



PIBIC/CNPq-UFPG 2015

ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DA BICAMADA DE GRAFENO INTERCALADO COM OXIGÊNIO

Edson da Silva Oliveira¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O Grafeno tem ganhado destaque e respeito no mundo científico devido a versatilidade deste material, ele é flexível, com excelentes propriedades elétricas e térmicas, transparente, impermeável extremamente resistente. Todas essas características tornam o grafeno um elemento com um potencial para revolucionar a tecnologia como a conhecemos e chega a ser inimaginável a gama de aplicações que podemos ter com esse material. Neste trabalho nós realizamos cálculos de primeiros princípios para investigar as propriedades estruturais e eletrônicas da bicamada de grafeno, na qual intercalamos o interior dessas camadas com átomos de oxigênio(O). Os átomos de oxigênio foram inicialmente inseridos no ponto médio dessas camadas, o qual foram finalmente absorvido por uma das camadas de grafeno, resultando da diferença de potencial eletrostático existente entre elas. Observamos que houve uma abertura do gap no nível de Fermi onde fica os níveis de energia da impureza e que devido a transferência de carga da bicamada para o átomo de oxigênio a energia Fermi desce no nível de valência o que nos revela o comportamento metálico do sistema.

Palavras-chave: Bicamada de Grafeno, Dopagem, Oxigênio.

STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GRAPHENE BILAYER INTERCALATED WITH OXYGEN

ABSTRACT

Graphene has gained prominence and respect in the scientific world due to the versatility of this material, it is flexible, with excellent electrical and thermal properties, transparent and highly resistant waterproof. All these characteristics make graphene a compound with the potential to revolutionize the technology as we know it and has an unimaginable range of applications. In this work we performed calculations from first principles to investigate the structural and electronic properties of bilayer graphene in which we alternate the inside of these layers with oxygen atoms (O). The oxygen atoms were initially inserted at the midpoint of these layers, which were finally absorbed by a layer of graphene, resulting from existing electrostatic potential difference between them. We observed that there was an opening of the gap at the Fermi level which is the impurity energy levels and due to the bilayer charge transfer to the oxygen atom, the Fermi energy falls in the valence level which reveals the metallic behavior of the system.

Keywords: Bilayer Graphene, Doping, Oxygen.

¹Aluno do Curso de Licenciatura em Física, CES/UAFM, UFPG, Campina Grande, PB,
e-mail: edsonfisica98@gmail.com

² Professor Doutor, CES/UAFM, UFPG, Campina Grande, PB,
e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br