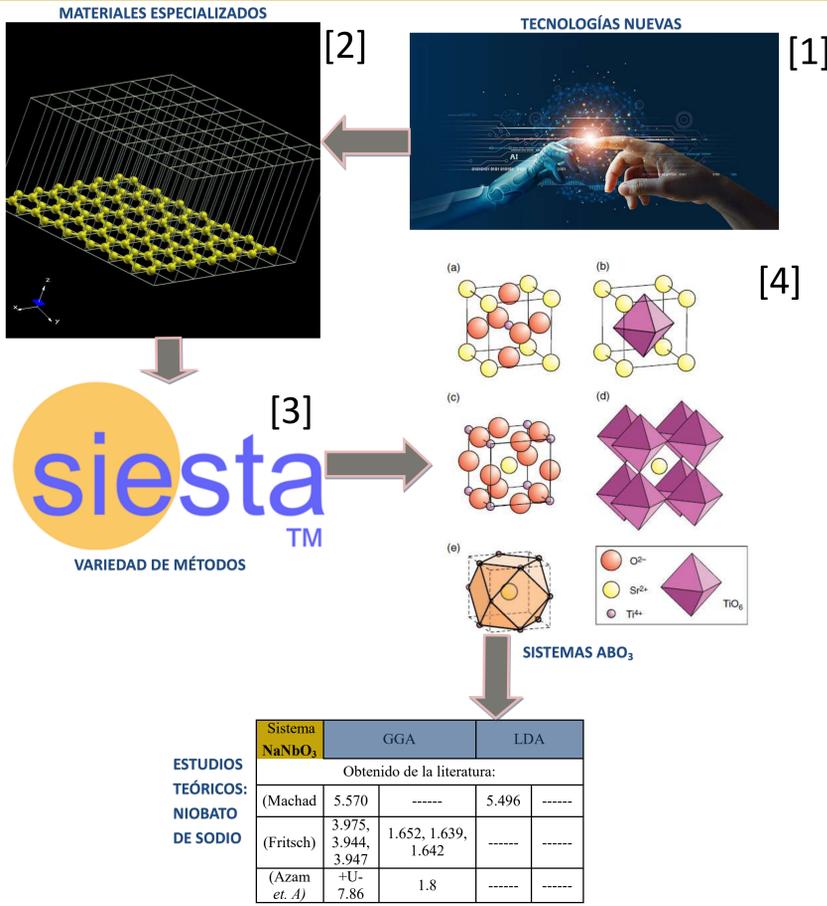


Resumen

El diseño de materiales con propiedades electromagnéticas ajustables derivadas de la disposición espacial de los átomos en la estructura cristalina representa un reto tecnológico e instrumental importante. En esta investigación se presenta el estudio teórico *ab initio* de una de las perovskitas más complejas tipo Bridgmanita, el niobato de sodio, mediante el empleo de un código sustentado en la Teoría del Funcional de la Densidad, para la simulación de su comportamiento estructural, electrónico y óptico. En un inicio, se relajó el sistema disminuyendo las distancias interatómicas optimizando el parámetro de red de la fase cúbica, con valores de 3.900 Å con la Aproximación de Densidad Local y de 4.040 Å con la Aproximación de Gradiente Generalizado. Posteriormente, ajustando la malla para los puntos de alta simetría se obtuvieron las estructuras de bandas con brechas prohibidas indirectas de 1.28 y 1.05 eV. En virtud de obtener la densidad de estados electrónica se descubrió que el comportamiento del niobato de sodio es de semiconductor extrínseco, denotando amplias aplicaciones en fotocatalisis, y células solares. A su vez, el cálculo de la función dieléctrica imaginaria en ambos pseudopotenciales presentaron pérdidas de polarización mayoritariamente entre 2 y 6 eV, lo cual, significó que los dipolos comenzaron a alinearse. El niobato de sodio fase cúbica tiene un comportamiento opto-electrónico idóneo para fotocatalisis y células solares que difiere de lo reportado, confirmado con la contribución de los estados electrónicos y la curva de la parte imaginaria de la función dieléctrica compleja en los rangos de los espectros ultravioletas que se asocian a las transiciones electrónicas entre las bandas de valencia y conducción.

Palabra clave: niobato de sodio, estado electrónico, función dieléctrica, ultravioletas, homogeneidad óptica

Introducción

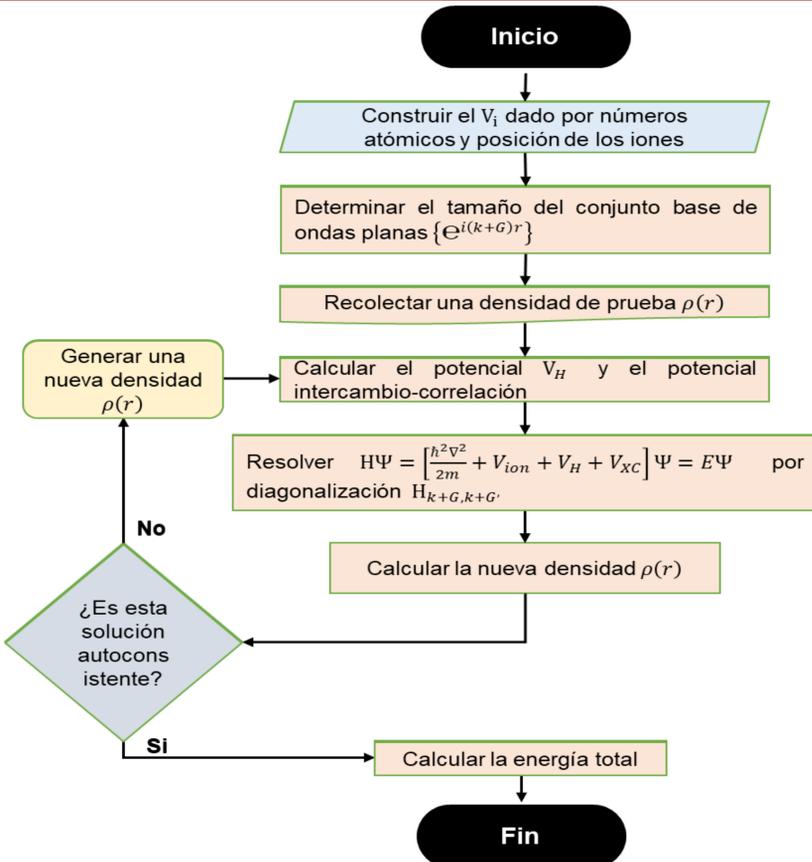


[5,6,7]

Objetivo

Simular la perovskita NaNbO_3 *ab initio* sustentado en DFT para el cálculo de sus propiedades estructurales, electrónicas y demostrar un comportamiento óptico para proponerlo en alguna metaestructura.

Metodología



Resultados

Optimización de la geometría

En la optimización geométrica se busca encontrar el conjunto de coordenadas que minimice las distancias interatómicas y por lo tanto la energía total del sistema localizando el mínimo de la energía superficial para el cálculo en el equilibrio de sus propiedades electrónicas y ópticas.

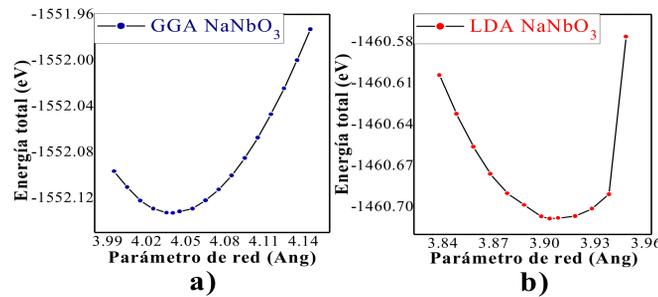


Figura 2. Gráfica de parámetro de red y la energía total del sistema, a) GGA y b) LDA.

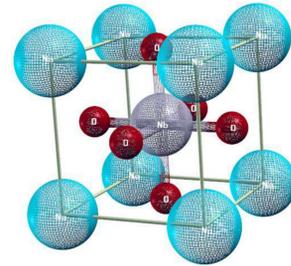


Figura 3. Estructura cúbica de NaNbO_3 por XCRYSDEN.

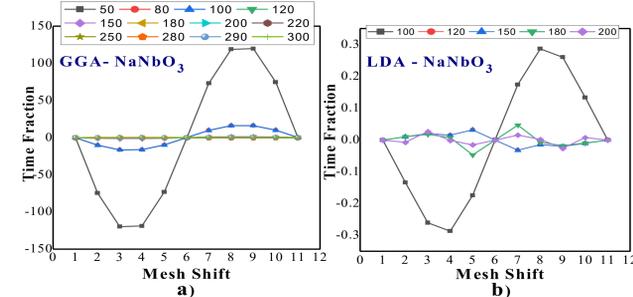


Figura 1. Gráfica de fracción de tiempo y pasos de la malla con la energía de corte, a) GGA y b) LDA.

[8]

	a_{in} (Å)	a_{out} (Å)	Nb-Na (Å)		Nb-O (Å)		Na-O (Å)	
			Inicial	Final	Inicial	Final	Inicial	Final
NaNbO ₃ - GGA	3.945	4.040	6.4562	6.2095	1.9725	2.0335	2.7895	2.7503
NaNbO ₃ - LDA	3.945	3.900	6.4562	6.0107	1.9725	1.9629	2.7895	2.7792

Figura 4. Parámetros de red y distancias interatómicas antes (in) y después (out) de la optimización.

Función dieléctrica imaginaria

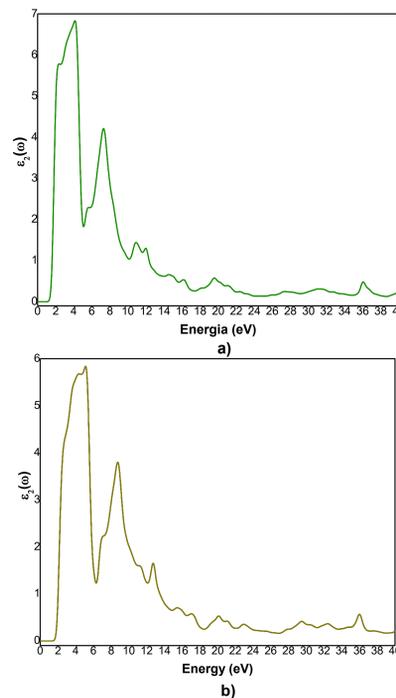


Figura 6. Función dieléctrica imaginaria del NaNbO_3 , a) GGA y b) LDA.

Estructura de bandas y densidad de estados

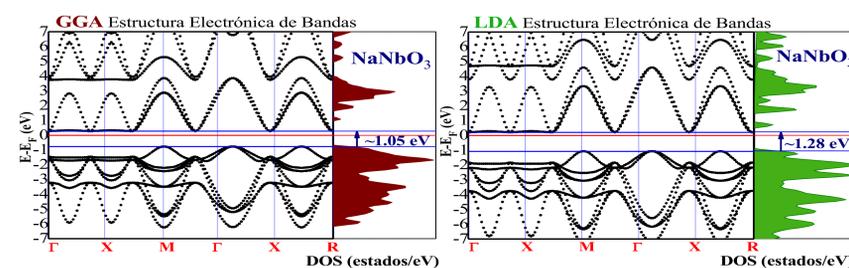


Figura 5. Estructura de bandas y densidad de estados electrónica (DOS) del NaNbO_3 , a) GGA y b) LDA.

Conclusión

El estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de la fase cúbica de la perovskita NaNbO_3 se hizo empleando cálculos a primeros principios considerando una celda unitaria de 5 átomos. Se observó un semiconductor de banda prohibida indirecta. En relación a la reproducción del parámetro de red del Niobato de Sodio los resultados fueron óptimos con tan sólo un error relativo al reproducir el sistema en equilibrio estructural de 2.4% y 1.14% con GGA y LDA respectivamente, siendo GGA un pseudopotencial con mayor precisión. Las estructuras de bandas electrónicas tienen un comportamiento similar para ambos pseudopotenciales, y siendo prominente para aplicaciones en lentes ópticas, células fotovoltaicas, circuitos integrados, y fotocatalisis (como bien se reporta del NaNbO_3). Por otra parte, la energía que se consideró refiere a las ondas de los Rayos Gamma y abarca un poco el espectro de radio; llega a 0 al reducirse la curva de la función, y puesto que conforma una reducción del band gap, y dado que la reproducción de las propiedades estructurales y electrónicas denotan capacidades incluso opuestas con lo reportado del material como en lentes. En virtud de ello, se recomienda el estudio teórico de más propiedades ópticas y magnéticas, así como del confinamiento de la estructura para su síntesis ya que es un prometedor prospecto en aplicaciones tecnológicas como en ingeniería de nano opto-electrónicos.

Referencias

- [1] V. Fedotov, V. (2017). Springer Handb. Electron. Photonic Mater. Springer Handb. Electron. Photonic Mater. 1351–1377. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-48933-9onic Photonic Mater.>, pp. 1351–1377, 2017, doi: 10.1007/978-3-319-48933-9.
- [2] K. Elgammal. (2018). Density Functional Theory Calculations for Graphene based Gas-Tensor Technology. Kungliga Tekniska Högskolan School of Engineering Sciences.
- [3] J.M. Soler. (2002). The SIESTA method for *ab initio* order-N materials simulation. Journal of Physics: Condensed Matter. 2745-2779. S0953-8984(02)30737-9. vol. 14.
- [4] R. J. D. Tilley, Perovskites: Structure-Property Relationships, Firts Edit. Reino Unido, 2016.
- [5] R. Machado, M. Sepiarsky, y M. G. Stachiotti, "Relative phase stability and lattice dynamics of NaNbO_3 from first-principles calculations", Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys., vol. 84, núm. 13, pp. 1–7, 2011, doi: 10.1103/PhysRevB.84.134107.
- [6] D. Fritsch, "Electronic and optical properties of sodium niobate: A density functional theory study", Adv. Mater. Sci. Eng., vol. 2018, pp. 10–12, 2018, doi: 10.1155/2018/6416057.
- [7] S. Azam et al., "Electronic structure and optical properties of cubic NaNbO_3 and tetragonal KNbO_3 crystals: First principles study", Dig. J. Nanomater. Biostructures, vol. 14, núm. 3, pp. 751–760, 2019.
- [8] S. A. Prosandeev, "Comparative analysis of the phonon modes in AgNbO_3 and NaNbO_3 ", Phys. Solid State, vol. 47, núm. 11, pp. 2130–2134, 2005, doi: 10.1134/1.2131156.