



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

Colóquio

“Estudo teórico de nanoestruturas híbridas”

RESUMO: Materiais com hibridização sp^2 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 uma folha de grafite, pela alternância de átomos de boro ou nitrogênio, formando um nitreto de boro hexagonal, resulta na abertura do gap de energia levando a estrutura 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 $B_xC_yN_z$, os quais podem apresentar diferentes estequiometrias. 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, ao invés de sua quiralidade ou diâmetro, como o que acontece com os nanotubos de carbono. Nesta apresentação, pretendemos mostrar os trabalhos desenvolvidos por nosso grupo nessa linha de pesquisa, ou seja, cálculos teóricos para obtenção da estabilidade e estrutura eletrônica desses compostos. Em resumo, mostraremos o que foi desenvolvido por nosso grupo nos últimos anos, mais especificamente desde que cheguei no DF-UFPB, onde a maior do equipamentos foram comprados com recursos do INCT-Nanomateriais de Carbono.

Prof. Dr. Sérgio Azevedo
UFPB

12/jun/2015

16h00

Auditório da Pós-Graduação em Física (novo prédio)