



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

INVESTIGAÇÃO DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS DA BICAMADA DE GRAFENO INTERCALADO COM O ÁTOMO DE N

Allan K. Muniz Pinto¹, Luis A. Terrazos²

Resumo

No presente trabalho vamos investigar as propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas do sistema da bicamada de grafeno (BLG) intercalado com o átomo de N. Nós aplicamos cálculos de primeiros princípios, baseado na teoria do funcional da densidade (DFT) usando o método Full-Potencial Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW), embutido no código WIEN2k para investigar as propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas desse sistema. O átomo de N é inserido inicialmente no meio entre as monocamadas, depois vai finalmente ser adsorvido por uma das monocamadas de grafeno, resultando em uma diferença de potencial eletrostático entre as duas camadas do grafeno e, em seguida, ocorre a abertura de uma banda de energia proibida cheio de estados de impureza. Os estados quase-localizados ao redor do nível de energia de Fermi introduzidos pelo átomo intercalado podem induzir o magnetismo de Stoner no sistema de N. O momento magnético no sistema N intercalado é essencialmente contribuído por o átomo de N. Além disso a transferência de carga da bicamada de grafeno ao átomo de N resulta no deslocamento da energia de Fermi embaixo da banda de Valência e entanto tem um comportamento metálico.

Palavras chave: bicamada de grafeno; cálculos de primeiros princípios; propriedades eletrônicas.

¹Graduando em Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: allanmuniz.ct@hotmail.com.

²Física – USP, Doutor, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Cuité, PB, E-mail: lterrazos@ufcg.edu.br.



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

FIRST-PRINCIPLES INVESTIGATION OF BILAYER GRAPHENE WITH INTERCALATED N ATOM

ABSTRACT

In this paper we investigate the structural, electronic and magnetic properties of the bilayer graphene system (BLG) intercalated with the N atom. We apply calculations of first principles, based on the density functional theory (DFT) using the Full-potential Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW), embedded in the code WIEN2k to investigate the structural, electronic and magnetic properties this system. The N atom is initially inserted in the middle between the monolayers then will ultimately be adsorbed by one monolayer of graphene, resulting in an electrostatic potential difference between the two graphene layers, and then the opening of a band energy occurs forbidden full of impurity states. The quasilocalized states around the Fermi energy level introduced by intercalated atom can induce of magnetism Stoner in the N system. The magnetic moment at the N intercalated system is mainly contributed by the N atom. Furthermore, the charge transfer from the bilayer graphene to the N atom results in the Fermi energy displacement of below the valence band and yet has a metallic behavior.

Keywords: Bilayer Graphene; First-Principles Calculations; Electronic Properties.