



16, 17 e 18 de novembro de 2016.  
Campina Grande, Paraíba, Brasil

## ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DA NANOFITA DE GRAFENO POLTRONA

José Robson da Costa Venâncio<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### RESUMO

O grafeno é formado por uma rede bidimensional (2D), é uma forma alotrópica do carbono que desempenha um papel importante, é a base para compreensão das propriedades eletrônicas em outras formas alotrópicas. O grafeno é constituída por uma camada de átomos de carbonos dispostos em uma estrutura hexagonal que lembra um favo de mel. As nanofitas de grafeno são determinadas a partir de cortes de uma folha de grafeno. Estes criam propriedades específicas que resultam no seu surgimento. Dependendo do formato de suas bordas ao longo do comprimento, as nanofitas podem ser classificadas em poltrona ou ziguezague, possuindo características próprias e distintas. Neste trabalho, vamos estudar a nanofita poltrona. Fizemos cálculos de primeiros princípios da estrutura eletrônica do grafeno e da nanofita de grafeno poltrona (12-AGNR), baseado no formalismo da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando o método do Potencial Total de Ondas Planas Linearizadas e Aumentadas (FP-LAPW), inseridos nos códigos computacionais WIEN2k, utilizamos o esquema de supercélula para simular esses dois sistemas. O resultado obtido para o grafeno que apresenta características de um semimetal ou semiconductor de gap nulo e com sistema 12-AGNR é um semiconductor com um gap direto de energia **0,59 eV** no ponto  $\Gamma$  e que concorda muito bem com a literatura.

**Palavras-chave:** DFT, Grafeno, Nanofita de Grafeno.

---

<sup>1</sup>Graduando em Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: robson\_cuite@hotmail.com

<sup>2</sup>Física – UFCG, Professor. Doutor, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



16, 17 e 18 de novembro de 2016.  
Campina Grande, Paraíba, Brasil

## **STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE ARMCHAIR GRAPHENE NANORIBBON**

### **ABSTRACT**

Graphene is formed by a bidimensional lattice (2D) it is an allotropic form of carbon that plays an important role, it is the basis for the understanding of the electronic properties in other allotropes. Graphene consists of a layer of carbon atoms arranged in a hexagonal structure that resembles a honeycomb. The graphene nanoribbons are determined by cutting a graphene sheet. they create specific properties resulting in their onset. Depending on the format of their edges along the length, nanoribbons can be classified into armchair or zigzag, having own distinctive characteristics. In this work, we studied the armchair nanoribbon. We made calculations of first principles the electronic structure of graphene and graphene nanoribbon armchair (12 AGNR) based on the Density Functional Theory formalism (DFT) using the full-Potential Linear Augmented Plane Wave method (FP-LAPW), inserted in WIEN2k computer codes, we use the supercell scheme to simulate these two systems. The result obtained for graphene that has characteristics of a semi-metal or zero gap semiconductor and 12-AGNR system is a semiconductor with a direct band gap energy of **0.59 eV** in  $\Gamma$  point and agree well with the literature.

**Keywords:** DFT, Graphene, nanoribbon graphene.