

SPIRO-CARBON - UM ALÓTROPO DE CARBONO METÁLICO PREDITO A PARTIR DE CÁLCULOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS.

Felipe L. Oliveira (PG)¹, Rodrigo B. Capaz (PQ)², Pierre M. Esteves (PQ)^{1*}

¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro; ²Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro

* pesteves@iq.ufrj.br

Palavras Chave: Alótropos de Carbono, DFT, Carbono Microporoso.

Introdução

Um alótropo de carbono metálico, microporoso e estruturalmente estável, poly(spiro[2.2]penta-1,4-diyne), denominado Spiro-carbon, apresentando simetria $I4_1/amd$ (D_{4h}) é predito utilizando cálculos de primeiros princípios (DFT PBE-D3). Os cálculos das propriedades eletrônicas, vibracionais e estruturais mostram que o Spiro-Carbon apresenta menor energia relativa que outros alótropos de carbono já reportados como T-Carbon e 1-diamondyne. Sua estrutura pode ser visualizada como um conjunto de cadeia de trans-cisoid-poliacetileno conectadas e entrelaçadas por átomos de carbono sp^3 . Os cálculos de sua estrutura eletrônica revelam que seu caráter metálico surge de um “doping” intrínseco gerado pela interação dos carbonos sp^3 com a cadeia de poliacetileno. Para guiar a caracterização de candidatos sintetizados são apresentados também cálculos do difratograma de raios-X, deslocamentos químicos na ressonância magnética nuclear de sólidos e espectro de absorção de infravermelho.

Resultados e Discussão

A estrutura do spiro-carbon possui 10 átomos em uma célula unitária primitiva tetragonal de corpo centrado, com grupo espacial $I4_1/amd$ (n° 141) e grupo pontual D_{4h} . A geometria resultante da otimização apresentou parâmetros de célula $a = b = 5.122 \text{ \AA}$, $c = 13.126 \text{ \AA}$ e $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$.

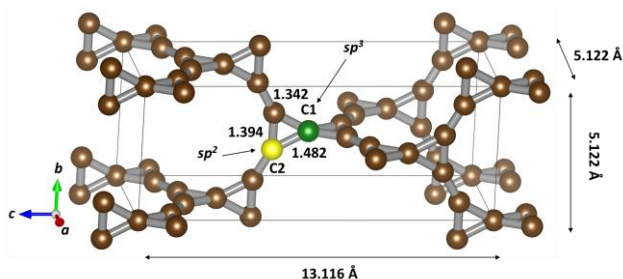


Figura 1. Representação atômica da estrutura tetragonal do spiro-carbon. Por simplicidade mostramos a célula unitária tetragonal convencional com duas fórmulas unitárias. Os átomos não equivalentes C1 e C2 estão destacados em verde e amarelo, respectivamente.

Como podemos ver na **Figura 2**, nenhuma frequência imaginária é observada, confirmando que a estrutura do spiro-carbon corresponde a um mínimo na superfície de potencial.

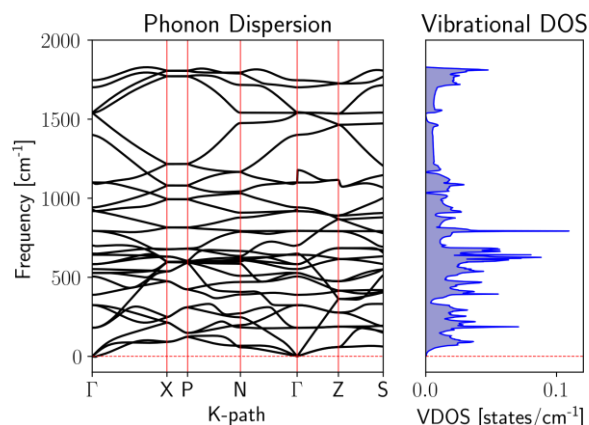


Figura 2. Gráfico da dispersão de fônons ao longo de alguns pontos de alta simetria na primeira zona de Brillouin e a correspondente densidade de estados vibracionais (VDOS). Inseto: Caminho através dos pontos de alta simetria da primeira zona de Brillouin do spiro-carbon

Conclusões

No presente trabalho um alótropo de carbono nomeado spiro-carbon, que, na extensão de nosso conhecimento, ainda não foi relatado na literatura foi estudado por cálculos em nível DFT PBE-D3. Com base nos dados apresentados podemos concluir que esta estrutura é um mínimo na superfície de potencial, é mecanicamente estável e apresenta caráter eletrônico metálico. Ele também apresenta menor energia de formação que outras formas alotrópicas tridimensionais do carbono, como Y-, Y-II-, T-, e T-II-Carbon.

Agradecimentos

Gostaríamos de agradecer ao auxílio financeiro da CAPES, INCT- Nanomateriais de Carbono, CNPq e FAPERJ. Gostaríamos de agradecer também ao Núcleo Avançado de Computação de Alto Desempenho (NACAD) da COPPE/UFRJ pelos recursos computacionais.