



## ESTUDO TEÓRICO SOBRE A APLICABILIDADE DE NANOMATERIAIS

Guilherme Angelo Moreira Bernardo<sup>1</sup>, Mirleide Dantas Lopes<sup>2</sup>

### RESUMO

O estudo dos nanomateriais tem se consolidado como uma nova revolução no meio científico. Dentre as nanoestruturas mais investigadas atualmente encontram-se as derivadas do carbono e do nitreto de boro hexagonal (h-BN). O grafeno, por exemplo, trata-se de uma rede bidimensional hexagonal, formada exclusivamente por átomos de carbono, cujas propriedades eletrônicas e estruturais prometem revolucionar a eletrônica que conhecemos. Neste sentido, investigamos a energia de formação e a densidade de estados de um plano de grafeno e um plano de h-BN, assim como, quatro nanocones, com disclinação de  $60^\circ$  cada, sendo dois deles derivados do grafeno, com diferentes tamanhos, e dois derivados do h-BN (BNN e BNB). Esta análise permitiu-nos obter informações sobre a estabilidade estrutural dos nanomateriais, bem como, inferir conclusões a respeito da condutividade elétrica destes. Tais investigações foram feitas por meio do Código SIESTA, um software livre que utiliza a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) como parâmetro para sua execução. A partir das observações realizadas foi possível identificar quais nanoestruturas se apresentaram mais estáveis mediante a organização atômica na rede cristalina. Nos nanomateriais investigados percebemos que, tanto a energia de formação por átomo, quanto à densidade de estados, variaram sensivelmente em função dos diferentes arranjos atômicos. Com relação à condutividade elétrica, as

---

<sup>1</sup>Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza (UACEN), Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), Cajazeiras, PB, e-mail: [guilhermessa1996@hotmail.com](mailto:guilhermessa1996@hotmail.com)

<sup>2</sup>Doutora em Física da Matéria Condensada, Professora Adjunta, Unidade Acadêmica de Ciências Exatas e da Natureza (UACEN), UFCG, Cajazeiras, PB, e-mail: [mirleide\\_dantas@yahoo.com.br](mailto:mirleide_dantas@yahoo.com.br)

estruturas pesquisadas apresentaram boa concordância com a literatura, reafirmando assim a aplicabilidade destes nanomateriais em dispositivos eletrônicos.

**Palavras-chave:** NANOMATERIAIS. ENERGIA DE FORMAÇÃO. DENSIDADE DE ESTADOS.

## **THEORETICAL STUDY ON THE APPLICABILITY OF NANOMATERIALS**

### **ABSTRACT**

The study of nanomaterials has been consolidated as a new revolution in the scientific environment. Among the most investigated nanostructures are those derived from carbon and hexagonal boron nitride (h-BN). Graphene, for example, is a two-dimensional hexagonal lattice, made exclusively of carbon atoms, whose electronic and structural properties promise to revolutionize the electronics that we know. In this sense, we investigate the formation energy and the density of states of a graphene plane and a h-BN plane, as well as four nanocones with disclination of  $60^\circ$  each, two of them being derived from graphene, with different sizes, and two are derived from h-BN (BNN and BNB). This analysis allowed us to obtain information on the structural stability of nanomaterials, as well as to infer conclusions about the electrical conductivity of these nanomaterials. These investigations were done through the SIESTA Code, a free software that uses the Density Functional Theory (DFT) as a parameter for its execution. From the observations, it was possible to identify which nanostructures were more stable through the atomic organization in the crystalline lattice. In the investigated nanomaterials we realized that both the formation energy per atom and the density of states varied considerably as a function of the different atomic arrangements. Regarding the electrical conductivity, the structures researched presented good agreement with the literature, thus reaffirming the applicability of these nanomaterials in electronic devices.

**Keywords:** NANOMATERIALS. FORMATION ENERGY. DENSITY OF STATES.