطالعه ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، مغناطیسی و اپتیکی تک لایه اکسید روی با فرمول ساختاری ZnO را در حالت پایه مورد بررسی قرار گرفته است. برای انجام محاسبات مربوط به مشخص کردن کمیت‌های اولیه، ضروری است که درون کره‌های موفین تین، چگالی بار و پتانسیل به صورت هارمونیک‌های بلوری تا $l_{max} = 10$ بسط داده شوند. همچنین، در نواحی بین جایگاهی، چگالی بار و پتانسیل بر حسب بردار موج قطع تا $G_{max} = 14$ بسط داده شده‌اند. برای محاسبه ویژگی‌های الکترونی، در محاسبه انرژی تبادل-همبستگی از تقریب GGA با تابعی پرده-بورک-انزروهوف (PBE) استفاده شده است [۲۴]. انرژی جداسازی حالت‌های مغزه از ظرفیت برابر با ۶- ریدبرگ انتخاب شده است. به منظور جلوگیری از برهمکنش بین لایه‌ها، ضخامت خلاء ۱۵ آنگستروم بین لایه‌های اکسیدروی در نظر گرفته شد. تعداد توابع پایه در ناحیه بین جایگاهی با مقدار $R_{MT}K_{max} = 7$ محدود شده است، که در آن R_{MT} بیانگر شعاع کوچک‌ترین کره موفین تین و K_{max} بردار موج قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت در ناحیه بین جایگاهی است. تعداد نقاط K در ناحیه اول بریلوئن برای تمامی ترکیبات برابر با ۷۰۰ نقطه مشخص شد. برای مطالعه دقیق‌تر ویژگی‌های الکترونی و اپتیکی، تعداد این نقاط به ترتیب به ۱۰۰۰ و ۲۰۰۰ نقطه برای انجام محاسبات الکترواپتیکی افزایش یافته است. تمامی کمیت‌ها بر مبنای همگرایی انرژی انتخاب شده‌اند.

۳. ویژگی‌های ساختاری و الکترونی

۱.۳ ویژگی‌های ساختاری و الکترونی نانوصفحه خالص اکسید روی

نانوصفحات اکسید روی معمولاً در دو ساختار بلوری هگزاگونال و مکعبی وجود دارند [۲۷-۲۵]. شبکه شش گوشه آن در حالت دو بعدی، به دلیل تشابه به ساختار گرافن از اهمیت بیشتری برخوردار است. در شکل (۱)، ساختار شبکه پایه نانوصفحه اکسید روی را در کنار توزیع چگالی الکترونی اطراف هر اتم مشاهده می‌کنید. ویژگی‌های الکترونی نانوصفحات اکسید روی تحت تأثیر ابعاد و ساختار بلوری آن‌ها قرار دارد. این نانوصفحات معمولاً دارای شکاف انرژی بزرگ‌تری نسبت به ساختارهای سه بعدی هستند. نتایج محاسباتی نشان می‌دهد که شکاف انرژی این نانوصفحات به



دلیل اثرات کوانتومی و کاهش ابعاد به حدود $3/3$ تا 4 الکترون ولت برای شبکه مکعبی و حدود $1/6$ تا 2 الکترون ولت در شبکه شش‌گوشی می‌رسد [۲, ۴]. در شکل زیر ساختار نواری اسپین پلاریزه نانوصفحه اکسید روی به همراه توزیع چگالی حالت های الکترونی کل اتم نشان داده شده است. همان طور که در شکل مشاهده می‌شود، اثرات اسپین قطبیدگی تأثیری در ویژگی‌های الکترونی نانوصفحات خالص اکسید روی ندارد.

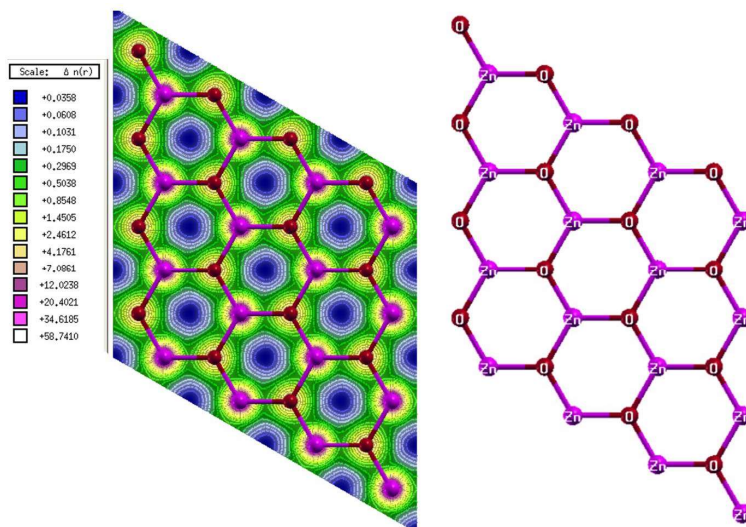


Fig. 1 Hexagonal lattice structure of ZnO nanosheet (right) along with the electron density distribution of each atom in the bond (left).

شکل ۱ ساختار شبکه شش‌گوشی نانوصفحه اکسید روی (سمت راست) به همراه توزیع چگالی الکترونی هر اتم در پیوند (سمت چپ).

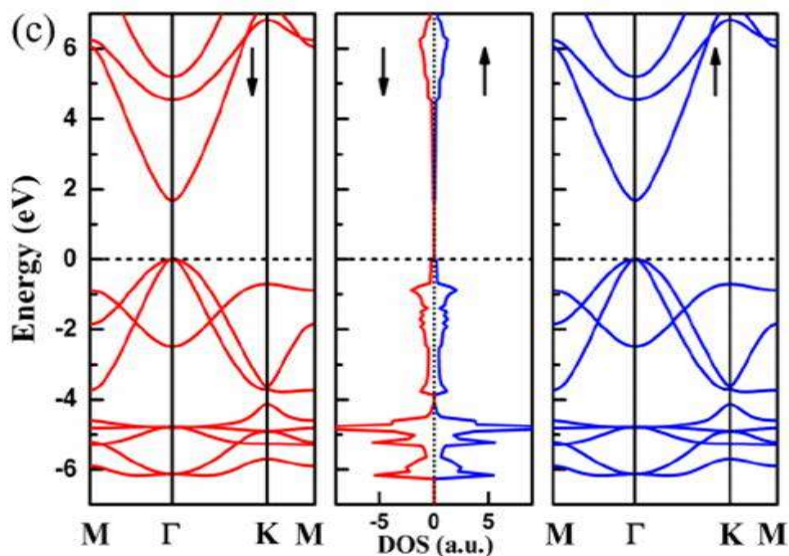


Fig. 2 Band structure of the hexagonal ZnO nanosheet along with the electron density distribution for the two spin directions, up (right) and down (left). The blue lines represent the up spins, and the red lines represent the down spins.

شکل ۲ ساختار نواری نانوصفحه اکسیدروی شش گوشه به همراه توزیع چگالی حالت‌های الکترونی برای دو راستای اسپینی بالا (سمت راست) و پایین (سمت چپ). خطوط آبی رنگ اسپین‌های بالا و خطوط قرمز رنگ اسپین‌های پایین را نشان می‌دهند.

توزیع الکترونی در نانوصفحات اکسیدروی نسبت به حالت کپه‌ای آن به دلیل وجود سطوح و مرزهای ریزمقیاس به صورت قابل توجهی تغییر می‌کند. این تغییرات می‌توانند بر روی ویژگی‌های الکتریکی و نوری نانوصفحات تأثیر بگذارند. در جدول (۱) مقادیر محاسبه شده مربوط به تعدادی از مهم‌ترین کمیت‌های ساختاری، مثل ثابت ساختار شبکه، مدول حجمی، مشتق مدول حجمی، انرژی بستگی و انرژی حالت پایه در دو حالت سه‌بعدی (کپه‌ای) و دوبعدی (نانوصفحه) گزارش شده‌اند که در هماهنگی با مقادیر تجربی و نظری مطالعات پیشین هستند [۱۰، ۱۸، ۲۶، ۲۸]. مدول حجمی در نانوصفحات نسبت به حالت کپه‌ای معمولاً کاهش می‌یابد. این کاهش به دلیل افزایش نسبت سطح به حجم و اثرات سطحی است که منجر به تغییر در رفتار مکانیکی مواد می‌شود.



جدول ۱ نتایج محاسبه شده از کمیت‌های ساختاری شبکه سه بعدی و دو بعدی اکسید روی.

Table 1 Calculated results of the 3D and 2D lattice structural quantities of ZnO.

Property	Hexagonal Structure (Wurtzite)	Cubic Structure (Zinc Blende)	ZnO Nanosheet (Hexagonal)
Lattice constant (Å)	a=3.25, c=5.20	a=4.30	Similar to Hexagonal or Cubic
Bulk modulus (GPa)	$K \approx 160$	$K \approx 120$	---
Bulk modulus derivative	$K' \approx 4.0$	$K' \approx 5.0$	---
Ground state energy (eV)	-7.5	-6.9	~ -7.0
Binding energy (eV)	3.0-4.0	2.5-3.5	~ 3.0
Band gap (eV)	2.8-3	3.4-3.6	1.6-2

۲.۳ ویژگی‌های ساختاری و الکترونی نانوصفحه اکسید روی در حضور ناخالصی

در این بخش تأثیر حضور کادمیوم به عنوان ناخالصی در ویژگی‌های ساختاری و الکترونی نانوصفحات اکسید روی مطالعه می‌شود. برای این منظور، ناخالصی کادمیوم با درصدهای مختلف که با کمیت X نشان داده شده به ساختار اکسید روی اضافه می‌شود. مقدار X می‌تواند بین ۰ تا ۰/۲۵ متغیر باشد. در نانوصفحات اکسیدروی، ثابت‌های ساختاری به دلیل اثرات سطحی و تنش‌های ناشی از حضور ناخالصی در ابعاد نانومتری ممکن است تغییر کنند. محاسبات نشان داده‌اند که طول‌های برداری و زوایا تحت تأثیر حضور ناخالصی در ساختار قرار می‌گیرند.

یکی از مهم‌ترین اثرات حضور ناخالصی، کاهش محسوس شکاف انرژی است. در نمودار شکل (۳) مقادیر مختلف شکاف انرژی بر حسب درصدهای مختلف ناخالصی کادمیوم گزارش شده است. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود، شکاف انرژی نانوصفحه اکسیدروی در حالت خالص ۱/۶ الکترون‌ولت است که این مقدار به ۱/۲ الکترون‌ولت برای مقدار $X = 0.25$ می‌رسد.

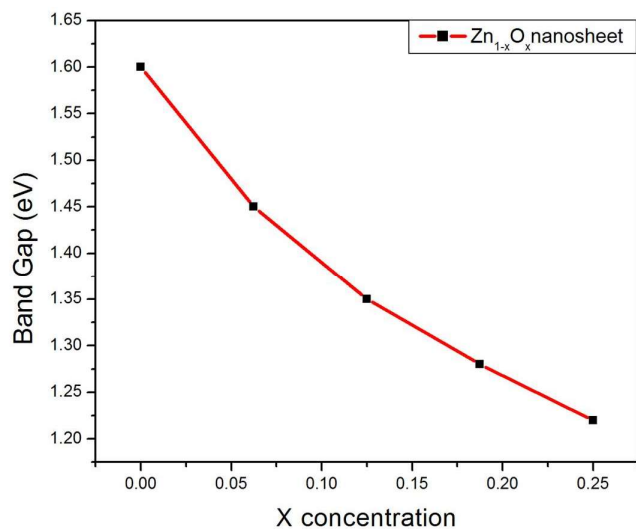


Fig. 3 Variation of the band gap (in electron volts) with respect to the percentage of cadmium impurity.

شکل ۳ تغییرات شکاف انرژی (بر حسب الکترون ولت) نسبت به درصد حضور ناخالصی کادمیوم.

منحنی ساختار نواری و چگالی حالت های الکترونی کل ترکیبات نشان می دهد که حضور ناخالصی کادمیوم تاثیر قابل توجهی بر تراکم و تعداد ساختارهای زیر سطح فرمی در ساختار نواری دارد که ناشی از اوربیتال های d و p اتم کادمیوم است. اگرچه، تغییر قابل توجهی در نوارهای انرژی بالای سطح فرمی ایجاد نمی کند. حضور ناخالصی کادمیوم به عنوان یک عنصر مغناطیسی می تواند در تولید گشتاور مغناطیسی در ساختار نانوصفحه نیز تاثیر گذار باشد.



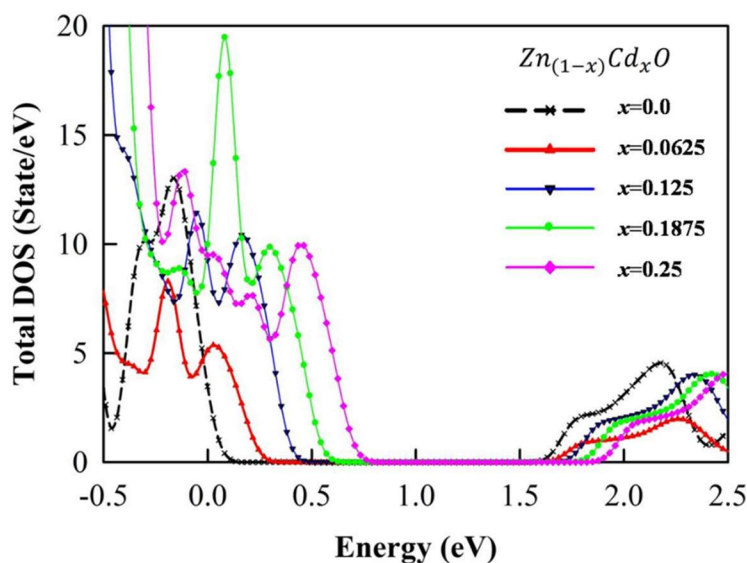


Fig. 4 Total electron density of states for ZnO nanosheet (pure and doped).

شکل ۴ چگالی کل حالت‌های الکترونی نانوصفحه اکسیدروی (خالص و با ناخالصی).

در نانوساختارهای اکسیدروی، گشتاور مغناطیسی معمولاً به دلیل حضور نقص‌ها در ساختار ایجاد می‌شود. در این جا نقص‌ها در اتم‌های روی ایجاد شده است و اتم‌های روی با اتم‌های کادمیوم که دارای ویژگی مغناطیسی هستند جایگزین شده‌اند. به این ترتیب، این نقص‌ها می‌توانند به عنوان مراکز مغناطیسی عمل کنند و منجر به ایجاد ویژگی‌های مغناطیسی در ساختار ماده شوند. در جدول (۲) مقادیر گشتاور مغناطیسی کل این نانوصفحات در غیاب و حضور کادمیوم آمده است. با وجود اینکه توزیع اسپین‌های بالا و پایین به صورت عمده برای همه ساختارها یکسان است، اما گشتاور مغناطیسی کل ماده مقداری افزایش یافته است. این اثر تنها به دلیل حضور کادمیوم مغناطیسی در ترکیب است.

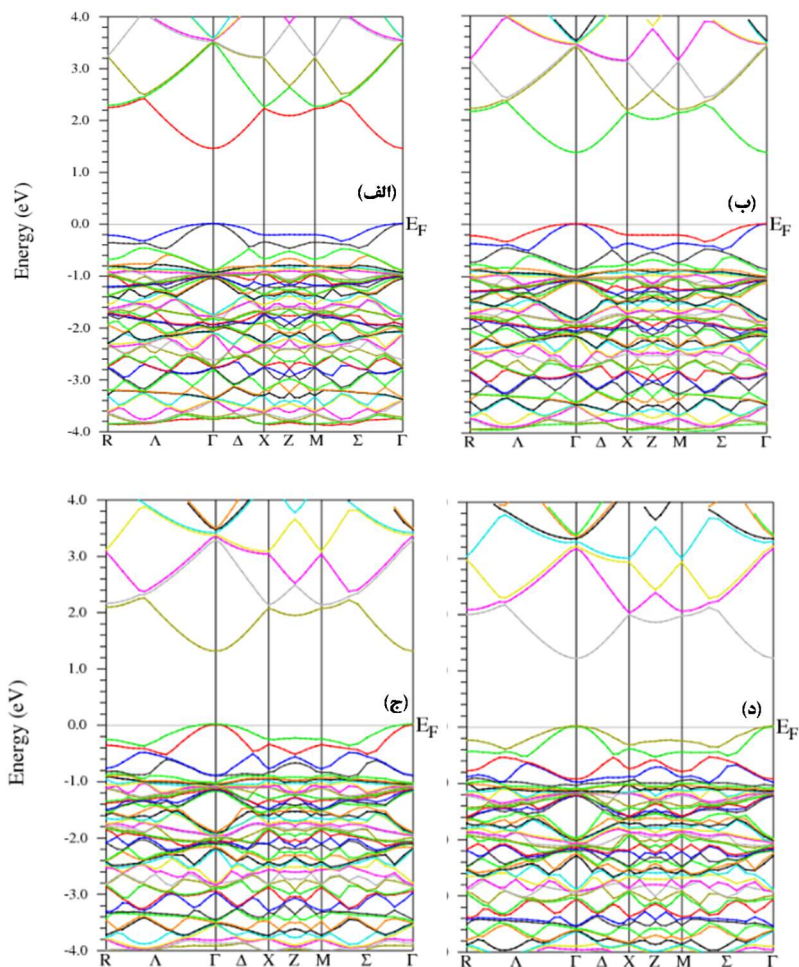


Fig. 5 Band structure of ZnO nanosheets in the presence of cadmium impurity ($ZnCd_{1-x}O_x$) with $x=0.625$ (graph a), $x=0.125$ (graph b), $x=0.187$ (graph c), and $x=0.25$ (graph d).

شکل ۵ ساختار نواری نانوصفحات اکسیدروی در حضور ناخالصی کادمیوم ($ZnCd_{1-x}O_x$) با $x = 0.625$ (نمودار الف)، مقدار $x = 0.125$ (نمودار ب)، مقدار $x = 0.187$ (نمودار ج) و مقدار $x = 0.25$ (نمودار د)



جدول ۲ گشتاور مغناطیسی کل برای ساختار سه بعدی و دوبعدی.

Table 2 Total magnetic moment for three-dimensional and two-dimensional structures.

State	Impurity Type	Impurity Atom Percentage	Total Magnetic Moment (μ_B)
Three-dimensional	-	-	0
Three-dimensional [29]	Fe	1%	0.05 - 0.2
Three-dimensional [30]	Cd	0-10%	0.00 - 1.5
Two-dimensional - Nanowire	-	-	0.2 - 0.6
Two-dimensional - Nanowire [31]	Mn	3%	0.4 - 0.8
Two-dimensional - Nanosheet	-	-	0.1 - 0.5
Two-dimensional - Nanosheet	Co	2%	0.3 - 0.7
Two-dimensional - Nanosheet	Cd	0-10%	0.00 - 1.2
Two-dimensional - Nanosheet	Cd	0-6.25%	0.00 - 1.00

۴. ویژگی‌های اپتیکی

در این بخش به مطالعه ویژگی‌های نوری نانوصفحه اکسیدروی خالص و ناخالص می‌پردازیم. ویژگی‌های اپتیکی مواد به‌ویژه نانوساختارهای شبه‌گرافن در محدوده انرژی کمتر از ۳ الکترون ولت دارای کاربردهای گسترده و گوناگونی است. این ویژگی‌ها در طراحی و بهینه‌سازی سلول‌های خورشیدی برای جذب نور و تبدیل آن به انرژی الکتریکی، ساخت سنسورهای نوری حساس به تغییرات محیطی، تولید دیودهای ساطع‌کننده نور (LED) با رنگ‌های مختلف، و توسعه دستگاه‌های فوتونیک مانند فیلترها و تقویت‌کننده‌ها استفاده می‌شوند [۳، ۷، ۱۰، ۳۲]. همچنین، این ویژگی‌ها در بهبود وضوح میکروسکوپ‌های نوری، ایجاد نانوپوشش‌های اپتیکی، و پژوهش‌های بنیادی برای درک بهتر پدیده‌های کوانتومی و تعاملات ماده و نور اهمیت دارند.

تابع دی‌الکتریک مختلط، به عنوان کلیدی‌ترین کمیت برای توصیف ویژگی‌های اپتیکی یک ماده، نشان‌دهنده واکنش بلور به میدان الکترومغناطیسی با بسامد ω است [۳۳]. این پاسخ به‌وسیله معادله زیر بیان می‌شود.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (1)$$



که در آن، $\epsilon_1(\omega)$ بخش حقیقی و $\epsilon_2(\omega)$ بخش موهومی تابع دی الکتریک می باشد. این تابع دارای دو سهم گذارهای درون نواری و بین نواری می باشد که گذارهای درون نواری اهمیت ویژه ای در ساختارهای فلزی دارد و باتوجه به اینکه ساختارهای نانوصفحه اکسید روی نیمه رسانا هستند در محاسبات ویژگی های اپتیکی سهم گذارهای بین و درون نواری در نظر گرفته شده است. شایان ذکر است که گذارهای بین نواری به دو دسته گذارهای مستقیم و غیرمستقیم تقسیم می شوند. در این میان، گذارهای غیرمستقیم که شامل پراکندگی فونون ها هستند، سهم اندکی در تابع دی الکتریک دارند و به همین دلیل از آن ها چشم پوشی شده است.

در این مطالعه در چارچوب تقریب فاز کاتوره ای رفتار مؤلفه های مهم اپتیکی نظیر قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب جذب، ضریب بازتاب، ضریب شکست و خاموشی و طیف اتلاف انرژی الکترون بر حسب انرژی در محدوده ۰/۵ تا ۲/۵ الکترون ولت برای درصدهای مختلف ناخالصی بررسی و نتایج در شکل های (۶) تا (۸) گزارش شده است.

برای قسمت موهومی تابع دی الکتریک $\epsilon_2(\omega)$ با در نظر گرفتن گذارهای اپتیکی مستقیم به صورت زیر می توان نوشت:

$$\epsilon_2(\omega) = \left(\frac{4\pi^2 e^2}{m^2 \omega^2}\right) \sum \int \langle \langle i | M | j \rangle \rangle^2 f_i (1 - f_j) \times \delta(E_f - E_i - \omega) d^3 k \quad (2)$$

که در این رابطه، M ماتریس دوقطبی، i و j به ترتیب حالت های اولیه و نهایی، f_i تابع توزیع فرمی و E_i انرژی الکترون در حالت i ام است. قسمت حقیقی تابع دی الکتریک $\epsilon_1(\omega)$ نیز با استفاده از رابطه کرامرز-کرونیک مطابق زیر محاسبه می شود:

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \epsilon_2(\omega') d\omega'}{(\omega^2 - \omega'^2)} \quad (3)$$

که در آن، P به قسمت اصلی انتگرال اشاره دارد.

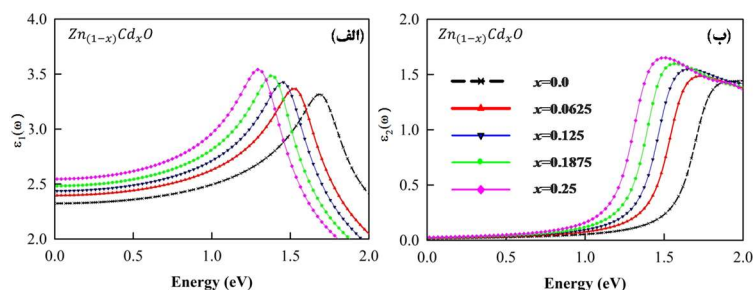


Fig. 6 Real part (a) and imaginary part (b) of the dielectric function of ZnO nanosheets with and without cadmium impurity.

شکل ۶ قسمت حقیقی (الف) و موهومی (ب) تابع دی الکتریک نانوصفحه اکسیدروی با و بدون ناخالصی کادمیوم.



در ساختارهای سه بعدی، ویژگی‌های اپتیکی ترکیبات ناهمسانگرد بوده و ساختارها در راستاهای مختلف ویژگی‌های متفاوتی را از خود نشان می‌دهند. از آن جایی که ویژگی‌های اپتیکی ترکیبات در دو راستای x و z بر هم منطبق نیستند و بلور ویژگی ناهمسانگردی دارد، محاسبات اپتیکی عموماً برای میدان‌های x و z انجام می‌شود. با این حال در ترکیبات دوبعدی نظیر نانوصفحات و نانونوارها، به دلیل کم بودن ضخامت نانوصفحات و پایین بودن سطح مقطع جذب در راستای عمود بر صفحه، تنها محاسبات میدان x دارای معنای فیزیکی است.

در شکل (۶)، قسمت‌های حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی گزارش شده است. همان طور که شکل (۶) مشاهده می‌شود، با افزایش درصد ناخالصی کادمیوم، ریشه‌های تابع دی‌الکتریک (انرژی‌هایی که به ازای آن‌ها بخش حقیقی تابع یعنی $\epsilon_1(\omega)$ صفر می‌شود) با جابه‌جایی قرمز به سمت انرژی‌های کمتر منتقل می‌شوند که این تغییرات به پایین آمدن نوارهای رسانش (کاهش شکاف انرژی) مربوط می‌شود که ساختار نوری ترکیبات نیز این موضوع را تأیید می‌کند.

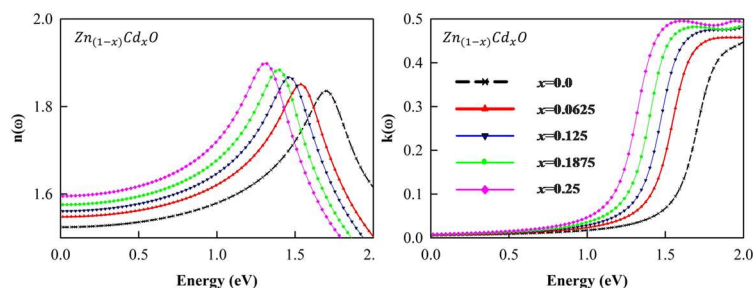


Fig. 7 Refractive index ($n(\omega)$) and extinction coefficient ($k(\omega)$) of ZnO nanosheets as a function of energy in the presence and absence of cadmium impurity.

شکل ۷ ضرایب شکست ($n(\omega)$) و خاموشی ($k(\omega)$) نانوصفحه اکسیدروی بر حسب انرژی در حضور و غیاب ناخالصی کادمیوم.

قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک در بسامد صفر نشان دهنده ثابت دی‌الکتریک است که کمیت دارای اهمیتی در مطالعات اپتیکی به شمار می‌رود. ثابت دی‌الکتریک اکسیدروی به صورت قابل توجهی به ساختار و ابعاد آن بستگی دارد. در حالت سه‌بعدی، ثابت دی‌الکتریک اکسیدروی در حدود ۸ تا ۹ گزارش شده است. در حالت دوبعدی، یعنی نانوصفحات و نانونوارهای اکسیدروی، ثابت دی‌الکتریک کاهش می‌یابد و می‌تواند به مقادیر کمتر از ۵ برسد. این تغییر به دلیل اثرات سطحی و کاهش ابعاد در نانوصفحات است. به عنوان نمونه، مطالعه‌ای توسط ژانگ و همکاران نشان

می دهد که ثابت دی الکتریک در نانوصفحات اکسیدروی می تواند به حدود ۴/۶ کاهش یابد [۳۴]. محاسبات این مقاله نیز نشان می دهد که ثابت دی الکتریک نانوصفحه خالص حدود ۲/۲۵ است که با افزایش درصد ناخالصی افزایش می یابد. با محاسبه قسمت های حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، سایر ویژگی های اپتیکی نظیر ضریب جذب، بازتاب، شکست، خاموشی و طیف اتلاف انرژی نیز قابل محاسبه هستند. ضریب شکست نیز مانند ثابت دی الکتریک یک تابع مختلط است و از رابطه زیر به دست می آید:

$$n(\omega) = n(\omega) + ik(\omega) \quad (۳)$$

که قسمت حقیقی آن $n(\omega)$ ، ضریب شکست و قسمت موهومی آن $k(\omega)$ ، ضریب خاموشی نامیده می شود. ضریب خاموشی، سنجشی از میزان جذب موج الکترومغناطیسی است. یعنی اگر موج الکترومغناطیسی به راحتی از داخل ماده عبور کند، ضریب خاموشی کمی دارد و اگر پرتویی به سختی به ساختار ماده ای نفوذ کند، ماده دارای ضریب خاموشی بزرگ تری است.

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega))^{1/2} + \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (۴)$$

$$K(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega))^{1/2} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (۵)$$

همان طور که در شکل (۷) مشاهده می شود، نانوصفحه اکسیدروی در حالت خالص یک نیمه رسانا با ضریب شکست حدود ۱/۵ است که با جایگزین کردن اتم های روی با کادمیوم این ضریب افزایش می یابد. همچنین، وارد کردن ناخالصی به ساختار سبب افزایش ضریب خاموشی به ویژه در محدوده انرژی های کمتر از ۲ الکترون ولت می شود. نتایج نشان می دهد که ساختارهای اکسیدروی ناخالص در مقابل نفوذ امواج الکترومغناطیسی مقاومت بیشتری از خود نشان می دهند.

سومین کمیت اپتیکی محاسبه شده در این مقاله، ضریب جذب نانوصفحات در حضور و غیاب ناخالصی کادمیوم است. ضریب جذب یک ساختار در واقع میزان جذب آن ماده بر واحد طول را بیان می کند. لبهی جذب قسمتی از نمودار است که در آن ساختار شروع به جذب موج الکترومغناطیسی می نماید، یعنی اگر انرژی فوتون ها بیشتر از این مقدار باشند، توسط ساختار جذب می شوند. ضریب جذب اپتیکی با توجه به رابطه زیر محاسبه می شود:

$$I(\omega) = \sqrt{2}\omega \left[(\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega))^{1/2} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (۶)$$

در شکل (۸)، ضریب جذب ساختار نانوصفحه اکسیدروی گزارش شده است. این نمودار نشان می دهد که لبهی جذب در ساختارهای ناخالص دارای پهنای کمتری است. اکسیدروی خالص می -



تواند امواج با انرژی‌های بالاتر از ۱/۵ ولت را جذب کند. در حالی که حضور ناخالصی کادمیوم می‌تواند جابجایی قرمزی به پهنای نیم‌ولت ایجاد کند که در ادوات اپتوالکترونیکی پر کاربرد است.

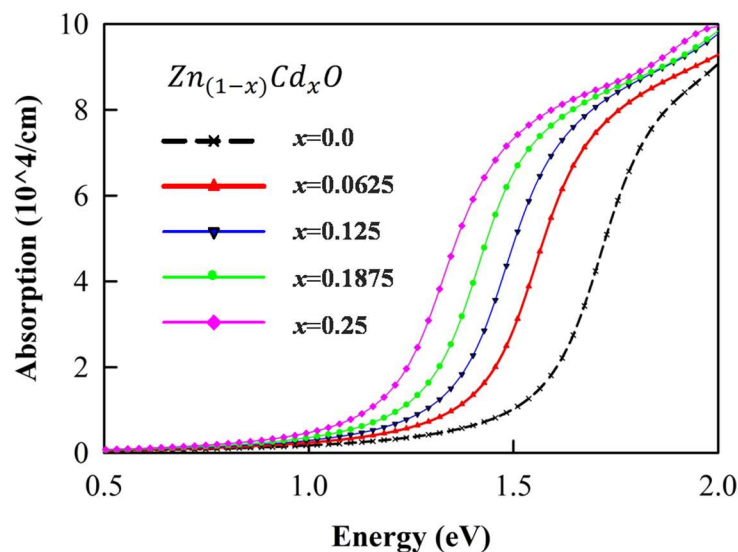


Fig. 8 Absorption spectrum curve of ZnO nanosheets with and without cadmium impurity.

شکل ۸ منحنی طیف جذب نانوصفحه اکسیدروی با و بدون ناخالصی کادمیوم.

طیف اتلاف انرژی الکترون (EELS) متناسب با احتمال اتلاف انرژی E در واحد طول برای یک الکترون در حال عبور از محیط است. این تابع بر اساس رابطه زیر با قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت عکس دارد.

$$L(\omega) = \text{Im} \frac{-1}{\varepsilon(\omega)} = \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} \quad (7)$$

در شکل (۹) طیف اتلاف انرژی نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با کاهش مقدار انرژی، اتلاف انرژی افزایش می‌یابد. این پدیده می‌تواند به دلیل افزایش واکنش الکترون‌ها با اتم‌های ناخالصی باشد که این واکنش‌ها اتلاف انرژی بیشتری را به دنبال داشته دارند. همچنین، وجود ناخالصی کادمیوم می‌تواند سبب ایجاد حالت‌های انرژی جدیدی شود که منجر به افزایش اتلاف انرژی الکترون‌ها شده است.

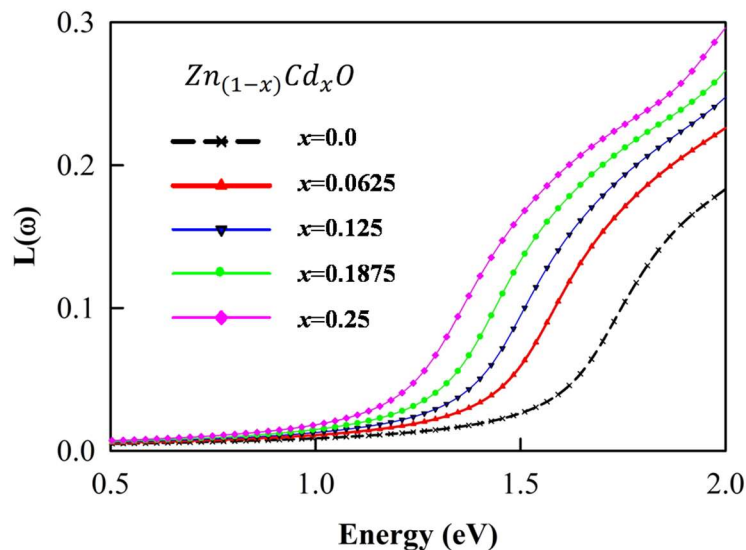


Fig. 9 Electron energy loss spectrum of ZnO nanosheets with and without cadmium impurity.

شکل ۹ طیف اتلاف انرژی الکترونی نانوصفحه اکسیدروی با و بدون ناخالصی کادمیوم.

ضریب بازتاب مشخص کننده‌ی شدت موج بازتابیده نسبت به موج فرودی می‌باشد که با استفاده از رابطه‌ی (۸) می‌توان این ضریب را مشخص نمود.

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)} - 1}{\sqrt{\varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)} + 1} \right|^2 \quad (۸)$$

با توجه به شکل (۱۰)، افزایش ضریب جذب یک ساختار با وارد کردن ناخالصی کادمیوم به آن نشان‌دهنده انتقال الکترون‌ها به حالت‌های انرژی بالاتر است. این پدیده به دلیل وجود نوارهای انرژی جدید ناشی از ناخالصی در پایین و بالای سطح فرمی است که با افزایش انرژی تابش، الکترون‌ها را قادر به عبور از نوار ممنوعه و ورود به نوار رسانش می‌کند. در این حالت، با افزایش انرژی، تعداد الکترون‌های تحریک شده و در نتیجه توانایی جذب تابش افزایش می‌یابد.



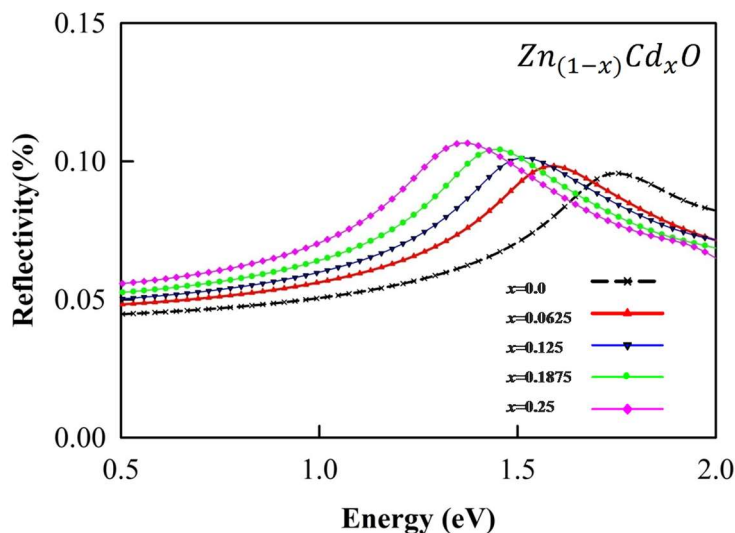


Fig. 10 Energy reflectance percentage of ZnO nanosheets with and without cadmium impurity.

شکل ۱۰ درصد بازتاب انرژی نانوصفحه اکسیدروی با و بدون ناخالصی کادمیوم.

۵. نتیجه‌گیری

نانوصفحه‌های اکسیدروی (ZnO) به‌عنوان یک ماده نیمه‌رسانا با ویژگی‌های منحصر به فرد، در سال‌های کنونی توجه زیادی را در حوزه‌های علمی و صنعتی جلب کرده‌اند. این ماده به دلیل شفاف انرژی کمابیش بالا و توانایی جذب نور در ناحیه فرابنفش، به صورت گسترده‌ای در دیودهای نوری، حسگرها و سلول‌های خورشیدی استفاده می‌شود. در این مطالعه، ویژگی‌های ساختاری، الکترونی و اپتیکی این ماده با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که حضور ناخالصی کادمیوم در نانوصفحات اکسیدروی تأثیرات قابل توجهی بر این ویژگی‌ها دارد. افزودن کادمیوم می‌تواند منجر به تغییرات قابل توجهی در شبکه بلوری و بهبود پایداری ساختاری شود، که به کاهش نقص‌های بلوری و افزایش نسبت سطح به حجم کمک می‌کند. همچنین، ناخالصی کادمیوم می‌تواند شفاف انرژی را کاهش داده و میزان گشتاور مغناطیسی کل ماده را افزایش دهد. این تغییرات می‌توانند حالت‌های الکترونی جدیدی در ساختار نانوصفحه ایجاد کرده و به بهبود ویژگی‌های نوری، از جمله جذب و گسیل نور، و همچنین بهبود ویژگی‌های نوری برای کاربرد در ابزارهای فوتوولتائیک کمک کنند.

۶. سپاس‌گزاری

این مقاله مستخرج از طرح پژوهشی درون‌دانشگاهی سمات تحت حمایت مالی دانشگاه آیت اله العظمی بروجردی (ره) انجام شده است.

منابع

- [1] Shanmugam, N., Suthakaran, S., Kannadasan, N. and Sathishkumar, K., "Synthesis and characterization of Te doped ZnO nanosheets for photocatalytic application", *Journal of Heterocyclics*, 105(6736182), 15-20, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhetchem.2015.05.021>
- [2] Yang, J., Wang, Y., Kong, J., Jia, H., and Wang, Z., " Synthesis of ZnO nanosheets via electrodeposition method and their optical properties, growth mechanism", *Optical Materials*, 46, 179-185, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2015.04.025>
- [3] Al-Hazmi, F., Aal, N.A., Al-Ghamdi, A.A., Alnowaiser, F., Gafer, Z.H., Al-Sehemi, A.G., El-Tantawy, F. and Yakuphanoglu, F., "Facile green synthesis, optical and photocatalytic properties of zinc oxide nanosheets via microwave assisted hydrothermal technique", *Journal of Electroceramics*, 31, 324-330, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10832-013-9772-9>
- [4] Othman, A., Osman, M., Ibrahim, E., and Ali, M. A., "Sonochemically synthesized ZnO nanosheets and nanorods: Annealing temperature effects on the structure, and optical properties", *Ceramics International*, 43, 527-533, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.09.183>
- [5] Xie, J., Wang, H., Duan, M., and Zhang, L., "Synthesis and photocatalysis properties of ZnO structures with different morphologies via hydrothermal method", *Applied Surface Science*, 257, 6358-6363, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2011.01.045>
- [6] Jiang, J., Huang, Z., Tan, S., Li, Y., Wang, G., and Tan, X., "Preparation of ZnO nanosheets by a novel microemulsion-based hydrothermal method", *Materials Chemistry and Physics*, 132, 735-739, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2012.01.025>
- [7] Tsai, J.-K., Meen, T.-H., Wu, T.-C., Lai, Y.-D., and He, Y.-K., "Morphology and optical properties of ZnO microrods grown by high-temperature hydrothermal method", *Microelectronic Engineering*, 148, 55-58, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mee.2015.03.016>
- [8] Ibrahim, K. M., Saleh, W. R., and Al-Sammarraie, A. M., "Structural and optical properties of ZnO nanostructures synthesized by hydrothermal method at different conditions", *Nano Hybrids and Composites*, 35, 75-83, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nanhyb.2022.03.005>
- [9] Agarwal, S., Jangir, L. K., Rathore, K. S., Kumar, M., and Awasthi, K., "Morphology-dependent structural and optical properties of ZnO nanostructures", *Applied Physics A*, 125, 553, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-019-2971-x>
- [10] Chen, S., Liu, Y., Shao, C., Mu, R., Lu, Y., Zhang, J., Shen, D., and Fan, X., "Structural and optical properties of uniform ZnO nanosheets", 2005. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-005-3089-5>
- [11] Kang, Y., Yu, F., Zhang, L., Wang, W., Chen, L., and Li, Y., "Review of ZnO-based nanomaterials in gas sensors", *Solid State Ionics*, 360, 115544, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2021.115544>



- [12] Supraja, P., Kumar, R. R., Mishra, S., Haranath, D., Sankar, P. R., Prakash, K., Jayarambabu, N., Rao, T. V., and Kumar, K. U., "A simple and low-cost triboelectric nanogenerator based on two dimensional ZnO nanosheets and its application in portable electronics", *Sensors and Actuators A: Physical*, 335, 113368, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.sna.2022.113368>
- [13] Chu, L., Xu, C., Zeng, W., Nie, C., and Hu, Y., "Fabrication and application of different nanostructured ZnO in ultraviolet photodetectors: A review", *IEEE Sensors Journal*, 22, 7451-7462, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1109/JSEN.2022.3149816>
- [14] Khun, K., Elhag, S., Ibupoto, Z. H., Khranovskyy, V., Nur, O., and Willander, M., "Supramolecules-assisted ZnO nanostructures growth and their UV photodetector application", *Solid State Sciences*, 41, 14-18, 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2014.11.004>
- [15] Theerthagiri, J., Salla, S., Senthil, R., Nithyadharseni, P., Madankumar, A., Arunachalam, P., Maiyalagan, T., and Kim, H.-S., "A review on ZnO nanostructured materials: Energy, environmental and biological applications", *Nanotechnology*, 30, 392001, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab5e1a>
- [16] Gupta, M. K., Lee, J.-H., Lee, K. Y., and Kim, S.-W., "Two-dimensional vanadium-doped ZnO nanosheet-based flexible direct current nanogenerator", *ACS Nano*, 7, 8932-8939, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1021/nn4027006>
- [17] Haq, B. U., AlFaify, S., Alrebdi, T. A., Ahmed, R., Al-Qaisi, S., Taib, M., Naz, G., and Zahra, S., "Investigations of optoelectronic properties of novel ZnO monolayers: A first-principles study", *Materials Science and Engineering: B*, 265, 115043, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2020.115043>
- [18] Zheng, F.-b., Zhang, C.-w., Wang, P.-j., and Luan, H.-x., "Tuning the electronic and magnetic properties of carbon-doped ZnO nanosheets: First-principles prediction", *Journal of Applied Physics*, 111, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4725511>
- [19] Zheng, F.-b., Zhang, C.-w., Wang, P.-j., and Luan, H.-x., "First-principles prediction of the electronic and magnetic properties of nitrogen-doped ZnO nanosheets", *Solid State Communications*, 152, 1199-1202, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.02.020>
- [20] Wong, K. Mun, Alay-e-Abbas, S., Shaukat, A., Fang, Y., and Lei, Y., "First-principles investigation of the size-dependent structural stability and electronic properties of O-vacancies at the ZnO polar and non-polar surfaces", *Journal of Applied Physics*, 113, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4794977>
- [21] Zheng, F.-B., Zhang, C.-W., Wang, P.-J., and Luan, H.-X., "The electronic and magnetic properties with intrinsic defects in ZnO nanosheets: First-principles prediction", *Current Applied Physics*, 13, 799-802, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cap.2012.09.013>
- [22] Ozugurlu, E., "Cd-doped ZnO nanoparticles: An experimental and first-principles DFT studies", *Journal of Alloys and Compounds*, 861, 158620, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.158620>
- [23] Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G.K., Kvasnicka, D. and Luitz, J., "wien2k", *An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties*, 60(1), 2001. ISBN: 3-9501031-1-2
- [24] Perdew, J. P., Burke, K., and Ernzerhof, M., "Generalized gradient approximation made simple", *Physical Review Letters*, 77, 3865, 1996. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [25] Özgür, Ü., Alivov, Y. I., Liu, C., Teke, A., Reshchikov, M. A., Doğan, S., Avrutin, V., Cho, S.-J., and Morkoç, H., "A comprehensive review of ZnO materials and devices", *Journal of Applied Physics*, 98(4), 2005. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1948481>
- [26] Klingshirn, C., "ZnO: Material, physics and applications", *ChemPhysChem*, 8, 782-803, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200700106>



- [27] Klingshirn, C., "ZnO: From basics towards applications", *Physica Status Solidi (b)*, 244, 3027-3073, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1002/pssb.200645191>
- [28] Kochnev, N., Tkachenko, D., Kirsanov, D., Bobrysheva, N., Osmolowsky, M., Voznesenskiy, M., and Osmolovskaya, O., "Regulation and prediction of defect-related properties in ZnO nanosheets: Synthesis, morphological and structural parameters, DFT study and QSPR modelling", *Applied Surface Science*, 621, 156828, 2023. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.156828>
- [29] Gu, G., Xiang, G., Luo, J., Ren, H., Lan, M., He, D., and Zhang, X., "Magnetism in transition-metal-doped ZnO: A first-principles study", *Journal of Applied Physics*, 112, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4742863>
- [30] Abdel-Baset, T., Fang, Y.-W., Anis, B., Duan, C.-G., and Abdel-Hafiez, M., "Structural and magnetic properties of transition-metal-doped Zn_{1-x}Fe_xO", *Nanoscale Research Letters*, 11, 1-12, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1186/s11671-016-1611-7>
- [31] Chen, L., Li, S., Cui, Y., Xiong, Z., Luo, H., and Gao, Y., "Manipulating the electronic and magnetic properties of ZnO monolayer by noble metal adsorption: A first-principles calculations", *Applied Surface Science*, 479, 440-448, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.02.236>
- [32] Coleman, V.A. and Jagadish, C., "Basic properties and applications of ZnO", In *Zinc oxide bulk, thin films and nanostructures*, pp. 1-20. Elsevier Science Ltd, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-008044722-3/50001-4>
- [33] Ambrosch-Draxl, C., and Sofo, J. O., "Linear optical properties of solids within the full-potential linearized augmented planewave method", *Computer Physics Communications*, 175, 1-14, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2005.07.010>
- [34] Zhang, X., Le, M.-Q., Zahhaf, O., Capsal, J.-F., Cottinet, P.-J., and Petit, L., "Enhancing dielectric and piezoelectric properties of micro-ZnO/PDMS composite-based dielectrophoresis", *Materials & Design*, 192, 108783, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2020.108783>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

