



PIBIC/CNPq/UFPG-2013

DEFEITOS PONTUAIS EM GRAFENO

Isaac de Macêdo Félix¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

A presença de defeitos na estrutura cristalina do grafeno modifica significativamente suas propriedades eletrônicas e estruturais. Esses defeitos podem aparecer ao ser incorporado grupos funcionais na estrutura cristalina do grafeno. No nosso caso, adicionamos prótons (hidrogênio - H) e grupos hidroxilos (OH). Entender como estes defeitos modificam as propriedades eletrônicas do grafeno é crucial para novas aplicações na nanotecnologia. Neste trabalho apresentamos um estudo teórico dos defeitos pontuais do grafeno, causados por uma hidratação, usando cálculos de primeiros princípios através de programas inseridos nos códigos Wien2k, que adota o método "Full-Potential Linear Augmented Plane Wave" (FP-LAPW) que está baseado na Teoria Funcional da Densidade (DFT). Nele, mostramos que a formação de hidratos de carbono a partir de carbono e água é energeticamente favorecida quando grafeno é submetido a um ambiente químico desigual entre os dois lados do plano. A estrutura de hidratos de carbono resultante é bidimensional (2D), com os átomos de hidrogênio exclusivamente ligado de um lado do grafeno, e grupos hidroxilos do outro. Mostramos também que, o grafeno sofre uma transição semimetal – isolante após a hidratação, possibilitando novas aplicações nas mais variadas áreas de conhecimentos. Após esse procedimento adicionamos apenas uma coluna de hidratos de carbono na rede do grafeno, na direção zigzag dos carbonos que o compõe, o que tivemos foi uma transição semimetal – metal, o que mostra a facilidade de alterar as propriedades eletrônicas do grafeno, quando fazemos modificações em sua estrutura.

Palavras-chave: Grafeno, Primeiros Princípios, Estrutura Eletrônica.

DEFECTS PUNCTUAL IN GRAPHENE

ABSTRACT

The presence of defects in the crystalline structure of graphene significantly modifies their electronic and structural properties. These defects may appear to be incorporated into functional groups in the crystal structure of graphene. In our case, we added protons (hydrogen - H) and hydroxyl groups (OH). Understanding how these defects modify the electronic properties of graphene is crucial for new applications in nanotechnology. We present a theoretical study of point defects in graphene, caused by hydration, using first-principles calculations through programs entered in the codes Wien2k, which adopts the method "Full-Potential Linear Augmented Plane Wave" (FP-LAPW) that is based on Density Functional Theory (DFT). In it, we show that the formation of carbohydrates from carbon dioxide and water is energetically favored when graphene is subjected to a chemical environment uneven between the two sides of the plane. The structure of carbohydrates resulting two-dimensional (2D) with hydrogen atoms only on one side of graphene and the other hydroxyl groups. We also show that graphene undergoes a transition semimetal-insulator after hydration, enabling new applications in various areas of knowledge. After this procedure just added a column of carbohydrates in the network of graphene in zigzag direction of the carbon that makes up what had been a transition metal-semimetal, which shows the ease of changing the electronic properties of graphene, when we changes in its structure.

Keywords: Graphene, Ab initio, Electronic Structure

¹Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB, E-mail: isaac.equip@gmail.com

²Licenciatura em Física, Professor. Doutor, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB, E-mail: lterrazo@ufcg.edu.br