

## СТРУКТУРА ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ КЛАСТЕРІВ (ZnO)<sub>n</sub>(n=34. 60)

Ростислав Бовгира

Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача  
НАН України, bovhyra@gmail.com

Наведено результати розрахунків, з перших принципів, методом теорії функціонала густини енергетичного спектру та параметрів основного стану «магічних» кластерів (ZnO)<sub>n</sub> (n = 34. 60) та кластерів з власно дефектною структурою. Розрахунки були виконані з використанням ультрам'яких псевдопотенціалів у базисі плоских хвиль, на основі попередніх досліджень [1]. Для обчислення обмінно-кореляційної енергії використано функціонал у наближенні узагальненого градієнта (GGA) в параметризації Пердю, Бурке, Ернценхофа. Оптимізація структури нанокластерів проводилась методом спряжених градієнтів, в процесі оптимізації структури не використовувалося обмеження симетрії.

Для того, щоб визначити найбільш стабільну структуру для «магічних» кластерів (ZnO)<sub>34</sub> і (ZnO)<sub>60</sub> було досліджено ряд ізомерів, серед них були фулереноподібні порожнисті структури та структури типу клітки, які задовольняли правило шести ізольованих чотирикутників. Крім того, були побудовані структури типу цеоліту, що склалися зі структурних одиниць (ZnO)<sub>12</sub>.

Таблиця 1. Електронні властивості нанокластерів (ZnO)<sub>34</sub> та (ZnO)<sub>60</sub>

Isomer	E <sub>total</sub> /ZnO, eV	ΔE/ZnO, eV	E <sub>v</sub> /ZnO, eV	E <sub>g</sub> , eV
(ZnO) <sub>34</sub> -A	-50461.66	0	-6.764	2.275
(ZnO) <sub>34</sub> -B	-50461.64	0.02	-6.748	2.151
(ZnO) <sub>34</sub> -C	-50461.62	0.04	-6.724	2.048
(ZnO) <sub>34</sub> -W	-50461.54	0.12	-6.645	1.124
(ZnO) <sub>60</sub> -содаліт	-50461.744	0	-6.847	1.93
(ZnO) <sub>60</sub> -A	-50461.734	0.01	-6.836	2.184
(ZnO) <sub>60</sub> -B	-50461.732	0.012	-6.835	2.4
(ZnO) <sub>60</sub> -W	-50461.699	0.045	-6.802	0.982

Для аналізу стабільності кластерів ZnO було розраховано енергію зв'язку на одну молекулу ZnO. Аналіз значень енергії показує, що у випадку нанокластерів (ZnO)<sub>34</sub> найбільш енергетично вигідними є фулереноподібні  
<http://www.iapmm.lviv.ua/chyt2019>

**Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2019»,  
27–29 травня 2019 р., Львів**

порожністі структури. Підтвердженням високої стабільності цих кластерів є високе значення ширини забороненої зони, що робить їх хімічно інертними. У випадку з нанокластерами  $(\text{ZnO})_{60}$  найбільш стабільною є цеолітова структура, яка складається з семи нанокластерів  $(\text{ZnO})_{12}$ , які мають спільні чотирикутні грані. Також було проведено дослідження зміни електронних властивостей кластерів через вплив дефектів. Було одержано результати для енергії формування та ширини забороненої зони для досліджуваних кластерів.

*Таблиця 2. Енергія формування та ширина забороненої зони для різних дефектів у нанокластерах  $(\text{ZnO})_{34}$  та  $(\text{ZnO})_{60}$*

Ізомер	$E^f$ , eV				$E_g$ , eV				
	V <sub>Zn</sub>	V <sub>O</sub>	Zn <sub>O</sub>	O <sub>Zn</sub>	V <sub>Zn</sub>	V <sub>O</sub>	Zn <sub>O</sub>	O <sub>Zn</sub>	
$(\text{ZnO})_{34-A}$	5.20	5.09	8.75	9.16	1.86	2.3	1.426	2.184	3.91
$(\text{ZnO})_{34-B}$	5.07	4.93	8.51	8.87	1.74	2.13	1.238	1.951	3.72
$(\text{ZnO})_{34-C}$	4.91	4.80	8.35	8.74	1.64	1.99	1.084	1.708	3.58
$(\text{ZnO})_{60-содаліт}$	5.52	4.89	9.33	9.60	1.63	2.05	1.314	1.882	3.32
$(\text{ZnO})_{60-A}$	5.38	4.78	9.15	9.25	1.82	2.26	1.627	2.041	3.78
$(\text{ZnO})_{60-B}$	5.31	4.71	8.97	9.08	1.95	2.39	1.967	2.358	4.15

1. *Bovgyra O.V., Bovhyra R.V., Kovalenko M.V., Popovych D.I., Serednytski A.S.* Density functional theory study of structural and electronic properties of ZnO clusters // Journal of Nano- and Electronic Physics. – 2013. – 5, № 1. – P. 1027.

**AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF  $(\text{ZnO})_n$  NANOCCLUSERS**

*Density functional theory studies of the structural and electronic properties of  $(\text{ZnO})_n$  ( $n = 34, 60$ ) nanoclusters and native point defects in  $(\text{ZnO})_n$  nanoclusters ( $n = 34, 60$ ) were performed. Optimization of structure geometry, as well as the band structure research, was performed. It was established that for the  $(\text{ZnO})_{34}$  nanoclusters the most stable are fullerene-like hollow structures that satisfy the rule of six isolated quadrangles. For the  $(\text{ZnO})_{60}$  nanoclusters different types of isomers, including hollow structures and sodalite-like structures composed from  $(\text{ZnO})_{12}$  nanoclusters were investigated. It was determined that the most energetically favorable structure was sodalite type structure composed of seven  $(\text{ZnO})_{12}$  clusters with common quadrangle edges. The values for formation energy, HOMO-LUMO gap, as well as, the partial density of states for each cluster were investigated to establish the influence of the defects on the electronic properties of the  $(\text{ZnO})_n$  nanoclusters.*