



ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE GRAFENO/Ni(111) INTERCALADO POR UMA MONOCAMADA DE Au.

José Roberto Moreira da Silva¹. Luís Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O grafeno consiste de uma monocamada de átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal, com propriedades ópticas e de transporte eletrônico únicas. Na sua produção é necessário utilizar um substrato metálico como base, alterando as suas propriedades. Neste trabalho estudamos a superfície de grafeno/Ni(111), através da Teoria do Funcional da Densidade, utilizando o método Full-Potential Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW), inserido no pacote computacional Wien2k. Nossos cálculos mostraram as propriedades eletrônicas do grafeno sobre a superfície de Ni(111), onde podemos verificar que (1) os átomos de ouro favorecem energeticamente a interface de intercalação sobre a superfície, (2) A intercalação de Au muda drasticamente a estrutura eletrônica do grafeno/Ni(111) de modo que a banda π do grafeno quase recupera o cone de Dirac ideal, e (3) o nível de Fermi localiza-se perto do ponto de Dirac, indicando que o substrato Au/Ni(111) é inerte. O presente trabalho confirma um estudo experimental onde o grafeno crescido sobre a superfície de Ni(111) intercalado com uma monocamada de Au pode recuperar as propriedades do grafeno livre.

Palavras-chave: superfícies metálicas, grafeno níquel, primeiros princípios.

ABSTRACT

Graphene consists of a monolayer of carbon atoms arranged in a hexagonal lattice with unique optical and electron transport properties. For its production is necessary to use a metal substrate as a support by changing its properties. We study the surface of graphene/Ni(111) by Density Functional Theory, using the Full Potential Linear Augmented Plane Wave Method (FP-LAPW), implemented on the computer package Wien2k. Our calculations demonstrate that (1) Au atoms improve the interface intercalation over surface adsorption, (2) Au intercalation drastically changes the electronic structure of graphene/Ni(111) so that the graphene bands almost recover the Dirac cone of the free-standing graphene model, and (3) the Fermi edge locates closely at the Dirac point, indicating that the underlying Au/Ni (111) substrate is inert. The present theory confirms a recent experimental result that graphene grown on Ni(111) and intercalated by one monolayer Au can be regarded as quase-free-standing graphene model.

Keywords: metalsurfaces, graphene, Ab initio.

¹Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Centro de Educação e Saúde, UFCEG, Campina Grande, PB, e-mail: robertoslv96@gmail.com

² Física, Professor. Doutor, Centro de Educação e Saúde, UFCEG, Cuité, PB, E-mail: lterrazo@ufcg.edu.br *Autor para correspondências