

## Efecto del coeficiente U de Hubbard sobre las propiedades ópticas y cargas de los semiconductores TiO<sub>2</sub> y el ZnO

• Ana Cecilia Rossi Fernández,<sup>1</sup> Lorena Meier,<sup>2</sup> Ana Belén Schvval,<sup>2,3</sup> María Julia Jiménez,<sup>2</sup> Gabriela Fernanda Cabeza,<sup>2</sup> Cecilia Ines Nora Morgade<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup>INQUISUR - Dpto. Química - Universidad Nacional del Sur

<sup>2</sup>IFISUR, Universidad Nacional del Sur, CONICET, Departamento de Física, Av. Alem 1253, 8000 Bahía Blanca, Argentina

<sup>3</sup>Departamento de Química - Universidad Nacional del Sur

<sup>4</sup>Universidad Tecnológica Nacional

Las nanoestructuras de semiconductores como el TiO<sub>2</sub> y el ZnO han demostrado ser capaces de mediar la oxidación fotocatalítica de contaminantes orgánicos para su eliminación del agua. Por eso es interesante la descripción correcta de sus propiedades electrónicas y ópticas. La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)<sup>1</sup> suele subestimar por ejemplo el ancho de banda prohibida (BG) de estos óxidos. Entonces para resolver los errores de auto-interacción para materiales de electrones fuertemente correlacionados se utiliza el método conocido como DFT + U<sup>2</sup>). Este método impone un coeficiente U, de Hubbard, de funcional tipo Coulomb para la representación correcta de los orbitales d de metales de transición como el Ti y el Zn. En el presente trabajo teórico se pudo evaluar como el factor U utilizado afecta las distintas propiedades ópticas y la carga de los átomos. Se pudieron calcular las partes imaginarias y reales de la función dieléctrica, reflectividad  $R(\omega)$ , Índice de refracción  $n(\omega)$ , coeficiente de extinción  $k(\omega)$ , coeficiente de absorción  $\alpha(\omega)$  y la función de pérdida de energía de electrones  $L(\omega)$ . Es importante destacar que las curvas obtenidas considerando la inclusión del parámetro U aplicado a los orbitales d muestran un excelente acuerdo con los datos reportados experimentalmente. Con respecto al efecto sobre las cargas, se pudo determinar que en TiO<sub>2</sub> (anatasa o rutilo) el volumen de la esfera con la que se calculan las cargas de Bader aumenta con el valor del U, mientras que en ZnO ocurre lo opuesto.

### Referencias:

[1] Hohenberg, H., and Kohn, W., Phys. Rev. B **136**, 864 (1964).

[2] Anisimov, V., Aryasetiawan, F., and Lichtenstein A. I., J. Phys. Condens. Matter **9**, 767 (1997).