



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Nitreto de Tântalo: Estudo Teórico das Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Ópticas da Superfície na Orientação (100)
Autor	BRUNO HEITOR DE CARVALHO BARROS
Orientador	SERGIO RIBEIRO TEIXEIRA

Nitreto de Tântalo: Estudo Teórico das Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Ópticas da Superfície na Orientação (100)

Autor: Bruno Heitor de Carvalho Barros

Orientador: Sérgio Ribeiro Teixeira

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A produção de hidrogênio por processos fotocatalíticos ou fotoeletroquímicos de divisão da molécula de água usando luz solar é uma alternativa ecológica para suprir a demanda por energia. Nas últimas décadas, óxidos metálicos têm sido extensivamente estudados para esse propósito, entretanto, devido à grande diferença em energia entre as bandas de valência e condução desses materiais (gap), a maioria deles só consegue operar na faixa do ultravioleta do espectro de radiação. Já que o Sol produz 43% de sua luz no espectro visível, esses materiais não são os mais indicados para a fotólise da água em H_2 . O nitreto de tântalo já consegue operar na faixa do espectro de luz visível devido ao seu menor gap e, por causa disso, é um melhor candidato a essa atividade.

Este trabalho faz um estudo teórico das propriedades estruturais, eletrônicas e ópticas da superfície do nitreto de tântalo Ta_3N_5 na orientação (100) e sua aplicação no processo de fotólise da água como mecanismo para a produção de H_2 e O_2 . Isso é possível porque o nitreto de tântalo tem um gap de 2,1 eV na fase sólida, que é adequado para a quebra da molécula de água no processo de fotocatalise por possuir bandas de valência e condução abaixo do potencial de oxidação e acima do potencial de redução da água respectivamente.

Os cálculos foram realizados usando o código Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP) baseado no método da teoria do funcional da densidade (DFT) com o objetivo de ter uma melhor compreensão da importância dos defeitos estruturais sobre a superfície, associados com possíveis vacâncias de átomos de N e substituição de átomos de N por O, e dos processos de transporte de carga eletrônica, transições ópticas, interação elétron-buraco e atividade fotocatalítica. Foram obtidos até o momento os parâmetros estruturais do composto juntamente com seu gap, que estão de acordo com cálculos teóricos da literatura. A análise das bandas mostra que o nitreto de tântalo é um semicondutor de caráter indireto com o máximo da banda de valência (VBM) e mínimo da banda de condução (CBM) coincidindo sobre os pontos Γ e Y respectivamente. Quanto a propriedades ópticas, foram feitos o cálculo da constante dielétrica do material, da função dielétrica real e imaginária, corroborando a existência de um gap indireto e transições intrabanda, do coeficiente de absorção, da função de perda de energia e dos coeficientes de refração e reflexão.