

# ANÁLISE ESTRUTURAL, ELETRÔNICA E ENERGÉTICA DE NANOTUBOS BC<sub>8</sub>N ATRAVÉS DE SIMULAÇÕES

EDUARDO RIBAS<sup>1</sup>; MARCELO MACHADO<sup>1</sup>; SÉRGIO AZEVEDO<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Universidade federal de Pelotas – eribas.fisica@gmail.com e marcelo.machado@ufpel.edu.br

<sup>2</sup>Universidade Federal da Paraíba – sazevedo@fisica.ufpb.br

## 1. INTRODUÇÃO

O interesse em nano 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 o grafite e o nitreto de boro hexagonal (hBN) motivou a síntese dos compostos B<sub>x</sub>C<sub>y</sub>N<sub>z</sub>, onde espera-se que as propriedades destes compostos híbridos sejam intermediárias entre as do grafite (semimetálico) e as do hBN (isolante). Além disso, as propriedades mecânicas destes compostos podem ser similares àquelas do diamante e BN cúbico, o que permite a perspectiva de novos materiais com alta dureza. Neste trabalho estudamos as propriedades estruturais, energéticas e eletrônicas de nanotubos BC<sub>8</sub>N com diferentes diâmetros, realizando cálculos de primeiros princípios.

## 2. METODOLOGIA

Utilizamos uma abordagem teórica baseada em cálculos de primeiros princípios com o uso da Teoria do Funcional da Densidade (DFT – *Density Functional Theory*) (HOHEMBERG; KOHN, 1964)(KOHN; SHAM, 1965). Pseudo potenciais de norma conservada foram usados para descrever a interação entre os íons do carvão com os elétrons de valência. Os elétrons de valência são representados por combinações lineares de conjuntos de bases Gaussianas numéricas (SOLER et al., 2002). Os funcionais de troca e correlação foram descritos tanto pela aproximação da densidade local (LDA) (PERDEW; ZUNGER, 1981)(CEPERLEY; ALDER, 1980) como pela aproximação de gradiente generalizado (GGA) (PERDEW et al., 1996). Os cálculos foram realizados através do código computacional SIESTA (ARTACHO, 2008). Foram feitos cálculos para sete tubos BC<sub>8</sub>N, sendo três tubos armchair com quiralidade (10,10), (20,20), (30,30) e quatro tubos zigzag com quiralidade (10,0), (20,0), (30,0) e (40,0).

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

### 3.1. Análise estrutural:

Para a realização desta análise, medimos o diâmetro dos tubos antes da realização da otimização geométrica (DI), como mostra a Figura 1. Após a realização dos cálculos, obtivemos um rearranjo geométrico dos átomos nos tubos, o que gerou algumas deformações na estrutura tubular perfeita dos mesmos, causando um achatamento das partes que continham átomos de BN.

Com isso, encontramos dois novos diâmetros (D1 e D2) para cada tubo, uma vez que os mesmos deixam de se apresentar numa forma cilíndrica e passam a ser elípticos. Os dados dos diâmetros, antes e após a convergência, encontram-se na Tabela I.

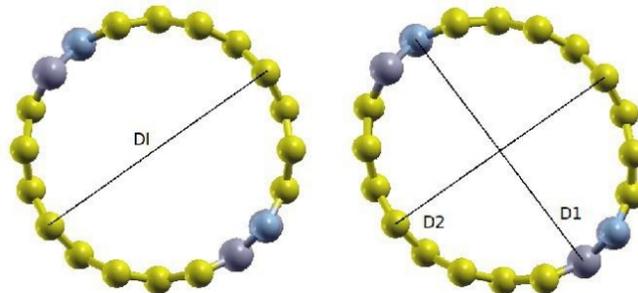


Figura 1 - Tubo BC<sub>8</sub>N (10,0). Do lado esquerdo (direito), o tubo antes (depois) da convergência.

Tabela I - Tubos zigzag, com o números de átomos, diâmetros em Angstroms, antes (D1) e depois (D1) e (D2) da otimização geométrica utilizando os funcionais LDA e GGA.

Tubo	átomos	D1	D1 (LDA)	D2 (LDA)	e (LDA)	D1 (GGA)	D2 (GGA)	e (GGA)
(10,10)	80	13,60	13,98	13,64	0,22	13,91	13,82	0,11
(20,20)	160	27,14	27,28	27,68	0,17	27,70	27,61	0,08
(30,30)	240	40,69	41,03	40,91	0	41,09	41,40	0,12 i
(10,0)	40	7,83	8,37	7,54	0,43	8,49	7,59	0,45
(20,0)	80	15,66	16,05	15,71	0,20	16,05	15,93	0,12
(30,0)	120	23,49	23,83	23,44	0	24,04	23,77	0,15 i
(40,0)	160	31,32	31,69	31,32	0	31,99	31,60	0,16 i

### 3.2. Análise energética:

Para investigarmos a estabilidade dos tubos, calculamos as suas energias de formação. 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 no tubo,  $\mu_B$ ,  $\mu_C$ ,  $\mu_N$  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 Tabela II.

Tabela II - Energias de coesão para os tubos zigzag 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	$E_c$ LDA	$E_c$ GGA
BC <sub>8</sub> N (10,10)	62	14	4	4	-9,70	-10,24
BC <sub>8</sub> N (20,20)	126	30	4	4	-9,76	-10,30
BC <sub>8</sub> N (30,30)	190	46	4	4	-9,78	-10,32
BC <sub>8</sub> N (10,0)	52	10	4	4	-9,60	-10,15

BC <sub>8</sub> N (20,0)	108	24	4	4	-9,73	-10,27
BC <sub>8</sub> N (30,0)	164	38	4	4	-9,76	-10,31
BC <sub>8</sub> N (40,0)	220	52	4	4	-9,78	-10,32

### 3.3. Análise eletrônica:

Já as estruturas de bandas de energia são mostradas na Figura 2 para os tubos armchair e na Figura 3 para os tubos zigzag.

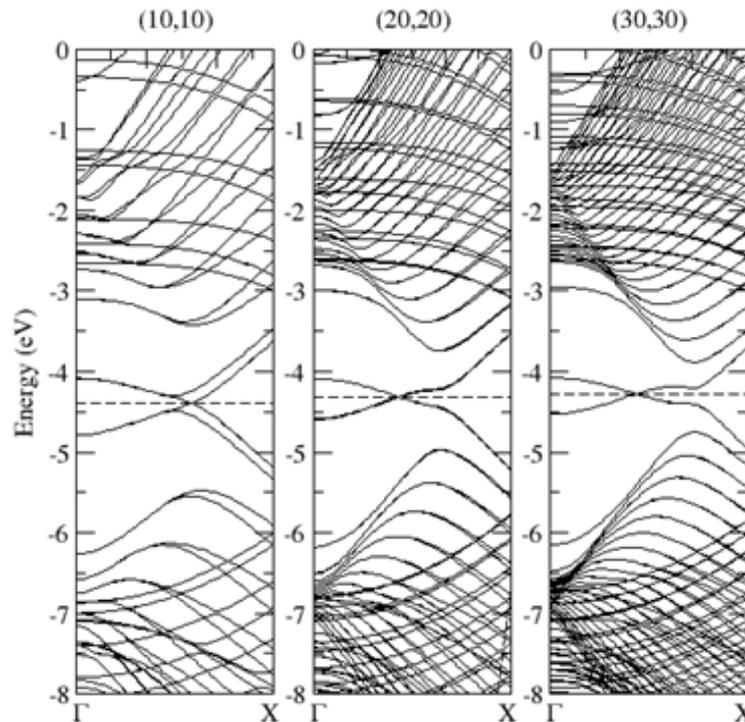


Figura 2 – Estruturas de bandas de energia dos tubos BC<sub>8</sub>N armchair usando a aproximação GGA. A linha pontilhada representa o nível de Fermi.

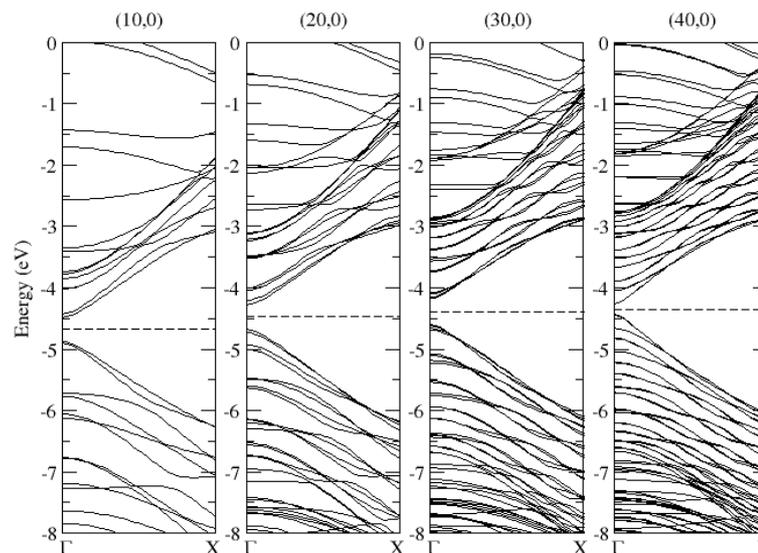


Figura 3 – Estruturas de bandas de energia dos tubos BC<sub>8</sub>N zigzag usando a aproximação GGA. A linha pontilhada representa o nível de Fermi.

## 4. CONCLUSÕES

Através da Tabela I conseguimos ver que quanto menor o diâmetro do tubo, maior é o achatamento sofrido, havendo uma alteração no sentido de achatamento para grandes diâmetros. Este resultado para pequenos tubos é esperado e explicado considerando a energia necessária para enrolar folhas planas de C e BN. É mais custoso, energeticamente, enrolar tubos de carbono a partir de folhas de carbono (grafeno) do que enrolar tubos de nitreto de boro a partir de folhas de nitreto de boro, logo, energeticamente é mais favorável para o tubo deixar as faixas de C mais planas e intensificar a curvatura das faixas de BN, alterando a sua seção transversal de uma forma circular para uma elipsoidal. Já em tubos de grandes diâmetros, as paredes de carbono naturalmente aproximam-se de uma configuração planar, não necessitando intensificar a curvatura das de BN. Através dos dados da Tabela II observamos que tubos de maior diâmetro são mais estáveis. Isto acontece porque em tubos de maior diâmetro, as paredes de carbono naturalmente aproximam-se de uma configuração planar. Além disso, o número de ligações C-C e B-N (favoráveis energeticamente) aumenta em nanotubos de maior diâmetro, enquanto que o número de ligações C-B e C-N (desfavoráveis energeticamente) se mantém constante. Finalmente, o achatamento também contribui para a estabilidade. Já nas figuras de bandas podemos ver que o comportamento dos tubos  $BC_8N$  é semelhante ao comportamento dos tubos de carbono puro, onde os armchair apresentam comportamento metálico e os zigzag, um pequeno gap de energia em torno de 0,4 eV para todos os zigzag, exceto o maior tubo, o (40,0), que apresentou um gap de 0,2 eV. Este resultado é esperado, pois o número de C é bem maior que o número de BN nos tubos. Ao aumentarmos a concentração de BN e, conseqüentemente, diminuirmos a concentração de C nos tubos, o resultado esperado seria um aumento no gap de energia, uma vez que tubos de BN apresentam um grande gap de energia (são isolantes), independente da quiralidade. Dessa forma, pode-se pensar em uma forma de obtermos sistemas nanométricos com comportamentos eletrônicos feitos sob medida e com boa estabilidade energética.

## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Artacho E. 2008. **User's Guide SIESTA 2.0.2**. Disponível em <<http://flex.phys.tohoku.ac.jp/texti/siesta-2.0.2-manual.pdf>>.
- Ceperley D. M. and Alder B. J. 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566.
- Hohenberg P. and Kohn W. 1964 *Phys. Rev.* **136** B864.
- Kohn W. and Sham L. J. 1965 *Phys. Rev.* **114** A1133.
- Perdew J. P., Burke K. and Ernzerhof M. 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865.
- Perdew J. P. and Zunger A. 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048.
- 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.