

СТРУКТУРА ТА ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ НАНОКЛАСТЕРІВ ОКСИДУ ЦИНКУ (ZnO)_n, (n=96, 120)

Ростислав Бовгира

ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України, bovyhra@gmail.com

Проведено розрахунки, з перших принципів, методом теорії функціонала електронної густини енергетичного спектру та параметрів основного стану нанокластерів (ZnO)_n (n = 96, 120). Розрахунки були виконані у базисі плоских хвиль, з використанням ультрам'яких псевдопотенціалів, на основі попередніх досліджень [1]. Для обчислення обмінно-кореляційної енергії використано функціонал у наближенні узагальненого градієнта із поправками Габбарда (GGA+U) в параметризації Пердю, Бурке, Ернценхофа (PBE). Оптимізація структури нанокластерів проводилась методом спряжених градієнтів, в процесі оптимізації структури не використовувалося обмеження симетрії.

Для того, щоб визначити найбільш стабільну структуру для нанокластерів (ZnO)₉₆ і (ZnO)₁₂₀ було досліджено ряд ізомерів, серед них були фуллереноподібні порожнисті структури, структури типу клітки (cage structure) та содаліт подібні структури, які задовольняли правило шести ізолюваних чотирикутників та складались зі структурних одиниць (ZnO)₁₂.

Для аналізу стабільності кластерів ZnO було розраховано енергію зв'язку на одну молекулу ZnO. Аналіз значень енергії показує, що у випадку нанокластерів (ZnO)₉₆ найбільш енергетично вигідними є фуллереноподібні порожнисті структури. Підтвердженням високої стабільності цих кластерів є високе значення ширини забороненої зони, що робить їх хімічно інертними. У випадку з нанокластерами (ZnO)₁₂₀ найбільш стабільною є содаліт-подібна структура, яка складається з чотирнадцяти нанокластерів (ZnO)₁₂, які мають спільні чотирикутні грані. (рисунком 1)

Таблиця 1. Електронні властивості нанокластерів (ZnO)₉₆ та (ZnO)₁₂₀

Isomer	E _{total} /ZnO, eV	ΔE/ZnO, eV	E _b /ZnO, eV	E _g , eV
(ZnO) ₉₆ -фулерен	-50454.801	0	-6,897	2,99
(ZnO) ₉₆ -клітка	-50454.795	0.006	-6,888	2,79
(ZnO) ₉₆ -содаліт	-50454.799	0.002	-6,883	2,87
(ZnO) ₁₂₀ -фулерен	-50454.662	0,003	-6,950	2,93
(ZnO) ₁₂₀ -клітка	-50454.658	0.007	-6,947	2,86
(ZnO) ₁₂₀ -содаліт	-50454.665	0	-6,953	2,89

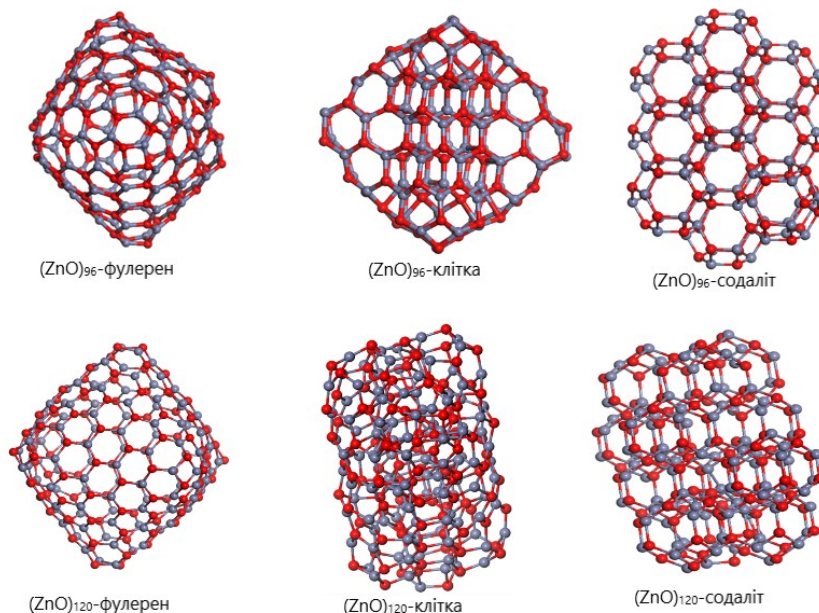


Рисунок 1. Оптимізовані структури найбільш стабільних нанокластерів (ZnO)₉₆ та (ZnO)₁₂₀

1. Bovgyra R.V., Popovych D.I., Bovhyra O.V., Serebnytski A.S. Ab Initio Study of Structural and Electronic Properties of (ZnO)_n “Magical” Nanoclusters, *n* = (34, 60) // *Nanoscale Research Letters*. – 2017. – 12. – А. 76.

AB INITIO STUDY OF STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF (ZnO)_n NANOCLUSTERS

*Density functional theory studies of the structural and electronic properties of (ZnO)_n (*n* = 34, 60) nanoclusters and native point defects in (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 (ZnO)₉₆ nanoclusters the most stable are fullerene-like hollow structures that satisfy the rule of six isolated quadrangles. For the (ZnO)₁₂₀ nanoclusters different types of isomers, including hollow structures and sodalite-like structures composed from (ZnO)₁₂ nanoclusters were investigated. It was determined that the most energetically favorable structure was sodalite type structure composed of fourteen (ZnO)₁₂ clusters with common quadrangle edges.*