



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ESTUDIO TEÓRICO COMPARATIVO DEL EFECTO DEL COEFICIENTE U DE HUBBARD EN LOS SEMICONDUCTORES TiO₂ Y ZnO

Rossi Fernández Ana C¹, Schvval Ana B¹, Jiménez María J¹, Cabeza Gabriela F¹, Morgade Cecilia I N^{1,2}

¹Grupo de Modelización de propiedades fisicoquímicas de materiales y sistemas catalíticos perteneciente al Instituto de Física del Sur (IFISUR-CONICET), Universidad Nacional del Sur (UNS), Av. Alem 1253, Bahía Blanca, B8000CP, Argentina

²Universidad Tecnológica Nacional, 11 de Abril 461, Bahía Blanca, B8000CP, Argentina
ana.rossi@uns.edu.ar

Introducción

Las nanoestructuras de semiconductores como el TiO₂ 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. La Teoría de la Funcional Densidad (DFT)¹ suele subestimar 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 + U². 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 se pudo comprobar como el factor U utilizado afecta a los parámetros de red y esta variación se produce en sentido opuesto para dichos óxidos.

Resultados

A continuación se presenta una tabla con los resultados de la utilización de algunos valores de U para orbitales d metálicos para TiO₂ A (Anatasa), TiO₂ R (Rutilo), ZnO W (Wurzita).

Tabla 1: Parámetros de celda a (Å) y BG (eV) para algunos valores de U. Se indican entre paréntesis los respectivos valores experimentales.

U	TiO ₂ A	TiO ₂ R		U ZnO	ZnO W		
	a (3.78Å)	BG (3.2eV)	a (4.58Å)		BG (3eV)	a (3.25Å)	BG (3.4eV)
0	3.76	2.06	4.66	1.68	0	3.26	0.6
2	3.81	2.21	4.67	1.91	5	3.21	1.35
6	3.89	2.78	4.71	2.38	9	3.13	2.02
8	3.92	3.21	4.73	2.61	13	3.01	3.29
10	3.96	3.07	4.76	2.52	14	2.94	3.89

Conclusiones

En TiO₂ A y TiO₂ R a medida que el factor U se incrementa aumentan tanto el BG como el parámetro de red. Por el contrario, para el ZnO W, al crecer U aumenta el valor del BG pero disminuye el valor del parámetro de celda.

Referencias

- 1) Hohenberg, H., Kohn, W., *Phys. Rev. B*, **1964**, 136, 864-871.
- 2) Anisimov, V., Aryasetiawan, F., Lichtenstein A. I., *J. Phys. Condens. Matter*, **1997**, 9, 767-808,.