

Estudo teórico das propriedades estruturais e eletrônicas da junção Au/1,4-Benzenodiamina/Au

Carlos Eduardo Silva^a (PG), Renato Borges Pontes^a (PQ)

^aInstituto de Física, Universidade Federal de Goiás, CP 131, 74001-970, Goiânia, GO, Brasil. Email: carloseduardofisica@yahoo.com.br

Palavra Chave: 1,4-Benzenodiamina, Junção Molecular, Teoria do Funcional da Densidade.

INTRODUÇÃO

A nano-eletrônica molecular visa utilizar moléculas individuais como elementos ativos em dispositivos eletrônicos. Para o seu desenvolvimento é fundamental entender, do ponto de vista atômico, as propriedades físicas da junção molecular, cujos constituintes são: a molécula (elemento central) e os eletrodos (superfícies metálicas). Neste trabalho apresentamos uma investigação por meio de cálculos de primeiros princípios das propriedades mecânicas e eletrônicas da junção molecular Au/1,4-Benzenodiamina(BDA)/Au.

MÉTODOS

Nesse trabalho estudamos a molécula 1,4-benzenodiamina na fase isolada, e também ligada a superfícies de átomos de ouro na direção Au(111). Para a realização dos cálculos de estrutura eletrônica utilizamos o pacote SIESTA. Utilizamos um conjunto de funções base numérico finito para expandir as autofunções dos elétrons de valência. Também fizemos de pseudopotenciais de norma conservada para descrever as interações entre os elétrons de caroço e entre os elétrons de valência e de caroço.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com as simulações realizadas para a molécula BDA, observamos que a mesma sofre pequenas mudanças conformacionais comparada com a molécula na fase isolada, durante o processo de alongação. No caso a distância entre o C-N (tanto superior quanto inferior) aumentam e também ocorre um pequeno decréscimo no ângulo θ_{H-N-H} (tanto superior quanto inferior). Pode ser observado na Figura 1 a energia e a força necessária para romper a junção Au/BDA/Au em

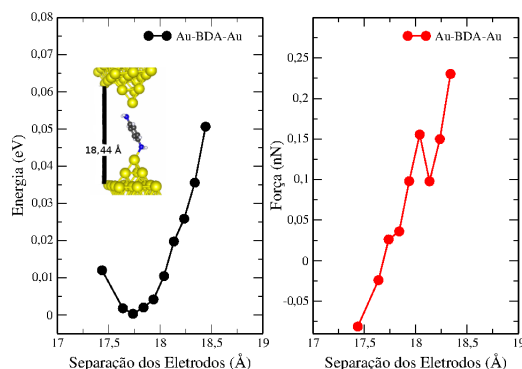


Figure 1. Energia (painel esquerdo) e a força (painel direito) em função do estiramento da junção Au/BDA/Au. A figura inserida, no painel esquerdo, ilustra a conformação do sistema na máxima alongação.

função da separação das superfícies. Como pode ser observado, a energia para a quebra da ligação corresponde à 0,05 eV e a força à 0,23 nN, a uma alongação de 0,7 Å a partir da configuração de menor energia.

CONCLUSÕES

Investigamos as propriedades estruturais e eletrônicas da molécula BDA em fase gasosa, bem como, acoplada a eletrodos de Au(111). Determinamos a força para ruptura desta junção. Estes resultados apresentam um bom acordo quando comparados com recentes medidas experimentais.

AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer as agências brasileiras de fomento à pesquisa: CAPES, CNPq e FAPEG.