

Nanotubos de ZnO

Eduardo de Moraes¹ (PG)*, José Divino dos Santos¹ (PQ), João B. L. Martins² (PQ)

eduquimica2003@yahoo.com.br

1- Universidade Estadual de Goiás, CP 459, Anápolis, GO, 75001-970

2- Universidade de Brasília, IQ, CP 4478, Brasília, DF, 70904-970

Palavras Chave: Nanotubos, ZnO, semi-empírico.

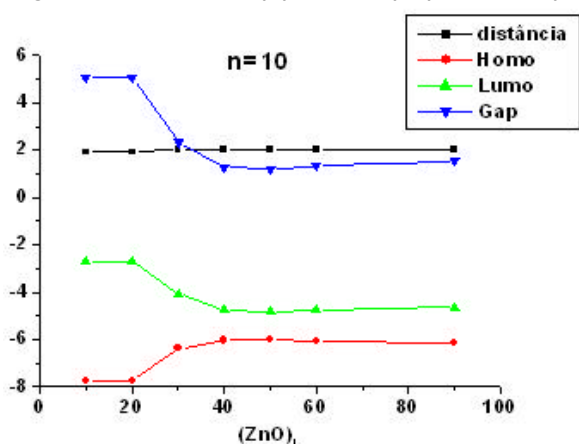
Introdução

Materiais unidimensionais tem sido de grande interesse devido ao uso potencial em eletrônica e mecânica. ZnO é um material semiconductor (banda de 3,37 eV). Nanoestruturas de ZnO tem sido utilizadas em diversas aplicações como, por exemplo, armazenagem de H₂, sensor de H₂ e etanol [1], fotocatalisadores e células fotoelétricas [2]. Nanotubos de ZnO tem sido preparados por diversos métodos como decomposição térmica, síntese hidrotermal, transporte por fase vapor [3].

Resultados e Discussão

Cálculos semi-empíricos AM1 foram realizados com o programa MOPAC7.0. O número de ZnO na base (n) em cada camada (nível) foi variado de n=4 a n=10. O número de camadas de ZnO variou de 1-9. A distância ZnO foi otimizada para cada camada e nível, gerando cerca de 700 estruturas do tipo cadeira e zigzag. A Figura 1 apresenta os resultados das propriedades dos nanotubos de menor energia para cada conjunto de n e camadas, para o nanotubo zigzag. Na Figura 2 estão apresentados os resultados para o nanotubo cadeira.

Figura 1. Distância(Å), Homo(eV), LUMO (eV) e



Gap(eV) versus número de unidades de ZnO.

Como se pode notar, a distância ZnO apresenta pouca variação tanto para o modelo zigzag quanto para o cadeira. No entanto, as outras propriedades apresentam comportamento diferenciado para os dois modelos. O Homo tem valores entre -6eV e -8eV para

o modelo zigzag, apresentando uma tendência para valores menos negativos com o aumento do número de unidades de ZnO. Já o modelo cadeira apresenta valores próximos a -10eV para o modelo cadeira. O Gap apresenta comportamento de decréscimo com o aumento de unidades de ZnO, variando de 1eV a 5eV do nanotubo em zigzag. Enquanto que o Gap do nanotubo cadeira varia em valores de 8-10 eV. Estes resultados podem ser explicados através da terminação nos dois nanotubos. A terminação do nanotubo zigzag é em oxigênio, formando uma terminação polar. Enquanto que, o nanotubo cadeira termina em ZnO, formando uma terminação apolar.

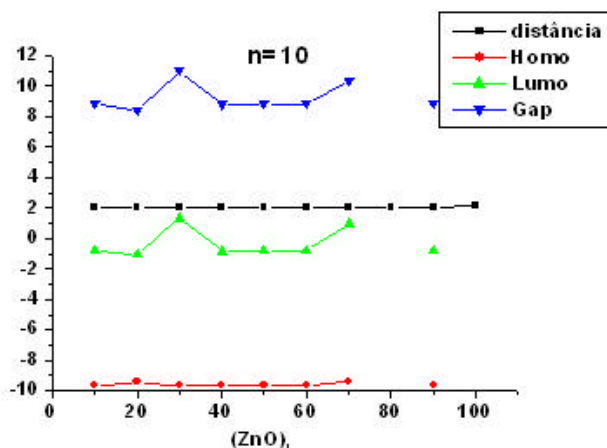


Figura 2. Distância(Å), Homo(eV), LUMO (eV) e Gap(eV) versus número de unidades de ZnO

Conclusões

Método semi-empírico AM1 apresentou uma diferenciação entre os dois nanotubos estudados de ZnO. Esta diferença concorda com os diferentes tipos de terminação apresentadas.

Agradecimentos

Finattec, CNPq

¹ Rout, C. S., Krislma, S. H., Vivekchand S.R.C., Govindaraj, A., Raio, C.N.R., Chem. Phys. Lett. 2005, 418, 586.

² Erkoç, S., Kokten, H., Physica E., 2005, 28, 162.

³ Zhan J. H., Bando Y., Hu, J. Q., Golberg, D., Appl. Phys. Lett., 2006, 89, 243111