

**A. Ciências Exatas e da Terra - 3. Física - 4. Física da Matéria Condensada**

**Estudo das propriedades eletrônicas do nanotubo de nitrato de boro**

Bruno César da Silva<sup>1</sup>

Aline Duarte Lúcio <sup>2</sup>

1. Bruno César da Silva - Física - UFLA

2. Profa. Dra. Aline Duarte Lúcio -Dept. Ciências Exatas - UFLA - Orientadora

**RESUMO:**

Materiais na escala nanométrica podem apresentar interessantes propriedades devido as suas reduzidas dimensões. Um exemplo é o nanotubo de nitrato de boro (BN) que possui elevada resistência mecânica [1], sendo um dos materiais mais duros conhecidos. Estes pequeníssimos tubos são, em geral, semicondutores e podem ser utilizados em diversas aplicações como, por exemplo, transistores de computadores. Desta forma, conhecer a distribuição dos níveis de energia e entender qual a dependência da sua banda proibida com a quiralidade e o tamanho do tubo é fundamental para o desenvolvimento de diversos dispositivos. Sendo assim, investigou-se a estabilidade e a banda proibida de nanotubos BN com diferentes quiralidades e diâmetros [2], sendo a estabilidade analisada a partir do cálculo da energia de formação de cada modelo proposto. Os cálculos foram feitos através de métodos de primeiros princípios, com simulações computacionais baseadas na teoria do funcional da densidade (DFT), utilizando como aproximação, para os termos de troca e correlação, o GGA (Generalized Gradient Approximation). A DFT é uma das abordagens desenvolvidas para solucionar a equação de Schrodinger independente do tempo para um sistema com um número elevado de átomos constituintes. Utilizou-se o método de combinação linear de orbitais atômicos implementado no código SIESTA [3]. Encontrou-se que a banda proibida aumenta monotonicamente com o aumento do diâmetro do tubo em ambas as quiralidades investigadas (armchair e zigzag). Para um limiar do diâmetro, a largura da banda proibida converge para um valor aproximado de 5.5eV. Essa mudança pode ser explicada devido à redução na tensão do tubo. Além disso, a partir da energia de formação da estrutura e da molécula de BN isolada, estudou-se a estabilidade dos nanotubos e foi verificado que a energia de formação também diminui com o aumento do diâmetro do tubo. Isso indica que nanotubos BN, com grandes diâmetros, são energeticamente mais favoráveis e, portanto, mais prováveis de serem encontrados na natureza.

[1] SURYAVANSHI, A. P. et al., Applied Physics, 84, 2527 (2004).

[2] JIAN-FENG, J. et al., J. Phys. Condens. Matter, 381, 90 (2006).

[3] SOLER, J. M. et al., J. Phys. Condens. Matter, 14, 2745 (2002).

Instituição de Fomento: Fapemig

Palavras-chave: nanotubo BN, primeiros princípios, SIESTA.