



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE FEIRA DE SANTANA

Autorizada pelo Decreto Federal nº 77.496 de 27/04/76
Recredenciamento pelo Decreto nº 17.228 de 25/11/2016



PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
COORDENAÇÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

XXIII SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UEFS SEMANA NACIONAL DE CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA - 2019

Investigação teórica das propriedades eletrônicas dos materiais BiMO_3 (M = B, Al, Ga, In e Tl)

Gabriel Pereira Silva¹; Nilton Souza Dantas²

1. Bolsista PIBIC/FAPESB, Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: biel.silva2802@gmail.com

2. Orientador, Departamento de Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: nilton@uefs.br

PALAVRAS-CHAVE: Perovskita, Teoria Funcional da Densidade, Semicondutor.

INTRODUÇÃO

Foram conduzidos estudos teóricos através de modelagem computacional para investigar as propriedades eletrônicas dos materiais BiMO_3 (M = B, Al, Ga, In e Tl). Os materiais do tipo BiMO_3 pertencem ao grupo das perovskitas, as quais são materiais de ocorrência rara na natureza, mas que tem, recentemente, despertado o interesse de diversos pesquisadores devido a diversas propriedades de interesse prático, tais como piezoelectricidade, ferroelectricidade, (anti-)ferromagnetismo, transição metal-isolante [1,2,3], dentre outras. O que se pretende nessa proposta, é, com a substituição do átomo de Sb por Bi, buscar subsídios para uma posterior comparação entre os dois grupos. Inicialmente, calculamos todas as propriedades do grupo formado por BiMO_3 (M = B, Al, Ga, In e Tl).

MATERIAL E MÉTODOS

O trabalho seguiu a seguinte metodologia, a qual é a metodologia clássica para simulação computacional via Teoria do Funcional da Densidade (DTF):

1. Inicialmente, foram construídos os modelos de células cristalinas cúbicas para cada material, BiBO_3 , BiAlO_3 , BiGaO_3 , BiInO_3 e BiTlO_3 ;
2. Logo em seguida ajustou-se os parâmetros de rede através da minimização de energia de formação;
3. Em seguida, obtivemos as estruturas de banda para cada célula, onde conseguimos informações do *GAP*.

RESULTADOS E/OU DISCUSSÃO

Inicialmente calculamos os parâmetros de rede, a fim de obter a menor energia para cada célula cristalina. Esses valores encontram-se na Tabela 1,

Tabela 1 - Parâmetro de Rede

BiMO_3 (M=B, Al, Ga, In, Tl)	Parâmetro de rede (Å)
B	6.779094
Al	7.177178
Ga	7.385538
In	7.893047
Tl	8.161750

Os dados da Tabela 1 plotados na Figura 1 mostram que, ao substituir o átomo central por outro com o número atômico maior, a célula tem um crescimento linear.

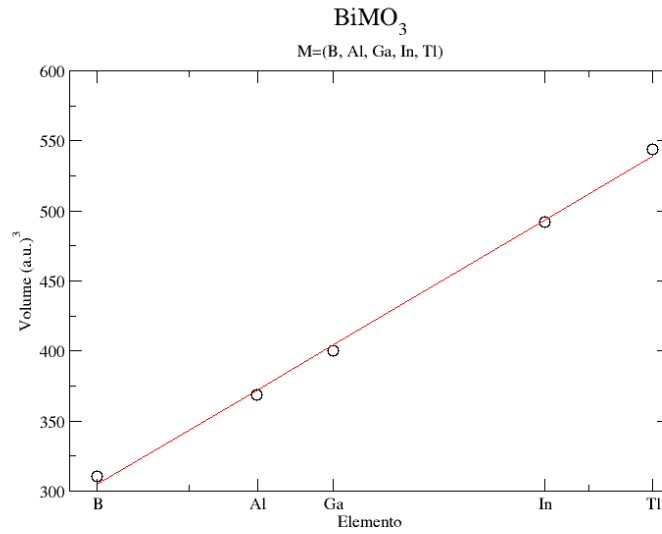


Figura 1 - Parâmetro de Rede do BiMO₃ (M= B, Al, Ga, In e Tl)

Com o parâmetro de rede otimizado foram obtidas a estrutura de banda e a densidade de estados de cada cristal.

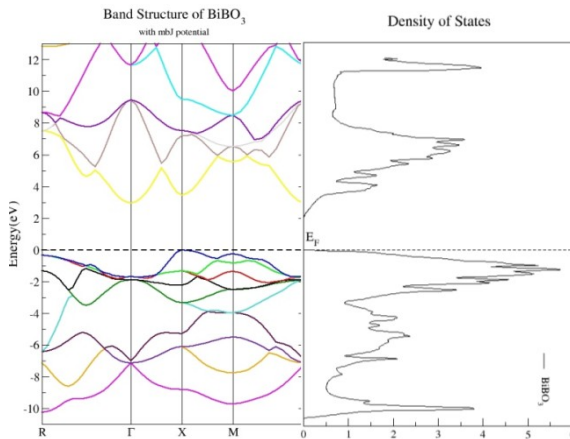


Figura 2-a) Estrutura de banda e D.O.S. do BiBO₃

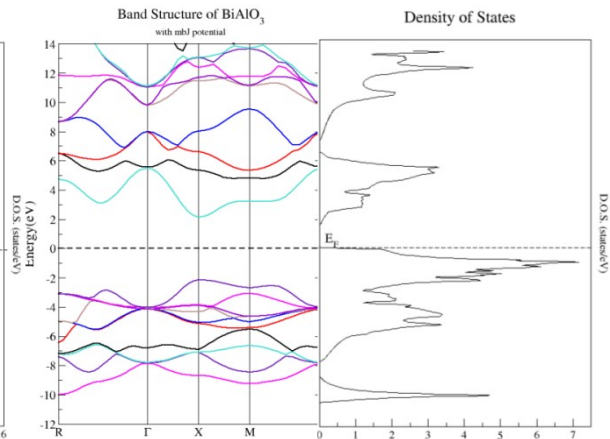


Figura 2-b) Estrutura de banda e D.O.S. do BiAlO₃

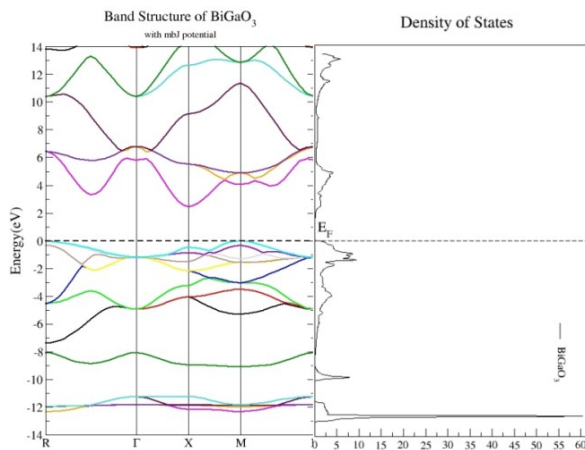


Figura 3-c) Estrutura de banda e D.O.S. do BiGaO₃

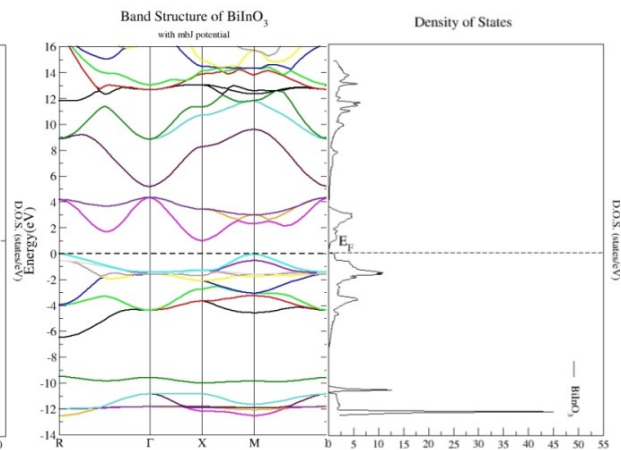


Figura 4-d) Estrutura de banda e D.O.S. do BiInO₃

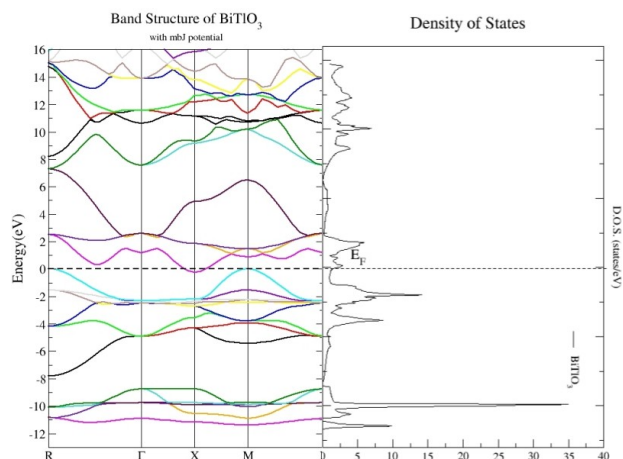


Figura 2-e) Estrutura de banda e D.O.S. do BiTiO_3

As Figuras 2-a), b), c), d) e e) mostram a estrutura de bandas (lado esquerdo) e a densidade de estados total (lado direito) dos materiais estudados. Se observarmos a linha que marca o nível de Fermi, E_F , é possível perceber que o *gap* vai diminuindo à medida que o número atômico do átomo de metal aumenta, até que, no BiTiO_3 o resultado encontrado sugere um comportamento metálico. Para os materiais onde o *gap* é positivo, os resultados de BiBO_3 e BiAlO_3 sugerem um *gap* direto, isto é, o maior pico na banda de valência está no mesmo vetor de onda do menor fundo na banda de condução. Enquanto que para BiGaO_3 , o resultado sugere um *gap* indireto. Ainda sobre as densidades de estados dos cristais, fez-se um estudo sobre a influência de cada banda, *s*, *p*, *d* e *f*, mostrados nas Figuras 3- a), b), c), d) e e),

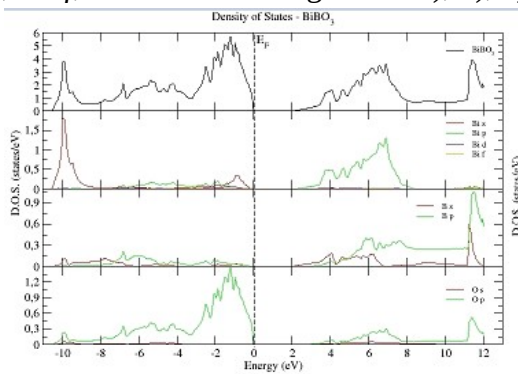


Figura 3 - a) Densidade total e parcial do BiBO_3

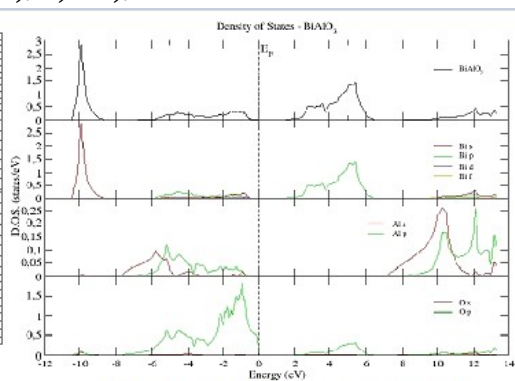


Figura 3 - b) Densidade total e parcial do BiAlO_3

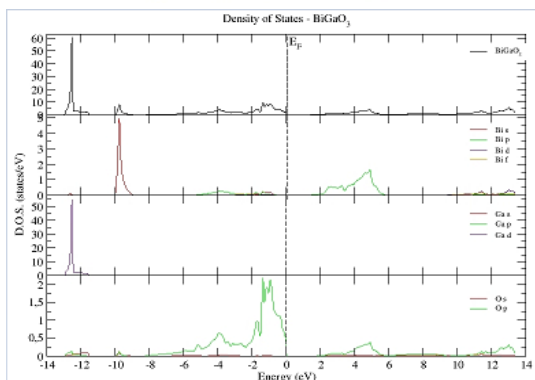


Figura 3 - c) Densidade total e parcial do BiGaO_3

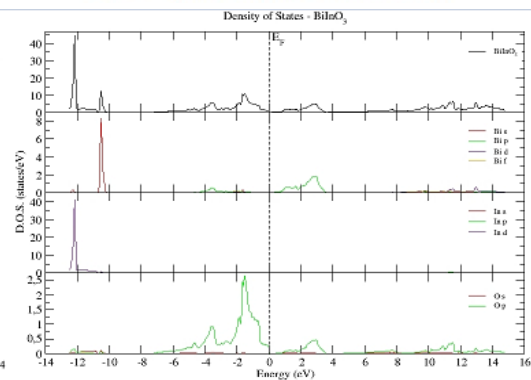


Figura 3 - d) Densidade total e parcial do BiInO_3

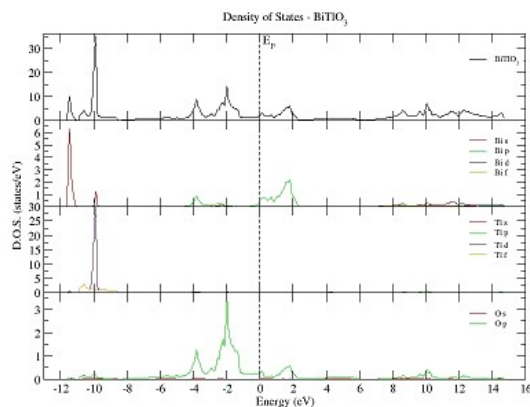


Figura 3 - e) Densidade total e parcial do BiTiO_3

Figura 3-a) para o bismuto a banda *s* teve maior participação na camada de valência que é abaixo da energia de Fermi. Enquanto na camada de condução, acima da energia de Fermi, a banda *p* foi mais predominante. No caso do boro tanto a banda *s* quanto a banda *p* teve participação semelhante na camada de valência, porém na camada de condução a *p* teve uma maior predominância. E para o oxigênio a banda predominante tanto na banda de valência quanto na de condução foi a banda *p*.

Figura 3-b) para o bismuto e para o oxigênio a interpretação é a mesma acima, porém para o alumínio a banda *s* e *p* teve participação bem parecida nas bandas de valência e de condução.

Figura 3-c), d) e e) a leitura é exatamente a mesma das anteriores, a única mudança foi no átomo central, gálio, índio e tálio, que tem maior número de elétrons se comparado ao boro e alumínio, por tanto a maior influência deles foi a banda *d* na camada condutora. Essas características explicam a variação do gap encontrada: quanto mais elétrons, menor será o gap.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Foram feitas simulações computacionais, baseadas em métodos de primeiros princípios da propriedade eletrônicas da perovskita do formato BiMO_3 ($M = \text{B}, \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ e Tl), de modo a entender como as propriedades estudadas dos cristais se comportam ao variar o átomo central. Os resultados mostraram que o parâmetro de rede cresceu à medida em que o átomo central é substituído por outro de número atômico maior. Esse crescimento já era esperado, pois ao inserir átomos mais pesados, é necessário um volume maior da rede cristalina. Com esse estudo encontramos que a perovskita com os átomos centrais B, Al, Ga e In sugere um comportamento semicondutor por causa do *gap* positivo de cada cristal, e quando substituímos o átomo central pelo Tl, o sólido deve ser condutor, já que o *gap* se fechou completamente e a banda condutora se juntou a banda de valência. O B e o Al mostram um *gap* direto enquanto o Ga e In, o *gap* foi indireto. Com esses resultados pretende-se comparar com o material SbMO_3 , cujos cálculos já foram desenvolvidos em trabalhos anteriores feitos por um dos autores.

REFERÊNCIAS

- [1] P. Zubko, S. Gariglio, M. Gabay, et al., *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 2 (2012) 141.
- [2] KIMURA, T. et al. Magnetic control of ferroelectric polarization. **Nature**, 2003.
- [3] HUR, N. et al. Electric polarization reversal and memory in a multiferroic material induced by magnetic fields. **Nature**, v. 429, n. 6990, p. 392–395, 27 maio 2004.