

ZnS:M (M=Mn, Cu) nanodaļiņu lokālās atomārās struktūras pētījumi ar rentgenabsorbcijas spektroskopiju

Aleksejs Kuzmins, Inga Pudža, Milena Dile, Katrīna Laganovska, Aleksejs Zolotarjovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

ZnS ir pusvadītājs ar aizliegto zonu aptuveni 3,6 eV kubiskā cinka blende fāzē un aptuveni 3,9 eV augstas temperatūras heksagonālā vurtcīta fāzē. Cinka sulfīds var viegli iekļaut dažādus pārejas metālu jonus kā luminiscences centrus. ZnS:M (M=Mn, Cu) nanodaļiņas plaši tiek izmantotas kā fosfora materiāls ar maiņstrāvu darbināmās elektroluminiscences ierīcēs [1], tāpēc aktuāls ir jautājums par to, kā ZnS režģī tiek iekļauti dopantu joni. Šajā pētījumā mēs parādām, kā rentgenabsorbcijas spektroskopiju var izmantot kombinācijā ar apgriezto Montekarlo metodi [2], lai noteiktu lokālo struktūru ap Mn un Cu joniem nanodaļiņās, sintezētās ar mikroviļņu asistēto solvotermālo metodi. Iegūtie rezultāti liecina, ka gan Cu, gan Mn aizvieto Zn jonus [3], tomēr jonu izmēru starpība rada statisku strukturālu relaksāciju.

Local atomic structure of ZnS:M (M=Mn, Cu) nanoparticles probed by x-ray absorption spectroscopy

Alexei Kuzmin, Inga Pudza, Milena Dile, Katrīna Laganovska, Aleksejs Zolotarjovs
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

Bulk ZnS is a semiconductor with a band gap of about 3.6 eV in the cubic zinc blende phase and about 3.9 eV in the high-temperature hexagonal wurtzite phase. Zinc sulfide can easily host different transition metal ions as luminescent centers. ZnS:M (M=Mn, Cu) nanoparticles are commonly used as a phosphor material in AC-operated electroluminescent devices [1], therefore, the question of how dopant ions are incorporated into the ZnS lattice is actual. In this study, we show how X-ray absorption spectroscopy combined with reverse Monte Carlo simulations [2] can be used to determine the local environment around Mn and Cu ions in nanoparticles synthesized by the microwave-assisted solvothermal method. The obtained results suggest that both Cu and Mn substitute Zn ions [3]. However, the difference in the ion sizes results in a static structural relaxation.

The financial support of the European Regional Development Fund (ERDF) Project No. 1.1.1.1/20/A/060 is greatly acknowledged.

[1] L. Wang, L. Xiao, H. Gu, H. Sun, *Adv. Optical Mater.* 7 (2019) 1801154.

[2] J. Timoshenko, A. Kuzmin, J. Purans, *J. Phys.: Condens. Matter* 26 (2014) 055401.

[3] A. Kuzmin, M. Dile, K. Laganovska, A. Zolotarjovs, *Mater. Chem. Phys.* 290 (2022) 126583.