



Contribution ID: 50

Type: **Resumo**

Obtenção de propriedades optoeletrônicas de ligas de Au e Al através da Teoria do Funcional da Densidade

O intuito do presente trabalho foi aplicar a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) com o método dos pseudopotenciais implementado em cálculos autoconsistentes utilizando o software SIESTA no estudo das propriedades ópticas e eletrônicas de nanoestruturas bimetalicas de Ouro (Au) e Alumínio (Al) puros, além de três estequiometrias possíveis para quatro átomos numa estrutura cúbica de face centrada. Foram obtidas e analisadas a estrutura de bandas e a densidade de estados projetada das ligas. As propriedades ópticas foram calculadas a partir do tensor dielétrico, as quais incluíram o índice de refração, coeficiente de extinção, refletividade e coeficiente de absorção. Constatou-se que a presença de Alumínio na estrutura do Ouro promove quedas nos picos de absorção e refletividade do material na região do espectro visível, denotando a possibilidade de manipulação de suas respostas ópticas. Além disso, foi verificado a falta de anisotropia óptica nas ligas ao ser aplicado um campo elétrico polarizado nas três direções do espaço.

Author: LOPES, Tiago (Universidade Federal de Alfenas)

Co-author: BEZERRA, Anibal T. (Universidade Federal de Alfenas)

Session Classification: Apresentação de trabalhos