



ESTUDIO AB INITIO DE PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y ESTRUCTURALES DE NANOPARTÍCULAS DE SnO_2 BAJO PRESIÓN

Claudio A. Ponce^{(1)*}, María de los A. Caravaca⁽²⁾ y Ricardo A. Casali⁽¹⁾

⁽¹⁾Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales y Agrimensura, Universidad Nacional del Nordeste, Avda. Libertad 5470, Corrientes-Corrientes, Argentina.

⁽²⁾Departamento de Físico-Química, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Nordeste, Av. Las Heras 727, Resistencia-Chaco, Argentina.

*Correo Electrónico (autor de contacto): arielpa@exa.unne.edu.ar

RESUMEN

El óxido de estaño (SnO_2) tiene importantes aplicaciones, entre ellas su uso como conductor transparente en celdas fotovoltaicas y como polvo sinterizado, es el material de elección en el desarrollo de sensores de gases [1]. Cuando el tamaño de partícula se reduce al tamaño nanométrico, se observa un apreciable incremento en la eficiencia de dichos sensores, mejorando la sensibilidad y disminuyendo su temperatura de trabajo. Por este motivo es importante el estudio de su comportamiento a escala nanométrica. En este trabajo, a partir de cálculos ab-initio, se estudian las energías totales y de formación de superficie de nanopartículas (NPs) de SnO_2 . El análisis se realiza en NPs de concentración ($c=N_{\text{O}}/N_{\text{Sn}}$) 1.9, 2.0 y 2.2, y tamaños alrededor de los 2.5 nm. Mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT), se calculan las energías totales y posiciones atómicas completamente relajadas, las cuales son importantes para el estudio de los fenómenos de superficie. Teniendo en cuenta una posible transición de fase Rutilo- CaCl_2 cuando la NP es sujeta a presiones externas [2], también estudiamos el comportamiento bajo presiones aplicadas en el rango de 0 a 10 GPa. A partir de la función de distribución de pares (PDF) [3], se analizan los cambios estructurales con la presión y se comparan con las PDF de diferentes fases del cristal SnO_2 . Teniendo en cuenta la importancia para la detección del tamaño de las NP mediante difracción de rayos-X (XRD), se obtiene el tamaño del core en todos los casos. Estos tamaños son confirmados mediante la observación de las densidades de estados electrónicas (DOS) de diferentes regiones en cada NP. Asimismo, se analizan los cambios de las distribuciones de carga y coordinación atómica en las NP para las diferentes presiones.

ABSTRACT

Tin oxide (SnO_2) has important applications as transparent conductor in solar cells, and in the form of sintered powder, is the material of choice in the development of gas sensors [1]. When the particle size is reduced to nanosize, an appreciable increase in the efficiency of the sensors is observed, improving its sensitivity and reducing its operation temperature. For this reason, it is important to study the behavior of the oxide at the nanoscale. In this work, we study both total and surface formation energies of nanoparticles (NPs) of SnO_2 by means of ab-initio calculations. The analysis was performed on NPs, whose concentrations ($c=N_{\text{O}}/N_{\text{Sn}}$) are 1.9, 2.0 and 2.2, and its sizes are near to 2.5 nm. By means of the density functional theory (DFT), we calculated the total energies and the fully relaxed atomic positions, which are important for the study of surface phenomena. Considering a possible phase transition Rutile- CaCl_2 when the NP is subjected to external pressures [2], we also study its behaviour under pressures applied in the range of 0 to 10 GPa. Using the pair distribution function (PDF) [3], the structural changes with pressure are analyzed and compared with the PDF of SnO_2 in different crystalline phases. Taking into account the importance of NP size detection by X-Ray Diffraction (XRD), the core size is obtained in all cases. This is confirmed observing

the densities of electronic states (DOS) of different regions in each NP. Furthermore, changes in both charge distributions and atomic coordinations in the NP are analyzed at different pressures.

REFERENCIAS

1. M. Batzill, U. Diebold, “The surface and materials science of tin oxide”; Prog. Surf Sci, Vol. 79 (2005), p. 47-154.
2. I. Erdem, H.H. Kart and T. Cagin, “High pressure phase transitions in SnO₂ polymorphs by first-principles calculations”; Journal of Alloys and Compounds, Vol. 587 (2014), p. 638-645.
3. C.A. Ponce, R.A. Casali and M.A. Caravaca, “Ab initio studies of structure, electronic properties, and relative stability of SnO₂ nanoparticles as a function of stoichiometry, temperature, and oxygen partial pressure”; Journal of Physical Chemistry C, Vol. 119 (2015), p. 15604-15617.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: T22

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): P (*poster*)