Synthesis and Optical Properties of B-Mg co-Doped ZnO Nanoparticles

一. 成果完成人及所在单位： 李永丽，材料科学与工程学院 指导教师：李月婵

二. 成果简介：

以 ZnO 纳米材料为研究对象，使用高温热解法合成样品，制备了 B-Mg 共掺杂 ZnO 纳米粒子，利用 X 射线粉末衍射仪(XRD)、扫描电子显微镜(SEM)、透射电子显微镜(TEM)和紫外漫反射光谱(UV-vis)对合成纳米粒子的物相结构、形貌及光学性能进行表征与分析。探究了 B-Mg 元素掺杂对 ZnO 纳米粒子结构形貌及光学性能的影响，发现随着 Mg 掺杂量的增加，ZnO 纳米颗粒的光学带隙增加，而 B-Mg 共掺杂 ZnO 纳米颗粒的光学带隙先增加后降低。研究结果发表在 Coatings 2021, 11, 882 上。

三. 主要研究内容及创新点：

将 B-Mg 共掺杂 ZnO 纳米粒子作为研究对象，对其结构形貌及光学性能进行表征与分析。XRD 结果表明，掺杂原子成功地与 ZnO 主体晶格结合，而没有改变纳米颗粒的晶体结构，“Mg”原子占据了晶格位置和间隙位。随着 Mg 元素的掺入，ZnO 纳米粒子的晶粒形状改变，由三角形和球形变为六边形形状，说明 ZnO 纳米粒子的择优生长取向发生改变。Mg 元素的掺入提高了 ZnO 纳米粒子的结晶度，而 B 的掺入降低了纳米粒子的结晶度。根据紫外漫反射图谱及 Tauc 公式计算出纳米粒子的光学带隙 Eg，可看出随着 Mg 浓度的提高，光学带隙逐渐提高。掺入 B 后，纳米颗粒的带隙先增加后随着 Mg 浓度的提高反而降低。这是由于 CB 位移、Burstein-Moss 位移和收缩效应互相影响导致的。

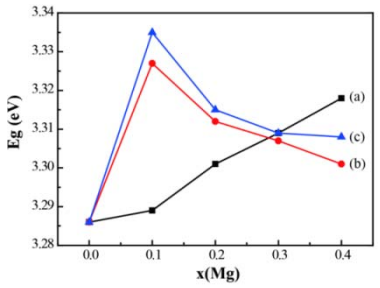


图 1 本征 ZnO 和掺杂 ZnO 的光学带隙 Eg

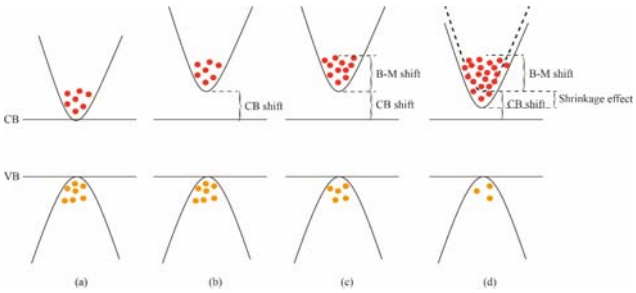


图 2 掺杂对 ZnO 能带结构影响的示意图

四. 主要研究成果及应用情况

在 SCI3 区发表论文一篇（Coatings 2021, 11,882）。投稿中论文一篇。


coatings

Article

Synthesis and Optical Properties of B-Mg co-Doped ZnO Nanoparticles

Yuechan Li [1,2], Yongli Li [1,2] and An Xie [1,2,*]

联系人：李永丽， 电 话：15980937494 Email: lyl606614@163.com