

ZnO₂ MODEĻĒŠANA NO PAMATPRINCIPIEM: KOMPARATĪVS DFT PĒTĪJUMS

Andrejs Česnokovs¹, Deniss Grjaznovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹, Juris Purāns¹
¹*Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts*

Viena no bieži minētām *ab initio* modelēšanas priekšrocībām (vispārīgi un īpaši blīvuma funkcionāla teorijas (DFT) gadījumā) ir spēja iegūt informāciju par eksotiskiem materiāliem, par kuriem nav eksperimentālu datu. Tilpuma fāzes cinka dioksīds (ZnO₂) ir eksotiskais materiāls, kaut arī tas ir ķīmiski pieejams un tehnoloģiski nozīmīgs, ar plašu pielietojuma klāsta diapazonu, no tehniskās piedevas gumijām, plastikātiem un kosmētikai, līdz ķīmiskās attīrīšanas līdzeklim, un pat līdz caurspīdīgas elektronikas pamatmateriālam. ZnO₂ tiek sintezēts nanodaļiņu veidā, un tā tilpumfāze paliek neizpētīta.

Šajā darbā mēs sniedzam šī materiāla detalizēto teorētisko aprakstu un apspriežam metodoloģiju un iegūto rezultātu ticamību speciālajā gadījumā kad nav pieejami eksperimentālie references rezultāti. Šobrīd jautājums par DFT rezultātu reproducējamību ir kļuvis par aktuālu pētījumu virzienu, līdz ar mēģinājumiem kvantificēt metodes nenoteiktību. Mēs salīdzinām dažādas DFT implementācijas un apspriežam to ietekmi uz prognozētām ZnO₂ īpašībām.

FIRST-PRINCIPLES DESCRIPTION OF ZnO₂: A COMPARATIVE DFT STUDY

Andrejs Česnokovs¹, Deniss Grjaznovs¹, Dmitrijs Bočarovs¹, Juris Purāns¹
¹*Institute of Solid State Physics, University of Latvia*

One of the often-mentioned strengths of *ab initio* modelling in general and density functional theory (DFT) in particular is the ability to gain insights about physical properties of exotic materials for which experimental data is difficult to obtain. Bulk-phase zinc dioxide (ZnO₂) is exotic material, despite being chemically available, industrially important material, the utility of which spans the range from a technological additive to rubber, plastics and cosmetics to a chemically active purifying agent, to a prospective component for transparent electronics. It has only been synthesized as nanoparticles of various sizes, and its bulk phase remains uncharacterised.

In this work we present a detailed computational description of this material and discuss methodology and reliability of results, obtained without experimental reference. Recently the topic of reproducibility of DFT results has gained more attention, with an ongoing effort to quantify the errors produced by the method. We compare different DFT implementations and discuss their impact on the predicted properties of ZnO₂.

The financial support of ERAF project 1.1.1.1/18/A/073 Smart Metal Oxide Nanocoatings and HIPIMS Technology is greatly acknowledged.