



# ESTUDO DAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE NANOTUBOS DE CARBONO E h-BN

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

## RESUMO

Pesquisas envolvendo nanomateriais têm se mostrado cada vez mais expressivas na literatura, principalmente quanto à compreensão e aplicabilidade das propriedades eletrônicas e estruturais. Neste trabalho, analisamos, a partir da energia de formação e da densidade de estados, oito nanotubos de paredes simples formados por carbono e h-BN, quatro deles do tipo *zigzag* e quatro do tipo *armchair*. Em ambas as configurações foram analisados dois nanotubos de carbono e dois de h-BN, com diâmetros diferentes. Tal investigação foi realizada por meio do Código SIESTA, software livre que utiliza a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) como parâmetro para sua execução. Partindo destas observações foi possível identificar a nanoestrutura de maior estabilidade, mediante variação do diâmetro e organização dos átomos na rede cristalina. Observamos ainda que alguns nanotubos apresentaram discretas variações no *gap* de energia, em função do diâmetro do tubo. Finalmente, constatamos que nossos resultados apresentaram concordância com a literatura, reafirmando as propriedades insólitas destes nanomateriais.

**Palavras-chave:** Nanotubos. Energia de Formação. Densidade de Estados.

## INTRODUÇÃO

Quando nos deparamos com os inúmeros avanços experimentados pela ciência, devemos compreender que todos os saltos e discontinuidades são frutos de constantes reflexões sobre a natureza e os fenômenos que a compõe, não sendo obra do acaso, mas resultado de inquietações e questionamentos sobre o mundo vivencial.

Em meio a incontáveis exemplos desta ascensão podemos citar o advento da microeletrônica, que nasceu de uma necessidade prática para um fim incomum, logo que, James Prescott Joule (1818-1889), ao aperfeiçoar a precisão de seu termômetro de álcool, utilizando ácido e cera de abelha, abriu caminho para a técnica de uso de máscara e gravura ainda utilizada na eletrônica em dias atuais (JOACHIM & PLÉVERT, 2009).

Assim como Joule, inúmeros cientistas também se dedicaram ao aperfeiçoamento da ciência e da tecnologia, contribuindo assim para o atual estado de desenvolvimento. Neste caminho, por vezes árduo, surgiram alguns percalços relacionados à compreensão da própria

---

<sup>1</sup> Mestrando em Física na Universidade Federal de Campina Grande (UFCG/PPGF/UAF/CCT), [guilherme.angelo@estudante.ufcg.edu.br](mailto:guilherme.angelo@estudante.ufcg.edu.br)

<sup>2</sup> Professora de Física da Universidade Federal de Campina Grande (UFCG/UAF/CCT), [mirleide@df.ufcg.edu.br](mailto:mirleide@df.ufcg.edu.br)



natureza da Ciência, que, apesar de todo contingente teórico e experimental, não se mostrou suficiente para a compreensão de determinados fenômenos, até então indecifráveis.

Estas interrogações proporcionaram o surgimento de outras áreas do conhecimento humano, além de ramificações na própria estrutura da Ciência. Na Física, por exemplo, podemos citar o desenvolvimento da Mecânica Quântica (MQ), que surgiu neste cenário de dúvidas e hoje é o fundamento de todo o desenvolvimento eletrônico e tecnológico (NUSSENZVEIG, 1998).

A partir da MQ, outras propostas para o aprimoramento de técnicas e processos que beneficiassem e sanassem algumas necessidades humanas puderam ser elaboradas. Com o passar dos anos, a necessidade de tratar e interpretar grandes volumes de dados e informações, em intervalos de tempo cada vez menores, sobretudo utilizando componentes que não depreendessem grande espaço físico para a sua alocação, tornou-se pré-requisito. Assim, os processos de miniaturização contagiaram o meio científico, de tal modo que, “miniaturizar” tornou-se determinante (JOACHIM & PLÉVERT, 2009). Nesse caminho, deparamo-nos com um universo novo e surpreendentemente pequeno (FEYNMAN, 1959).

Neste novo mundo, investiga-se as estruturas cujas dimensões são da ordem do nanômetro ( $1\text{nm} = 10^{-9}\text{m}$ ). Tais investigações são realizadas no âmbito da Nanociência e Nanotecnologia (N&N), que necessariamente utilizam a MQ para compreender os fenômenos ocorridos nesta escala. A Nanociência é definida como a área do conhecimento que busca a compreensão dos fenômenos ocorridos na dimensão de arranjos atômicos e moleculares, desde que compreendidos entre 1 e 100 nanômetros (JOACHIM & PLÉVERT, 2009). Estes arranjos nanométricos são denominados nanomateriais. De modo complementar, a Nanotecnologia é a manipulação destes nanomateriais, tendo em vista aplicações tecnológicas (ALVES, 2004).

Há muito se discute sobre a possibilidade de compreender e manipular a matéria átomo a átomo. Desde inferências sobre a natureza atômica feitas por Demócrito e Leucipo na Grécia antiga; passando pela célebre palestra proferida por Richard Feynman em 1959, no encontro anual da Sociedade Americana de Física (APS); seguidos pelos trabalhos de Kim Eric Drexler e suas explanações ao senado americano, na década de 1990; até a sintetização e aplicação de materiais nanoestruturados na contemporaneidade (JOACHIM & PLÉVERT, 2009).

A N&N é essencialmente interdisciplinar, tendo contribuições de diversas áreas do conhecimento humano que se interligam em torno do estudo dos nanomateriais e suas aplicações. A Física, em especial a Física da Matéria Condensada, tem se dedicado a



compreensão das características destes materiais, dentre elas: propriedades óticas, térmicas, eletrônicas e mecânicas; objetivando especialmente aplicações em dispositivos eletrônicos.

Nesta perspectiva, o presente trabalho buscou investigar nanotubos de paredes simples, com diâmetros distintos, formados por carbono e h-BN, de chiralidade do tipo *zigzag* e *armchair*. Esta análise foi realizada a partir da energia de formação por átomo e da densidade de estados, considerando os diferentes arranjos cristalinos. Tais características nos permitiram analisar, de forma comparativa, a estabilidade estrutural dos nanomateriais investigados, bem como realizar inferências sobre a condutividade elétrica destes.

## METODOLOGIA

No estudo teórico dos nanomateriais é comum a utilização de simulações computacionais, que podem ser planejadas objetivando obter os mais variados parâmetros físicos, dependendo da natureza da investigação proposta. Um software amplamente utilizado na investigação destes nanomateriais é o Código SIESTA (*Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms*), um excelente instrumento teórico que tem sido utilizado para analisar sistemas complexos na escala nanométrica (SOLER et al., 2002).

Este software utiliza informações da estrutura dos nanomateriais que se deseja estudar, como por exemplo, quais e quantas espécies atômicas a compõem, bem como as coordenadas espaciais de cada átomo na rede cristalina (KITTEL, 2013). A partir destas informações o programa fornece dados sobre a energia da estrutura, densidade de estados, momento de dipolo elétrico, além de outros parâmetros que se deseja observar.

O SIESTA utiliza a Teoria do Funcional da Densidade (Density Functional Theory - DFT) como fundamento para sua execução (SOLER et al., 2002). A referida teoria está postulada em dois artigos base. No primeiro deles, proposto em 1964 por Walter Kohn e Pierre Hohenberg, os autores lançam uma reformulação da MQ, na qual a densidade eletrônica é utilizada como parâmetro para a resolução da equação de Schrödinger (HOHENBERG & KOHN, 1964). Já o segundo artigo, de 1965, traça a proposição prática para a DFT e foi publicado por Kohn e Lu Sham (KOHN & SHAM, 1965).

As colocações propostas nos dois artigos mencionados, bem como as equações de Kohn-Sham, aliadas ao desenvolvimento de métodos computacionais mais eficientes pôde facilitar a resolução de problemas que envolvem muitas variáveis. Tal avanço abriu um novo ciclo para o estudo das propriedades da matéria.



Especificamente neste trabalho utilizamos o SIESTA a fim de observar dois parâmetros: a energia de formação por átomos e a densidade de estados. A energia de formação por átomo indica qual o valor de energia é necessário para que o átomo se estabilize na estrutura cristalina do material. Assim, quanto mais negativo esse valor, mais estável a estrutura pode ser considerada, ou seja, mais energia externa deve ser aplicada sobre o sistema para que haja, por exemplo, o rompimento da rede (AZEVEDO et al., 2007). O cálculo da energia de formação dos nanotubos será realizado por meio da equação (1),

$$E_f = E_{tot} - n_C\mu_C - n_B\mu_B - n_N\mu_N \quad (1)$$

em que,  $E_f$  é a energia de formação,  $E_{tot}$  é a energia total do sistema, obtida através do Código SIESTA,  $n_C$ ,  $n_B$  e  $n_N$  são, nesta ordem, o número de átomos de carbono, boro e nitrogênio existentes nas estruturas investigadas, já os termos referentes a  $\mu_C$ ,  $\mu_B$ ,  $\mu_N$  são, respectivamente, os potenciais químicos destes elementos, que apresentam os valores de  $\mu_C = -146,55$  eV,  $\mu_B = -70,81$  eV e  $\mu_N = -263,39$  eV. Estas quantidades também foram obtidas a partir do SIESTA, calculando a energia total de um único átomo de cada espécie química. Por fim, a energia de formação por átomo pode ser obtida pela divisão da energia de formação total pelo número de átomos que compõem a estrutura.

Os gráficos da densidade de estados, também obtidos por meio do Código SIESTA e analisados neste trabalho, possibilitam inferir conclusões relativas à condutividade elétrica das nanoestruturas, posto que estes gráficos nos informam a concentração de estados antes e depois do nível de Fermi<sup>3</sup>, bem como os eventuais *gaps* de energia, no caso de nanomateriais isolantes ou semicondutores.

## REFERENCIAL TEÓRICO

Os nanomateriais são um dos principais objetos de estudo da Física da Matéria Condensada, em especial aqueles formados a partir de carbono. Este elemento químico é muito abundante na natureza, sua distribuição eletrônica,  $1s^2 2s^2 2p^2$ , caracteriza-o como tetravalente, o que favorece sua associação com outras espécies atômicas. Na natureza inúmeros alótropos<sup>4</sup> do carbono podem ser observados, dentre eles podemos destacar: o grafite, o diamante, o grafeno, os fulerenos, os nanocones e os nanotubos.

<sup>3</sup> Energia do último estado eletrônico na banda de valência.

<sup>4</sup> Materiais formados pelo mesmo elemento químico, apresentando apenas arranjo atômico diferente.



O grafeno, por exemplo, conforme Novoselov et al. (2004), é uma rede bidimensional hexagonal formada exclusivamente por átomos de carbono, mas que apresenta estabilidade em condições ambientes, fato que contrariou alguns postulados que cogitavam sobre sua instabilidade termodinâmica, caso fosse isolado em uma rede cristalina bidimensional (LANDAU, 1937). Este nanomaterial pode ser obtido a partir da clivagem mecânica do grafite, sendo este basicamente constituído por inúmeras camadas de grafeno, interligadas através de ligações de Van der Waals<sup>5</sup> (KLEIN et al., 2001).

Além de exibir propriedades mecânicas, térmicas, químicas e eletrônicas peculiares, como mostra Cano-Marques et al. (2015), o grafeno é útil também para compreender a formação dos outros alótropos do carbono. Suas ligações apresentam hibridização do tipo  $sp^2$ , ligações fortes que conferem estabilidade e rigidez a este material.

De modo geral, as nanoestruturas investigadas neste estudo foram os nanotubos. Eles foram observados pela primeira vez em 1991, sendo sintetizados utilizando o processo de pirólise de grafite em plasma, sob atmosfera controlada de hélio. Dessa forma, os nanomateriais obtidos eram constituídos exclusivamente por átomos de carbono (IJIMA, 1991; HERBST et al., 2004). As primeiras imagens mostraram Nanotubos de Carbono de Paredes Múltiplas (NCPM) (MWNT, do inglês Multi-Walled Nanotubes), que consistiam em cilindros concêntricos com espaçamento entre camadas da ordem de  $3,4 \text{ \AA}$  e comprimento de dezenas de nanômetros (FREITAS et al., 2013).

Vale destacar que todas as nanoestruturas só foram visualizadas graças ao avanço nos métodos de microscopia eletrônica de transmissão (TEM). Esta técnica mostrou-se fundamental para o estudo da morfologia dos nanotubos, bem como na detecção de outras partículas e estruturas que podem estar incorporadas aos tubos.

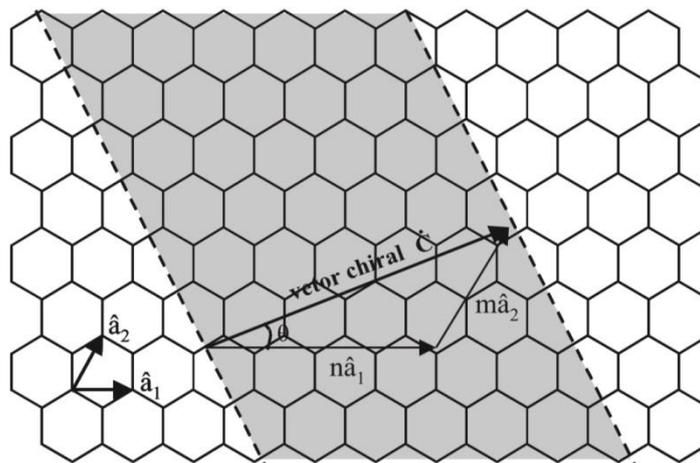
Após a descoberta experimental dos NCPM, os Nanotubos de Carbono de Parede Simples (NCPS) (SWNT, do inglês Single-Wall Nanotubes) foram igualmente obtidos. Um nanotubo do tipo NCPS pode ser considerado como uma folha de grafeno enrolada, em torno de um eixo central, ou mesmo, como um fulereno alongado e podem ser classificados a depender de como esse enrolamento é realizado. A caracterização deste procedimento hipotético ocorre por meio de um vetor  $C$ , chamado vetor chiral, que determina os pontos de união entre dois sítios cristalográficos, de tal modo que quando houver a junção destes pontos, o vetor chiral passa a ser a circunferência do tubo (HERBST et al., 2004). O referido vetor é definido em termos dos vetores de rede do grafeno  $\hat{a}_1$  e  $\hat{a}_2$ , ilustrados na Figura (1).

---

<sup>5</sup> Forças intermoleculares relativamente fracas.



**Figura 1: Esquema de obtenção de um nanotubo a partir da folha de grafeno.**



Fonte: HERBST et al. (2004, p. 986).

A formulação matemática do vetor chiral é apresentada na Equação 2,

$$\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (2)$$

esta caracterização, muito comum na literatura, permite definir três tipos de nanotubos (HAMADA et al., 1992). Os índices  $n$  e  $m$  formam um par  $(n, m)$  e são sempre números inteiros. Cada configuração do par  $(n, m)$  especifica um tipo de enrolamento da folha de grafeno, e assim um tipo de nanotubo. Para o caso em que  $n \neq 0$  e  $m = 0$   $(n, 0)$  dizemos que o nanotubo é do tipo *zigzag*, uma alusão ao padrão apresentado na borda da circunferência do tubo. Para o caso em que  $n = m \neq 0$   $(n, n)$ , dizemos que esta combinação gera um tubo do tipo *armchair*, por apresentar aparência com braços de uma poltrona, ao longo da circunferência do nanotubo. Por fim, quando  $n \neq m \neq 0$   $(n, m)$  denominamos tal estrutura como sendo chiral (HERBST et al., 2004).

Outra peculiaridade dos nanotubos se refere à posição das ligações de carbono com relação ao seu eixo central. Os nanotubos do tipo *armchair* apresentam ligações perpendiculares ao eixo central do tubo. Já os nanotubos *zigzag*, exibem ligações paralelas com relação ao mesmo eixo. No caso chiral, encontramos um padrão intermediário. A variação destes parâmetros aliados ao diâmetro do tubo podem proporcionar mudanças significativas no comportamento eletrônico da estrutura (WILDÖER et al., 1998).

Além das nanoestruturas formadas por átomos de carbono outros arranjos moleculares também podem formar configurações geométricas análogas, mas com propriedades diferentes. Em meio a estes, destacamos os nanomateriais produzidos a partir de h-BN (Nitreto de Boro

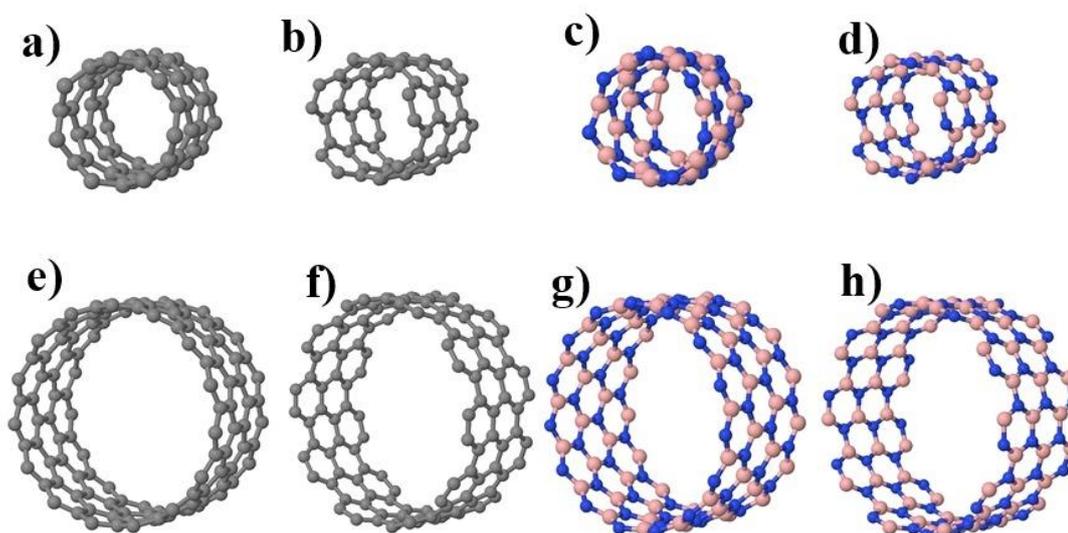


Hexagonal), que apesar de ser composto por duas espécies químicas diferentes, apresentam estrutura cristalina equivalente ao grafeno e seus derivados (RUBIO et al., 1994).

Dentre os nanomateriais formados a partir de h-BN podemos destacar, além da estrutura plana, os nanotubos (NBNPS para o caso do Nanotubo de h-BN de Parede Simples) (HAN et al., 1998; RUBIO et al., 1994). Este material pode ser sintetizado por deposição química a vapor, em um ambiente com uma combinação de óxido de boro e nitrogênio em suspensão, aliados a altas temperaturas (HAN et al., 1998).

De modo geral, os nanotubos de paredes simples são os mais estudados na literatura em detrimento aos de paredes múltiplas, principalmente com relação a trabalhos que levam em consideração influências externas, como a aplicação de campo elétrico (FREITAS et al., 2013). Além disso, nos estudos teóricos com simulação computacional, com o aumento no número de camadas e conseqüentemente o número de átomos da estrutura, existe o acréscimo no custo computacional. Por outro lado, os nanotubos de paredes múltiplas são produzidos experimentalmente com mais facilidade e com menor custo que os nanotubos de paredes simples (HERBST et al., 2004).

**Figura 2: Nanotubos de Paredes Simples investigados. Os átomos nas cores cinza, azul e rosa representam, respectivamente, carbono, nitrogênio e boro. a) CZ1; b) CA1; c) BNZ1; d) BNA1; e) CZ2; f) CA2; g) BNZ2; h) BNA2.**



Fonte: Organizado pelos pesquisadores a partir dos dados coletados na pesquisa.

Partindo dos pressupostos apresentados, nossa investigação consistiu na confecção e análise, a partir da energia de formação e da densidade de estados, de nanoestruturas tubulares do tipo *zigzag* e *armchair*, ilustradas na Figura 2, sendo as mesmas constituídas exclusivamente por átomos de carbono e h-BN.



**Tabela 1 - Da esquerda para direita: nomenclatura dos nanotubos investigados, número de átomos, diâmetro em Å e notação a partir do vetor chiral.**

NANOTUBOS	NÚMERO DE ÁTOMOS	DIÂMETRO (Å)	NOTAÇÃO
CZ1	56	5,8	(6,0)
CZ2	120	12,1	(14,0)
CA1	60	7,0	(4,4)
CA2	120	13,9	(9,9)
BNZ1	56	5,8	(6,0)
BNZ2	120	12,2	(14,0)
BNA1	60	7,1	(4,4)
BNA2	120	13,7	(9,9)

Fonte: Organizado pelos pesquisadores a partir dos dados coletados na pesquisa.

Desse modo, analisamos individualmente oito nanotubos de paredes simples (NPS), quatro do tipo *zigzag* ( $n, 0$ ) e quatro *armchair* ( $n, n$ ), sendo que em ambos os casos há dois tubos de carbono (CZ1 e CZ2 para o tipo *zigzag* e CA1 e CA2 para o *armchair*) e dois de h-BN (BNZ1 e BNZ2 para o tipo *zigzag* e BNA1 e BNA2 para o *armchair*), porém com número de átomos e diâmetros distintos, conforme a Figura 2. Na Tabela 1 estão sintetizadas algumas informações das estruturas investigadas. Estes parâmetros servem de referência para a análise comparativa que será realizada.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir da Equação 1 e de posse dos valores de energia total dos sistemas, fornecidos pelo Código SIESTA, apresentamos na Tabela 2 os resultados para a energia de formação.

**Tabela 2 - Energia de formação por átomo dos nanotubos em elétron-volt por átomo (eV/átomo).**

ESTRUTURA	DIÂMETRO (Å)	$E_{form}$ (eV/átomo)
CZ1	5,8	-8,58
CZ2	12,1	-8,77
CA1	7,0	-8,58
CA2	13,9	<b>-8,79</b>
BNZ1	5,8	-7,90
BNZ2	12,2	-8,62
BNA1	7,1	-8,55
BNA2	13,7	-8,61

Fonte: Organizado pelos pesquisadores a partir dos dados coletados na pesquisa.

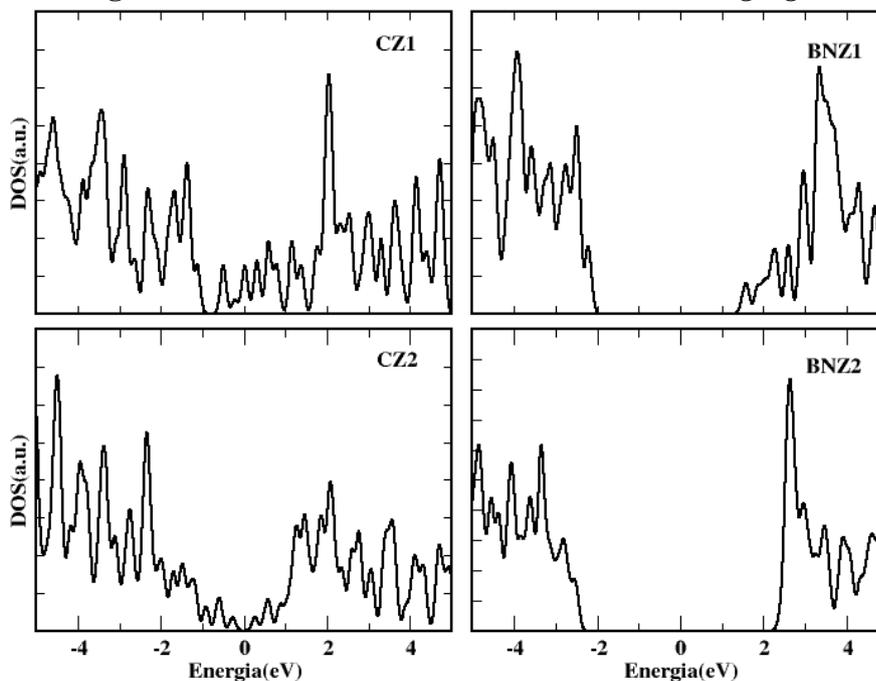
Por meio da Tabela 2 é possível constatar que, de modo geral, os nanotubos apresentam valores próximos para a energia de formação por átomo, isso implica dizer que os mesmos apresentam grau de estabilidade similar. Também foi possível observar que os nanotubos que apresentam menor diâmetro possuem menor estabilidade, quando dispõem da mesma chiralidade. Este padrão é observado em todas as combinações *zigzag* e *armchair* estudadas, e nos leva à conclusão de que, quanto menor o diâmetro do tubo, menos energia seria utilizada



para transformá-lo numa rede bidimensional plana. Tal resultado se alinha aos dados disponíveis na literatura e mostram-se relevantes quanto à observação da estabilidade via energia de formação por átomo (FREITAS et al., 2013).

Para a densidade de estados dos nanotubos do tipo *zigzag* investigados (Figura 3), notamos que o tamanho do *gap* de energia é diretamente proporcional ao diâmetro do tubo, isso porque na medida em que o diâmetro dos tubos aumenta, o *gap* de energia também tende a aumentar. Essa característica é válida tanto para os tubos de carbono (CZ1 e CZ2), quanto para os tubos de h-BN (BNZ1 e BNZ2), no entanto ela é mais evidente para o segundo caso, no qual se observa para o tubo menor (BNZ1), um *gap* da ordem de 3,5 eV e para um tubo maior (BNZ2), um *gap* em torno de 5,0 eV, caracterizando-os, quanto à condutividade elétrica, como isolantes, o que está em conformidade com a literatura revisitada (TERRONES et al., 2007).

**Figura 3: Densidade de estados dos nanotubos *zigzag*.**



Fonte: Organizado pelos pesquisadores a partir dos dados coletados na pesquisa.

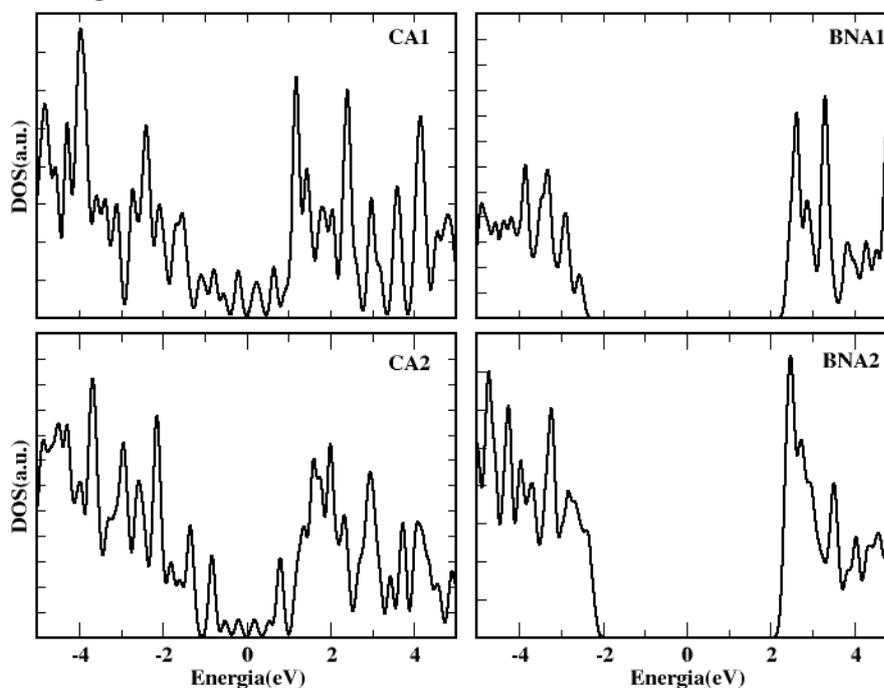
Ainda observando o gráfico apresentado na Figura 3, percebemos que no caso dos nanotubos de carbono, não há variação tão significativa nas energias de *gap*, em função do diâmetro. Contudo, é possível observar que o CZ1 apresenta uma energia de *gap* nula, sendo, portanto um condutor; enquanto o CZ2 apresenta um pequeno *gap* de energia, da ordem de 0,5eV, o que o caracteriza como um semiconductor, ou seja, apesar de estarem menos sujeitos às variações do diâmetro, os nanotubos de carbono também sofrem alterações no *gap* de energia que acarretam em caracterizações diferentes. Estes dados nos mostram que a partir da



variação de um único parâmetro, mudanças relevantes podem ocorrer nas propriedades eletrônicas dos materiais (WILDÖER et al., 1998).

No caso da densidade de estados dos nanotubos do tipo *armchair*, apresentada nos gráficos da Figura 4, o comportamento observado dos *gaps* de energia é um tanto diferente dos tubos do tipo *zigzag*. Para os nanotubos de h-BN, percebemos que ambos apresentam larga faixa de *gap*, no entanto apesar de não se diferenciarem significativamente, o tubo de menor diâmetro (BNA1) possui maior *gap* de energia, caracterizando assim uma relação inversamente proporcional entre o diâmetro e o *gap*, ao contrário do que ocorre com os tubos de h-BN do tipo *zigzag*.

**Figura 4: Densidade de estados dos nanotubos *armchair*.**



Fonte: Organizado pelos pesquisadores a partir dos dados coletados na pesquisa.

Os nanotubos de carbono do tipo *armchair* não mostraram variações significativas em suas energias de *gap* em relação ao diâmetro do tubo. As bandas de valência e de condução se tocam nas duas configurações, CA1 e CA2, o que caracteriza estas nanoestruturas como condutoras e as diferencia dos nanotubos de carbono do tipo *zigzag* previamente analisados. Tal resultado se alinha às previsões expressas na literatura sobre as propriedades eletrônicas destes materiais (DRESSELHAUS & AVOURIS, 2001).

De modo geral, os nanotubos apresentaram semelhanças quanto à energia de *gap*, no entanto, é possível observar nas diferentes configurações, tanto de carbono, quanto de h-BN, pequenas variações nos *gaps* de energia das nanoestruturas investigadas, que podem modificar a condutividade elétrica do material.



## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Quanto à energia de formação, foi possível observar que os nanotubos apresentaram menor estabilidade quando havia uma redução no diâmetro do tubo, independente da quiralidade e da espécie atômica.

A análise da densidade de estados dos diferentes tubos nos mostrou que no caso das estruturas feitas de h-BN, o comportamento isolante será sempre observado, no entanto, é possível constatar que para os tubos do tipo *zigzag* a relação entre *gap* de energia e diâmetro é diretamente proporcional, enquanto que para as estruturas do tipo *armchair* essa mesma relação é inversamente proporcional.

Os nanotubos de carbono do tipo *zigzag* apresentaram comportamentos diferenciados. O tubo de menor diâmetro mostrou-se semicondutor, enquanto o tubo de maior diâmetro apresentou comportamento condutor. Já os nanotubos de carbono do tipo *armchair* mostraram-se condutores nas duas configurações investigadas.

De modo geral, os resultados expostos na investigação ora realizada apresentaram concordância com a literatura e mostraram-se viáveis quanto à aplicabilidade destas nanoestruturas em inovações tecnológicas, uma vez que apresentaram boa estabilidade estrutural, bem como propriedades eletrônicas que podem variar a depender da configuração estudada.

As nanoestruturas investigadas também podem ser analisadas mediante a introdução de impurezas na rede, ou mesmo da aplicação de campo elétrico. Tais investigações visam ter um maior controle das propriedades eletrônicas e certamente serão realizadas na continuidade desta pesquisa.

## REFERÊNCIAS

ALVES, O. L. Nanotecnologia, nanociência e nanomateriais: quando a distância entre o presente e o futuro não é apenas questão de tempo. **Parceria Estratégicas**. v. 18, p. 23-40, 2004.

BERNARDO, G. A. M.; LOPES, M. D.; AZEVEDO, S. A. F. Estudo teórico sobre as propriedades eletrônicas de nanoestruturas de carbono e h-BN. **Pesquisa e Ensino em Ciências Exatas e da Natureza**. p. 71-81, 2018.

JOACHIM, C.; PLÉVERT, L. **Nanociências**: a revolução invisível. Rio de Janeiro: Jorge Zahar Ed. 2009. 163p.

AZEVEDO, S.; KASCHNY, J. R.; CASTILHO, C. M. C.; MOTA, F. B. A theoretical investigation of defects in a boron nitride monolayer. **Nanotechnology**. v. 18, p. 1-4, 2007.

CANO-MARQUEZ, A. G.; SCHMIDT, W. G.; RIBEIRO-SOARES, J.; CANÇADO, L. G.; RODRIGUES, W. N.; SANTOS, A. P.; FURTADO, C. A.; AUTRETO, P. A. S.; PAUPITZ, R.; GALVÃO, D. S.; JORIO, A. Enhanced Mechanical Stability of Gold Nanotips through Carbon Nanocone Encapsulation. **Scientific Reports**. v.5, p. 1-5, 2015.



- DRESSELHAUS, M. S.; AVOURIS, P. Introduction to Carbon Materials Research. In: DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; AVOURIS, P. **Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties and applications**. Topics in Applied Physics. Berlin: Springer, v. 80, 2001. p. 1-9.
- FEYNMAN, R. P. **There's plenty of room at the bottom**. 1959. Disponível em: <<http://www.its.caltech.edu/~feynman/plenty.html>> Acesso em: 20 abr. 2016.
- HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. **Physical Review**. v. 136, p. 864-871, 1964.
- FREITAS, A.; AZEVEDO, S.; KASCHNY, J. R. Effects of a transverse electric field on the electronic properties of single- and multi-wall BN nanotubes. **Solid State Communications**. v. 153, p. 40-45, 2013.
- HAMADA, N.; SAWADA, S.; OSHIRIAMA, A. New one-dimensional conductors: graphitic microtubules. **Physical Review Letters**. v. 68, p. 1579-1581, 1992.
- HAN, W.; BANDO, Y.; KURASHINA, K.; SATO, T. Synthesis of boron nitride nanotubes from carbon nanotubes by a substitution reaction. **Applied Physics Letters**. v. 73, p. 3085-387, 1998.
- HERBST, M. H.; MACÊDO, M. I. F.; ROCCO, A. M. Tecnologia dos nanotubos de carbono: tendências e perspectivas de uma área multidisciplinar. **Química Nova**. v. 27, p. 986-992, 2004.
- IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. **Nature**. v. 354, p. 56-58, 1991.
- KITTEL, C. **Introdução à Física do Estado Sólido**. Rio de Janeiro: LTC Editora, 2013. 578p.
- KLEIN, A.; TIEFENBACHER, S.; EYERT, V.; PETTENKOFER, C.; JAEGERMANN, W. Electronic band structure of single-crystal and single-layer WS<sub>2</sub>: Influence of interlayer van der Waals interactions. **Physical Review B**. v. 64, p. 1-14, 2001.
- KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. **Physical Review**. v.140, p. 1133-1138, 1965.
- LANDAU, L. D. Zur Theorie der phasenumwandlungen II. **Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion**. v.11, p. 26-35, 1937.
- NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. **Science**. v.306, p. 666-669, 2004.
- NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: ótica, relatividade, física quântica**. 2. ed. São Paulo: Blucher, 1988. 437p.
- RUBIO, A.; CORKILL, J. L.; COHEN, M. L. Theory of graphitic boron nitride nanotubes. **Physical Review B**. v. 49, p. 5081-5084, 1994.
- SOLER, J. M.; ARTACHO, E.; GALE, J. D.; GARCIA, A.; JUNQUERA, J.; ORDEJON, P.; SANCHEZ-PORTAL, D. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. **Journal of Physics: Condensed Matter**. v.14, p. 2745-2779, 2002.
- TERRONES, M.; ROMO-HERRERA, J. M.; CRUZ-SILVA, E.; LÓPEZ-URÍAS, F.; MUÑOZ-SANDOVAL, E.; VELÁZQUEZ-SALAZAR, J. J.; TERRONES, H.; BANDO, Y.; GOLBERG, D. Pure and doped boron nitride nanotubes. **Materials Today**. v. 10, p. 30-38, 2007.
- WILDÖER, J. W. G.; VENEMA, L. C.; RINZLER, A. G.; SMALLEY, R. E.; DEKKER, C. Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes. **Nature**. v. 391, p. 59-62, 1998.