

184

ESTUDO DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS DE DEFEITOS NATIVOS EM NANOTUBOS DE SiC.*Lucio Pereira Neves, Rogério José Baierle (orient.) (UNIFRA).*

Nanotubos de C são estruturas unidimensionais com potencial aplicação em nanodispositivos.

Recentemente foi apresentado um método de síntese e produção de nanotubos de SiC onde nanotubos de carbono são usados para modular as estruturas de SiC. Considerando as notáveis propriedades do SiC cristalino, como o fato de ser quimicamente estável e possuir largo gap de energia, nanotubos de SiC deverão apresentar potenciais aplicações em dispositivos nanométricos, em ambientes que envolvem alta temperatura e alta frequência. Para uma possível utilização de um material na fabricação de um dispositivo, é necessário que este seja bem caracterizado, para isso, um estudo envolvendo defeitos nativos é de fundamental importância. Considerando o método em que os nanotubos de SiC são produzidos, defeitos nativos como vacâncias, anti-sítios e impurezas deverão estar presentes. Neste trabalho usando métodos de cálculo de primeiros princípios no formalismo do funcional densidade com a aproximação local e pseudopotenciais, estudamos vacâncias e anti-sítios em nanotubos de SiC. Nosso estudo envolve as energias de formação e as mudanças nas propriedades eletrônicas do material na presença de defeitos. As energias de formação são calculadas utilizando as energias totais do sistema sem defeito e com defeito. Nossos resultados para as energias de formação apresentam que o anti-sítio de Si no lugar de carbono possui a mais baixa energia de formação (0.62 eV) e a mais alta energia de formação ocorre para uma vacância de silício (6.29 eV). Para a parte eletrônica investigamos as estruturas de bandas e densidades de estados. Obtivemos que estes defeitos introduzem níveis (ocupados e não ocupados) dentro do gap, sendo assim, deverão fortemente influenciar nas propriedades eletrônicas do material. (Fapergs).