



EFEITO DE IMPUREZAS NA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE NANOTUBOS DE CARBONO E H-BN COM PAREDES SIMPLES E DUPLAS

Guilherme Angelo Moreira Bernardo¹, Mirleide Dantas Lopes²

RESUMO

Utilizando cálculos de primeiros princípios, analisamos a estabilidade estrutural e as propriedades eletrônicas de vinte nanotubos formados por carbono e h-BN, do tipo *zigzag* e *armchair*, com a adição de impurezas de carbono, boro e nitrogênio. Para tanto, obtivemos a energia de formação por átomo e a estrutura eletrônica de bandas. Tal investigação foi realizada com auxílio do Código SIESTA, software que utiliza a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) como base para sua execução. Inicialmente, foram feitos quatro nanotubos mistos, de paredes duplas, com diferentes arranjos coaxiais de carbono e h-BN. A partir destes nanotubos outros dezesseis foram confeccionados, no entanto, a estes foram adicionados diferentes impurezas de átomos de carbono, boro e nitrogênio. Desta forma, obtivemos oito nanoestruturas com impurezas do tipo P e oito do tipo N. Todos os nanotubos avaliados apresentaram valores semelhantes para a energia de formação por átomo, no entanto, os nanotubos com impurezas são sensivelmente menos estáveis que os nanotubos de base. Percebemos ainda que a adição de átomos estranhos à rede intrínseca provocou o surgimento de estados eletrônicos na região do nível de Fermi, tanto na banda de valência, quanto na banda de condução, a depender da impureza introduzida na rede. Para tanto, nossos dados alinham-se aos resultados expressos na literatura e reafirmam as propriedades insólitas destes materiais.

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



***EFFECT OF IMPURITIES ON THE ELECTRONIC STRUCTURE OF CARBON
AND H-BN NANOTUBES WITH SIMPLE AND DOUBLE WALLED***

ABSTRACT

Using first-principle calculations, we analyzed the structural stability and electronic properties of twenty zigzag and armchair-type carbon and h-BN nanotubes with the addition of carbon, boron and nitrogen impurities. For this, we obtained the energy of formation by atom and the electronic structure of bands. This investigation was carried out with the aid of the SIESTA Code, software that uses the Density Functional Theory (DFT) as the basis for its execution. Initially, four mixed double walled nanotubes with different carbon and h-BN coaxial arrangements were made. From these nanotubes another sixteen were made, however, to these were added different impurities of carbon atoms, boron and nitrogen. Thus, we obtained eight nanostructures with impurities of P-type and eight of N-type. All nanotubes evaluated presented similar values for the energy of formation per atom, however, nanotubes with impurities are noticeably less stable than base nanotubes. We also noticed that the addition of foreign atoms to the intrinsic lattice caused the emergence of electronic states in the Fermi level region, both in the valence band and in the conduction band, depending on the impurity introduced in the lattice. Therefore, our data are in line with the results expressed in the literature and reaffirm the exceptional properties of these materials.

Keywords: Nanotubes, Formation Energy, Electronic Band Structure.