

УДК: 538.9, 31.15.A, 31.15.E, 31.15.ec, 538.91, 31.15.es, 71.15.m, 31.15.p, 73.22f, 73.63.Fg ISSN 1729-4428

Р.М. Балабай, М.В. Науменко

## Синергетичні властивості масивів нанодротів $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

Криворізький державний педагогічний університет, Кривий Ріг, Україна, [nikemar13@gmail.com](mailto:nikemar13@gmail.com)

Методами теорії функціоналу електронної густини та *ab initio* псевдопотенціалу розраховано просторові розподіли густини валентних електронів, розподіли густини електронних станів та Кулонівські потенціали вздовж визначених напрямків у межах масивів нанодротів  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> різних форм перерізу та розташування один відносно одного. Встановлені синергетичні властивості масивів дротів, визначена ступінь впливу дротів один на одного в залежності від геометричних параметрів їх взаємного розташування в масиві та електронні характеристики масиву дротів як єдиного цілого.

**Ключові слова:**  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, масиви нанодротів, функціонал електронної густини, *ab initio* псевдопотенціал, розподіл густини валентних електронів, розподіл густини електронних станів, Кулонівський потенціал, синергетичні властивості.

Подано до редакції 10.10.2022; прийнято до друку 17.02. 2023.

### Вступ і постановка задачі

Нанотрубки та нанодроти на сьогодні успішно вирощуються з різноманітних матеріалів [1-16] і привертають увагу завдяки своїм мезоскопічним фазам, які забезпечують їх нові фізичні властивості для застосування у пристроях [17]. Були зроблені зусилля для виготовлення нанотрубок на основі  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, але нанотрубки, про які повідомлялося [18], були переважно непорядкованими або нахиленими.

Вирощування великомасштабних матриць циліндричних структур на основі  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> з однорідною морфологією все ще є величезною проблемою. На цей момент є небагато повідомлень про виготовлення масивів нанодротів  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> шляхом травлення індуктивно зв'язаною плазмою [19-27]; синтезовані з використанням техніки хімічного осадження з парової фази за допомогою водню [28]; моноклінні, вертикально орієнтовані нанодроти  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, що отримані гідротермальним шляхом і відпалені [29] (рис. 1).

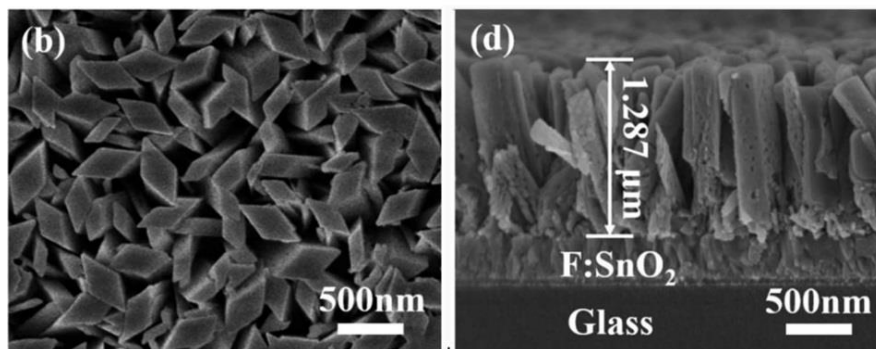


Рис. 1. Зображення сканувальним електронним мікроскопом при великому збільшенні вертикально вирівняних масивів нанодротів  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, вирощених на підкладці скла з покриттям оксиду олова з домішками фтору (зліва - вигляд зверху), та поперечний переріз масиву нанодротів (справа) [29].

Джонсон та інші [30] удосконалили метод вирошування «пар-рідина-тверде тіло» для синтезу нанодротів з оксиду індію, оксиду галію та оксиду олова шляхом використання хімічного транспорту парів із наночастинками золота як каталізаторами. Їм вдалося синтезувати монокристалічні нанодрооти діаметром 40-100 нм та довжиною понад 10-100 мікрон.

Алхалайлі та інші [31] проаналізували характерну структуру та морфологію нанодротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  щодо їх застосування для УФ-фотодетекторів. Нанодрооти мають велику площу поверхні, малий діаметр, внутрішнє розсіювання та високий коефіцієнт фотопровідності, що може дозволити УФ-фотодетекторам на їх основі досягти високої чутливості. Також нанодрооти мінімізують вплив дефектів решітки та теплової невідповідності під час процесу росту, що спрощує виробництво високопродуктивних пристроїв. Крім того, однією із переваг використання нанодротів є здатність посилювати поглинання світла та обмежувати світло для підвищення світлочутливості.

Завдяки своїм структурним особливостям і потенційним ефектам квантового обмеження у напівпровідникових нанодротах та нанотрубках реалізуються унікальні електричні та оптичні властивості. Метт Лоу та інші [32], Хао Цзен та інші [33] вважають, що ці напівпровідникові наноструктури є важливими елементами в широкому діапазоні перспективних застосувань для нанорозмірних пристроїв завдяки їхньому широкому діапазону композицій і зонних структур. Поточні дослідження зосереджені на раціональному синтетичному контролі одновимірних нанорозмірних будівельних блоків, новій характеристиці властивостей і виготовленні пристроїв на основі нанодротяних будівельних блоків, а також інтеграції нанодротяних елементів у складній функціональній архітектурі.

Необхідне всебічне розуміння синергетичного зв'язку структурної морфології масивів нанодротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  з електронними властивостями масиву в цілому. Наша робота присвячена чисельному визначенню характеристик електронної підсистеми модельних масивів нанодротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  різного перерізу та геометрії упакування. Основними методами дослідження були теорії функціоналу електронної густини та *ab initio* псевдопотенціалу. За допомогою авторської програми [34] розраховано просторові розподіли густини валентних електронів, розподіли густини електронних станів та Кулонівські потенціали вздовж визначених напрямків у межах масиву нанодротів.

## I. Методи та моделі обчислення

Розрахунковий комп'ютерний експеримент із перших принципів було виконано за алгоритмом, що описано у роботах [35-37]. Оскільки алгоритм розрахунку передбачав трансляційну симетрію в досліджуваній атомній системі, спочатку була створена штучна супергратка орторомбічного типу.

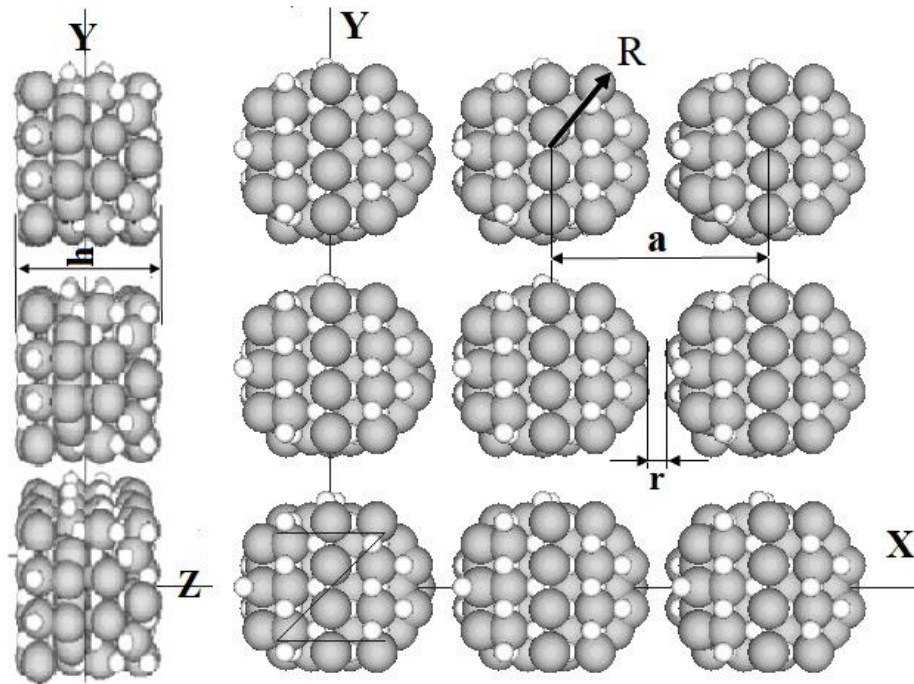
Симетрія супергратки дозволяла ставити Декартову систему у відповідність до кристалографічної. Об'єкти дослідження визначали параметри одиничної комірки супергратки та атомного базису. Об'єктами розрахунку були нескінченні масиви нанодротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  різного діаметру, однакової висоти, різних форм перерізу: циліндричної та паралелограмної. Розташовувалися дроти один відносно одного з дотриманням прямокутної симетрії.

Визначалися основні стани підсистеми валентних електронів модельних масивів нанодротів за допомогою самоузгодженого розв'язку рівнянь Кона-Шема у локальному наближенні при фіксованих атомних остовах. Розрахунки проводились за наступних умов: інтегрування по зоні Бриллюена штучної супергратки було замінено розрахунком у Г-точці; ітерації самоузгодження припинялися, якщо результати розрахунку поточної ітерації збігалися з попередньою із наперед заданою похибкою, їх кількість змінювалася в залежності від об'єкта, що обчислювався, але, зазвичай, наші результати збігалися після 3-6 ітерацій; хвильові функції Кона-Шема бути записані у формі функцій Блоха, розкладених по базису плоских хвиль; кількість плоских хвиль у розкладі хвильової функції урізали шляхом пробних розрахунків та оцінки фізичності отриманих результатів (просторовий розподіл електронної густини, величина розриву в енергетичному електронному спектрі між останнім зайнятим станом і першим незайнятим, загальні уявлення про модельовану наноструктуру або оцінка отриманих результатів у порівнянні з результатами, отриманими іншими авторами), кількість плоских хвиль вибирали приблизно 20-25 хвиль на один атом базису; атомний базис не оптимізувався; взаємодія валентних електронів з іонними остовами оброблялися з використанням псевдопотенціалу із перших принципів Бечелета-Хеменна-Шлетера.

Досліджувалися синергетичні властивості електронної підсистеми масиву дротів, тобто визначався ступінь впливу дротів один на одного в залежності від геометричних параметрів їх взаємного розташування в масиві та електронні характеристики масиву дротів як єдиного цілого. Вплив можливої ростової підкладки масиву дротів не враховувався.

Відповідні значення параметрів одиничної комірки супергратки та координати атомів в базисі дозволило нам змодельовати нескінченні масиви дротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ . На Рис. 2 наводяться зображення у різних ракурсах чисельно відтворених періодично розташованих в площині XY циліндричних нанодротів з висотою  $h = 1,57$  нм, різними діаметрами  $2 \cdot R$  (0,61 або 0,95 нм, тонкі або товсті), розділені вакуумом і розташовані один відносно одного згідно квадратної симетрії на змінних відстанях  $g$  (відстані між центрами циліндрів на рисунку позначено як «а»). Дроти у вигляді циліндра мали симетричний переріз – коло, інші типи дротів – призмоподібні – мали просторові кути між обмежуючими гранями та розміри граней, що відповідають моноклінній сингонії  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ .

Параметр «с» (напрямок Z) одиничної комірки супергратки підбиралося так, щоб уникнути взаємодії



**Рис. 2.** Фрагменти нескінченного масиву дротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ . Показані товсті нанодроти в різних ракурсах: зліва – в площині ZY, справа – в площині XY. Сірі сфери – атоми Ga, білі сфери – атоми O.

між атомами масиву нанодротів, що транслюються у напрямку Z, тоді як взаємодія у напрямках X, Y виявлялася. Кількість атомів у базисі складала для тонких дротів циліндричної та призмоподібної форм – 60 атомів, для товстих циліндричної форми – 120 атомів.

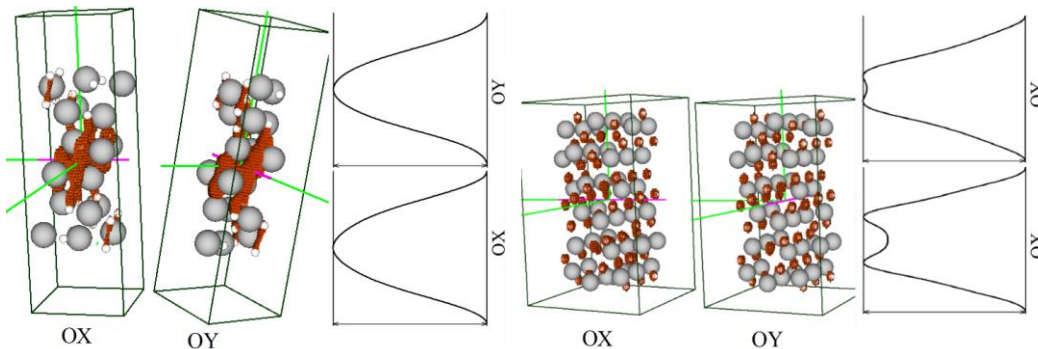
## II. Результати та їх обговорення

Для визначення кількісних характеристик взаємодії між нанодроти в масиві за рахунок дальнодійних електричних сил були розраховані Кулонівські потенціали, індуковані валентними електронами, вздовж різних напрямків масива нанодротів (рис. 3). Ознакою того, що взаємодія між електронною підсистемою проводів зникає, ми вважали рівність нулеві Кулонівського потенціалу в області між дротами.

Встановлено, що взаємодія між дротами циліндричної форми проявляється, починаючи з

відстані між ними від 0,71 нм для тонких дротів, від 0,37 нм для товстих (рис. 4-5).

Спостерігалось очевидне зростання значень Кулонівських потенціалів, індукованих електронною підсистемою, коли дроти в масиві наближалися один до одного. При цьому це зростання інтенсивніше відбувалося для тонких дротів. Схожість характеру зміни Кулонівських потенціалів, що розраховані у різних напрямках масиву циліндричних дротів, та близькість їх чисельних значень свідчить про ізотропність електричних властивостей масиву, а деяка відмінність пов'язана з неправильним колом у перерізі дроту та з різними за типом атомами, якими викладена бокова його поверхня. Збільшення значень Кулонівських потенціалів, індукованих електронною підсистемою та пропорційний їй густині заряду, в області між дротами корелює зі зменшенням інтенсивності просторових розподілів густини валентних електронів всередині дротів, особливо, це помітно в масиві тонких дротів (рис. 6).



**Рис. 3.** Напрямки вздовж масивів тонких (зліва) та товстих (справа) нанодротів для розрахунку Кулонівських потенціалів та їх позначення: OX, OY. Наведена одинична комірка з електронною густиною максимального ізо-значення, що містить один дріт; операція трансляція, що задіяна в алгоритмі розрахунку реалізує нескінченний масив дротів у площині XY. Наведені приклади отриманих потенціальних розподілів.

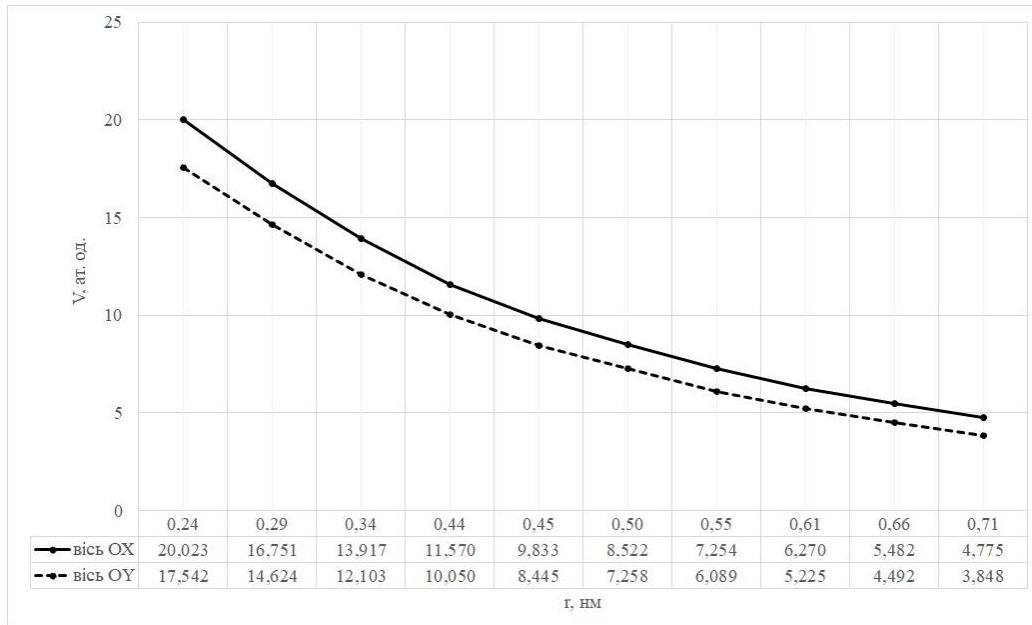


Рис. 4. Значення Кулонівських потенціалів, розрахованих посередині між дротами на вказаних на рис.2 напрямках у масиві тонких дротів, в залежності від відстані між ними.

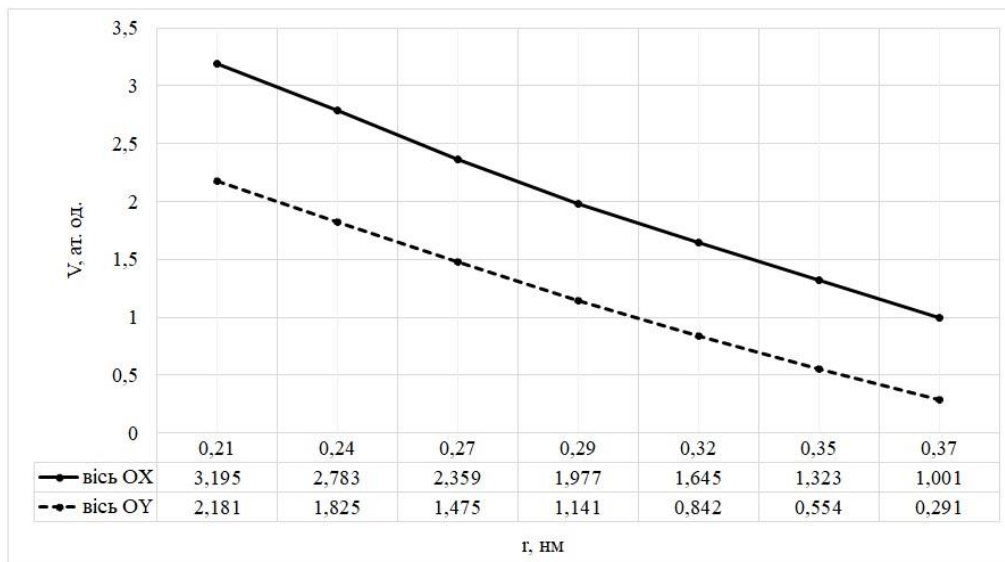


Рис. 5. Значення Кулонівських потенціалів, розрахованих посередині між дротами на вказаних на рис. 2 напрямках у масиві товстих дротів, в залежності від відстані між ними.

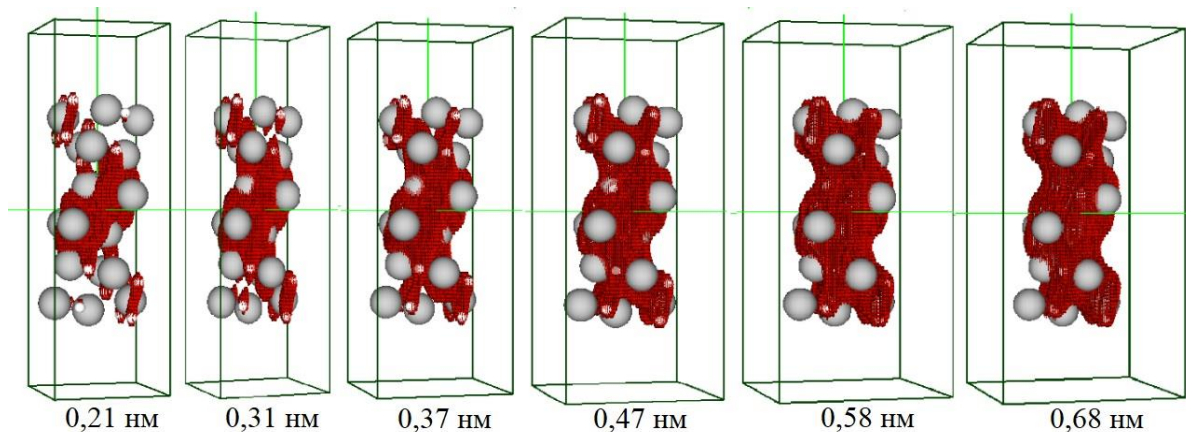
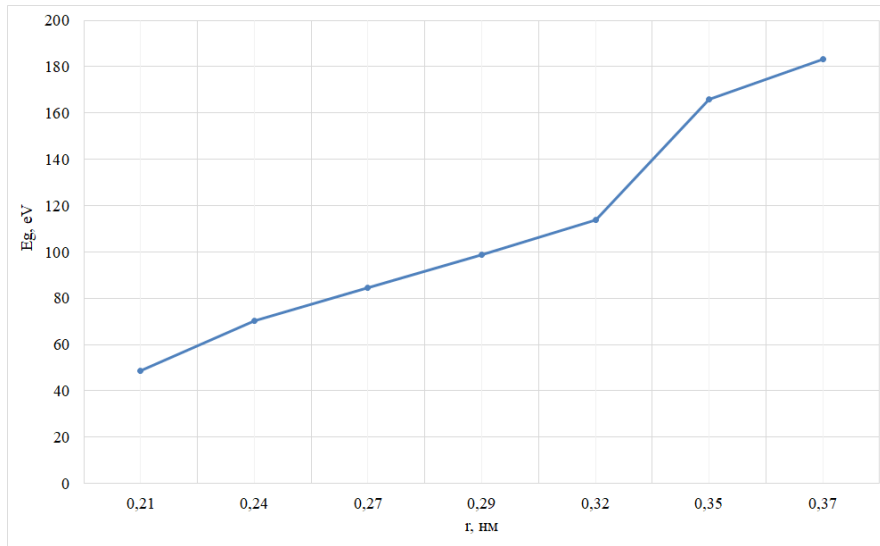


Рис. 6. Просторові розподіли густини валентних електронів в інтервалі ізо-значень 0.8-0.7 від максимального в масиві тонких дротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  при зміні відстані між ними від 0,21 нм до 0,68 нм.

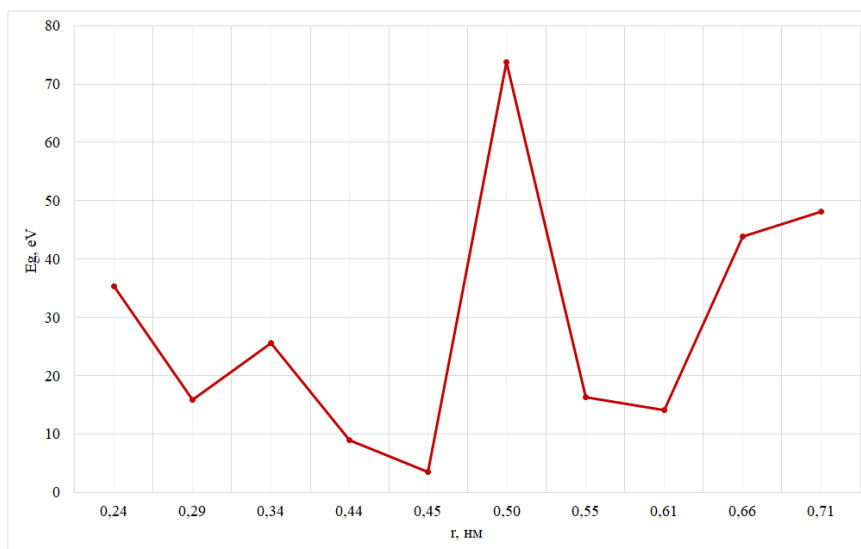
Свідченням наявності синергетичного (колективного) ефекту в електронних властивостях масиву близько розташованих товстих дротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  є зменшення ширини електронної забороненої зони. А саме, далеко розташовані один від одного дроти демонструють властивості поодинокого кластера і мають значну ширину забороненої зони (НОМО-LUMO) – близько 180 еВ. Тоді як близько розташовані дроти демонструють властивості впорядкованої взаємодіючої метаструктури і значно менший розмір забороненої зони – близько 40 еВ (рис. 7). При цьому, характер зміни величини забороненої зони при зменшенні відстані між дротами є монотонним.

Що стосується масиву тонких дротів, то характер зміни величини електронної забороненої зони в залежності від відстані між дротами є немонотонним, і при відстані між ними біля 0,50 нм величина забороненої зони була найбільшою. Решта отриманих значень були майже на порядок меншими ніж для масиву товстих дротів (рис. 8).

Масивам призмоподібних дротів, що обмежені гранями, характерними моноклінній сингонії  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ , притаманні анізотропні електричні властивості, так як, по-перше, площа поверхні взаємодіючих граней дротів-призм у напрямку ОУ в чотири рази більша ніж у напрямку ОХ та, по-друге, розташовані дроти один відносно одного згідно прямокутної, але не квадратної симетрії (рис. 9). Цей факт відбивається на розподілах Кулонівських потенціалів (рис. 10-11). А саме, всі розподіли різні за формою та різняться за величиною. При цьому, очікувана більша інтенсивність взаємодії між гранями дротів, що мають більшу площу, не справдилася. Навпаки, між цими гранями фіксувалися потенціали меншої величини, що, мабуть, визначалося незавершеними атомними зв'язками, котрі були активнішими на гранях меншої



**Рис. 7.** Залежність ширини електронної забороненої зони впорядкованої метаструктури – масив товстих дротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  циліндричної форми – від відстані між дротами.



**Рис. 8.** Залежність ширини електронної забороненої зони впорядкованої метаструктури -масив тонких дротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$  циліндричної форми – від відстані між дротами.

Синергетичні властивості масивів нанодротів  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$

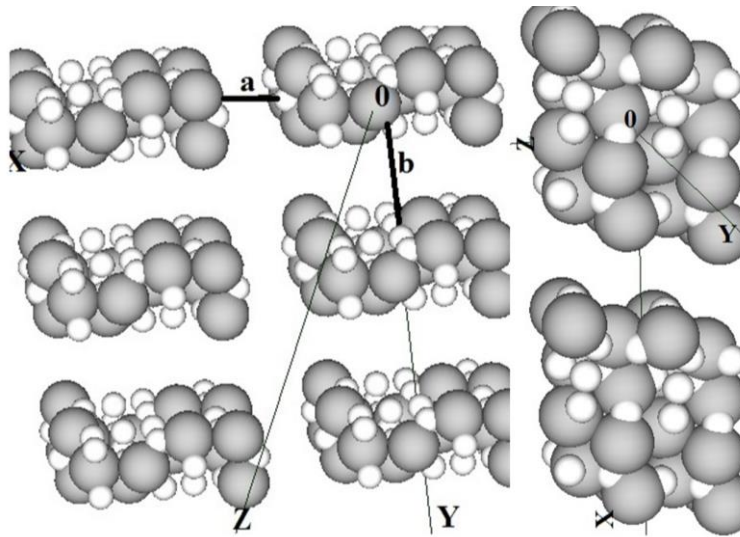


Рис. 9. Напрямки вздовж масивів призмоподібних нанодротів, що обмежені гранями, характерними моноклінній сингонії  $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ , для обчислення Кулонівських потенціалів та їх позначення: OX, OY. Символами «a», «b» позначені відстані між дротами.

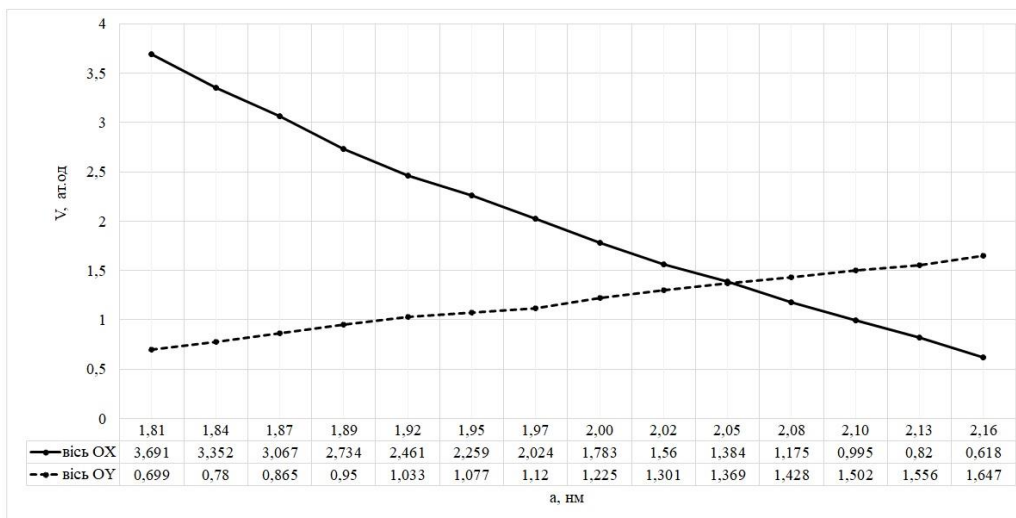


Рис. 10. Значення Кулонівських потенціалів, розрахованих посередині між призмоподібними дротами на вказаних на рис. 9 напрямках у масиві, в залежності від відстані між ними. Відстань «a» між дротами змінювалася, відстань «b» була зафіксована на величині 1,8 нм.

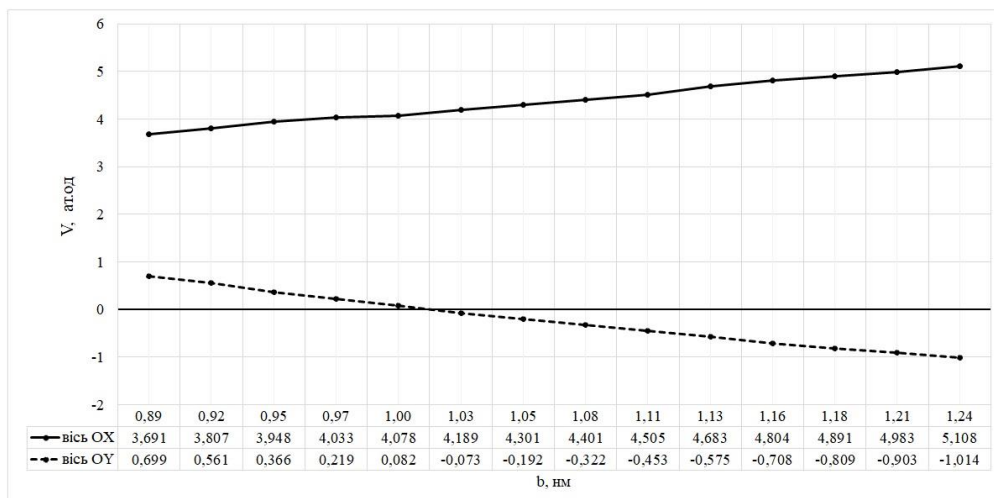


Рис. 11. Значення Кулонівських потенціалів, розрахованих посередині між призмоподібними дротами на вказаних на рис. 9 напрямках у масиві, в залежності від відстані між ними. Відстань «b» між дротами змінювалася, відстань «a» була зафіксована на величині 0,9 нм.

площі, тобто у напрямку ОХ. Щодо величин електронної забороненої зони масиву призмоподібних дротів, то їх в залежності від відстані між є немонотонною.

## Висновки

Методами теорії функціоналу електронної густини та *ab initio* псевдопотенціалу розраховано просторові розподіли густини валентних електронів, розподіли густини електронних станів та Кулонівські потенціали вздовж визначених напрямків у межах масивів нанодротів  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> різних форм перерізу та розташування один відносно одного. Встановлені синергетичні властивості масивів дротів, визначена

ступінь впливу дротів один на одного в залежності від геометричних параметрів їх взаємного розташування в масиві та електронні характеристики масиву дротів як єдиного цілого. Масиви дротів  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> циліндричної форми та більшого діаметру виявляють більш контрольовані та фізично аргументовані синергетичні електронні характеристики ніж масиви дротів циліндричної форми меншого діаметру та призмоподібної форми.

**Балабай Р.М.** – докторка фіз.-мат. наук, професорка кафедри фізики та методики її навчання;  
**Науменко М.В.** – студентка PhD, кафедра фізики та методики її навчання..

- [1] B. Cheng, E. T. Samulski, *Fabrication and characterization of nanotubular semiconductor oxides In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*, Journal of Materials Chemistry, 11, 2901 (2001); <https://doi.org/10.1039/B108167E>.
- [2] B. Zhang, P.-X. Gao, *Metal oxide nanoarrays for chemical sensing: a review of fabrication methods, sensing modes, and their inter-correlations*, Front. Mater. 6(55) (2019); <https://doi.org/10.3389/fmats.2019.00055>.
- [3] Y. Zhang, J. Yang; Q. Li, X. Cao, *Preparation of Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoribbons and tubes by electrospinning*, J. Cryst. Growth, 308, 180 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2007.07.036>.
- [4] N. W. Gong, M. Y. Lu, C. Y. Wang, Y. Chen, L. J. Chen, *Au(Si)-filled  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanotubes as wide range high-temperature nanothermometers*. Appl. Phys. Lett., 92, 073101 (2008); <https://doi.org/10.1063/1.2840574>.
- [5] H. Jiang, Y. Chen, Q. Zhou, Y. Su, H. Xiao, L. Zhu, *Temperature dependence of Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> micro/nanostructures via vapor phase growth*, Mater. Chem. Phys., 103, 14 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2007.02.031>.
- [6] T. Braniste, and et al., *Aero-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Nanomaterial Electromagnetically Transparent from Microwaves to Terahertz for Internet of Things Applications*, Nanomaterials, 10(6), 1047 (2020); <https://doi.org/10.3390/nano10061047>.
- [7] Ziyao Zhou, Changyong Lan, SenPo Yip, Renjie Wei, Dapan Li, Lei Shu, Johnny C. Ho, *Towards high-mobility In<sub>2</sub>xGa<sub>2-2x</sub>O<sub>3</sub> nanowire field-effect transistors*, Nano Research, 11 (11), 5935 (2018); <https://doi.org/10.1007/s12274-018-2106-9>
- [8] G. F. Yang, and et al. *Fabrication of GaN Nanocolumns with Semipolar Plane Using Ni nano-island masks*, Semicond. Technol., 36, 417 (2011).
- [9] H. S. Kim, G. Y. Yeom, J. W. Lee, T. I. Kim, *Characteristics of inductively coupled Cl<sub>2</sub>/BCl<sub>3</sub> plasmas during GaN etching*, J. Vac. Sci. Technol. A, 17, 2214 (1999); <https://doi.org/10.1116/1.581749>.
- [10] M. Y. Hsieh, C. Y. Wang, L. Y. Chen, M. Y. Ke, J. Huang, *InGaN-GaN nanorod light emitting arrays fabricated by silica nanomasks*, IEEE J. Quantum Electron., 44, 468 (2008); <https://doi.org/10.1109/JQE.2007.916665>
- [11] J. Lin, R. Zong, M. Zhou, Y. Zhu, *Photoelectric catalytic degradation of methylene blue by C<sub>60</sub>-modified TiO<sub>2</sub> nanotube array*, Appl. Catal. B Environ., 89, 425 (2009); <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2008.12.025>.
- [12] T. J. Hsueh, S. J. Chang, C. L. Hsu, Y. R. Lin, I. C. Chen, *ZnO nanotube ethanol gas sensors*, J. Electrochem. Soc., 155, K152 (2008); <https://iopscience.iop.org/article/10.1149/1.2952535>.
- [13] A. Star, Y. Lu, K. Bradley, G. Grüner, *Nanotube optoelectronic memory devices*, Nano Lett., 4, 1587 (2004); <https://doi.org/10.1021/nl049337f>.
- [14] J. Han, Z. Liu, K. Guo, B. Wang, X. Zhang, T. Hong, *High-efficiency photoelectrochemical electrodes based on ZnIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub> sensitized ZnO nanotube arrays*, Appl. Catal. B Environ., 163, 179 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2014.07.040>.
- [15] Z. Zhuang, and et al. *High color rendering index hybrid III-nitride/nanocrystals white light-emitting diodes*, Adv. Funct. Mater., 26, 36 (2016); <https://doi.org/10.1002/adfm.201502870>.
- [16] B. Liu, and et al. *Hybrid light emitters and UV solar-blind avalanche photodiodes based on iii-nitride semiconductors*, Adv. Mater., 32, 1904354 (2020); <https://doi.org/10.1002/adma.201904354>.
- [17] Y. C. Choi, and et al., *Catalytic growth of beta-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanowires by arc discharge*, Adv. Mater., 12 (10), [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-4095\(200005\)12:10<746::AID-ADMA746>3.0.CO;2-N](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-4095(200005)12:10<746::AID-ADMA746>3.0.CO;2-N).
- [18] S. Ding, L. Zhang, Y. Li, X. Xiu, Z. Xie, T. Tao, B. Liu, P. Chen, R. Zhang, Y. Zheng, *A selective etching route for large-scale fabrication of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> micro-/nanotube arrays*, Nanomaterials, 11, 3327 (2021); <https://doi.org/10.3390/nano11123327>.
- [19] H. Liang, Y. Chen, X. Xia, C. Zhang, R. Shen, Y. Liu, Y. Luo, G. Du, *A preliminary study of SF<sub>6</sub> based inductively coupled plasma etching techniques for beta gallium trioxide thin film*, Mater. Sci. Semicond. Proc., 39, 582 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2015.05.065>.
- [20] J. E. Hogan, S.W. Kaun, E. Ahmadi, Y. Oshima, J. S. Speck, *Chlorine-based dry etching of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*, Semicond. Sci. Technol., 31, 065006 (2016); <https://doi.org/10.1088/0268-1242/31/6/065006>.

- [21] J. Yang, S. Ahn, F. Ren, S. Pearton, R. Khanna, K. Bevlín, D. Geerpuram, A. Kuramata, *Inductively coupled plasma etching of bulk, single-crystal Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*, *J. Vac. Sci. Technol. B*, 35, 031205 (2017); <https://doi.org/10.1116/1.4982714>.
- [22] Z. Lin, X. Xiu, S. Zhang, X. Hua, Z. Xie, R. Zhang, P. Han, Y. Zheng, *Arrays of GaN nano-pillars fabricated by nickel nano-island mask*, *Mater. Lett.*, 108, 250 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2013.07.005>.
- [23] L. Zhang, X. Xiu, Y. Li, Y. Zhu, X. Hua, Z. Xie, T. Tao, B. Liu, P. Chen, R. Zhang, and et al. *Solar-blind ultraviolet photodetector based on vertically aligned single-crystalline  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanowire arrays*, *Nanophotonics*, 9, 4497 (2020); <https://doi.org/10.1515/nanoph-2020-0295>.
- [24] S. Wang, Y. W. Li, X. Q. Xiu, and et al. *Synthesis and characterization of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>@GaN nanowires*, *Chin. Phys. B*, 28, 028104 (2019); <https://doi.org/10.1088/1674-1056/28/2/028104>.
- [25] T. Yamada, J. Ito, R. Asahara, K. Watanabe, M. Nozaki, S. Nakazawa, Y. Anda, M. Ishida, T. Ueda, A. Yoshigoe, and et al., *Comprehensive study on initial thermal oxidation of GaN (0001) surface and subsequent oxide growth in dry oxygen ambient*, *J. Appl. Phys.*, 121, 035303 (2017); <https://doi.org/10.1063/1.4974458>.
- [26] J. H. Choi, M. H. Ham, W. Lee, J. M. Myoung, *Fabrication and characterization of GaN/amorphous Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanocables through thermal oxidation*, *Solid State Commun.*, 142, 437 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2007.03.034>.
- [27] L. Zhang, Y. Li, X. Xiu, G. Xin, Z. Xie, T. Tao, B. Liu, P. Chen, R. Zhang, Y. Zheng, *Preparation of vertically aligned GaN@Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> core-shell heterostructured nanowire arrays and their photocatalytic activity for degradation of Rhodamine B.*, *Superlattices Microstruct.*, 143, 106556 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2020.106556>.
- [28] [28] J.P. Rex and et al., *The influence of deposition temperature on the structural, morphological and optical properties of micro-size structures of beta-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*, *Results in Physics*, 14, 102475 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2019.102475>.
- [29] W. Shunli, and et al.,  *$\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanorod arrays with high light-to-electron conversion for solar-blind deep ultraviolet photodetection*, *RSC Adv.*, 9, 6064 (2019); <https://doi.org/10.1039/c8ra10371b>.
- [30] M. C. Johnson, Shaul Aloni, D. E. McCready, E. D. Bourret-Courchesne, *Controlled vapor-liquid-solid growth of indium, gallium, and tin oxide nanowires via chemical vapor transport*, *Crystal Growth & Design*, 6(8), 1936 (2006); <https://doi.org/10.1021/cg050524g>.
- [31] B. Alhalaili, and et al. *Gallium oxide nanowires for UV detection with enhanced growth and material properties*, *Scientific Reports*, 10, 21434 (2020); <https://doi.org/10.1038/s41598-020-78326-x>.
- [32] M. Law, J. Goldberger, P. Yang, *Semiconductor nanowires and nanotubes*, *Annu. Rev. Mater. Res.*, 34, 83 (2004); <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.040203.112300>.
- [33] Hao Zeng and et al. *Metal-oxide nanowire molecular sensors and their promises*, *Chemosensors*, 9(2), 41 (2021); <https://doi.org/10.3390/chemosensors9020041>.
- [34] Ab initio calculation. Web source: <http://sites.google.com/a/kdpu.edu.ua/calculationphysics>.
- [35] R. Balabai, M. Naumenko, *Methodology of converting of the coordinates of the basis atoms in a unit cell of crystalline  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, specified in a monoclinic crystallographic system, in the laboratory cartesian coordinates for computer applications*, *Photoelectronics*, 29, 12-20 (2020); <https://doi.org/10.18524/0235-2435.2020.29.225463>.
- [36] R. Balabai, V. Zdeschits, M. Naumenko, *Mechanical modification of electronic properties of ultrathin  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> films*, *Ukrainian Journal of Physics*, 66(12), 1048 (2021); <https://doi.org/10.15407/ujpe66.12.1048>.
- [37] R. Balabai, O. Bondarenko, M. Naumenko, *Energy levels of acceptor impurities in  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanostructures*, *Materials Today: Proceedings*, 62(9), 5838-5844 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.05.365>.

R.M. Balabai, M.V. Naumenko

## Synergistic Properties of $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Nanowire Arrays

Kryvyi Rih State Pedagogical University, Kryvyi Rih, Ukraine, [nikemar13@gmail.com](mailto:nikemar13@gmail.com)

Using the methods of electron density functional and ab initio pseudopotential, the spatial distributions of valence electron density, the density of electronic states, and Coulomb potentials along the specified directions within the arrays of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanowires with different cross-sectional shapes and positions in arrays were calculated. Synergistic properties of arrays of wires are established. The degree of influence of the wires on each other is determined depending on the geometric parameters of their mutual location in the array. The electronic characteristics of the array of wires as a whole are determined.

**Keywords:**  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, nanowire arrays, electron density functional, ab initio pseudopotential, valence electron density distribution, electron state density distribution, Coulomb potential, synergistic properties.