



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

A. C. Rossi Fernandez¹, A. B. Schvval², M. J. Jimenez², G. F. Cabeza², C. I. N. Morgade^{2,3*}

¹ Instituto de Química del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca

² Instituto de Física del Sur - Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca

³ Universidad Tecnológica Nacional, Bahía Blanca.

* cmorgade@frbb.utn.edu.ar

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. En el caso de estos óxidos de metales de transición se conoce que la Teoría del Funcional Densidad (DFT)¹ suele subestimar el ancho de su banda prohibida (BG). Un enfoque viable para resolver los errores de auto-interacción para materiales de electrones fuertemente correlacionados es el uso de métodos conocidos como DFT + U². Este método impone un adicional (U) de funcional tipo Coulomb para la representación correcta de los orbitales *d* de metales de transición como el Ti y el Zn. La determinación de este factor de corrección para un elemento dado requiere varias pruebas y la comparación de la estructura calculada con datos experimentales. Es interesante destacar que el factor U utilizado en los cálculos afecta a los parámetros de red y esta variación se produce en sentido opuesto para dichos óxidos. En TiO₂ a medida que el factor U se incrementa aumentan tanto el BG como el parámetro de red. Por el contrario, para el ZnO, 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*, Vol. 136 , 864-871, 1964.
2. Anisimov V., Aryasetiawan F., Lichtenstein A. I., *J. Phys. Condens. Matter*, Vol. 9, 767-808, 1997.