

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física

# Estudo da Influência de Defeitos Estruturais nas Propriedades de Nanotubos de Carbono

Rodrigo Garcia Amorim

---

Tese apresentada ao Instituto  
de Física para a obtenção do  
título de Doutor em Ciências

---

**Orientador:** Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva

**Comissão Examinadora:**

Prof. Antônio José Roque da Silva (IF/USP)

Prof. Maria Cecília B. da S. Salvatori (IF/USP)

Prof. Andréa Brito Latgé (IF/UFF)

Prof. Ricardo Wagner Nunes (UFMG)

Prof. Roberto Hiroki Miwa (UFU)

São Paulo - 2009

**FICHA CATALOGRÁFICA**  
**Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação**  
**do Instituto de Física da Universidade de São Paulo**

Amorim, Rodrigo Garcia

Estudo da Influência de Defeitos Estruturais nas Propriedades de Nanotubos de Carbono. São Paulo, 2009.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.  
Instituto de Física. Depto. de Física dos Materiais e Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Antônio José Roque da Silva

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Unitermos: 1. Física do Estado Sólido; 2. Física do Estado Sólido - Defeitos estruturais; 3. Física do Estado Sólido - Propriedades estruturais e mecânicas; 4. Nanotecnologia - Nanotubos; 5. Simulação computacional - Teoria do funcional da densidade.

USP/IF/SBI-088/2009

*Dedico esta tese ao  
meu irmão Guilherme.*



*“Procure ser um homem de valor, em vez de ser um  
homem de sucesso. O sucesso é consequência.”*

**Albert Einstein**



# Agradecimentos

Quero agradecer primeiramente a Deus.

Ao povo brasileiro que compõe esta nação e que paga imposto. A este povo que me proporcionou a oportunidade de estar na universidade pública.

Ao meu orientador Antônio José Roque da Silva, pela orientação e discussões ao longo desse período. Agradeço também ao professor Adalberto Fazzio pela colaboração e discussões.

A Mãina e Gigi pela dedicação, paciência, motivação e companheirismo. Aos meus Pais, Wellington e Zenaide, e meus irmãos Cássio (Thalita e Ana) e Guilherme pelo incentivo e motivação. Agradeço os meus tios Silvano e Rose juntamente com meus primos Patrícia e Thiago. A Família Fantini: Marcos, Inês e Talita por me receber e me incentivar.

As pessoas que me receberam em São Paulo, em particular agradeço ao Marcelo e seu pai Reinaldo e Lucimar, por me acolher num momento de transição muito difícil.

Sou grato aos integrantes de Tongpura: Lucas, Rodrigo Ramos, Bahia, Vitor pela amizade.

Agradeço os amigos do Grupo SAMPA: Luana, Alberto, Thiago, Matheus, Edwin, Alexandre, Márcio, Zé Eduardo, Pedro, Amaury, Renato, James e Leandro. Em especial ao Thiago, Edwin, Luana, Alberto, Zé Eduardo, Alexandre, Márcio e Matheus pelas inúmeras discussões, ajudas, viagens e churrascos. Agradeço também a Marisa

por estar sempre a disposição em ajudar.

A todos os meus amigos de São Paulo, em especial o Maurício, Priscila e Bahia por serem amigos incondicionais e também os amigos do DFMT Ferenc, Rafael, Marcelos, Jarlesson, Jeconias, Regina, Ricardo, Joelson e Rolando.

Aos meus amigos de São Carlos que apesar da distância sempre estão presente: Cacheffo, Veríssimo, Dodonov e Juracy pela amizade.

Aos amigos do Rio que desde o tempo de graduação estão sempre presente na minha vida acadêmica: Mago, Wells, Lidy, Davi, Mamour, Molim, Marcos, Fred e Juca.

Para finalizar, agradeço às agências de fomento CNPq, CAPES e FAPESP pelo financiamento da bolsa e pelos recursos para realizar a pesquisa. Agradeço aos centros de computação LCCA, CENAPAD-SP pelos recursos computacionais.



# Resumo

Nesse trabalho investigamos a influência de defeitos nas propriedades estruturais, eletrônicas e mecânicas de nanotubos de parede simples (SWCNT), em feixes de nanotubos e em nanotubos de parede múltipla (MWCNT). Todos os nossos resultados foram obtidos utilizando uma teoria de primeiros princípios de energia total, a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Investigamos as propriedades estruturais para quatro defeitos em nanotubos de parede simples: Stone-Wales (5577), monovacância e duas divacâncias (585) e (555777), e o comportamento da energia de formação em função do diâmetro para as quatro estruturas. Observamos que as divacâncias apresentam uma inversão de estabilidade, quando comparamos as energias de formação desses defeitos em nanotubos com o grafeno e, além disso, as divacâncias são os defeitos mais importantes na modificação das propriedades de transporte em SWCNT. Estudamos a estabilidade e as propriedades de transporte desses sistemas e observamos que o defeito 585 é menos estável em grafeno devido à quebra de duas ligações dos pentágonos do defeito. O defeito 555777 torna-se mais estável do que o 585 para os CNT *armchair* (*zigzag*) com o diâmetro 40 Å (53 Å).

Investigamos as propriedades estruturais e mecânicas de feixes de nanotubos com os defeitos do tipo vacância-vacância,  $V_2^1$  e  $V_2^2$ . Devido à estrutura geométrica dos nanotubos, esses defeitos possuem energia de formação menores do que em grafeno. Apresentaremos como as conexões modificam o módulo de cisalhamento dos nanotubos e também mostraremos o processo de formação das conexões através

do método “*Nudged Elastic Band*”- NEB.

Por fim, foram investigadas as propriedades estruturais e mecânicas de nanotubos de parede dupla (DWCNT) com defeitos do tipo vacância-interstício (defeito de Wigner) e os defeitos do tipo vacância-vacância (defeitos  $V_2^1$  e  $V_2^2$ ). Mostraremos que neste sistema existem várias possibilidades para o defeito de Wigner. Observamos que o defeito de Wigner mais estável é o que possui um pentágono no tubo interno e que os átomos do pentágono, formados pelo defeito, participam da conexão (Wigner-I-a). Investigamos a estabilidade desses defeitos em duas concentrações ( $\rho_d = 0.082$  [def.Å<sup>-1</sup>] e  $\rho_d = 0.164$  [def.Å<sup>-1</sup>]). As propriedades mecânicas desses sistemas foram investigadas e constatamos uma melhora do módulo de cisalhamento por um fator de até 15, quando comparado com o sistema sem defeito e, quando dobramos a concentração de defeitos, o módulo de cisalhamento aumenta por um fator de 3 em relação ao sistema com a concentração inicial. Apresentaremos um estudo da transferência de tensão entre as paredes dos nanotubos através das conexões, e mostraremos que, dependendo da concentração de defeitos, a transferência de tensão pode chegar até 75% da tensão máxima.

## Gracias por visitar este Libro Electrónico

Puedes leer la versión completa de este libro electrónico en diferentes formatos:

- HTML(Gratis / Disponible a todos los usuarios)
- PDF / TXT(Disponible a miembros V.I.P. Los miembros con una membresía básica pueden acceder hasta 5 libros electrónicos en formato PDF/TXT durante el mes.)
- Epub y Mobipocket (Exclusivos para miembros V.I.P.)

Para descargar este libro completo, tan solo seleccione el formato deseado, abajo:

