



УДК 539.21:537.86  
ББК 22

## AB INITIO РАСЧЕТ МНИМОЙ ЧАСТИ КОМПЛЕКСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА ТИТАНА

Ю.М. Александров, В.В. Яцышен

Из первых принципов произведен расчет мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости наночастиц  $\text{TiO}_2$  ( $n = 1-3$ ). Симуляция взаимодействия света с кластерами осуществлялась с помощью программы SIESTA. Полученные данные сравниваются со значениями для объемного оксида титана.

**Ключевые слова:** *ab initio, DFT, SIESTA, наночастицы, оксид титана, диэлектрическая проницаемость, псевдопотенциал.*

Диоксид титана ( $\text{TiO}_2$ ) является важным оксидным материалом, полезными свойствами которого являются его высокий коэффициент отражения ультрафиолетовых лучей, а также замечательные каталитические особенности, поэтому он широко используется в качестве катализатора, компонента солнечных батарей, а также красящего пигмента и т. п. Квантово-размерные эффекты, наблюдаемые в наночастицах  $\text{TiO}_2$ , могут приводить и к изменению оптических свойств оксида титана [2; 5]. Уже при размерах, меньших 14 нм, наиболее стабильной фазой является анатаз (тогда как в объемном состоянии стабильным остается фаза рутила), при дальнейшем уменьшении размеров атомные структуры наночастиц все больше отличаются от объемных структур.

Геометрия кластеров представлена на рисунке 1. Оценивалось их взаимодействие со светом, учитывая, что координаты волнового вектора световой волны (1,0,0), а плоскость рисунка (1,1,0). Требуется оценить отклик на электромагнитное воздействие для кластеров различных размеров.

В работе использованы файлы псевдопотенциалов FHI (Fritz-Haber-Institute), взятые с сайта. Конструировались по методике Тру-

льера – Мартинса (Troullier – Martins). Расчет производился в одной точке  $\Gamma$   $k$ -пространства, вследствие того, что кластеры рассматривались как молекулы (нуль-мерные объекты). Для расчета объемной фазы строилась суперячейка как совокупность элементарных ячеек в предположении, что объемное вещество стабильно в фазе анатаза.

Диэлектрическая проницаемость рассчитывалась, исходя из следующей формулы (в системе единиц Хартри):

$$\text{Im}[\epsilon^0(\vec{n}, \omega)] = 2 \times 4\pi^2 / V_{cell} \int dk^3 \sum_i \sum_j \dots \\ \dots \times f_i(1-f_j) \frac{|\langle \Psi_i(\vec{k}) | \vec{\nabla} \cdot \vec{n} | \Psi_j(\vec{k}) \rangle|^2}{(\epsilon_j - \epsilon_i)^2} \delta(\epsilon_j - \epsilon_i \pm \omega)$$

Для сравнения электронных структур кластеров и объемного оксида титана (в фазе анатаза) на рис. 2 и 3 представлены расчетные мнимые части диэлектрической проницаемости. Видно, что мнимые части диэлектрической проницаемости для наночастиц стремятся к форме мнимой части диэлектрической проницаемости для объемного  $\text{TiO}_2$ . Особенно это заметно для пика между 4 и 5 электронвольтами (УФ-область).

В работе изучена зависимость мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости наночастиц оксида титана от энергии фотона с помощью теории функционала электронной плотности и метода псевдопотенциалов.

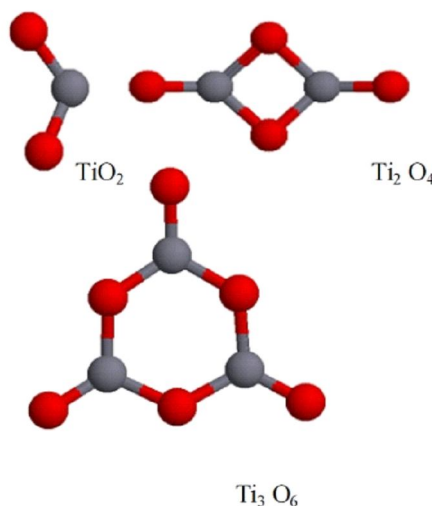


Рис. 1. Кластеры  $\text{TiO}_2$  ( $n = 1-3$ )

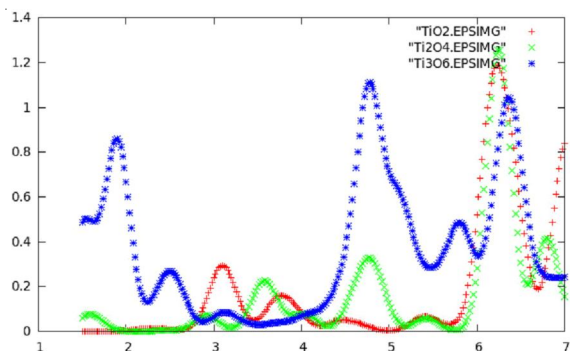


Рис. 2. Зависимости мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости (ось ординат) от энергии фотона в  $\text{eV}$  (ось абсцисс) для наночастицы оксида титана разных размеров

Был выявлен размерный эффект – зависимость мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости, которая определяет поглощение, от размера кластера.

Получена качественная совместимость результата расчета мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости при ее стремлении к значениям для объемного вещества со значениями для объемной фазы.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Электронная структура, оптические и фотокаталитические свойства анатаза, допиро-

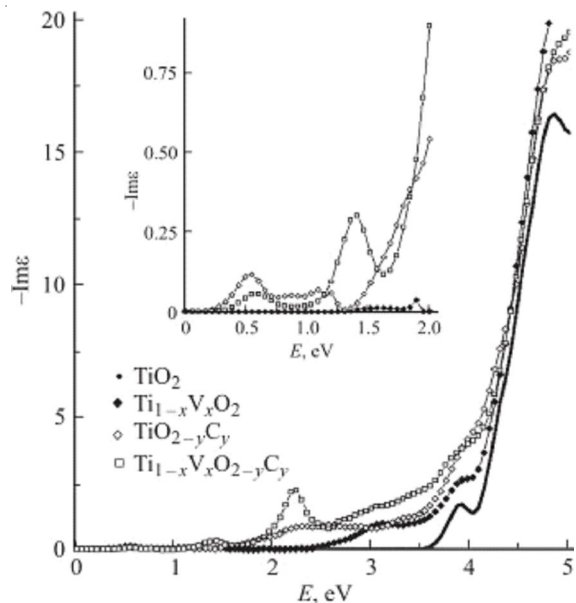


Рис. 3. Зависимость мнимой части комплексной диэлектрической проницаемости для объемного оксида титана от энергии фотона, значения пропорциональны коэффициенту поглощения \*

\* Составлено авторами по: [1].

ванного ванадием и углеродом / В. М. Зайнуллина [и др.] // Физика твердого тела. – 2010. – № 2. – С. 259.

2. Hongbin, W., Lai-Sheng, W. // J. Chem. Phys. – 1997. – Vol. 107. – P. 20.

3. PSF file for use in SIESTA [Electronic resource]. – Mode of access: [http://icmab.cat/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/Pseudos\\_LDA\\_Abinit](http://icmab.cat/leem/siesta/Databases/Pseudopotentials/Pseudos_LDA_Abinit) (date of access: 28.08.2012).

4. Sanches, D. Calculation of optical properties with SIESTA [Electronic resource]. – Mode of access: [http://www.powershow.com/vievl/16c43e-MWUxN/Presentacin\\_de\\_PowerPoint\\_flash\\_ppt\\_presentation](http://www.powershow.com/vievl/16c43e-MWUxN/Presentacin_de_PowerPoint_flash_ppt_presentation) (date of access: 28.08.2012).

5. Tristan, A., Finocchi, F., Claudine, N. // Applied Surface Science. – 1999. – Vol. 144–145. – P. 672.

**AB INITIO CALCULATIONS OF THE IMAGINARY PART OF THE COMPLEX DIELECTRIC CONSTANT OF TITANIUM OXIDE NANOPARTICLES**

*Yu.M. Aleksandrov, V.V. Yatsyshen*

The calculations of the imaginary part of complex dielectric constant of  $\text{TiO}_2n$  ( $n = 1-3$ ) nanoparticles is produced by the first principles. Using the SIESTA program, the simulating of the interaction of light with clusters is carried out. The data obtained is compared with the value for bulk titanium oxide.

**Key words:** *ab initio, DFT, SIESTA, nanoparticles, titanium oxide, dielectric constant, pseudopotential.*