



PIBIC/CNPq/UFPG-2011

Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Ópticas do TiO₂ por Cálculos de Primeiros Princípios.

Allyson Irineu Araújo¹, José de Miranda Henriques Neto²

RESUMO

O dióxido de titânio (TiO₂) tem sido amplamente investigado recentemente devido a seu potencial de aplicações em optoeletrônica, produção de pigmentos e filmes, e para desenvolvimento de materiais biocompatíveis. As propriedades estruturais cristalográficas do TiO₂ nas fases rutila e anatase (parâmetros de rede, distâncias interatômicas e ângulos de ligação) foram inicialmente determinadas através de processo de otimização autoconsistente desenvolvido no referencial da teoria do funcional da densidade (DFT) e utilizando-se a aproximação da densidade local (LDA). A estrutura eletrônica de bandas, a densidade de estados, a função dielétrica e a absorção óptica foram calculadas a partir da otimização da estrutura cristalina com a mesma metodologia teórica. As energias de gap e as transições entre pontos de mais alta simetria na zona de Brillouin foram estabelecidas confirmando resultados obtidos por outros métodos encontrados na literatura.

Palavras-chave: TiO₂, estrutura eletrônica, propriedades ópticas.

STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF TiO₂ FROM FIRST PRINCIPLES CALCULATION

ABSTRACT

Titanium dioxide has been received great attention in recent years due to the wide range of its applications. TiO₂ is used in heterogeneous catalysis, in solar cells, as gas sensor, white pigment (in paints and cosmetic products), optical coating, and is being considered as a gate insulator for the new generation of MOSFETS. It plays an important role in the biocompatibility of bone implants. Structural, electronic and optical properties of TiO₂ single crystal in rutile and anatase phases were studied in the framework of density functional theory (DFT) within the local density approximation (LDA). The electronic band structure, density of states, dielectric function and optical properties was calculated using the same methodological tools from optimized crystalline structure. The gap energy and the transitions between high symmetry points on the first Brillouin zone were determined. Our results have been supported by literature in good approximation.

Keywords: TiO₂, electronic structure, optical properties.

¹ Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Educação, Centro de Educação e Saúde, UFPG, Cuité, PB, E-mail: allyson@gmail.com

² Licenciatura em Física, Professor. Doutor, Unidade Acadêmica de Educação, Centro de Educação e Saúde, UFPG, Cuité, PB, E-mail: miranda@ufcg.edu.br *Autor para correspondências.