

## IX-P-4

### HIỆU CHỈNH DFT+U CHO KHỐI $\text{TiO}_2$ ANATASE VÀ RUTILE

Châu Tuấn Khanh, Vũ Hoàng Nam, Lê Minh Hưng

Khoa Khoa học Vật liệu, Trường ĐH KHTN, ĐHQG-HCM

#### Tóm tắt

Dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ (density functional theory-DFT), các kết quả tính toán của chúng tôi cho vật liệu khối  $\text{TiO}_2$  anatase và rutile cho thấy năng lượng vùng cấm của chúng bị ước lượng dưới so với giá trị thực nghiệm và pha anatase thì bền hơn pha rutile. Hai hạn chế này được chúng tôi khắc phục bởi phép hiệu chỉnh DFT+U. Một giá trị  $U = 4.5$  eV được chọn để không chỉ năng lượng vùng cấm phù hợp tốt với thực nghiệm mà còn đảm bảo được sự ổn định pha tương đối của hai pha anatase và rutile.

#### A DFT+U APPROACH FOR ANATASE AND RUTILE OF $\text{TiO}_2$ BULK MATERIAL

##### Abstract

Using the density functional theory (DFT), our calculations for anatase and rutile of  $\text{TiO}_2$  bulk material indicate that underestimations of band gaps of anatase and rutile and the anatase phase is more energetically stable than rutile. Consequently, we employ the DFT+U method in order to deal with these failure of the conventional DFT calculations for  $\text{TiO}_2$ . We find out that at  $U = 4.5$  eV not only total energy of rutile is lower than that of anatase but also the band gaps of both rutile and anatase are in good agreement with the reported experiment.