

Título do Projeto: Transporte eletrônico em nanotubos de carbono com curvatura média constante

Orientador: Fernando Jorge Sampaio Moraes

Introdução

Nanoestruturas de carbono têm aplicações tão diversas como biosensores, armazenagem e produção de energia, construção civil, além de dispositivos fotônicos, eletrônicos e spintrônicos. As possibilidades para aplicações tecnológicas desses materiais são imensas e por isso mesmo o estudo teórico e simulacional de suas propriedades eletrônicas se faz necessário. Em particular, o estudo das propriedades eletrônicas de nanoestruturas de carbono tem sido o foco da pesquisa básica e aplicada de inúmeros grupos no Brasil e no exterior nas últimas duas décadas. Desde a década de 1990 que temos estudado analiticamente estruturas bidimensionais de carbono (como em 1998 o termo grafeno não era ainda conhecido nos referíamos a "monocamada de grafite") [1-3]. Utilizando técnicas computacionais de primeiros princípios exploramos também diversas formas de BN, análogas às de carbono, com e sem carbono adicionado [4-8]. Utilizando o formalismo da equação de Dirac estudamos efeitos inerciais devido à rotação em C60 (fullereno) [9,10] e nanotubos de carbono [11]. Com o mesmo formalismo, mostramos como obter um gap indireto no grafeno utilizando a influência do substrato na velocidade de Fermi [12]. Com técnicas geométricas e topológicas estudamos estruturas curvas de grafeno em [13]

Sendo as nanoestruturas de carbono sistemas bidimensionais e podendo assumir formas curvas, a possibilidade de utilizar geometria para manipular suas propriedades eletrônicas foi apontada em trabalhos recentes do nosso grupo de pesquisa com nanotubos deformados [14,15]. Combinando técnicas tradicionais, como dopagem, com alterações na curvatura da superfície pode-se então ter maior controle das propriedades eletrônicas levando então a uma maior flexibilidade no design de dispositivos. Neste projeto de dissertação de mestrado, com o intuito de obter uma melhor compreensão da influência da geometria nas propriedades eletrônicas das estruturas curvas de carbono, daremos continuidade aos trabalhos [14,15], focando agora em nanotubos com curvatura média constante.

As superfícies de revolução com curvatura média constante são conhecidas como superfícies de Delaunay [16]. Nosso interesse em estudar "nanotubos de Delaunay" decorre do fato que a influência da geometria na dinâmica quântica dos elétrons é dada pelo potencial geométrico [17]

$$V_S = -\frac{\hbar^2}{2m}(H^2 - K)$$

onde H e K são, respectivamente, as curvaturas média e gaussiana da superfície. Com $H=const$ ficamos apenas com a curvatura gaussiana K como ingrediente principal do potencial geométrico, o que simplifica a análise e interpretação dos resultados.

Objetivos

- Objetivo Geral

Estudar a influência da geometria nas propriedades eletrônicas de formas curvas de grafeno, em particular nanotubos, com fins de aplicações no design de dispositivos eletrônicos.

-Objetivos Específicos

- Estudar as propriedades eletrônicas de nanotubos de carbono de curvatura média constante.
- Analisar o papel da curvatura gaussiana nos resultados obtidos.

Metodologia

Será feito o cálculo da transmitância de elétrons balísticos em função da energia de incidência para tubos com geometrias distintas. Isto será realizado resolvendo-se numericamente a equação de Schrödinger incluindo o potencial geométrico, com o código MAPLE desenvolvido em nosso grupo de pesquisa e publicado como material suplementar da referência [14].

Resultados Esperados

- Melhor compreensão dos efeitos da geometria nas propriedades eletrônicas das estruturas bidimensionais à base de carbono.
- Apresentação de trabalhos em congressos;
- Publicação de artigos em periódicos internacionais indexados.

Aderência aos critérios de priorização

I. Reserva de bolsas para Cursos Novos

O programa de pós-graduação em Engenharia Física (PPG-ENGFIS), vinculado à Unidade Acadêmica do Cabo de Santo Agostinho (UACSA – UFRPE), está iniciando suas atividades em 2019.1. O PPG-ENGFIS foi aprovado na 181ª reunião do CTC-CAPEs em dezembro de 2018.

II. Apoio diferenciado à pós-graduação em Engenharias

O projeto está vinculado ao programa de pós-graduação em Engenharia Física, sediado na UACSA-UFRPE, pertencente à grande área de Materiais da CAPES.

Cronograma

ATIVIDADES	ANO 2019											
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez
Disciplinas			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Estudo de literatura			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Desenvolvimento do projeto								X	X	X	X	X

ATIVIDADES	ANO 2020											
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez
Estudo de literatura	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Desenvolvimento do projeto	X	X	X	X	X	X						
Obtenção de resultados				X	X	X	X	X	X	X	X	X
Elaboração da dissertação e de artigos									X	X	X	X

ATIVIDADES	ANO 2021											
	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul	Ago	Set	Out	Nov	Dez
Elaboração da dissertação e de artigos	X	X										
Defesa da dissertação		X										

Referências

- [1] S. Azevedo, C. Furtado, and F. Moraes, Charge localization around disclinations in monolayer graphite, *physica status solidi (b)*, **207** 387, (1998).
- [2] Sérgio Azevedo and Fernando Moraes, Two-dimensional scattering by disclinations in monolayer graphite, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **12** 7421 (2000).
- [3] Claudio Furtado, Fernando Moraes, and A.M. de M. Carvalho, Geometric phases in graphitic cones, *Physics Letters A*, **372** 5368 (2008).

- [4] Sérgio Azevedo, Jorge Kaschny, and F. Moraes, Metal-free spin channels in graphitic boron–nitrogen nanostructures, *Physics Letters A*, **372** 5492 (2008).
- [5] Rebeca D. Gonçalves, Sérgio Azevedo, Fernando Moraes, and M. Machado, Energetic stability of boron nitride nanostructures doped with one carbon atom, *International Journal of Quantum Chemistry*, **110** 1778 (2010).
- [6] R. D. Gonçalves, S. Azevedo, F. Moraes, and M. Machado. Electronic structure of boron nitride nanostructures doped with a carbon atom, *The European Physical Journal B*, **73** 211 (2010).
- [7] S. Azevedo, F. Moraes, and J.R. Kaschny, Structural and electronic properties of BN Möbius stripes, *The European Physical Journal B*, **85** 1 (2012).
- [8] M. D. Lopes, S. Azevedo, F. Moraes and M. Machado, Theoretical study of carbon double cones, *The European Physical Journal. B*, **88** 10 (2015).
- [9] J. R. F.Lima, J. Brandão, M. M. Cunha and F. Moraes, Effects of rotation in the energy spectrum of C60, *The European Physical Journal. D*, , **68** 94 (2014).
- [10] J. R. F. Lima and F. Moraes, The combined effect of inertial and electromagnetic fields in a fullerene molecule, *The European Physical Journal. B*, **88** 63 (2015).
- [11] M. M. Cunha, J. Brandão, J. R. F.Lima and F. Moraes, Spin splitting at the Fermi level in carbon nanotubes in the absence of a magnetic field, *The European Physical Journal. B*, **88** 288 (2015).
- [12] J. R. F. Lima and F. Moraes, Indirect band gap in graphene from modulation of the Fermi velocity. *Solid State Communications*, **201** 82 (2015).
- [13] A. M. M. Carvalho, C. A. Lima Ribeiro, F. Moraes, and C. Furtado, Holonomy transformations and application in the curved structure of graphene, *The European Physical Journal Plus*, **128** 1 (2013).
- [14] F. Santos, S. Fumeron, B. Berche, F. Moraes, Geometric effects in the electronic transport of deformed nanotubes, *Nanotechnology* **27** 135302 (2016).
- [15] F. Serafim, F. Santos, J. Lima, C. Filgueiras, F. Moraes, Position-dependent mass effects in the electronic transport of two-dimensional quantum systems: Applications to nanotubes. *Physica E - Low-dimensional systems & nanostructures* **108**, 139, 2019.
- [16] S. N. Krivoshapko, V. N. Ivanov, *Encyclopedia of analytical surfaces*. Springer, 2015.
- [17] R. C. T. da Costa, Quantum mechanics of a constrained particle, *Physical Review A* **23**, 1982 (1981).