



Pró-Reitoria
de Pesquisa
e Extensão



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

Allyson Irineu Araújo¹, José de Miranda Henriques Neto²

RESUMO

As propriedades estruturais do CaSnO_3 ortorrômbico 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). Uma boa concordância entre os parâmetros de rede calculados e os experimentais foi obtida, e um gap direto de energia de 1,945 eV (2,912 eV) foi estimado na aproximação GGA (LDA) para o CaSnO_3 ortorrômbico. A estrutura eletrônica de bandas, densidade de estados, função dielétrica e absorção óptica foram obtidos com o mesmo procedimento de cálculo. O espectro e a densidade de estados de fônons, o espectro Raman, o espectro de infravermelho e as propriedades termodinâmicas foram determinadas considerando-se apenas a aproximação do gradiente generalizado (GGA).

Palavras-chave: CaSnO_3 , propriedades ópticas e eletrônica, propriedade vibracionais e termodinâmicas.

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

ABSTRACT

Density functional theory *ab initio* calculations of the structural parameters, electronic structure, and optical absorption of orthorhombic CaSnO_3 were performed within the local density and generalized gradient approximations, LDA and GGA, respectively. A good agreement between the calculated lattice parameters and experimental results was obtained, and a direct energy gap of 1.945 eV (2.912 eV) is estimated in the GGA (LDA) for orthorhombic CaSnO_3 . The computed band structure and density of states allowing us to suggest that direct gap orthorhombic CaSnO_3 is a semiconductor with potential for optoelectronic applications. The optical absorption increases for photon energies larger than 7.0 eV due to the appearance of transitions involving O 2p valence states and Ca 3d conduction states. We performed vibrational calculations within generalized gradient (GGA) to determine Raman and IR spectra, phonon density of state and phonon spectrum, and thermodynamic properties.

Keywords: CaSnO_3 , Electronic and Optical Properties, Vibrational and Thermodynamic Property.

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

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