



Efectos del Desorden en las Propiedades Electrónicas de Nanotubos de BN

Y.D.Ibarra Panteves^{a,b}, K. M. Fonseca Romero,^a R. R. Rey-González^a

^aGrupo de Óptica e Información Cuántica, Departamento de Física. Universidad Nacional de Colombia.

^bUniversidad de la Amazonia, Florencia, Colombia

Recibido 22 de Oct.2007; Aceptado 3 de Mar.2008; Publicado en línea 15 de Abr.2008

Resumen

Los nanotubos de Nitruro de Boro, BN, son semiconductores con una amplia brecha prohibida en todas sus configuraciones. El BN bidimensional y el grafeno poseen redes similares, con la misma estructura hexagonal. Sin embargo, los parámetros de red del nitruro de boro y el carbono son 0.250 nm y 0.245 nm respectivamente, una diferencia de red del orden de 2% . Estas características sugieren la integración de nanotubos BN y C e impulsa el estudio de los efectos en las propiedades electrónicas al dopar con carbono los nanotubos BN. Nuestros resultados muestran que la brecha prohibida de los nanotubos BN dopados con carbono depende de la geometría de los nanotubos y posee un comportamiento semi-lineal con la concentración de carbono tanto para nanotubos tipo brazo de silla como zigzag.

Palabras Clave: Nanotubos, Propiedades electrónicas, Modelo de enlace fuerte

Abstract

Boron Nitride, BN, nanotubes are wide bandgap semiconductors in all configurations. The bidimensional BN and the graphene possess quite similar lattices, with the same hexagonal structure. Moreover, the lattice parameters of boron nitride and carbon are 0.250 nm 0.245 nm respectively, i.e., a lattice difference of less than 2% . This characteristic suggests the integration of BN and C nanotubes and prompts the study of the effect in the electronic properties of BN nanotubes doped with carbon. Results show that the band gap of BN nanotubes depends on the geometry of the nanotubes, as the gap has a quasi-linear behavior with the carbon concentration in armchair and zigzag nanotubes.

Keywords: Nanotubes, Electronic properties, Tight binding model

1. Introducción

El progreso en las técnicas de crecimiento de materiales alcanzado en los últimos años ha permitido el desarrollo de materiales nanométricos con excelentes propiedades ópticas y electrónicas y prometedoras aplicaciones tecnológicas. Como ejemplo de esto, se tienen los nanotubos de Nitruro de Boro (BN) que han sido producidos en los últimos años [1] y sus propiedades son predichas a ser cercanas y complementarias a las propiedades de los nanotubos de Carbono [2,3,4], los cuales, han sido el centro de interés de la física de la materia condensada. En este nuevo campo también se

han crecido estructuras con una composición diferente que consiste en nanotubos de nitruro de boro dopados con átomos de carbono, que se espera exhiban nuevas e interesantes propiedades electrónicas. El rango de aplicaciones (como por ejemplo en dispositivos optoelectrónicos) de los nanotubos de nitruro de boro dopados con carbono será extenso si su brecha de energía prohibida puede ser controlada a valores deseados.

Con el fin de contribuir en este campo, reportamos resultados sobre el comportamiento lineal de la brecha de energía prohibida en función de la concentración de carbono en nanotubos BN dopados. Para tal análisis hemos usado la aproximación de cristal virtual. Tam-

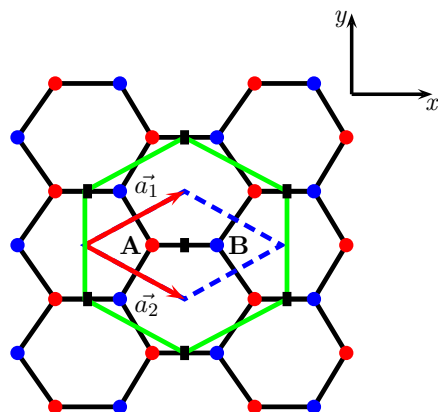


Figura 1. Representación esquemática de una hoja de nitruro de boro. Se señalan los vectores unitarios, así como el motivo con los átomos de boro, A, y nitrógeno, B.

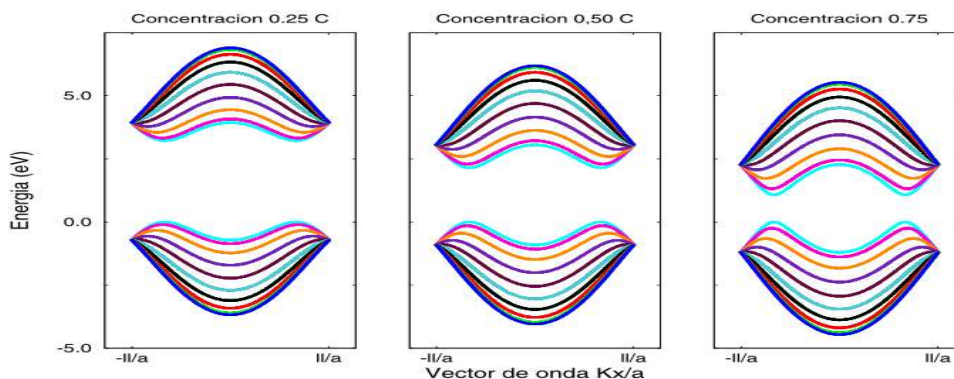


Figura 2. Relaciones de dispersión para nanotubos BN, tipo brazo de silla (9,9), para diferentes concentraciones de carbono

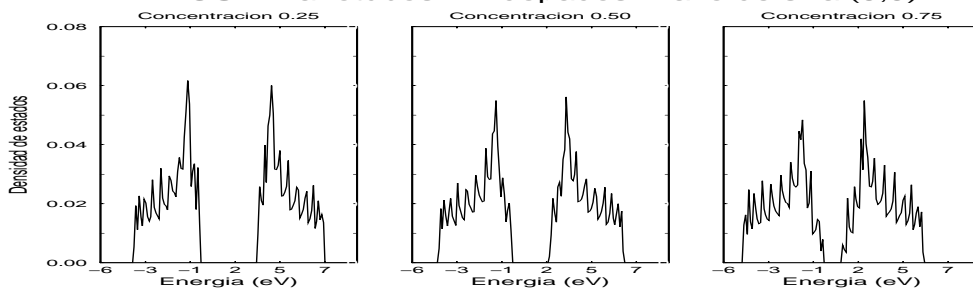


Figura 3. D.O.S. de los BNN - Dopados, tipo brazo de silla (9,9).

bién se reportan resultados para la densidad de estados en nanotubos finitos donde los efectos de correlación debido al desorden introducido por el dopaje son llevadas en cuenta explícitamente.

2. Sistema físico y modelo

Para entender la estructura geométrica de los nanotubos, previamente es necesario conocer la configuración del nitruro de boro. Este es un compuesto químico bina-

rio, que se constituye de iguales proporciones de Boro y Nitrógeno. Estructuralmente, es isoelectrónico al Carbono y tiene una representación geométrica similar, y la cual se muestra en la figura 1. El nitruro de boro es estable hasta una temperatura aproximada de 1000°C y bajo condiciones críticas, altas presiones, puede ser usado cerca a los 1800°C . El nitruro de boro es mucho más resistente a la oxidación que el Carbono y por lo tanto utilizado para aplicaciones a altas temperaturas en las cuales las nanoestructuras de Carbono pueden ser

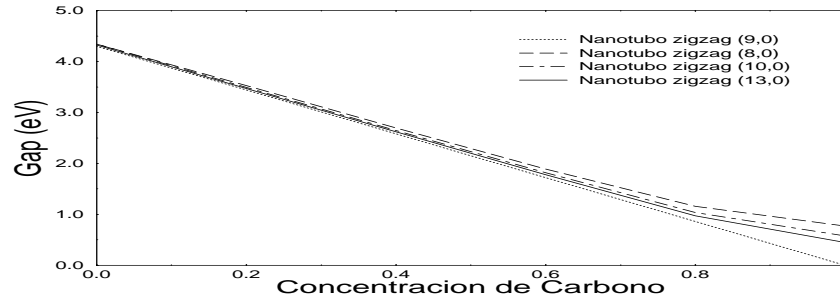


Figura 4. Ancho de la brecha de energía en función de la concentración de carbono.

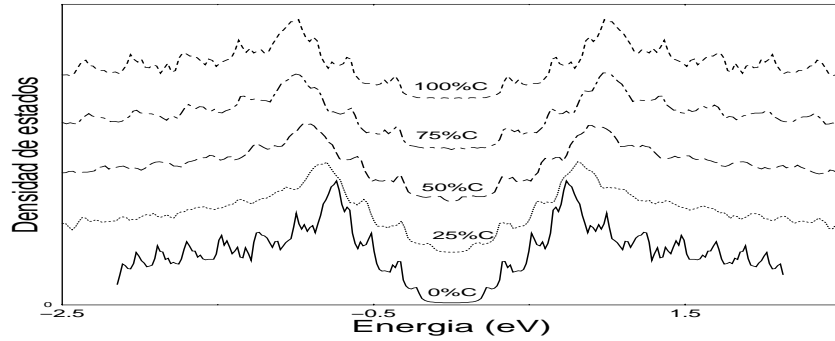


Figura 5. DOS, por diagonalización numérica, para nanotubos BN (9,9)

quemadas.

Las propiedades electrónicas tanto de nanotubos finitos como de sistemas periódicos e ideales son estudiadas usando un solo orbital por sitio, tipo π , y bajo las aproximaciones de enlace fuerte y de electrón independiente. Para sistemas periódicos trabajamos en el espacio recíproco, mientras que para sistemas finitos el análisis se realiza en el espacio real. El hamiltoniano se escribe en la representación espacial como:

$$H = \sum_m \epsilon_m c_m^\dagger c_m + \sum_{m \neq n} t_{mn} c_m^\dagger c_n \quad (1)$$

donde m representa el sitio de la red, c^\dagger y c son los operadores de creación y aniquilación, respectivamente, ϵ_m es la autoenergía por sitio y t_{mn} representa las integrales de solapamiento a primeros vecinos. No se incluyen efectos de hibridización tipo $\sigma - \pi$ dado que los efectos de curvatura se desprecian. En el caso de los sistemas periódicos e ideales el dopaje se analiza a través de la aproximación de cristal virtual, donde las correlaciones debido al desorden inducido son despreciadas. Bajo estas consideraciones la solución al hamiltoniano del sistema, ecuación (1), se escribe como una combinación lineal de orbitales atómicos y restringida a cumplir el teorema de Bloch. [5,6]. Para el caso de sistemas finitos la solución se escribe en el espacio real e implica la diagonalización de matrices de orden $m = 2nN_{cu}N_a$,

donde n es el índice del nanotubo, N_a es el número de átomos por celda unitaria y N_{cu} el número de celdas unitarias consideradas. Para la diagonalización numérica de dichas matrices se usó la subrutina LAPACK. En el presente estudio se diagonalizaron matrices hasta de orden $m = 1680$. Los resultados mostrados corresponden a una sola configuración.

3. Resultados

En la figura 2 se presentan los resultados de la estructura de bandas de nanotubos BN, tipo brazo de silla (9,9), para diferentes concentraciones de carbono. La dependencia del ancho de la brecha de energía prohibida con la concentración de carbono es clara. Relación que se confirma en los resultados de la densidad de estados, (D.O.S.) y la cual se calcula usando el formalismo de las funciones de Green.

Para el caso de nanotubos tipo zigzag, los resultados encontrados muestran el mismo tipo de comportamiento y el cual se puede visualizar en la figura 4 donde presentamos la dependencia del ancho de la brecha prohibida, ΔE_g en función de la concentración de carbono, C_x , para diferentes nanotubos. Como una primera aproximación podemos decir que:

$$\Delta E_g = (1 - C_x)\Delta E_g(BN) - C_x\Delta E_g(C) \quad (2)$$

donde $\Delta E_g(BN)(C)$ representa el ancho de banda prohibida para nanotubos puros de BN o C, respectivamente.

Finalmente, en la figura 5 presentamos los resultados de la D.O.S., para los mismos nanotubos de las figuras 2 y 3, obtenidos mediante la diagonalización numérica y exacta del hamiltoniano. Podemos observar que como resultado de las correlaciones se pierde la simetría en la DOS, mientras que la dependencia del ancho de la brecha prohibida con la concentración de carbono se mantiene.

4. Conclusiones

Se calcula la dependencia del ancho de la brecha prohibida en función de la concentración de dopaje con carbono de nanotubos BN para diferentes radios y geometrías. El incluir las correlaciones debidas al desor-

den inherente a los procesos de dopaje rompe la simetría de la D.O.S.

Referencias

- [1] Nasrenn G. Chopra, R. J. Luyken, K. Cherrey, Vincent H. Cespi, Marvin L. Cohen, Steven G. Louie, and A. Zetti. *Science*, 269:966, 1995.
- [2] D. Golberg, Y. Bando, W. Han, K. Kurashima, and T. Sato. *Chemical Phys. Lett.*, 308:337, 1999.
- [3] C.S. Guo, W.J. Fan, Z.H. Chen, and R.Q. Zhang. *Solid State Commun.*, 137:549, 2006.
- [4] Yenid Dolores Ibarra. *Propiedades electrónicas de nanotubos de nitruro de boro*. Master's thesis, Universidad Nacional de Colombia, 2007.
- [5] P. Y. Yu and M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors*. Springer Verlag, 1996.
- [6] J. Callaway. *Quantum Theory of Solid State*. Academic Press, Inc., 2nd edition, 1991.