

## Efecto del coeficiente $U$ de Hubbard sobre las propiedades ópticas y cargas de los semiconductores $\text{TiO}_2$ y el $\text{ZnO}$

• 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  $\text{TiO}_2$  y el  $\text{ZnO}$  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  $\text{Ti}$  y el  $\text{Zn}$ . 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  $\text{TiO}_2$  (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  $\text{ZnO}$  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).