

Estudo das propriedades estruturais e eletrônicas de monocamadas e de nanotubos de carbono (C), nitreto de alumínio (AlN) e nitreto de boro (BN) via descrição *ab initio*

Gleydson F. Jesus (IC)¹, Edward F. Almeida Junior (PQ)^{1*}

Universidade Federal do Oeste da Bahia, ¹Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias, CEP 47808-021, Barreiras, Bahia, Brasil

*E-mail: Edward.almeida@ufob.edu.br

Palavras Chave: monocamadas, nitretos, alumínio.

Abstract

The present academic work addresses aspects of mechanics and electronics structure of III-nitrate monolayers. We did a systematic revision of this structures based in first principles calculations with Density Functional Theory (DFT). We also studied the Borophene, a monatomic material made of boron.

Introdução

Devido aos grandes avanços na área da nanotecnologia, o estudo de sistemas de baixa dimensionalidade tem atraído muita atenção na área de pesquisa de sólidos cristalinos. Por exibirem excelentes propriedades físicas e químicas para a indústria, os materiais do grupo III- nitretos se tornaram um dos destaques nestas pesquisas. Nesta revisão sistemática de literatura foi estudada a estrutura de alguns desses materiais, levando em consideração trabalhos feitos com base em cálculos de primeiros princípios via Teoria do Funcional da Densidade (DFT) e em trabalhos experimentais. Com esta revisão procuramos detalhar o que já foi estudado dessas estruturas, para a partir de então explorar os campos não abordados em teoria

Material e Métodos

Foi realizada uma revisão sistemática de literatura com a pesquisa de artigos sobre sistemas bidimensionais e treinamento com aplicativos de simulações computacionais para a descrição dos materiais nanoestruturados. Mantivemos o foco na formação de defeitos, observando sempre as previsões feitas via descrição *ab initio* com relação às condições de laboratório e às possíveis dificuldades de síntese do material.

Resultados e Discussão

Com o Nitreto de Alumínio (AlN) [1], foi encontrado estudos sobre vacâncias de Alumínio, troca de sítios e substituição de Alumínio e Nitrogênio por Carbono e Silício. As simulações foram feitas em dois ambientes diferentes, um abundante em Nitrogênio e outro abundante em Alumínio. Para este estudo foi utilizado uma rede Plana com 96 átomos, com dimensões de 21.9 Å e 18.9 Å. Foi necessário adotar uma célula unitária com 384 átomos na dopagem com Carbono (em lugar do alumínio), devido a um deslocamento de orbital, a fim de evitar a interação mútua entre defeitos localizados em células vizinhas. Na dopagem Al_N, o átomo de alumínio é deslocado 1.84 Å do plano da rede. Não houve desvio no plano da rede cristalina nas substituições com o carbono.

No caso do i_{Al} entretanto, houve um desvio de 0.46 Å e, no caso do Si_N houve um desvio ainda mais significativo (1.94 Å). Essa diferença significativa entre a dopagem Si_N e A se deve ao fato de que a dopagem Si_N é energeticamente mais favorável, e consequentemente mais estável. A estabilidade da monocamada sem defeitos é apenas 6% menor do que a estabilidade da estrutura tridimensional do material. Para o Nitreto de Boro (BN), foi encontrado o estudo de troca de sítios com Boro e com Nitrogênio, de Vacância de Boro e de Nitrogênio, e de introdução de Carbono no lugar de um átomo de Boro e no lugar de um átomo de Nitrogênio, simulados em dois ambientes diferentes, um abundante em Nitrogênio e outro abundante em Boro. Também foi estudado o Borofeno, onde foi encontrado estudos sobre vacância de Boro, inclusão de X (X = H, C, B, N ou O) e inclusão de X, simuladas em dois ambientes diferentes, com temperaturas de 300 e 600 K.

Conclusões

Os trabalhos com os nitretos do grupo III se concentram principalmente no Al e BN, e muita pesquisa ainda deve ser feita com os demais materiais do grupo. Mesmo com esses dois materiais amplamente estudados, estudos de defeitos com alguns elementos muito presentes em condições de laboratório não foram feitos até o momento.

Agradecimentos

A todos que de maneira direta ou indireta contribuíram com este projeto, em especial ao professor Edward Ferraz, por seu grande trabalho de orientação.

Referência

[1] E.F. Almeida Junior, F. Brito Mota, C.M.C. de Castilho, A. Kakanakova-Georgieva, G.K. Gueorguiev, Eur. Phys. J. B 85 (2012) 48.