



ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE GRAFENO

Alexsandro Silva Santos¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O grafeno é um alótropo do carbono e se destaca pelas suas propriedades mecânicas, eletrônicas e térmicas. Uma das promissoras áreas de aplicação desse material é na construção de supercapacitores devido as suas propriedades eletrônicas. O grafeno é feito de átomos de carbono arranjados em uma estrutura hexagonal. A hibridação sp^2 entre um orbital s e duas orbitais p leva a um plano estrutural trigonal com a formação de uma ligação covalente entre os átomos de carbono que são separados por uma distância de 1,42 Å. Neste trabalho nós fizemos cálculos de primeiros princípios baseado na teoria funcional da densidade utilizando o método "Full Potential Linear Augmented Planes Waves" (FP-LAPW), inseridos nos códigos computacionais do Wien2k. Na densidade eletrônica temos uma concentração de $2,4 e/\text{Å}^3$ que caracteriza uma ligação covalente. Na densidade de estados observamos que o grafeno tem um gap igual a zero que é característica de um semimetal e que a total contribuição na energia de Fermi é devido à banda p_z . Notamos na estrutura de bandas que a banda de valência e a banda de condução se tocam no ponto de Dirac, onde os elétrons se comportam como uma partícula sem massa.

Palavras-chaves: grafeno, semimetal, estrutura eletrônica.

STUDY OF ELECTRONIC STRUCTURE GRAPHENE

ABSTRACT

Graphene is an allotrope of carbon and stands out for its mechanical, electronic and thermal properties. One of the promising areas of application of this material is in the construction of supercapacitors due to their electronic properties. The grapheme is made of carbon atoms arranged in a hexagonal structure. The sp^2 hybridization between one s orbital and two p orbitals leads to a trigonal planar structure with the formation of a covalent bond between the carbon atoms which are separated by a distance of 1.42 Å. In this work we made first-principles calculations based on density functional theory using the "Full Potential Linear Augmented Planes Waves" (FP-LAPW) method, included in the computational codes Wien2k. In electron density have a concentration of $2.4 e/\text{Å}^3$ featuring a covalent bond. In the density of states observed that graphene has a gapless equal to zero which is characteristic of a semimetal and that the total contribution to the Fermi energy is due to the p_z band. We note that in the structure band the band valence and the band conduction touch at the Dirac point, where electrons behave as a massless particle.

Keywords: graphene, semi-metal, electronic structure.

¹ Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB,
E-mail: alex.s.s_pb@hotmail.com

² Física, Professor. Doutor, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB,
E-mail: lterrazo@ufcg.edu.br *Autor para correspondências.