



CÁLCULOS AB INITIO DE ESTRUTURA ELETRÔNICA DE NANOMATERIAIS

Guilherme Angelo Moreira Bernardo¹, Mirleide Dantas Lopes²

RESUMO

Investigamos a partir da energia de formação por átomos e da estrutura eletrônica de bandas, as propriedades eletrônicas de dezesseis nanotubos compostos por carbono e h-BN, com diâmetros e *chiralidades* diferentes. Tal análise foi realizada por meio do Código SIESTA, uma ferramenta computacional, que utiliza a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) como parâmetro para sua execução. As nanoestruturas foram organizadas em três cenários. O primeiro consistiu na confecção de oito nanotubos de paredes simples com *chiralidade zigzag* e *armchair*. O segundo partiu da observação de quatro nanotubos mistos, em diferentes arranjos coaxiais. O terceiro consistiu na configuração de quatro nanotubos de paredes duplas de mesma espécie. Os resultados obtidos para a energia de formação apontaram um comportamento similar em todas as estruturas. No entanto, nanotubos com diâmetros menores mostraram-se menos estáveis. Avaliamos também que independente da *chiralidade* e do diâmetro, nanoestruturas mistas com nanotubos de carbono externos, apresentaram maior estabilidade que quando arranjadas com nanotubo de h-BN fora. Ademais, nanotubos de paredes duplas de carbono exibiram menor energia de formação por átomo do que nanotubos duplos de h-BN, o que caracteriza uma menor estabilidade. Além disso, nanotubos de h-BN, independente da *chiralidade*, do diâmetro e do número de paredes, denotaram comportamento isolante. Já os nanotubos de carbono mostraram comportamento condutor em todas as configurações *armchair* e de parede dupla, e semicondutor, quando *zigzag* (14,0). Por sua vez, nanotubos mistos com h-BN fora são condutores, no entanto, quando apresentam carbono externo, *zigzag* e *armchair*, são, respectivamente, semicondutores e condutores.

Palavras-chave: Nanotubos, Energia de Formação, Estrutura Eletrônica de Bandas.

¹Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza (UACEN), Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), Cajazeiras, PB, e-mail: guilhermesa1996@hotmail.com

²Doutora em Física da Matéria Condensada, Professora Adjunta, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza (UACEN), UFCG, Cajazeiras, PB, e-mail: mirleide_dantas@yahoo.com.br

AB INITIO CALCULATIONS OF ELECTRONIC STRUCTURE OF NANOMATERIALS

ABSTRACT

We investigated, from the energy of formation by atoms and the electronic structure of bands, electronics properties of sixteen nanotubes composed of carbon and h-BN, with different diameters and chiralities. This analysis was performed using the SIESTA Code, a computational tool that uses the Density Functional Theory (DFT) as parameter for its execution. The nanostructures were organized in three scenarios. The first consisted of the construction of eight single-wall nanotubes with chirality zigzag and armchair. The second one was based on the observation of four mixed nanotubes in different coaxial arrangements. The third one consisted in the configuration of four double wall nanotubes of the same species. The results obtained for the formation energy showed a similar behavior in all the structures. However, nanotubes with smaller diameters were less stable. We also evaluated that, regardless of chirality and diameter, mixed nanostructures with external carbon nanotubes, presented higher stability than when arranged with nanotube of h-BN in the outside part. In addition, double wall carbon nanotubes exhibited lower formation energy per atom than double nanotubes of h-BN, which characterizes lower stability. Furthermore, h-BN nanotubes, regardless of chirality, diameter and number of walls, denoted insulating behavior. Carbon nanotubes showed conductor behavior in all armchair and double wall configurations, and semiconductor, when they were in zigzag (14.0). In turn, mixed nanotubes, with h-BN in the outside part are conductors, whereas when they have external carbon, zigzag and armchair, they are semiconductors and conductors, respectively.

Keywords: Nanotubes, Formation Energy, Electronic Band Structure.