



Estudo computacional das propriedades mecânicas e eletrônicas de nanofilamentos de carbono parcialmente saturados

Aluno: Pedro Guerra Demingos

Orientador: André Rodrigues Muniz

Introdução

Nanofilamentos de Carbono (NCs) são nanomateriais unidimensionais sintetizados a partir de cristais de benzeno¹ ou piridina², cujas propriedades mecânicas foram analisadas computacionalmente e se mostraram excelentes, similares às de nanotubos de carbono. A recente caracterização de NCs^{2,3} indicou a presença de ligações duplas C=C e C=N, e este trabalho relata o primeiro estudo teórico dos efeitos dessas insaturações nas propriedades de NCs.

Métodos Computacionais

Cálculos de DFT foram realizados no software Quantum Espresso utilizando o funcional GGA/PBE com a correção de Grimme (D2) e pseudopotenciais do tipo PAW, usando uma malha de 1x1x9 pontos no espaço recíproco, vácuo nas direções perpendiculares ao filamento, e uma energia de corte de 45 Ry para a expansão das ondas planas. Todos os parâmetros passaram por testes de convergência.

Resultados e Discussão

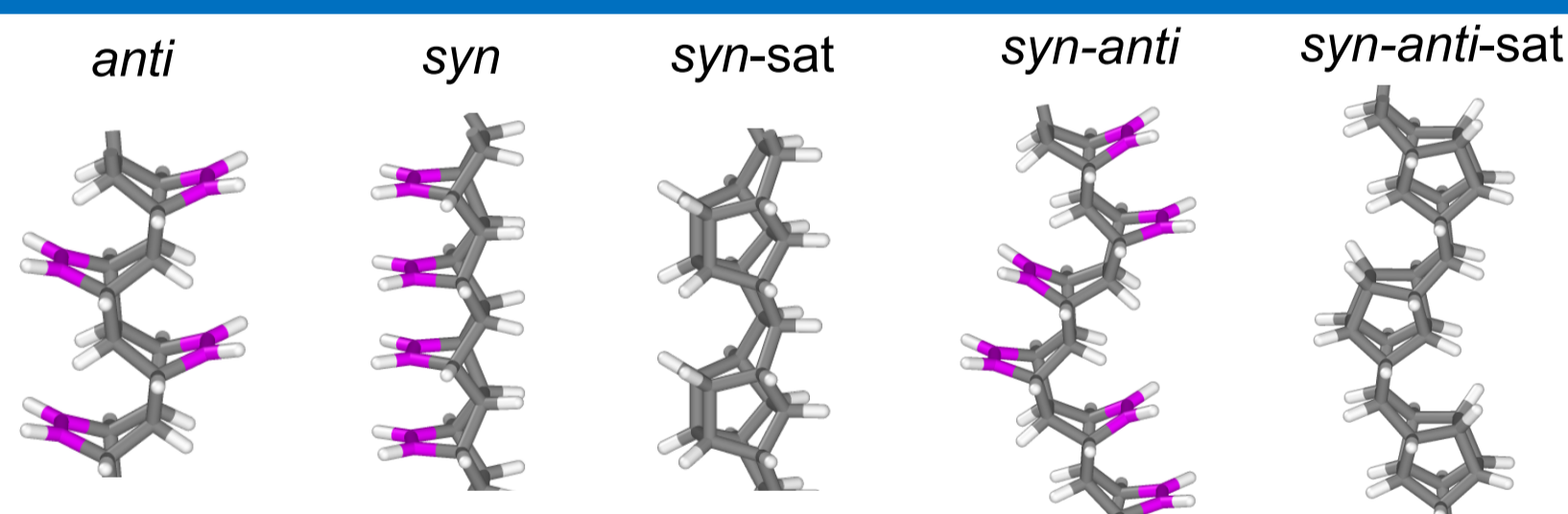


Figura 1: Estrutura atômica dos NCs estudados (átomos de carbono sp^2 estão em magenta). Também foram analisadas estruturas com átomos de nitrogênio em posições sp^3 (nomeadas -N33), sp^2 (-N22), ou ambas (-N23).

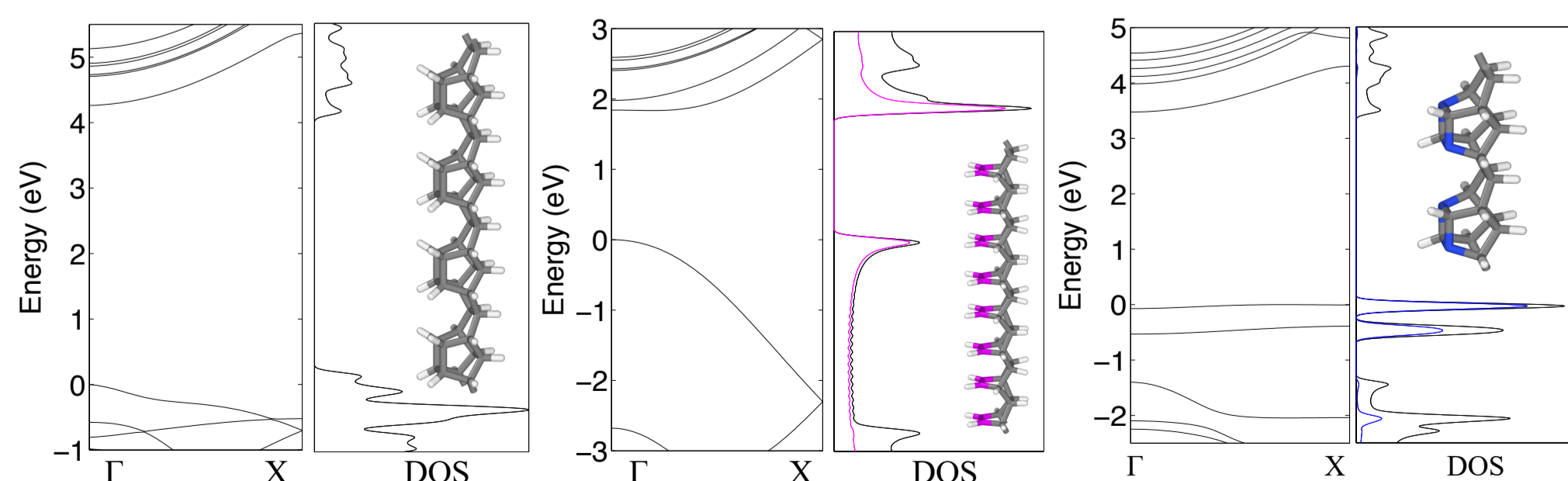


Figura 2: Estrutura eletrônica de bandas e densidade de estados eletrônicos de um NC totalmente saturado, um parcialmente saturado, e um contendo nitrogênios (sintetizado a partir de piridina), da esquerda para a direita.

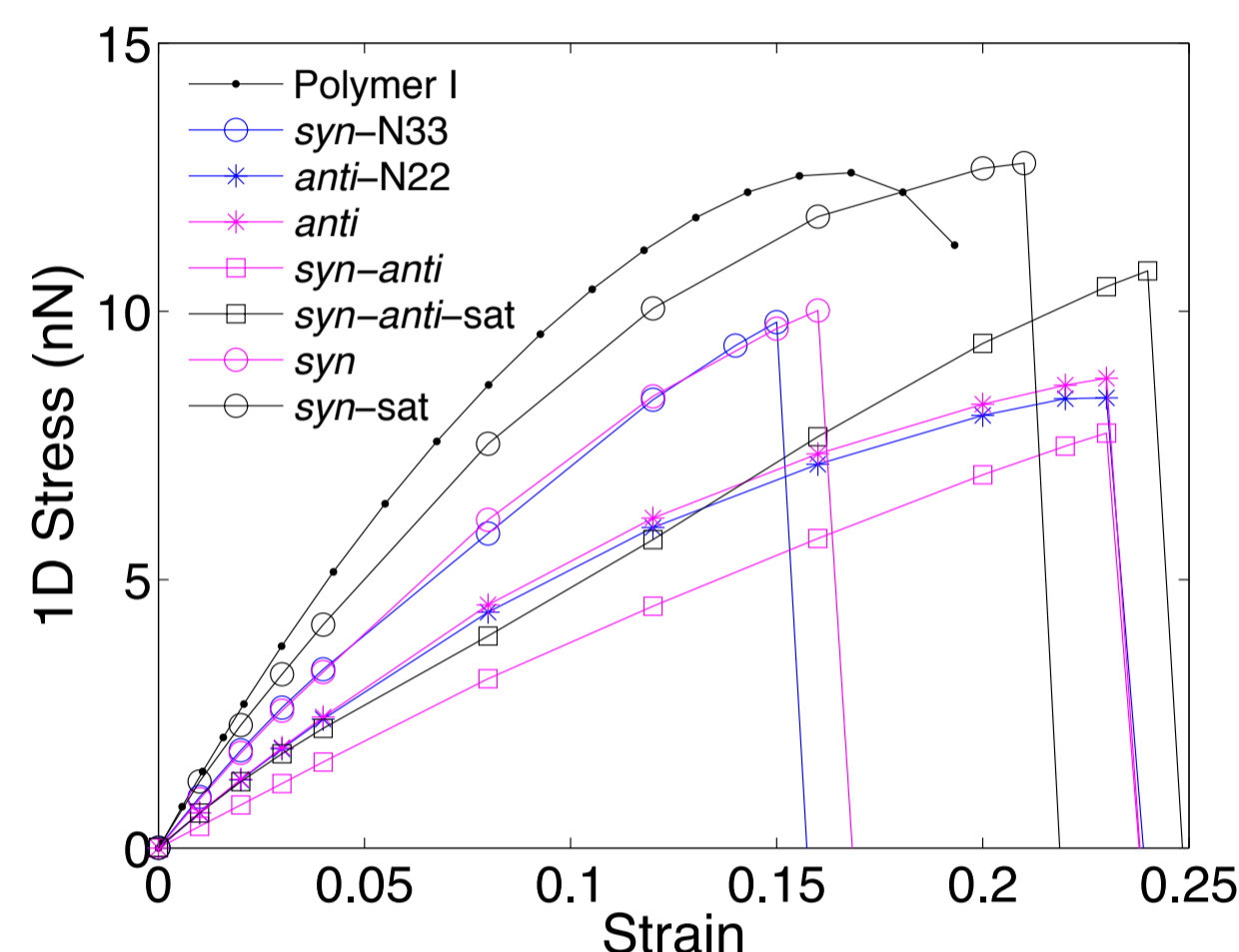


Figura 3: Curva de tensão-deformação para NCs representativos (Polymer I é uma das estruturas arquetípicas dos NCs totalmente saturados).

- A presença de ligações duplas C=C diminui o *gap* eletrônico de energia dos NCs (Figura 2).
- A presença de átomos de nitrogênio introduz estados intermediários de energia, reduzindo o *gap* (Figura 2).
- NCs parcialmente saturados são mais fracos que suas contrapartes totalmente saturadas, mas ainda assim possuem excelentes propriedades mecânicas (Figura 3).
- A presença de nitrogênio não diminui apreciavelmente a resistência dos NCs (Figura 3).

Conclusões

NCs parcialmente saturados são extremamente resistentes, e algumas de suas estruturas apresentam comportamento semicondutor; logo, podem ser empregados em uma grande gama de aplicações eletrônicas e de reforço de materiais.

Trabalho completo publicado em: Demingos, P. G. and Muniz, A. R., *Electronic and Mechanical Properties of Partially Saturated Carbon and Carbon Nitride Nanowires*, *J. Phys. Chem. C* 2019.

Agradecimentos



Referências Bibliográficas

- [1] FITZGIBBONS, T. C. *et al.*, Benzene derived carbon nanowires, *Nature Materials* 2015.
- [2] LI, X. *et al.*, Carbon nitride nanowire crystals derived from pyridine, *Journal of the American Chemical Society* 2018.
- [3] WANG, T. *et al.*, Constraining nanowire structures by experimental and calculated magnetic resonance spectra, *Nano Letters* 2018.