

Anais do XIV Seminário de Iniciação Científica da Universidade Estadual de Feira de Santana, UEFS, Feira de Santana, 18 a 22 de outubro de 2010

## **EFEITO DO TAMANHO DA CÉLULA UNITÁRIA SOBRE PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE COMPOSTOS BC<sub>2</sub>N**

**Elias Brito Alves Junior<sup>1</sup>; Sérgio André Fontes Azevedo<sup>2</sup>**

1. Bolsista Fapesb, Graduando em Bacharelado em Física, Universidade Estadual de Feira de Santana, e-mail: elias.fisica@gmail.com
2. Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, e-mail: sazevedo@fisica.ufpb.br

**PALAVRAS-CHAVE:** Nanoestruturas, Estrutura Eletrônica, BC<sub>2</sub>N.

### **INTRODUÇÃO**

Com o aumento das pesquisas na área da nanotecnologia e graças à descoberta dos nanotubos de carbono, outras nanoestruturas passaram a ser estudadas em busca de melhores aplicações tecnológicas. Recentemente, estruturas compostas de boro, nitrogênio e carbono (BCN) na forma hexagonal, similar ao grafite têm atraído a atenção, devido a seu bom desempenho como bons condutores, além de bons emissores de campo. Além disso, a semelhança estrutural com o grafite motivou a síntese dos  $B_xC_yN_z$  cujas as propriedades mecânicas podem ser similares àquelas do diamante, o que permite a perspectiva de novos materiais super-duros. Entretanto, é desconhecido o tamanho da célula unitária que compõe tais estruturas. Neste trabalho, como uma forma de fornecer um indício para essa questão, investigamos tais modelos com composição  $B_xC_yN_z$ , de diferentes tamanhos, para dois arranjos e comparamos os resultados da estabilidade estrutural com o tamanho da célula unitária, além das modificações na estrutura eletrônica.

Foi construído um arranjo tipo ilha, onde as linhas de carbono ficam ilhadas entre as linhas de BN e outro do tipo faixa, onde há alternância entre as linhas de carbono e de BN, onde a configuração do tipo ilha mostrou-se mais estável. Para cada modelo, variamos a quantidade de átomos de um valor constante, verificando que a energia de formação, que é a energia necessária para formar a estrutura, independe dessa mudança, possuindo o mesmo valor para cada, pois a diferença na quantidade de ligações BN e CC entre as estruturas é a mesma.

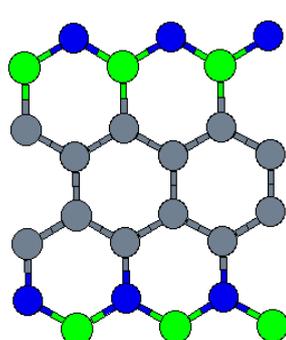
### **MATERIAIS E MÉTODOS**

A vantagem prática de utilizar um plano do tipo  $B_xC_yN_z$  é devido à facilidade de controlar as suas propriedades eletrônicas, que dependem apenas de sua composição. Quando tratamos de planos de grafite e BN é difícil controlar essas propriedades, pois estes possuem um gap de energia, que é a quantidade de energia necessária para um elétron transitar da camada de valência para a camada de condução, pequeno e grande respectivamente que restringe as aplicações na área tecnológica.

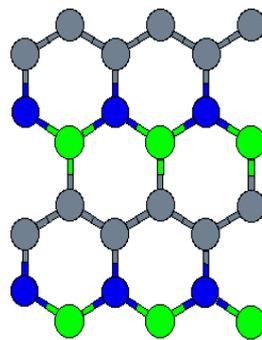
Uma investigação sobre algumas estruturas planas de  $B_xC_yN_z$ , de diferentes tamanhos para dois arranjos foi realizada e os resultados comparados com dados experimentais, com o propósito de analisar a relação da estabilidade estrutural com o tamanho da célula unitária, e se a estrutura eletrônica é também estável. Os cálculos são baseados na teoria do funcional da densidade (DFT), implementado no código *SIESTA* utilizando a teoria do pseudo-potencial com um critério de convergência de  $10^{-4}$ . Para a construção dos gráficos, arranjos, foram usados respectivamente o XMGRACE e o XMAKEMOL. Todos os cálculos foram refeitos para se testar a semelhança dos valores obtidos anteriormente.

Anais do XIV Seminário de Iniciação Científica da Universidade Estadual de Feira de Santana, UEFS, Feira de Santana, 18 a 22 de outubro de 2010

As estruturas estudadas foram do tipo Ilha (Figura 1) e do tipo Faixa (Figura 2). Todas elas seguindo um padrão do tipo  $BC_2N$  (um par de ligações C-C para um par de ligações B-N). A quantidade de átomos que foi acrescentada para cada estrutura e sua respectiva energia de formação está representada na tabela (Tabela 1).



Plano com 24 átomos:  
12 átomos de Carbono  
6 átomos de Nitrogênio  
6 átomos de Boro



Plano 24 com átomos:  
12 átomos de Carbono  
6 átomos de Nitrogênio  
6 átomos de Boro

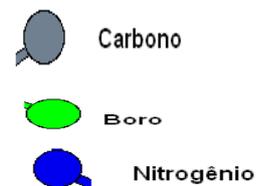


Figura 1

Figura 2

(estrutura com os carbonos ilhados) (alternância entre as linhas)

Quantidade de Átomos	Energia de Formação (eV)- Ilha	Energia de Formação (eV) - Faixa	Energia(eV)/átomo- Ilha	Energia(eV)/átomo- Faixa
8	1.01	1.65	0.13	0.21
16	2.28	3.54	0.14	0.22
24	3.43	5.32	0.14	0.22
48	6.89	10.69	0.14	0.22
72	10.31	16.01	0.14	0.22
96	13.73	21.31	0.14	0.22
120	17.2	26.7	0.14	0.22

(Tabela 1)

**Relação entre quantidade de átomos (tamanho) e energias de formação.**

Para o cálculo da energia de formação dessas estruturas utilizamos a equação dada por:

$$E_{form} = E_{total} - n_B \mu_B - n_C \mu_C - n_N \mu_N$$

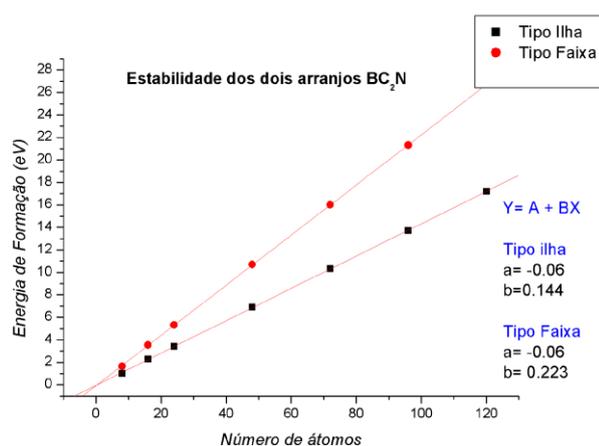
onde  $E_{total}$  é a energia total da estrutura,  $\mu_B$ ,  $\mu_C$  e  $\mu_N$  são os potenciais químicos do Boro, Carbono e Nitrogênio respectivamente e ns são os números de átomos para cada estrutura.

Anais do XIV Seminário de Iniciação Científica da Universidade Estadual de Feira de Santana, UEFS, Feira de Santana, 18 a 22 de outubro de 2010

Para análise das propriedades eletrônicas dos arranjos foram feitos os gráficos da DOS (Densidade de Estados), que é a medida de estados ocupados por energia da minha configuração e das Bandas de energia, onde um valor estatístico é gerado pelo *SIESTA*.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

O gráfico abaixo (Figura 5) mostra que a estrutura do tipo Ilha se mostrou a mais estável como já era previsto por [1], e na (Tabela 1) foi constatado que o aumento da célula unitária não influenciou na Energia de Formação, com aproximadamente 0.14 eV e 0.22 eV para as estruturas tipo Ilha e Faixa respectivamente.



**Figura 5- (Gráfico da Energia de Formação (eV) x Número de átomos)**

As propriedades eletrônicas também não sofreram mudanças, isso é constatado analisando a tabela (Tabela 2), onde os valores de GAP (diferença de energia entre as bandas de valência e condução) não foram modificados com o aumento da célula unitária, sendo aproximadamente 1.15 eV e 1.58 eV para as estruturas tipo Ilha e tipo Faixa.

Quantidade de Átomos	Gap (eV) (Ilha)	Gap (eV) (Faixa)
8	1.15	1.55
16	1.17	1.57
24	1.12	1.60
48	1.18	1.56
72	1.12	1.59
96	1.14	1.57
120	1.18	1.59

**Tabela 2- Valores de GAP dos arranjos BC<sub>2</sub>N estudados**

## CONCLUSÕES

Analisando o gráfico da energia de formação pelo tamanho das células unitárias, vê-se que, como se seguiu uma proporção de crescimento dos planos em relação ao número de átomos, ele se mantém em um padrão de crescimento linear, onde a energia de formação por átomo não varia, já que a configuração das ligações permanece a mesma.

Nas fitas com defeitos C-N não houve mudança significativa, já que os próximos níveis disponíveis estão bem distantes do último nível ocupado. Por outro lado, nas fitas com defeitos C-B houve uma notável redução do GAP, visto que basta uma pequena energia para que os elétrons passem do último nível preenchido para o nível aceitador situado muito perto dos níveis da banda de condução, melhorando a condutividade elétrica dessas estruturas.

Tudo isso será complementado na apresentação do evento, pois o espaço físico do resumo não permite a apresentação dos gráficos da DOS e de Bandas de energia. Assim, tudo que foi reestudado, e algumas coisas calculadas novamente para serem conferidas com os valores antigos obtidos, mostrou que foi possível chegar às mesmas conclusões, tendo, portanto o mesmo resultado.

## REFERÊNCIAS

- Azevedo, S. Stability energetic of B-C-N monolayer. *Physics Letters A*, UEFS, 2006.
- Mazzoni, Mario S.C, R. W. Nunes, Azevedo, S. and Chacham, H. Electronic structure and energies of  $B_xC_yN_z$  layered structures. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 73(7).
- Iijima, S.; Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, London, v.354, p.56-58, Nov. 1991.
- Terrones M., J-C Chalker, A. Gloter, E.Cruz-Silva. Y. B.Li, A. Vinu, Z. Zanolli, J. M. Dominguez, H. Terrones, Y. Bando, and D. Golberg, *Nano Letters* 4, 1026 (2008).
- Mahan; Myers. *Química, um curso universitário*. Editora Edgard, Blucher ,LTDA, 1987.
- Atkins, P.W; Jones, Loretta. *Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente*. Porto Alegre: Bookman, 2001. 193 p. ISBN 857307739-5
- Vianna, Jose David M.; Fazzio, Alberto; Canuto, Sylvio. *Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional*. São Paulo, SP: Livraria da Física, 2004. 401 p. ISBN 8588325160
- Kaylan Raidongia, Dinesh Jagadeesan, Mousumi Upadhyay-Kahaly, U. V. Waghmare, Swapan. K. Pati, M.Eswaramoorthya and C. N. R. Rao, Received 14th August 2007, Accepted 14th September 2007
- S. Azevedo and M. Machado, *IOP Publishing, Nanotechnology* 20,115709 (2009)
- L. Xu, L. Shi, X. Li A. *Surface Science* 255 5957-5960 (2009)