



# VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

## Efecto de Metales de Transición en Nanotubo de Carbono Semiconductor

Gaztañaga Francisco<sup>1</sup>, Luna C. Romina<sup>1</sup>, Jasen Paula<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Dpto. Física-Universidad Nacional del Sur-IFISUR  
cluna@uns.edu.ar

Los nanotubos de carbono (CNT) poseen excepcionales propiedades mecánicas, térmicas, químicas, ópticas y eléctricas, por lo que son un material prometedor para numerosas aplicaciones de alto interés tecnológico [1]. Por ello, actualmente hay un enorme interés sobre las aplicaciones de nanotubos de carbono en la comunidad científica que trabaja en el área de nanotecnología. Las propiedades fisicoquímicas de un CNT pueden verse modificadas por la adsorción de moléculas/átomos de diferentes sustancias en su superficie. En este trabajo se estudia mediante modelado computacional basado en la teoría DFT, implementado por el paquete VASP [2], el efecto que tienen los metales de transición (TM) pertenecientes a los periodos 4 y 5 sobre el CNT (8,0) de pared simple (SWCNT).

Los resultados obtenidos muestran que la adsorción de los TM es energéticamente más favorable para los metales del periodo 5. Particularmente, el Molibdeno es el que posee mejor adsorción sobre el SWCNT, con un valor de energía de adsorción ( $E_{ads}$ ) de - 4.96 eV; mientras que para Zinc y Cadmio, pertenecientes al periodo 4, son los que poseen menor  $E_{ads}$  sobre el nanotubo, con valores de 0.71 eV y 0.67 eV respectivamente.

Por otro lado, se analizó el cambio en el magnetismo luego de la adsorción de los TMs. El SWCNT (8,0) posee un comportamiento no magnético, es decir tiene un momento magnético de 0. Este comportamiento se mantiene para los metales de los grupos 10 y 12. Sin embargo, se observa un comportamiento paramagnético, con un aumento considerable del valor del momento magnético para los metales de los grupos 5 a 8. La adsorción de Cromo y Manganeso sobre CNT es la que presenta mayores valores de momento magnético,  $5.6 \mu_B$  y  $5 \mu_B$  respectivamente.

### Referencias.

[1] Kumar S., Rani, R. Dilbaghi N., Tankeshwar K., Kim K. -H. Chemical Society Reviews, **2017**, 46, 158-196

[2] <https://www.vasp.at/>

