

ESTUDO DE PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ENERGÉTICAS DE NANOTUBOS BC₈N

RIBAS, Eduardo Garcia¹; MACHADO, Marcelo Pereira¹

¹Universidade Federal de Pelotas – Licenciatura em Física, Departamento de Física.
maxxrs@gmail.com

1 INTRODUÇÃO

Recentemente o interesse em compostos com Boro (B), Carbono (C) e Nitrogênio (N) tem se intensificado devido ao seu grande potencial de aplicabilidade, e também por serem candidatos promissores para o desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos em nanoescala. A grande semelhança estrutural entre grafite e o nitreto de boro (BN) hexagonal motivou a síntese dos compostos B_xC_yN_z, onde se espera que as propriedades de tais compostos híbridos sejam intermediárias entre as do grafite semimetálico e as do BN hexagonal isolante. Além disso, as propriedades mecânicas destes compostos podem ser similares às daquelas do diamante e BN cúbico, o que permite a perspectiva de novos materiais com alta dureza.

Neste trabalho estudamos as propriedades eletrônicas e energéticas de nanotubos BC₈N com diferentes diâmetros, realizando cálculos de primeiros princípios.

2 METODOLOGIA (MATERIAL E MÉTODOS)

Neste trabalho utilizamos uma abordagem teórica baseada em cálculos de primeiros princípios com o uso da Teoria do Funcional da Densidade [1,2]. Pseudopotenciais de norma conservada foram usados para descrever a interação entre os íons do caroço com os elétrons de valência. Os elétrons de valência são representados por combinações lineares de conjuntos de bases Gaussianas numéricas [3]. Os funcionais de troca e correlação foram descritos tanto pela aproximação da densidade local (LDA) [4,5] como pela aproximação de gradiente generalizado (GGA) [6]. Os cálculos foram realizados através do código computacional SIESTA [7].

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a realização das análises, inicialmente criamos os nanotubos a serem estudados e otimizamos usando o software SIESTA. Para investigarmos a estabilidade energética dos mesmos, calculamos suas energias de coesão por átomo. Este cálculo é feito de acordo com a equação (1):

$$E_c = \frac{E_t - n_B \mu_B - n_C \mu_C - n_N \mu_N}{n_T} \quad (1)$$

onde E_c é a energia de coesão do tubo por átomo, E_t é a energia total do tubo, n_B , n_C , n_N indicam o número de átomos de boro, carbono e nitrogênio respectivamente no tubo, μ_B , μ_C , μ_N os potenciais químicos do boro, carbono e nitrogênio,

respectivamente e n_T o número total de átomos do tubo. Os valores encontrados com este cálculo estão dispostos na Tab. I.

Tabela I Energias de coesão para os tubos estudados. Os tipos e quantidades de ligações são mostrados nas colunas dois, três, quatro e cinco.

Nanotubos	C-C	B-N	C-B	C-N	E_c
(10,0)	88	16	4	4	-8,69
(20,0)	184	40	4	4	-8,82
(30,0)	280	64	4	4	-8,85
(40,0)	376	88	4	4	-8,86

Observamos que quando aumentamos o diâmetro do tubo, aumentando também o número de ligações favoráveis(ligações do tipo C-C e B-N) e mantendo fixo o número de ligações desfavoráveis(ligações C-B e C-N). Nesta situação a energia de coesão é mais negativa para nanotubos de maior diâmetro, levando a compostos mais estáveis.

As características eletrônicas dos nanotubos estudados podem ser visualizados através de análise das bandas de energia dos mesmos. Tais bandas são mostradas na Fig. 1.

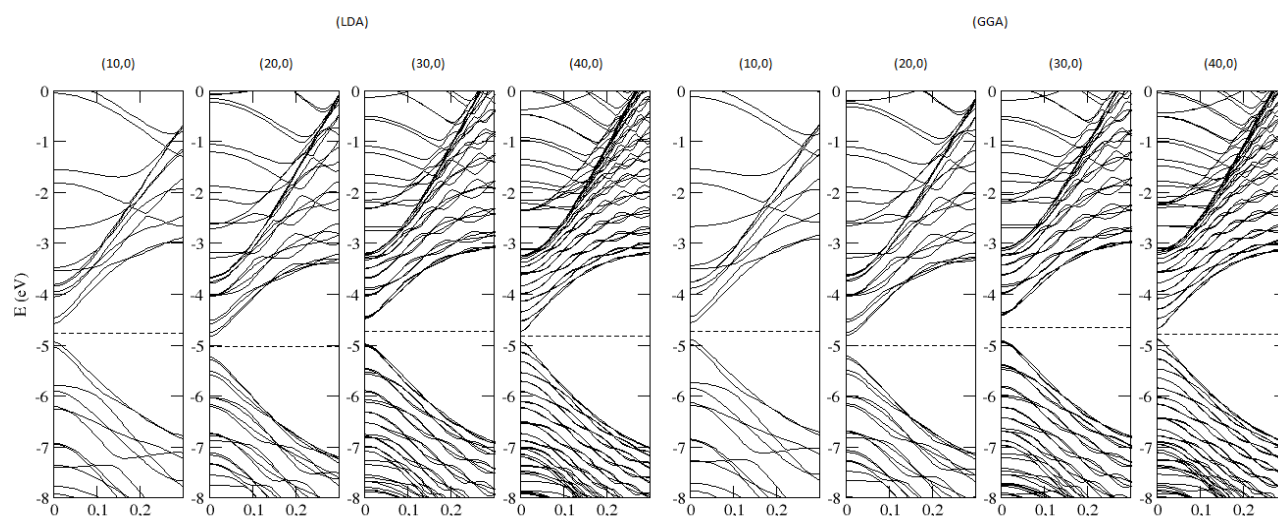


Figura 1 – Bandas dos nanotubos. À esquerda, usando LDA e a direita GGA. A linha tracejada indica o nível de Fermi.

Outra maneira de fazer a análise eletrônica é através das densidades de estados projetadas. Podemos visualiza-las através da Fig. 2.

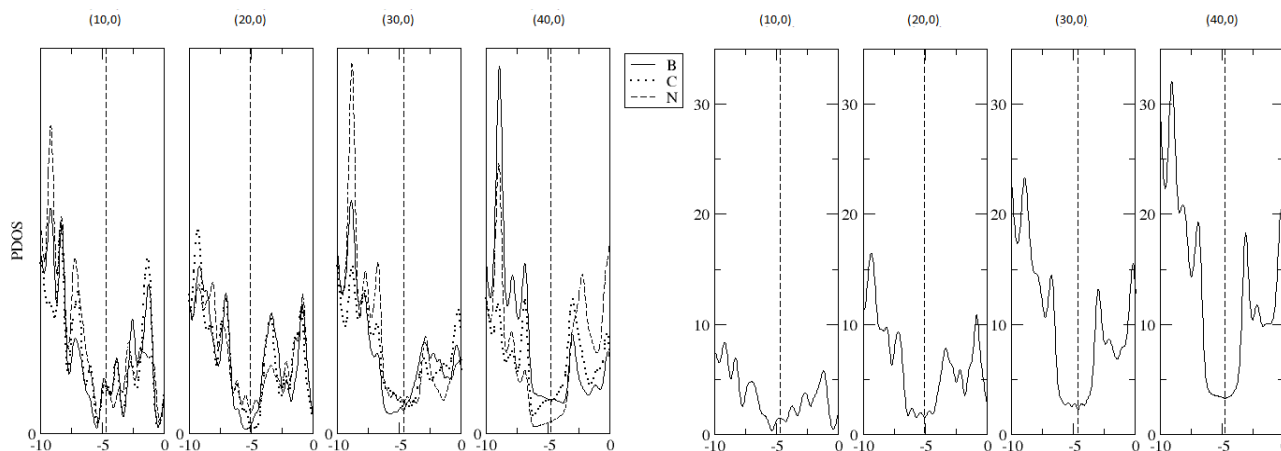


Figura 2 - Densidades de Estados Projetadas dos nanotubos. A linha tracejada indica o nível de Fermi. À esquerda, temos a importância de cada espécie química enquanto na direita, temos a importância de todos os átomos do tubo.

Tanto nas bandas eletrônicas quanto nas densidades de estados, é possível visualizar um aumento do gap's de energia proporcional ao diâmetro dos tubos. Ou seja, menor é o salto de energia que o elétron deve realizar para passar de um estado ligado para um estado desligado do átomo.

4 CONCLUSÃO

Podemos ver através dos dados da Tab. I que tubos de menor diâmetro são menos estáveis que tubos de maior diâmetro. Isto acontece porque para tubos de maior diâmetro, as paredes de carbono naturalmente aproximam-se de uma configuração planar (um plano é uma esfera de raio infinito), o que o torna mais estável. Além disso, viu-se que a relação entre o número de ligações C-C e B-N (favoráveis energeticamente) e ligações C-B e C-N (desfavoráveis), presentes nos tubos, também influenciam as propriedades eletrônicas: tubos com menor número de ligações C-C e B-N (em comparação com o número de ligações C-B e C-N) tem sua energia mais elevada do que os nanotubos com maior número destas ligações. Já através das Fig. 1 e Fig. 2, observamos que quanto maior o diâmetro do tubo, menor será o seu GAP de energia.

5 REFERÊNCIAS

- [1] Hohenberg P. and Kohn W. 1964 *Phys. Rev.* **136** B864.
- [2] Kohn W. and Sham L. J. 1965 *Phys. Rev.* **114** A1133.
- [3] Soler J. M., Artacho E., Gale J. D., García A., Junquera J., Ordejón P. and Sánchez-Portal D. 2002 *J. Phys.:Condens. Matter* **14** 2745.
- [4] Perdew J. P. and Zunger A. 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048.
- [5] Ceperley D. M. and Alder B. J. 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566.

[6] Perdew J. P., Burke K. and Ernzerhof M. 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865.

[7] Artacho E. 2002 *Journal of Physics: Condensed Matter*, **14** 2745.