

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

ESTUDO TEÓRICO COM DENSIDADE  
FUNCIONAL DE DEFEITOS E DOPAGEM NO MODELO  
DEGRAU DA SUPERFÍCIE DO AGLOMERADO DE MgO

**Neil M. De La Cruz Centeno**

Rio de Janeiro, 2007

TESE DE MESTRADO

ESTUDO TEÓRICO COM DENSIDADE FUNCIONAL DE  
DEFEITOS E DOPAGEM NO MODELO DEGRAU DA  
SUPERFÍCIE DO AGLOMERADO DE MgO

**Neil M . De La Cruz Centeno**

Orientador

Carlton. Anthony. Taft

Dedico esta tese a minha mae e pai.

Ascenciona Centeno e Filomeno De La Cruz.

A meus irmãos Eustradia, Lurdez, Elizabeth, Rovin, Rómulo.

A meus sobrinhos Lizeth, Isamar, Camila, Stev, Herbert e Kenedy.

Com todo meu carinho ...

# Agradecimentos

Em primer lugar o agradecimento a todos meus professores do CBPF pelo ensino...

Agradeço também

A meu orientador o professor Dr. Carlton A. Taft, pela compreensão, ensino e suas inúmeras sugestões referentes ao trabalho da tese.

A meus amigos Octavio Rodriguez, Habib Dumet e José Gonzales pelas discussões, sugestões e amizade ...

A meus pais Ascencion e Filomeno e toda a familia no Perú que sempre estão pendentes de meu progresso.

A meus amigos e colegas de sala no CBPF Aline Nogueira, Carlos Bonilla e André Lemos... pela amizade e sinceridade.

A meus amigos Daniel Reyes, Willian Alayo, Yony Milla e José Cebrian pela grande amizade...

A todos os funcionários da APL, da CFC e de todo o CBPF pela paciência e o tratamento cordial.

Agradeço também ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico CNPq, pelo apoio financeiro sem o qual não seria possível o desenvolvimento deste trabalho.

# Resumo

Os efeitos da morfologia com passos, cantos, esquinas, degraus e superfícies planas de nano-aglomerados de MgO foram investigados usando o DFT B3LYP/6–31G\* para estudar a influência de defeitos e impurezas em diversos parâmetros físico-químicos. Dopamos o aglomerado em sete (7) posições com diferentes impurezas (Li, Na, K, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn e Ga ). Calculamos para cada caso, usando DFT B3LYP/6–31G\*, a distribuição de cargas, as energias totais e de formação assim como o potencial de ionização. No aglomerado puro a distribuição de carga para Magnésio e Oxigênio é crescente com aumento dos números de coordenação. Quando dopamos o aglomerado nas diversas posições com as impurezas observamos uma redistribuição de carga na vizinhança do cation dopante. Os metais alcalinos e os metais de transição-3d tendem a ceder carga na vizinhança. Também introduzimos no aglomerado vacâncias neutras e carregadas em todas as posições de Oxigênio e a distribuição de cargas foi estudada por três métodos Mulliken (CM), NBO (Natural Bond Order) e CHELPG. Em geral os três métodos mostram tendências similares. Também estudamos a introdução de vacâncias neutras e carregadas de Magnésio em todas as posições assim como sistemas dopados com vacâncias no mesmo aglomerado. Nas vacâncias neutras e carregadas há redistribuição de cargas nos primeiros vizinhos. As energias de formação determinadas nas vacâncias neutras e carregadas estão de acordo com trabalhos de outros pesquisadores.

# Abstract

The effect of step, corners, edges and terraces of nano cluster of MgO were investigated using the DFT B3LYP/6 – 31G\* methodology in order to study the influence of defects and dopants on diverse physical-chemical parameters. We dope the cluster in 7 different positions with impurities (Li, Na, K, Si, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn e Ga.) and calculate for each case using DFT B3LYP/6 – 31G\*, the charge distribution total and formation energies as well as ionization potentials. In the pure cluster, the charge distribution for Magnesium and Oxygen increases with the increase of the coordination numbers. When we dope the cluster in different positions with impurities we observe a redistributions of charge in the neighboring of the doping cation. The substituted alkaline and 3d-transition metals tend to donated charge to the neighboring atoms. We also made neutral and charged vacancies in all the Oxygen positions and the charge distribution was investigated by three methods, Mulliken (CM), NBO (Natural Bond Orbital) and CHELPG. In general the three methods show similar tends. We also investigated the introduction of neutral and charged vacancies of Magnesium in all the positions of the cluster as well as systems with both dopants and vacancies. For the neutral and charged vacancies there is redistribution of charges for the neighboring atoms. The calculated formation energies for the neutral and charged vacancies are in agreement with the work of other authors.

# Sumário

Agradecimentos . . . . .	ii
Resumo . . . . .	iii
Abstract . . . . .	iv