

ESTUDO TEÓRICO DA ESTABILIDADE ESTRUTURAL E ELETRÔNICA DE NANOCONES $B_xC_yN_z$

Elias Brito Alves Junior¹; Carlos Alberto de Lima Ribeiro²; Sérgio Azevedo³

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 Estadual de Feira de Santana, e-mail: calr@uefs.br
3. Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, e-mail: sazevedo@fisica.ufpb.br

PALAVRAS-CHAVE: Nanocônes, Estrutura Eletrônica, $B_xC_yN_z$.

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 sua boa performance 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 às daquelas do diamante, o que permite a perspectiva de novos materiais super-duros. Os nanocônes são formados, de forma teórica com um plano – pode ser o grafite – que recebe um corte em um determinado ângulo, que aqui são múltiplos de 60° , e este, chamado de ângulo de desclinação, é descartado, as partes restantes do plano são então unidas de forma a adquirir o formato cônico. Os nanocônes são classificados de acordo com sua estequiometria e seu ângulo de desclinação.

Foram construídos cinco nanocônes de acordo com as camadas mais estáveis citadas por Azevedo *et al.* (2005), naquele trabalho foram escolhidas as camadas (a), (d), (f), (g), e (h), somados a um cone de BCN, que, juntamente com nanocônes de BN e carbono formam o grupo estudado. Os dois últimos nanocônes foram utilizados apenas como referência teórica, pois já possuem propriedades conhecidas na literatura científica, tanto em sua estabilidade quanto sua estrutura eletrônica.

MATERIAIS E MÉTODOS

A vantagem prática de utilizar um tubo do tipo $B_xC_yN_z$ é devido a facilidade de controlar as suas propriedades eletrônicas, que dependem apenas de sua composição. Quando tratamos de tubos de grafite e BN é difícil controlar essas mesmas propriedades, pois estes possuem um *gap* pequeno e grande respectivamente que restringe as aplicações na área tecnológica.

Uma investigação de algumas estruturas de nanocônes $B_xC_yN_z$, de diferentes desclinações foi realizada e os resultados comparados com tubos e camadas do trabalho de Azevedo e colaboradores (2005), com o propósito de analisar a relação da estabilidade com o ângulo de desclinação e se a estrutura eletrônica é também estável em relação ao seu *gap* e sua densidade de estados. Os cálculos são baseados na teoria funcional de densidade (DFT), implementados no código *SIESTA*, utilizando a teoria do pseudo-potencial com um critério de convergência de 10^{-4} . Para a construção dos gráficos e arranjos foram usados respectivamente o *XMAKEMOL* e *XMGRACE*. Todos os cálculos foram refeitos para se testar a semelhança dos valores obtidos anteriormente.

As estruturas estudadas foram nanocônes com ângulos de desclinação de 60° e 120° . Como as estequiometrias são do tipo $B_xC_yN_z$, então foram utilizados como referências os valores da estabilidade e estrutura eletrônica dos nanocônes de carbono e nitreto de boro, esperando obter resultados intermediários entre essas estruturas. Que podem ser observadas na figura 1 da página seguinte.

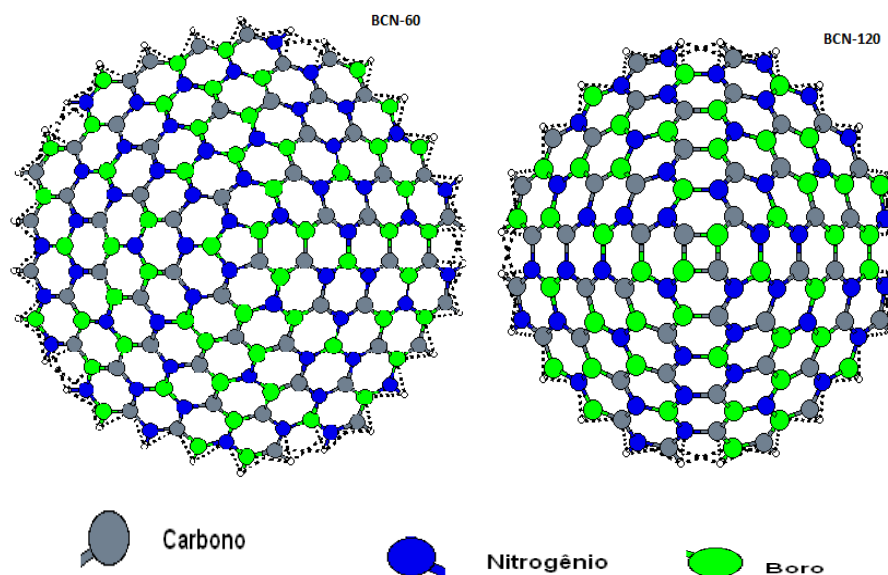


Figura 1. Modelo Teórico de nanocones $B_xC_yN_z$ com 60° e 120° de desclinações.

Tabela 1- Comparação entre os diferentes compostos

Estequiometria	Desclinação	Energia(eV)/ átomo	Gap (eV)
BC2N	60	0.17	0.06
BC2N	120	-1.30	0.30
B3C2N3	60	0.14	0.01
B3C2N3	120	0.16	0.14
BCN	60	0.56	0.03
BCN	120	0.63	0.05

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

$$E_{form} = E_{total} - n_B\mu_B - n_C\mu_C - n_N\mu_N - n_{HB}\mu_{HB} - n_{HC}\mu_{HC} - n_{HN}\mu_{HN}.$$

Na qual E_{total} é a energia total da estrutura, μ_B , μ_C e μ_N são os potenciais químicos do Boro, Carbono e Nitrogênio respectivamente e μ_{HB} , μ_{HC} , μ_{HN} os potenciais químicos desses átomos ligados ao hidrogênio, utilizado nas bordas para saturar as ligações restantes. Os números de átomos para cada estrutura estão na frente de cada potencial equivalente.

Para análise das propriedades eletrônicas dos arranjos temos o valor do *gap* de energia e foram feitos os gráficos da DOS (Densidade de Estados), que é a medida de estados ocupados por energia da configuração e a PDOS (Densidade de Estados Projetada) que apresenta qual átomo exerce maior influencia na densidade de estados, e são valores estatísticos gerados pelo *SIESTA*. Os valores das energias de formação, juntamente com o *gap* estão indicados na Tabela 1 acima.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Vamos apresentar alguns gráficos da DOS para os nanocones de BC₂N com desclinação de 60° e o B₃C₂N₃ com desclinação de 120°, na figura 2, e a PDOS para as mesmas estruturas na figura 3. São mostrados os que apresentaram maior estabilidade. Nos gráficos a escala de energia, no eixo das abscissas, é dada em eV. O objetivo é visualizar o *gap* e não buscar seus valores ou pontos máximos. Os gráficos são criados através do arquivo de saída do SIESTA, de extensão .dat, e logo em seguida, o software XMGRACE lê esse arquivo e cria os gráficos desta forma apresentada, não podendo alterar sua resolução.

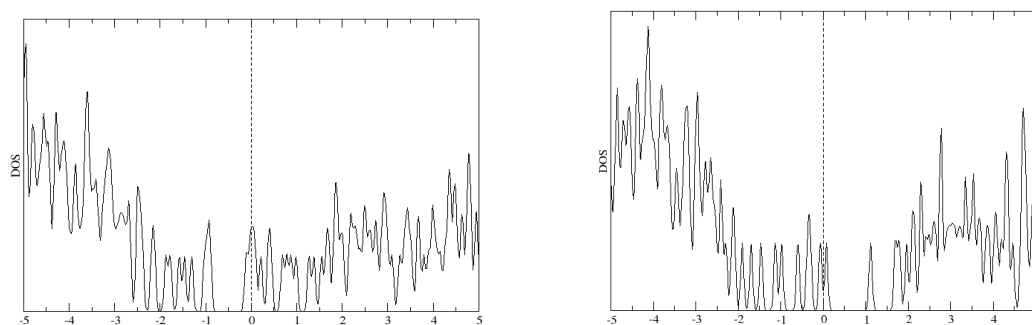


Figura 2. DOS para cones BC₂N-60 e B₃C₂N₃-120.

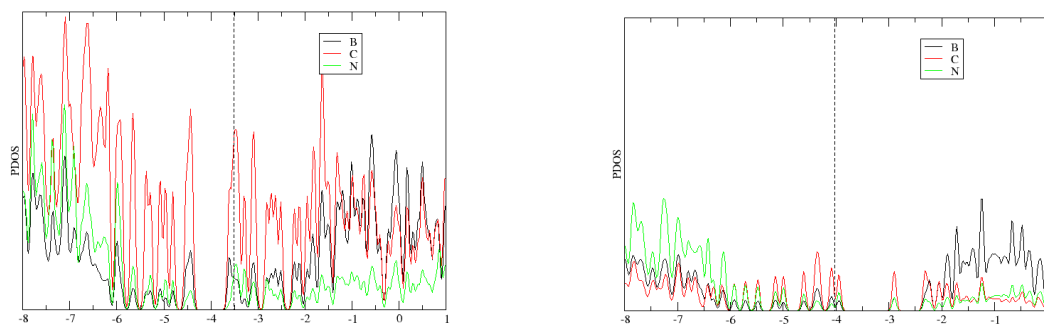


Figura 3. PDOS para cones BC₂N-60 e B₃C₂N₃-120

É visível que tanto para o nanocone BC₂N-60, quanto B₃C₂N₃-120, há a presença de estados ocupados no nível de Fermi, o que mostra que não há grande influência da curvatura do nanocone na densidade de estados, visto que o que mais influencia é a um pentágono no ápice. Na densidade projetada, há maior influência em ambos os nanocones do carbono, o que já era esperado, visto que o grafeno, o nanotubo e o nanocone de carbono possuem características de semiconductor, diferente do nitreto de boro, com caráter isolante. Então, a maior contribuição para ocupação dos estados na densidade de estados dos cones com maior estabilidade é devido ao carbono.

CONCLUSÕES

Analisando os gráficos da DOS e PDOS, constatamos que é possível obtermos propriedades intermediárias entre nanocones de carbono, que possuem caráter semicondutor e o nitreto de boro, com caráter isolante. O valor do *gap* de energia é baixo quando comparado ao do nitreto de boro e um pouco mais elevado que o do carbono, então basta uma pequena energia para que os elétrons passem do último nível preenchido para o nível aceitador situado muito perto dos níveis da camada de condução, melhorando a condutividade elétrica dessas estruturas. A curvatura dos nanocones adquiridas com o processo de Volterra não influencia tanto quanto a estequiometria dos compostos $B_xC_yN_z$ na densidade de estados. Contudo, a influência da curvatura só pode ser vista através dos nanocones com desclinação de 60° , que possuem um pentágono no seu ápice, diferente dos nanocones de 120° , que possuem um quadrado, sendo menos estáveis. Houve uma redução significativa de Energia de Ionização melhorando as performances dessas estruturas em um possível uso em materiais usados em dispositivos de emissão de campo. Isso foi devido à presença do átomo de carbono.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AZEVEDO S. 2006. Stability energetic of B-C-N monolayer. *Physics Letters A* 351 (1-2) 109-112.
- MAZZONI, Mario S.C.; *et al.* 2006. Electronic structure and energies of $B_xC_yN_z$ layered structures. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* 73 (7) 073108.
- IJIMA, S.; 1991. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354, pp.56-58.
- TERRONES, M.; *et al.* 2008. *Nano Letters* 4 1026.
- MAHAN, M. 1987. Química, um curso universitário. São Paulo, Edgard Blucher, 656p.
- ATKINS, P.W; JONES, L.; 2001. Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente. Porto Alegre: Bookman, 193p.
- VIANNA, J. D.; FAZZIO, A.; CANUTO, Sylvio. 2004. Teoria quântica de moléculas e sólidos: simulação computacional . São Paulo, Livraria da Física, 401p.