Estudo teórico de nanotubos de silício em conformações *armchair* e *zigzag*.

Pedro Simão S. Mendonça¹(IC)*, José Divino dos Santos¹(PQ).

pedrosimaoqi@gmail.com

¹UEG Câmpus Henrique Santillo - Rodovia BR-153, 3105 - Fazenda Barreiro do Meio, Anápolis - GO, 75132-400.

Palavras-chave: nanotubos, *armchair*, *zigzag*, estudo teórico.

Introdução

Desde a descoberta de nanotubos de carbono como subproduto de uma síntese de fulereno (IJIIMA, 1991), o interesse foi focado em nanomateriais, especialmente os feitos de carbono, devido suas propriedades de uma física fundamental, bem como o ponto de vista de aplicações possíveis (BAIERLE et al., 2001).

Propriedades eletrônicas semelhantes naturalmente são esperadas para nanoestruturas de alguns outros elementos do grupo IV. Em particular, o silício, uma vez que tem a maior compatibilidade para formação de micro/nano junções com microeletrônica baseada em silício (BAÑACKÝ; NOGA; SZÖCS, 2013).

Aplicando a Teoria do Funcional de Densidade (DFT), Fagan et al. estabeleceu similaridades entre nanotubos de carbono e silício. Seus resultados mostraram que as propriedades eletrônicas e estruturais dos nanotubos de silício (NTSi) são semelhantes as do nanotubo de carbono (NTC), eles podem apresentar comportamento semicondutor ou metálico, dependendo do tipo do de sua estrutura (*zig zag*, *armchair* ou *quiral*) e o diâmetro do tubo (FAGAN et al., 2000).

Metodologia

Com base na ideia de que os nanotubos com hibridização sp^2 são estruturas formadas pelo enrolamento de planos tipo grafeno, foram utilizados os dados base de uma estrutura desse tipo, como comprimento de ligação, ângulo de ligação e forma estrutural. As coordenadas espaciais dos nanotubos *armchair* e *zigzag* (n,m; n,0) foram obtidas a partir da distribuição dos átomos de silício em uma circunferência de diâmetro “D”, chamada de primeiro nível. A obtenção dos demais níveis foi feita pela translação da circunferência no sentido perpendicular ao diâmetro.

As estruturas geradas foram otimizadas utilizando o método PM7. A partir dessas estruturas, foram analisados os nanotubos mais estáveis conforme as configurações *armchair* e *zigzag*.

Resultados

Depois que foram geradas as geometrias dos nanotubos de silício, otimizou-as através de cálculos semi-empírico PM7. Após a otimização obteve-se os valores de energia total da estrutura, gap |HOMO-LUMO| e dipolo para cada conformação. Como pode se observado na Tabela 1.

Figura 1: Modelos de nanotubos de silício gerados pelo algoritmo. Respectivamente a estrutura armchair (n,m) e zigzag (n,0).

Tabela 1: Resultados obtidos através dos cálculos realizados utilizando o método PM7.

Conformação	Armchair (5,5)	Armchair (7,7)	Zigzag (5,0)	Zigzag (7,0)
Energia total (eV)	- 10130,264	- 14187,144	- 10118,103	- 13187,156
HOMO-LUMO	6,05	6,04	2,356	2,456
Dipolo (debye)	0,0044	0,0103	9,701	14,506

Discussão

Os dados da tabela 1 mostram que a estrutura armchair tem uma menor energia que a estrutura zig zag, para um determinado número de átomos, também mostra que para o maior diâmetro e número de átomos, tem-se menor energia dentre as conformações semelhantes. Isso é devido a diminuição da tensão de ligação, diminuindo assim a energia das estruturas. Pelos valores de dipolo e gap |HOMO-LUMO| que as estruturas têm diferentes comportamentos para as distintas conformações, no caso das estruturas com conformações armchair, nota-se comportamento semicondutor e para zigzag comportamento condutor.

Conclusões

Conclui-se que o comportamento dos nanotubos depende de suas conformações, e que quanto maior o diâmetro da estrutura, menor a tensão da estrutura, diminuindo assim sua energia.

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador José Divino, meus familiares e a UEG pelos conhecimentos e apoio.

Referências

- IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 354, 56-58, 1991.
 FAGAN, S. B.; BAIERLE, R.; MOTA, R.; DA SILVA, A. J. R.; FAZZIO, A. Ab initio calculations for a hypothetical material: Silicon nanotubes. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 61, 9994–9996, 2000.