



ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DO GRAFENO FUNCIONALIZADO

Isaac de Macêdo Félix¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

A funcionalização do grafeno por outros materiais pode modificar consideravelmente suas propriedades eletrônicas e estruturais. Isso tem motivado a elaboração de diversos trabalhos científicos sobre esse tema, por haver grande interesse das mais diversas áreas em suas aplicações. Neste trabalho apresentamos um estudo teórico do grafeno funcionalizado 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 no outro lado os grupos hidroxilo. Nós mostramos também que, o grafeno sofre uma transição metal-isolante após hidratação. Assim, essa forma de hidrato de grafeno oferece novas aplicações para o grafeno na eletrônica, quando depositado sobre um substrato ou em uma solução.

Palavras-chave: Grafeno Funcionalizado, Cálculos de Primeiros Princípios, Estrutura Eletrônica.

STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF FUNCTIONALIZED GRAPHENE

ABSTRACT

The functionalization of graphene by other materials may significantly modify their structural and electronic properties. This has motivated the development of various scientific papers on this topic, because there is great interest from various fields in their applications. We present a theoretical study of functionalized graphene using first-principles calculations by means of programs included in the codes Wien2k, which adopts the "Full-Potential Linear Augmented Plane Wave" (FP-LAPW) method which is based on Density Functional Theory (DFT). In it, show that formation of carbohydrates from carbon dioxide and water is energetically favored when graphene is subjected to a chemical environment unequal between the two sides of the plane. The carbohydrate structure of the resulting two-dimensional (2D), with the hydrogen atoms only on one side of the graphene, and on the other side of the hydroxyl groups. We also show that graphene undergoes a metal-insulator transition upon hydration. Thus, this form of hydrate graphene offers new applications for graphene electronics, when deposited on a substrate or a solution.

Keywords: Functionalized Graphene, Calculations of First Principles, 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