



XII Salão de
Iniciação Científica
PUCRS

Propriedades estruturais e energéticas de nanotubos BC₈N zigzag

Eduardo Ribas¹, Marcelo Pereira Machado¹ (orientador)

¹UFPEl, Instituto de Física e Matemática

Resumo

Introdução

Recentemente o interesse em compostos B_xC_yN_z 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 BN hexagonal motivou a síntese dos 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 superduros.

Neste trabalho estudamos as propriedades estruturais e energéticas de nanotubos zigzag com a estequiometria BC₈N e diferentes diâmetros, realizando cálculos de primeiros princípios.

Metodologia

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 base 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]. Já para visualização

de moléculas e construção de figuras foram utilizados os códigos computacionais Xmakemol e XCrySden.

Resultados (ou Resultados e Discussão)

Para a realização desta análise, inicialmente medimos o diâmetro dos tubos antes da realização da otimização geométrica, 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 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.

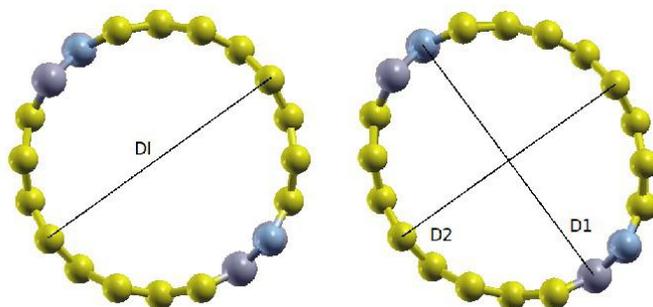


Figura 1 Tubo BC8N (10,0). Do lado esquerdo (direito) , o tubo antes (depois) da convergência.

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

Tubo	átomos	DI	D1 (LDA)	D2 (LDA)	D1/D2 (LDA)	D1 (GGA)	D2 (GGA)	D1/D2 (GGA)
(10,0)	40	7,83	8,37	6,61	1,27	8,55	7,59	1,13
(20,0)	80	15,66	15,86	15,83	1,00	16,06	15,97	1,00
(30,0)	120	23,49	23,78	23,60	1,01	24,02	23,80	1,01
(40,0)	160	31,32	31,68	31,42	1,01	32,02	31,76	1,01

Para investigarmos a estabilidade dos tubos, calculamos as suas energias de formação. Este cálculo é feito de acordo com a equação (1):

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

onde E_a é a energia de formação 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, 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 Tabela II.

Tabela II Energias de formação 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_a
(10,0)	52	10	4	4	- 8,69
(20,0)	56	24	4	4	- 8,82
(30,0)	84	38	4	4	- 8,85
(40,0)	120	52	4	4	- 8,86

Conclusão

Observando os dados da Tabela I, concluímos que quanto menor for o diâmetro do tubo, maior será a sua deformação. Este é um resultado esperado, uma vez que um tubo de menor diâmetro torna-se mais estável quando suas partes formadas por carbono aproximam-se de uma configuração planar, já que deve-se gastar energia para enrolar um tubo de carbono a partir de uma folha de grafeno. Por outro lado, para um tubo de maior diâmetro, as paredes de carbono naturalmente aproximam-se de uma configuração planar (um plano é uma esfera de raio infinito), logo, o achatamento é menos aparente. 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 influencia as propriedades estruturais dos mesmos: tubos com menor número de ligações C-C e B-N (em comparação com o número de ligações C-B e C-N) sofrem deformação maior do que os nanotubos com maior número destas ligações. De acordo com a Tabela II, vemos que a energia de formação por átomo é menor ao aumentarmos o diâmetro, ou seja, tubos de maiores diâmetros são mais estáveis. Este resultado é esperado, uma vez que deve-se gastar uma certa quantidade de energia para enrolar tubos a partir de folhas planas.

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.