NGHIÊN CỨU MÔ PHỎNG ĐỘNG LỰC PHÂN TỬ CẤU TRÚC NANO XỐP ZnO KÊNH RÕNG DẠNG LỤC GIÁC

Nguyễn Thị Thảo¹

TÓM TẮT

Cùng với wurtzite (WZ) và zincblende, người ta đã tìm thấy một số lượng lớn oxit kẽm (ZnO) có các đa hình khác nhau với các đặc tính và ứng dụng khác nhau căn bản. Do đó, dự đoán và tổng hợp các nhóm đa hình mới của ZnO có ý nghĩa lớn và vẫn đang thu hút được sự quan tâm nghiên cứu đáng kể. Ở đây, chúng tôi thực hiện một nghiên cứu dựa trên phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ kết hợp gần đúng liên kết chặt (Density Functional Theory based Tight Binding - DFTB) để dự đoán lý thuyết một họ đa hình rỗng mới của ZnO bằng cách tiếp cận từ trên xuống. Hình thù của các thành tố cơ bản cho phép thu được họ cấu trúc nano ZnO xốp mật độ thấp với kênh rỗng hình lục giác. Tính toán của chúng tôi cũng chỉ ra rằng tất cả các cấu trúc rỗng được dự đoán/thiết kế đều là chất bán dẫn có vùng cấm rộng, thẳng giống như của cấu trúc khối ZnO. Cấu trúc vùng điện tử của cấu trúc nano xốp ZnO cũng được nghiên cứu chi tiết.

Từ khóa: Nano xốp, lý thuyết phiếm hàm mật độ, chất bán dẫn.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ngày nay, các vật liệu vô cơ mở khung (nano xốp) đã nhanh chóng trở thành một hướng nghiên cứu mạnh. Các vật liệu nano xốp đóng một vai trò quan trọng trong nhiều ứng dụng liên quan đến năng lượng và phát triển bền vững, ví dụ xúc tác, tách khí, lọc nước và pin nhiên liệu. Theo thực nghiệm, vấn đề chính của hướng nghiên cứu vật liệu khung mở là tìm ra các vật liệu sở hữu kênh và các tính năng mà làm cho chúng thành vật liệu nano xốp, chẳng hạn các hốc cơ sở/các lồng ở cấp độ nano. Về mặt lý thuyết, tìm kiếm các dạng thù hình rỗng mới không những cần thiết mà còn là thách thức. Cơ sở dữ liệu của Hiệp hội Zeolite quốc tế (IZA) cho thấy rằng, theo thời gian số lượng các loại cấu trúc khung nano xốp độc đáo đã tăng nhanh chóng, từ 27 loại trong năm 1970, lên 38 vào năm 1978, lên 64 trong năm 1988, lên 98 vào năm 1996 và đến 174 trong năm 2007 [9].

Ôxit kẽm (ZnO) được cho là vật liệu bán dẫn có nhiều tính chất thú vị và quan trọng hơn nhiều so với các vật liệu khác. Lý giải cho điều này là vì ZnO có thể được hiện thực hóa rất dễ dàng trong nhiều cấu trúc nano khác nhau, tính chất phát quang tuyệt vời và khả năng thay đổi độ rộng vùng cấm năng lượng, chẳng hạn trong cấu trúc nano dị chất vỏ-lõi, tính áp điện của nó tìm thấy ứng dụng như máy phát điện nano, tính tương thích sinh học của nó tìm thấy ứng dụng trong cảm biến hóa sinh, tính trong suốt cao và khả năng có tính sắt từ ở nhiệt độ phòng sẽ tìm thấy ứng dụng trong quang điện tử và điện tử học spin. Đến nay, các tìm kiếm để tổng hợp hoặc dự đoán lý thuyết các nhóm cấu trúc hay các đa hình hoặc pha mới cho các hợp chất này vẫn có ý nghĩa lớn và đang thu hút được sự quan tâm đáng kể [6].

¹ Giảng viên khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức

Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất một phương pháp lý thuyết để thiết kế họ cấu trúc nano ZnO xốp mật độ thấp với kênh rỗng hình lục giác từ một vài thành tố đơn vị rỗng được lựa chọn cẩn thận. Chúng tôi cho rằng phương pháp này có thể cung cấp một cách hữu hiệu để thiết kế mô hình tính toán vật liệu nano xốp. Ở đây, chúng tôi thảo luận về độ bền vững và cấu trúc điện tử của các vật liệu dựa trên các tính toán trong hình thức phiếm hàm mật độ kết hợp gần đúng liên kết chặt (DFTB).

2. NỘI DUNG

2.1. Phương pháp nghiên cứu

2.1.1. Phương pháp thiết kế cấu trúc

Trong phần này chúng tôi mô tả ngắn gọn phương pháp tiếp cận "từ trên xuống" để tiên đoán về mặt lý thuyết các tinh thể nano rỗng. Các thủ tục thiết kế được bắt đầu từ một số lượng lớn các siêu ô của tinh thể ZnO dạng WZ, rồi khoét đi các kênh rỗng dạng lục giác, để lại một khung xương rỗng. Tiếp đến, cấu trúc khung rỗng này được dịch chuyển về tâm đối xứng và được thực hiện các phép đối xứng có thể, để được ô mạng tinh thể nguyên thủy. Sau đó, các cấu trúc này được tiến hành tối ưu hóa cấu trúc, tức là cho phục hồi hay giải tỏa các biến dạng đi kèm với sự tồn tại của kênh rỗng cũng như bề mặt bên trong của các vách rỗng. Cuối cùng, các cấu trúc đã hồi phục này được tính toán các đặc trưng cấu trúc, điện tử và rút ra các quy luật liên quan.

Các cấu trúc nano xốp rỗng ZnO trong bài báo này được đặc trưng bởi kích thước hốc và độ dày vách, tất cả các hốc đều có hình lục giác nhưng có đường kính khác nhau, được đo bằng đơn vị kích thước khối lục giác. Chúng tôi đưa ra khái niệm độ dày vách với ngụ ý là độ dày nhỏ nhất giữa các hốc, cũng được đo bằng số lớp khối lục giác, có thể là đơn vách (SW), hai vách (DW), ba vách (3W) hoặc bốn vách (4W). Do đó, một cấu trúc được viết là SW-2 sẽ có hốc lục giác với kích thước 2 khối lục giác, được cách nhau bởi những vách đơn. Tương tự như vậy, cấu trúc 1.5W-2 là hốc lục giác với kích thước 2 khối lục giác với kích thước 4 khối lục giác, được cách nhau bởi những vách đơn. Tương tự như vậy, cấu trúc 1.5W-2 là hốc lục giác với kích thước 2 khối lục giác ra cấu trúc nhỏ nhất ở mỗi chuỗi được chỉ ra ở hình 1.



Hình 1. Bốn chuỗi cấu trúc nano xốp ZnO kênh rỗng lục giác thiết kế trong bài báo này (chỉ có hai đại diện nhỏ nhất cho mỗi chuỗi). Từ trái sang phải: SW-2, SW-3, 2W-2, 2W-3, 3W-2, 3W-3, 4W-2, 4W-3. Các quả bóng nhỏ (màu đỏ) là nguyên tử O, các quả bóng lớn (màu xám) là những nguyên tử Zn. Khung hình thoi là ô cơ sở

2.1.2. Phương pháp tính toán

Tính toán của chúng tôi dựa trên phương pháp phiếm hàm mật độ kết hợp gần đúng liên kết chặt (DFTB+) có phân cực spin và tự tương thích điện tích. Phương pháp này dựa trên việc khai triển đến gần đúng bậc hai phiếm hàm năng lượng tổng của hệ điện tử Kohn-Sham phụ thuộc vào spin của hệ điện tử tham chiếu cho trước nhất định và mật độ từ hóa. Phương pháp này đã được sử dụng phổ biến [5, 7] và được đưa ra một cách ngắn gọn như sau:

i) Khai triển các quỹ đạo theo tổ hợp tuyến tính các quỹ đạo Slater: $\psi_n(\vec{r}) = \sum_i \sum_{\nu} C_{i\nu} \phi_{i\nu} (\vec{r} - \vec{R}_i)$. Các hàm cơ sở $\phi_{i\nu} (\vec{r} - \vec{R}_i)$ tập trung vào hạt nhân nguyên tử thứ i, ở vị trí \vec{R}_i , bản thân chúng là tổ hợp tuyến tính của các quỹ đạo Slater đơn $\phi_{\nu}(\vec{r}) = \left(\sum_{j=1} \left(\sum_{n=0}^{\infty} a_{jn} \vec{r}^{l_{\nu}+n}\right) e^{-\alpha_j r}\right) Y_{l_{\nu}m_{\nu}}$. Lượng tử số góc và lượng tử số từ được xác định bởi l_{ν} và m_{ν} . $Y_{l_{\nu}m_{\nu}}$ là hàm cầu điều hòa tương ứng.

ii) Gần đúng liên kết chặt khai triển các hàm sóng (tính các yếu tố ma trận trong gần đúng hai tâm): $\sum_{i} \sum_{\nu} |H_{i\nu,j\mu} - ES_{i\nu,j\nu}| C_{i\nu,j\mu} = 0 \text{ với } H_{i\nu,j\mu} = \left\langle \phi_{i\nu} |\hat{H}| \phi_{j\mu} \right\rangle \text{ và } S_{i\nu,\mu j} = \left\langle \phi_{i\nu} | \phi_{j\mu} \right\rangle.$

iii) Khai triển phiếm hàm năng lượng Kohn-Sham đến gần đúng bậc hai (tự tương thích mật độ điện tích- SCC-DFTB): $E_{Total} = \sum_{\mu,\nu} \left(\frac{1}{2}\gamma_{\mu\nu}\Delta q_{\mu}\Delta q_{\nu}\right) + \sum_{i=1}^{I} n_i \left\langle \psi_i \left| \hat{H}_o \right| \psi_i \right\rangle + E^{rep}$

trong đó Δq_{μ} - là thăng giáng điện tích của từng đơn nguyên tử (điện tích Mulliken), $\gamma_{\mu\nu}$ - là hệ số được xác định từ tương tác Culomb giữa hai phân bố điện tích cầu tập trung quanh các nguyên tử μ và ν tương ứng, E^{rep} - là số hạng mô tả tương tác đẩy.

Tất cả các yếu tố ma trận và các quỹ đạo đều được suy ra từ việc tính phiếm hàm mật độ, lợi thế của phương pháp DFTB là dựa trên việc sử dụng bộ cơ sở nhỏ của các quỹ đạo nguyên tử (để giảm kích thước ma trận cho việc tăng tốc độ chéo hóa) và hạn chế đến hai tâm Hamilton không trực giao (cho phép sử dụng rộng rãi bảng tra cứu). Phương pháp này khác biệt so với phương pháp bán thực nghiệm là tính rõ ràng của hàm sóng cơ sở, cho chúng ta cái nhìn vật lý sâu sắc hơn và kiểm soát tốt hơn các gần đúng được sử dụng. Phương pháp này sử dụng hình chiếu điện tích Mulliken để giải phương trình Kohn-Sham bằng cách tự hợp và chứng minh cho khả năng đưa ra thế tương tác chính xác cũng như hiệu quả bằng số cho phép mô phỏng động lực phân tử của ô mạng chứa vài trăm đến một ngàn nguyên tử.

Như vậy đây là phương pháp đặc biệt thích hợp để nghiên cứu các tính chất điện và động lực của hệ vi mô lớn và phân tử hữu cơ như dây nano hay chất hấp thụ bề mặt, chất bán dẫn dị cấu trúc... [5]. Lợi thế của tham số DFTB chỉ là rất ít, có thể lựa chọn các hệ cần thiết để tạo ra các thông số, tức là trong DFTB các hệ làm khớp có thể cũng là các hệ hoàn toàn lý tưởng, nếu chúng được chấp nhận về mặt hoá học và được mô tả cẩn thận với phương

pháp ab-initio. Tiếp theo, tham số này có thể được sử dụng cho hệ lớn hơn nhiều do tính chuyển đổi của nó. Trong tính toán của chúng tôi, tham số và tính chuyển đổi của nó đã được áp dụng thành công trong một số công trình DFTB [7, 8]. Các tham số điện tử DFTB (tức là tham số Hubbard, và các yếu tố ma trận $H^o_{\mu\nu}$ và $S_{\mu\nu}$) được rút ra trực tiếp từ tính toán DFT, được thực hiện trong gần đúng gradient tổng quát (GGA) và sử dụng phiếm hàm trao đổi tương quan Perdew, Burke và Ernzerhof (PBE).

2.2. Kết quả thảo luận

2.2.1. Năng lượng liên kết, độ bền vững của pha

Để so sánh độ bền vững của các khung nano tinh thể xốp với các pha ZnO khối truyền thống, chúng tôi đã tính tổng năng lượng liên kết trên mỗi cặp ZnO theo thể tích tỷ đối cho tất cả các cấu trúc được nghiên cứu so với pha WZ-ZnO đã biết.



Hình 2. Sự phụ thuộc của năng lượng liên kết riêng (eV/ZnO) với thể tích tỷ đối cho tất cả các cấu trúc rỗng có kích thước nhỏ nhất (n = 2) của từng chuỗi

Trên cơ sở của những đường cong làm khớp bậc ba phi tuyến [2], chúng tôi rút ra một số kết luận về độ bền vững của chúng. Như chúng tôi đã dự kiến, các cấu trúc rỗng đã đề xuất đều đứng vững (tức là có thể tồn tại) trong tất cả các hệ cấu trúc tuần hoàn mà không bị sụp đổ về mặt cấu trúc, điều này có thể dẫn đến sự tồn tại của các pha nano xốp mật độ thấp của chúng. Như ở hình 2 cho ta thấy rằng các cấu trúc bền vững hơn về mặt năng lượng là tương ứng với độ dày của vách tăng lên. Mặc dù pha có độ bền vững cao nhất là pha không rỗng, hay chính là cấu trúc tinh thể WZ và có một năng lượng cân bằng, tuy nhiên các pha rỗng lại có thêm một phần năng lượng liên kết đến từ các quá trình hồi phục bề mặt nội tại. Sự ảnh hưởng của bề mặt bên trong cũng như tỉ số bề mặt bên trong trên - thể tích ở đây có thể được đánh giá qua số phối vị trung bình của cấu trúc, số này là ít hơn bốn phối vị (xem bảng1) và khác nhau cho từng nhóm cấu trúc, số này thay đổi khi kích thước thay đổi.

2.2.2. Cấu trúc vùng điện tử

Để biết liệu các cấu trúc ZnO xốp được dự đoán, nếu được tổng hợp có sở hữu các đặc tính mới lạ không, chúng tôi khảo sát các cấu trúc điện tử của chúng. Hình 3 cho thấy sự phụ thuộc độ rộng vùng cấm của các cấu trúc rỗng này theo kích thước của hốc rỗng, tất cả các vùng cấm của chúng đều nhỏ hơn so với cấu trúc khối WZ. Việc tất cả các độ rộng vùng cấm của các cấu trúc rỗng đều nhỏ hơn WZ đã được chỉ ra bởi L.Sponza và cộng sự (2015) là do tác động của thế tĩnh điện lên các anion V_o và cation V_{Zn} dẫn đến một đóng góp cỡ $V = V_o - V_{Zn} > 0$ cho việc chia tách mức năng lượng của nguyên tử và độ rộng vùng cấm. Hơn nữa, chúng tôi cũng quan sát thấy việc tồn tại một giá trị vùng cấm nhỏ hơn trong một vài cấu trúc đầu tiên của một số nhóm, ví dụ 2W-2, 4W-2... so sánh với 2W-3, 4W-3, điều này là do hiệu ứng bề mặt làm xuất hiện các trạng thái bề mặt ở ngay trong vùng cấm.



Hình 3. Độ rộng vùng cấm theo kích thước hốc rỗng

Tính toán của chúng tôi cho thấy rằng độ rộng vùng cấm của chúng dao động trong khoảng từ 3.7eV với cấu trúc 4W đến 4.1eV với SW. Vì vậy, có thể kết luận là tất cả các

pha mới thu được vẫn là các bán dẫn có vùng cấm rộng và thẳng ở điểm gamma (Γ) như của cấu trúc gốc WZ-ZnO. Các cấu trúc rỗng cho các kết quả khác chủ yếu ở mặt cắt tiết diện ngang các hướng H-K- Γ -M-L, gây ra bởi việc làm phẳng các vùng năng lượng (hình 4).



Hình 4. Từ trái sang phải, cấu trúc vùng năng lượng của khối WZ-ZnO và SW-2, DW-2

Các liên kết treo trong bề mặt gây ra sự hồi phục bề mặt, có thể được quan sát thấy bởi sự chuyển động vào phía bên trong mặt của các vị trí anion (Zn), dẫn đến sự co nhăn lại bề mặt ngoài của các vách rỗng (hình 1). Demiroglu và cộng sự (2014) cho rằng, bình thường thì việc hình thành các khoảng trống trong không gian của một tinh thể tuần hoàn đậm đặc sẽ loại bở một số nguyên tử và qua đó cũng loại đi đóng góp vào việc hình thành cấu trúc vùng của chúng, kết quả là làm cho độ rộng vùng cấm nhỏ hơn. Lưu ý rằng các hốc ở đây không đưa thêm vào các trạng thái trong vùng cấm thông qua việc tạo ra các khuyết tật, ngoại trừ thông qua các trạng thái bề mặt như đã nói trên. Đây cũng là lý do mà dáng điệu của độ rộng vùng cấm trở nên phẳng khi không gian trống của hốc bên trong làm hạn chế sự chồng chéo, xen phủ lẫn nhau trong hầu hết phương tiết diện ngang khắp các tinh thể. Đó cũng chính là hiệu ứng của việc cấu trúc xốp làm giảm sự hình thành cấu trúc vùng năng lượng như được chỉ ra tại [1] hay cụ thể nó tuân theo dáng điệu dự kiến của hiệu ứng giam hãm lượng tử.

2.2.3. Các thông số cấu trúc

Để đánh giá sự tin cậy cho các cấu trúc nano xốp rỗng chúng tôi đã tính các thông số đặc trưng cho từng cấu trúc rỗng xốp (bảng 1).

~	~~~~			
Câu trúc	SW-2	DW-2	3W-2	4W-2
Mật độ khối lượng (gcm ⁻³)	3.975	5.126	4.757	5.257
Thể tích riêng V/at (Å ³ /at)	17.002	13.183	14.205	12.854
Mật độ hạt $(10^{23} \text{ cm}^{-3})$	36.588	46.759	96.704	106.778
Số phối vị trung bình	3.67	3.87	3.87	3.94
Cấu trúc tinh thể	Hex.	Hex.	Hex.	Hex.
Nhóm đối xứng tinh thể	P63MC 185	P31M 157	P63MC 185	P31M 157
Số nguyên tử trong ô đơn vị	36	46	96	106
Hằng số mạng (a-c) (Å)	11.40 5.44	11.40 5.40	17.08 5.40	17.10 5.39
Độ dài liên kết (Å)	2.00	2.01	2.01	2.013
Góc liên kết	108.65	109.18	109.09	109.34
Zn-O-Zn/O-Zn-O	111.25	110.06	110.05	109.72
Độ rộng vùng cấm (eV)	4.12	3.82	3.87	3.79
Diện tích bề mặt tiếp cận $(Å^2)$	130.27	42.79	127.77	43.63
Thể tích rỗng (Å ³)	163.67	20.72	156.60	21.02

Bảng 1. Các đặc tính tiêu biểu của mỗi loại từ các cấu trúc nghiên cứu

Sự bền vững của các cấu trúc được nghiên cứu là bằng chứng rõ ràng cho thấy một cách hợp lý để tin rằng các cấu trúc tinh thể được tạo ra bằng phương pháp tiếp cận từ trên xuống sẽ là mục tiêu tổng hợp nên các đa hình hấp dẫn. Cấu trúc vùng và các phân tích trên bảng 1 cho thấy số phối vị trung bình cho cấu trúc bất kỳ gần như bằng bốn (ngoại trừ một số nhỏ các liên kết treo do bề mặt bên trong của hốc), tức là mỗi nguyên tử Zn (O) có gần bốn nguyên tử O (Zn) bên cạnh hình thành một kiểu lai hóa dạng sp3 biến dạng cho hầu hết tất cả các cấu trúc. Vì vậy, bằng cách này đã giữ lại tính chất quan trọng của vật liệu ZnO như: bán dẫn vùng cấm rộng, áp điện và trong suốt quang học với ánh sáng nhìn thấy.

Kết quả bảng 1 cho thấy, thể tích mỗi nguyên tử của các cấu trúc rỗng ZnO cao hơn từ 8% đến 57.0% so với WZ (11.9 Å³). Một cách tự nhiên, điều này dẫn đến độ linh hoạt và khả năng nén cao hơn của các pha rỗng này. Do đó, các pha nano xốp mới này nếu được tổng hợp sẽ là một trong những ứng cử viên hứa hẹn nhất của siêu vật liệu cơ học để thay thế các vật liệu đắt tiền, dễ bị gãy vỡ cơ học hoặc các vật liệu dùng cho việc lọc các phân tử. Độ rộng vùng cấm của chúng thay đổi được và diện tích bề mặt bên trong rộng cũng là lợi thế cho các giải pháp đầy hứa hẹn trong việc chuyển đổi hiệu quả năng lượng mặt trời thành hóa năng lượng và phản điện hóa nước thay thế cho các cấu trúc vi/nano khuôn từ vật liệu TiO₂. Các thông số cấu trúc thiết yếu khác, chẳng hạn như các hằng số mạng tinh thể, mật độ hạt, mật độ khối lượng, cấu trúc mạng tinh thể đi kèm với nhóm đối xứng không gian, cho thấy rằng tất cả các pha này đều là các pha tinh thể có tính đối xứng cao, nghĩa là đi kèm với sự ổn định cao.

3. KÉT LUÂN

Dự đoán lý thuyết của chúng tôi về các ứng cử viên cho các cấu trúc tinh thể nano xốp ZnO dạng hốc lục giác theo cách tiếp cận mô hình topo, các cấu trúc này có tính đối

xứng tương tự với pha WZ-ZnO nhưng với kích thước hốc và độ dày vách khác nhau. Các phân tích về cấu trúc, tính chất điện tử cho thấy rõ rằng, các pha rỗng có thể tồn tại trong các cấu trúc tuần hoàn mà không làm sụp đổ cấu trúc, điều này có thể dẫn tới việc tồn tại các pha nano xốp và vật liệu tinh thể có mật độ thấp. Một yếu tố quan trọng cho các ứng dụng thực tế là khả năng điều chỉnh độ rộng vùng cấm, do ảnh hưởng của kích thước lỗ (hốc) và phân bố hình dạng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] A. Martijn Zwijnenburg, F. Illas and S. T. Bromley (2010), *Apparent Scarcity of Low-Density Polymorphs of Inorganic Solids*. Phys. Rev. Lett. 104 (17), 175503.
- [2] From Wikipedia, the free encyclopedia Birch Murnaghan equation of state [https://en.wikipedia.org/wiki/Birch-Murnaghan_equation_of_state].
- [3] I. Demiroglu, S. Tosoni, F. Illasa and T. Stefan Bromley (2014), *Bandgap engineering through nanoporosity*. Nanoscale 6(2), 1181-1187.
- [4] L. Sponza, J. Goniakowski, and C. Noguera (2015), *Structural, electronic, and spectral properties of six ZnO bulk polymorphs.* Phys. Rev. B 91(7), 075126.
- [5] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suha, G. Seifert (1998), Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties. Phys. Rev. B 58 (11), 7260.
- [6] Magnus Willander (2014), *Zinc Oxide Nanostructures Advance and Applications*. Pan Stanford Publisher.
- [7] Simulation code dftb+ at http://www.dftb-plus.info/
- [8] Vu Ngoc Tuoc (2010), *The self-consistent charge density functional tight binding study on wurtzite nanowire*. Computational Materials Science 49, S161-S169.
- [9] W. J. Roth, P. Nachtigall, R. E. Morris, P. S. Wheatley, V. R. Seymour, S. E. Ashbrook, P.Chlubná, L. Grajciar, M. Polozij, A. Zukal, O, Shvets & J. Cejka (2013), *A family of zeolites with controlled pore size prepared using a top-down method*. Nature Chemistry 5 (7), 628-633.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY ON ZnO NANOPOROUS STRUCTURE WITH HEXAGONAL HOLLOW

Nguyen Thi Thao

ABSTRACT

Along with zincblende and wurtzite, a large amount of zinc oxide (ZnO) has been found with different polymorphisms with different basic properties and applications. Thereby synthesizing and predicting new polymorphic groups of ZnO are of great significance and are still gaining considerable research interests. Here we perform a study based on the DFTB method to predict several new classes of ZnO polymorphisms by a top-down approach. The shape of the basic elements allows for obtaining a series of hexagonal, low density nanoporous ZnO hollow structure. Our calculations also explore that all hollow structures are predicted/designed to be semiconductors having the large, straight band gap like the bulk ZnO. The electronic band structure of the ZnO nanoporous are finally investigated in detail.

Keywords: Nanoporous, theory density functional (DFT), semiconductor.