Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós-Graduação *Stricto Sensu* em Física

Ciclo de Colóquios 2019.1

Colóquio nº 8

"Cálculos de primeiros princípios aplicados a nanoestruturas BxNyCz"

RESUMO: Materiais com hibridização sp2 podem apresentar uma extensa variedade de propriedades eletrônicas e estruturais. Nanotubos de carbono, por exemplo, podem apresentar caráter semicondutor ou metálico, dependendo da sua geometria, enquanto uma estrutura de grafite comporta-se como um semimetal. A substituição total de átomos carbono, em tais estruturas, pela alternância de átomos de boro ou nitrogênio, formando um nitreto de boro hexagonal, resulta na abertura do gap de energia levando a estrutura a se comportar como um isolante, com "gap" largo, o qual permanece essencialmente inalterado, independente da quiralidade ou diâmetro, quando a folha de nitreto de boro é enrolada para formar um nanotubo de BN. Uma possibilidade interessante é a substituição parcial de átomos de carbono por átomos de boro ou nitrogênio, levando-os a formação de compostos ternários, chamados de BxCyNz, os quais podem apresentar diferentes configurações. Tais estruturas, em forma de monocamada, foram recentemente sintetizadas. Esses compostos são interessantes, pois permite, em princípio, que as propriedades de condução sejam controladas através da incorporação de átomos de carbono ou BN. Nesta apresentação, pretendemos mostrar os trabalhos desenvolvidos por nosso grupo nessa linha de pesquisa. Ou seja, cálculos teóricos, baseados em métodos de primeiros princípios, para o estudo da propriedades eletrônicas, elásticas e óticas dessas estruturas

Prof. Dr. Sérgio Azevedo
UFPB

17/mai/2019	16:00
Local: Auditório do PPGF (prédio novo)	