



CÁLCULOS AB INITIO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS E ELETRÔNICAS DE COMPOSTOS DE CÁLCIO E CÁDMIO

Allyson Irineu Araújo Lima¹, José de Miranda Henriques Neto²

RESUMO

As propriedades estruturais, eletrônicas e ópticas do hidróxido de cádmio (β - $\text{Cd}(\text{OH})_2$) hexagonal foram determinadas através de cálculos de primeiros princípios desenvolvidos no referencial da teoria do funcional da densidade (DFT), utilizando-se a aproximação da densidade local (LDA) e aproximação do gradiente generalizado (GGA). A estrutura eletrônica de bandas, densidades de estado, função dielétrica e absorção óptica associada a transições eletrônicas foram obtidas. Uma boa concordância entre os parâmetros de rede calculados e os experimentais foi obtida, e um band gap indireto de $M \rightarrow \Gamma$ foi estimado na aproximação GGA (LDA) para o β - $\text{Cd}(\text{OH})_2$ hexagonal.

Palavras-chave: β - $\text{Cd}(\text{OH})_2$, propriedades ópticas e eletrônica.

AB INITIO CALCULATIONS OF ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF CALCIUM AND CADMIUM COMPOUNDS

ABSTRACT

β - $\text{Cd}(\text{OH})_2$ crystals were investigated using both the local density and generalized gradient approximations, LDA and GGA, respectively, of the density functional theory (DFT). The electronic band structures, densities of states, dielectric functions and optical absorption related to electronic transitions were obtained. The results show that GGA-optimized geometries are more accurate than LDA ones, and the Kohn–Sham band structures obtained for the β - $\text{Cd}(\text{OH})_2$ confirm that it has an indirect band gap $M \rightarrow \Gamma$, being semiconductor. The optical properties reveal a very small degree of anisotropy with respect to different polarization planes of incident light.

Keywords: β - $\text{Cd}(\text{OH})_2$, Electronic and Optical Properties.

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

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