



## ESTUDIO AB-INITIO DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES, ELÁSTICAS Y ELECTRONICAS DE NANOHILOS CORE/SHELL

Lucy A. Valdez\* y Ricardo A. Casali

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste. Av. Libertad 5450, Corrientes, Argentina.*

\*Correo Electrónico (L. Valdez): [lucy.alejandra.valdez@gmail.com](mailto:lucy.alejandra.valdez@gmail.com)

### RESUMEN

*El óxido de Zinc (ZnO) es uno de los semiconductores más exhaustivamente estudiados. A temperatura ambiente, presenta la estructura wurtzita (B4). En esta fase, por sus propiedades térmicas, electrónicas y piro-piezoeléctricas, es usado en diversos dispositivos electrónicos.*

*Algunas de estas propiedades mejoran notablemente en la nano escala, especialmente cuando el ZnO forma heteroestructuras con otros materiales.[1] Recientemente, se logró sintetizar nanohilos con estructura core/shell de ZnO/X (X=ZnSe,ZnS,BeO) que mejoran la eficiencia de sensores piezoeléctricos, celdas fotovoltaicas y dispositivos opto-electrónicos. [2,3]*

*En este trabajo se presenta un estudio teórico de las propiedades estructurales, elásticas y electrónicas de nanoestructuras tipo core/shell de ZnO, ZnS y BeO, cuando son sometidas a deformaciones uniaxiales en la dirección [0001]. Nanohilos hexagonales con diámetros entre 1.5 y 2.8 nm fueron estudiados ab-initio usando la teoría de la funcional de la densidad (DFT) en la aproximación de gradiente generalizado (GGA), implementada en el código SIESTA [4]. Mediante la aplicación de tensiones uniaxiales, se calcularon el módulo de Young, la tensión de ruptura y las densidades de estados electrónicos totales (TDOS) y proyectados (PDOS).*

*De la comparación de las TDOS, PDOS y las propiedades elásticas en los nanohilos tipo core/shell respecto a los mismos en nanohilos formados por uno solo de los materiales mencionados (ZnO, ZnS o BeO), se observan características relevantes que aportarían una información substancial para lograr un posible aumento de la eficiencia del ZnO en dispositivos electrónicos en la nano escala.*

### ABSTRACT

*Zinc oxide (ZnO) is one of the semiconductors more extensively studied. At normal temperature, ZnO shows a wurtzite (B4) crystallographic phase. In this phase, ZnO is used in different electronic devices due to its thermal, electronic, and piro-piezoelectric properties.*

*Some of these properties are noticeable improvement at the nano scale, especially when ZnO together with other material create heterostructures[1]. Recently, core/shell nanowires have been synthesized in order to raise the performance in devices like piezoelectronic sensors, photovoltaic cells, and optoelectronic devices. [2,3]*

*In this work, we introduce a theoretical study of structural, elastic and electronic properties of core/shell nanostructures of ZnO, ZnS, and BeO when they are subjected to uniaxial stresses in the [0001] direction. Hexagonal nanowires, whose diameters range from 1.5 to 2.8 nm, were ab-initio studied using the density functional theory, in the generalized gradient approximation (GGA), implemented in the SIESTA code [4]. By applying uniaxial stresses, we calculated the Young modulus, maximum tensile, and both total (TDOS) and projected electronic density of states (PDOS).*

*According to the comparison in the TDOS, PDOS and elastic properties between core/shell nanowires and nanowires composed by one of these materials (ZnO, ZnS, and BeO), we observed features which provide essential information in order to get a possible rise in the ZnO efficiency of electronic devices at the nano-scale.*

## **REFERENCIAS**

1. P. Prete, "Nanowires"; 2010, Intech.
2. M. Zhou, Z. Yi, K. Li, J. Zhang, and W. Wu, "Synthesis and characterization of aligned ZnO/BeO core-shell nanowire arrays on glass substrate"; *Nanoscale Research Letters*, Vol. 6 (2011), Nro. 506, p. 1-6.
3. B. Wei, K. Zheng, Y. Ji, Y. Zhang, Z. Zhang, X. Han, "Size-Dependent Bandgap Modulation of ZnO Nanowires by Tensile Strain"; *Nano Letters*, Vol. 12 (2012), p. 4595-4599.
4. J. M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejon, and D. Sánchez-Portal, "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation"; *Journal of Physics:Condensed Matter*, Vol. 14 (2002), p 2745-2779.

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO:** T22

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER):** P (*poster*)