

## ВИВЧЕННЯ СТРУКТУРНИХ ТА ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КЛАСТЕРІВ $(\text{ZnO})_n$ МЕТОДОМ ТЕОРІЇ ФУНКЦІОНАЛА ГУСТИНИ

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  $(\text{ZnO})_n$  ( $n = 34, 60$ ). Розрахунки виконано 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  $(\text{ZnO})_{34}$  і  $(\text{ZnO})_{60}$  досліджено ряд ізомерів, серед них були фуллереноподібні порожнисті структури та структури типу клітки, які задовольняли правило шести ізольованих чотирикутників. Крім того, побудовано структури типу цеоліту, що складались зі структурних одиниць  $(\text{ZnO})_{12}$ .

Таблиця 1. Електронні властивості нанокластерів  $(\text{ZnO})_{34}$  та  $(\text{ZnO})_{60}$

Isomer	$E_{\text{total}}/\text{ZnO}$ , eV	$\Delta E/\text{ZnO}$ , eV	$E_{\text{v}}/\text{ZnO}$ , eV	$E_{\text{g}}$ , eV
$(\text{ZnO})_{34\text{-A}}$	-50461.66	0	-6,764	2,275
$(\text{ZnO})_{34\text{-B}}$	-50461.64	0.02	-6,748	2,151
$(\text{ZnO})_{34\text{-C}}$	-50461.62	0.04	-6,724	2,048
$(\text{ZnO})_{34\text{-W}}$	-50461.54	0.12	-6,645	1,124
$(\text{ZnO})_{60\text{-sodalite}}$	-50461.744	0	-6,847	1,93
$(\text{ZnO})_{60\text{-A}}$	-50461.734	0.01	-6,836	2,184
$(\text{ZnO})_{60\text{-B}}$	-50461.732	0.012	-6,835	2,4
$(\text{ZnO})_{60\text{-W}}$	-50461.699	0.045	-6.802	0.982

**Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2017»,  
23–25 травня 2017 р., Львів**

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 фуллереноподібні порожнисті структури. Підтвердженням високої стабільності цих кластерів є високе значення ширини забороненої зони, що робить їх хімічно інертними.

У випадку з нанокластерами (ZnO)<sub>60</sub> найбільш стабільною є цеолітова структура, яка складається з семи нанокластерів (ZnO)<sub>12</sub>, які мають спільні чотирикутні грані.

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, N 1. – P. 1027.*

**DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY OF STRUCTURAL AND  
ELECTRONIC PROPERTIES OF (ZnO)<sub>n</sub> NANOCCLUSERS**

*Density functional theory studies of the structural and electronic properties of (ZnO)<sub>n</sub> (n = 34, 60) nanoclusters were performed. Optimization of structure geometry, as well as the band structure research, was performed. It was established that for the (ZnO)<sub>34</sub> nanoclusters the most stable are fullerene-like hollow structures that satisfy the rule of six isolated quadrangles. For the (ZnO)<sub>60</sub> nanoclusters different types of isomers, including hollow structures and sodalite-like structures composed from (ZnO)<sub>12</sub> nanoclusters were investigated. It was determined that the most energetically favorable structure was sodalite type structure composed of seven (ZnO)<sub>12</sub> clusters with common quadrangle edges.*