



UTILIZAÇÃO DOS MÉTODOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS PARA O ESTUDO TEÓRICO DO BaY2F8

Wallace Rodrigues da Silva (Apresentador) - Unifesspa
Jeânderson de Melo Dantas (Coordenador do Projeto) - Unifesspa

1. INTRODUÇÃO

O código computacional utilizado para obter um estudo sobre as propriedades destes materiais é o WIEN2K, onde a estrutura inicial (parâmetros de rede), é obtida através da literatura, para gerar os cálculos que serão utilizados para calcular as características desse material. Essas propriedades podem ser: densidade de elétrons (El. Dens.), densidade de estados (DOS) e estudo das bandas (Bandstructure). Possibilitando assim o auxílio de uma forma significativa na aplicação desses materiais em diversas áreas como engenharia e suas ramificações. Neste trabalho foi estudado as propriedades de densidade de estados do fluoreto de ítrio de bário, BaY2F8 (BYF).

Os compostos de fluoreto formam uma importante classe de materiais que apresentam características químicas e físicas peculiares: “baixo Índice de refração, fônon com baixa energia e uma ampla faixa de comprimento de onda na transmissão.” (1). “Recentemente, o BYF dopado com íons de terras raras é atraente devido às suas propriedades de cintilação.” (2). “Apesar de Esforço experimental para compreender os aspectos mecânicos e propriedades do BYF, ainda há uma falta de conhecimento teórico do composto, especialmente considerando sua estrutura de banda e absorção-emissão.” (3).

2. MATERIAIS E MÉTODOS

“O BaY2F8 (BAYF) é um composto de grande potencial para diversas aplicações em dispositivos ópticos do estado sólido.” (4). “Mediante dopagem com elementos do grupo das terras raras, apresentando importantes características espectroscópicas.” (5). “Atualmente, o composto se destaca em dois campos de aplicações: lasers do estado sólido e detectores de radiação.” (6).

Este material possui características interessantes para diversas áreas de aplicações, destacando-se o aspecto cintilante que vem sendo alvo de estudos nos últimos anos, a busca por um estudo teórico do mesmo possibilitara um maior acervo de informações para o entendimento de aplicações práticas do material. “Diferentes fluoretos têm sido investigados visando à aplicação em cintiladores.” (7).

Quando analisamos um sólido, a sua estrutura é formada por átomos isolados, onde cada um deles possui níveis discretos de energia que podem vir a ser ocupados pelos elétrons. No entanto, como descrito por Oliveira, “Em um sólido cristalino, devido ao grande número de átomos envolvidos, teremos vários desses valores discretos espaçados de valores muito pequenos entre si. Isso forma uma banda, ou seja, pode ser entendido como uma faixa contínua de valores que o elétron pode ter.” (8). As Estruturas de banda de energia dividem-se em duas partes: Banda de Valência e Banda de Condução.

A Banda de Valência é completamente ocupada por elétrons e os seus níveis de energia são mais baixos. Por sua vez a Banda de condução é onde estão situados os elétrons responsáveis pela condução de corrente elétrica. A divisão dessas duas bandas é dada pela Energia de Fermi, que consiste em uma linha localizada em $x=0$ na unidade elétrons-volts. Somente os elétrons com energia relativamente próximas a energia de Fermi sofrem interação significativa na presença de um campo elétrico. Passam a ser chamados de elétrons livres, pois se movimentam com relativa liberdade pelo material, participando do processo de condução de eletricidade pelo material. Para valores de energia distantes deste padrão adotado, considera-se nos cálculos que este elétrons faz parte do núcleo.

Existe uma lacuna entre as duas bandas de energia, a qual é dada o nome de GAP.

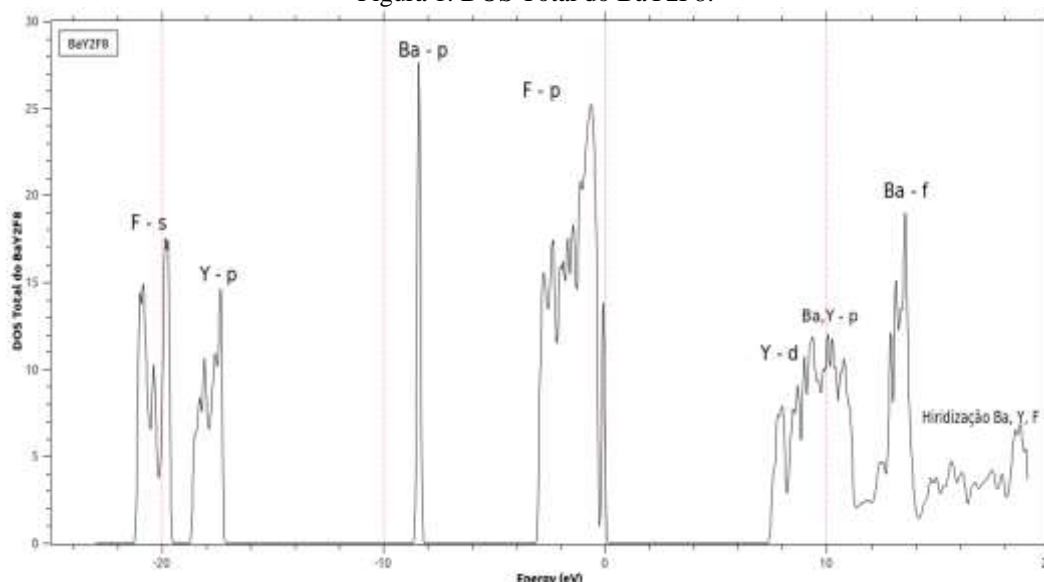
Neste trabalho foi feita o estudo teórico do Fluoreto de Bário e ítrio (BaY2F8 – BaYF), para obter as propriedades desejadas do material estudado foi utilizado o método Full Potential Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW) (9), Métodos de primeiros princípios baseado na teoria do funcional da densidade (DFT) (10) e implementação no código computacional WIEN2K (11).

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Inicialmente, a propriedade calculada é a densidade dos estados. Para isso, foi encontrada na literatura a estrutura inicial do BYF, com seu Grupo espacial B2/m, seus parâmetros da rede são $a = 6,9829$, $b = 4,2644$ nm e $c = 10,5190$ nm, e seus ângulos $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 99,678^\circ$ e $\gamma = 90^\circ$.

Através do cálculo do DOS total do material podemos analisar as regiões em que cada elemento tem predominância. Na figura 1, podemos notar que há divisões na banda de valência, encontrada nos intervalos de aproximadamente -21 a -19.5 eV, -19 a -17.5 eV, -9 a -8 eV e outra no intervalo de aproximadamente -3 a 0 eV.

Figura 1. DOS Total do BaY2F8.



Fonte: Autores.

No primeiro intervalo, pode-se perceber que há uma predominância do átomo de F no estado s, devido ao seu nível de energia ser distante da energia de Fermi. No segundo intervalo temos o átomo com maior presença sendo o Y no estado p. Na terceira faixa encontra-se um domínio do átomo de Ba no estado p. No último intervalo da banda de valência (próximo a energia de Fermi) temos a predominância do átomo de F no estado p.

Analisando a partir da linha da energia de Fermi. É possível perceber que existe uma grande lacuna de separação entre os estados ocupados e os não ocupados, uma energia de GAP de aproximadamente 7,5 eV, com isso os elétrons existentes na banda de valência têm uma grande dificuldade para passarem para a banda de condução, sendo necessário que haja um fornecimento expressivo de energia proveniente de um campo elétrico externo. Logo, assumiremos neste trabalho, apenas para fins de melhor entendimento, que o composto BaY2F8 é considerado um isolante.

Na banda de condução no intervalo de aproximadamente 7,5 a 9 eV pode-se perceber que há uma predominância do átomo de Y no estado d, na faixa de cerca de 9 a 11 eV temos os átomos com maior presença sendo o Ba e Y nos estados p, no trecho localizado próximo de 11 a 14 eV temos uma maior dominância do átomo Ba no estado f. Na região acima de 14 eV existe uma hibridização entre os estados de Bário, Ítrio e Flúor, impossibilitando determinar qual dos três átomos tem um predomínio na região tratada.

4. CONCLUSÃO

Decorrente de uma alta energia de GAP (aproximadamente 7,5 eV) considera o composto Fluoreto de Bário e Ítrio um isolante. Os cálculos do DOS do elemento através do método Full Potential Linear Augmented Plane Wave, baseado na teoria do funcional da densidade permite uma melhor compressão de suas propriedades e características. O BaY2F8 se destaca em duas áreas de aplicação: lasers do estado sólido e detectores de radiação. A principal utilização dos fluoretos tem sido em cintiladores, fazendo parte deste grupo o elemento em estudo quando dopado com elementos terra raras possui a propriedade de absorver radiação ionizante e transformar a energia dessa radiação em luz na região do espectro visível. Podendo ser utilizado em diferentes aplicações que necessitam de tais características.

REFERÊNCIAS

- [1] J.C. Wright, Radiationless processes in molecules and condensed phases, in: F.K. Fong (Ed.), Topics in Applied Physics, Springer, Berlin, 1976.
- [2] J.C. van't Spijker et al., J. Lumin. 85 (1999) 11.
- [3] Dantas, J.M. Estudo teórico das propriedades estruturais, eletrônicas e ópticas dos compostos BaY₂F₈ e BaAl₂O₄. Acesso em: <http://bdtd.ufs.br/handle/tede/1997>.
- [4] VALÉRIO, M. E. G., RIBEIRO, V. G., MELLO, A. C. S., SANTOS, M. A. C., BALDOCHI, S. L., MAZZOCHI, V. L., PARENTE, C. B. R., JACKSON, R. A. AMARAL, J. B. Structural and optical properties of Nd- and Tb-doped BaY₂F₈. Optical Materials, v. 30, p. 184-187, 2007.
- [5] MARTINS, T. S.; ISOLANI, P. C. Terras raras: aplicações industriais e biológicas. Química Nova, v. 28, n. 1, p. 111-117, 2005.
- [6] SANI, E., TONCELLI, A., L., TONELLI, M., AGNESI, A., GUANDALINI, A., REALI, G. Spectroscopic Analysis and Diode-Pumped Results of Nd:BaY₂F₈. IEEE Journal of Quantum Electronics, v. 39 (8), p. 971-978, 2003.
- [7] Wojtowicz, A. J. Rare-earth-activated wide bandgap materials for scintillators. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment, 486: 201, 2002.
- [8] Oliveira, L.F.L. Estudo da banda de gap em componentes eletrônicos semicondutores. Acesso em: <http://www.ifi.unicamp.br/~lunazzi/F530_F590_F690_F809_F895/F809/F809_sem1_2003/993963Luis_Tessler_f809_RF09_0.pdf>.
- [9] O.K. Andersen, Phys. Rev. B 12 (1975) 3060; D.J. Singh, Plane Waves, Pseudopotentials and the LAPW Method, Kluwer Academic, Dodrecht, 1994.
- [10] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev. 136 (1964) B864; W. Kohn, L.J. Sham, Phys. Rev. 140 (1965) A1133.
- [11] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, An Augmented Plane Waves + Local Orbital Program for Calculating Crystal Properties, Institut Für Physikalische und Theoretische Chemie, Wien, Austria, 2001.