

XXV Congresso de Iniciação Científica da Unicamp

18 a 20 Outubro Campinas | Brasil

25 anos

2017



Efeitos das bordas sobre propriedades eletrônicas do grafeno.

Filipe Pimenta da Silveira*, Ana Luiza C. Pereira

Resumo

Este projeto de iniciação científica envolve modelagem e simulação computacional de propriedades eletrônicas do grafeno através dos efeitos que as bordas do material, em particular do tipo zigzag e armchair, causam nestas propriedades. Tanto desordens na rede cristalina bidimensional do grafeno, quanto bordas, modificam fortemente a distribuição da densidade de carga sobre a rede, levando possivelmente ao processo de localização eletrônica, que tem importantes implicações no transporte eletrônico e no desempenho do material em diferentes aplicações.

Palavras-chave:

Grafeno, simulação computacional, bordas zigzag e armchair.

Introdução

O grafeno é um novo material bidimensional, de apenas um átomo de espessura, que tem sido amplamente estudado devido às suas propriedades excepcionais e suas potenciais aplicações¹⁻². O material consiste em átomos de carbono ligados em uma rede hexagonal¹⁻³. O grafeno é excelente quando trata-se de transporte eletrônico, de modo que configura-se como um forte candidato para aplicações em dispositivos eletrônicos². Entretanto, desordens na rede cristalina, como as causadas pelos efeitos das bordas, influenciam as propriedades eletrônicas e de transporte deste material².

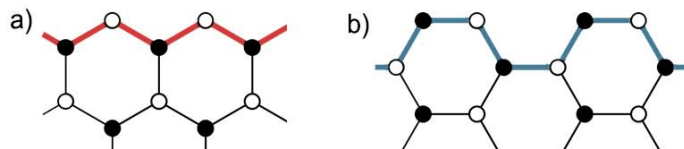


Figura 1. Esquema da rede de grafeno com borda superior da rede hexagonal **a)** do tipo zigzag, destacada em vermelho **b)** do tipo armchair, destacada em azul.

Torna-se interessante então calcular a distribuição de densidade de carga elétrica sobre a rede do grafeno, e conseguir identificar os efeitos de modificações nessa distribuição, devidas à presença de bordas finitas (zigzag ou armchair, conforme mostra a Figura 1) na rede.

Resultados e Discussão

Inicialmente, implementamos as simulações numéricas da densidade de carga eletrônica sobre a rede, considerando-se diferentes tipos de desordem, explorando-se, com maior frequência, as desordens de bordas finitas (zigzag e armchair), através do software MATLAB. As simulações numéricas realizadas envolveram um modelo de rede bidimensional na aproximação *tight-binding*, emulando a cadeia de átomos de carbono de uma rede hexagonal. Com isso, conseguimos calcular o espectro de energia e a densidade de estados, revelando graficamente o efeito de desordens, quando comparado a uma rede perfeitamente ordenada. O modelo de rede utilizado reproduz as diversas geometrias - e bordas - possíveis através de condições de contorno periódicas que podem ser ligadas ou desligadas durante a simulação. Então, as redes com apenas bordas zigzag ou armchair (nanofitas) e com ambas as bordas foram analisadas neste projeto.

Dado o foco nas redes com bordas finitas, entendemos a necessidade de analisar a concentração da distribuição de carga relativa apenas às bordas da rede. Para possibilitar a identificação de quais funções de onda estão concentradas nas bordas foi utilizada uma quantidade nomeada “*Edge Fraction*”³, correspondente à soma de amplitudes de probabilidade da função de onda apenas sobre os sítios atômicos contidos nas bordas da rede. A região é definida por quantidade de átomos (n), próximos à extremidade da rede, considerados na simulação.

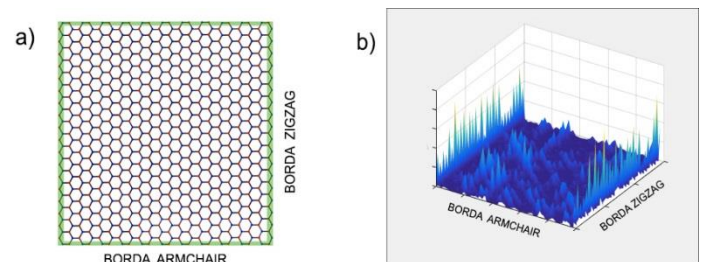


Figura 2. a) Representação dos átomos considerados para o cálculo do *Edge Fraction*³ (faixa verde) na rede de grafeno. Neste caso, a região de borda é dada por $n = 1$ átomo de espessura. **b)** Distribuição da densidade de carga sobre uma rede de grafeno com 3.600 átomos, com concentração maior nas bordas tipo zigzag.

Conclusões

O grafeno apresenta propriedades eletrônicas de enorme interesse para aplicações em dispositivos eletrônicos. Nesse projeto foram desenvolvidas simulações numéricas que permitiram entender o processo de localização eletrônica na rede de grafeno, e também verificar os estados de borda (localizados nas bordas da rede). Implementamos, com eficiência uma ferramenta desenvolvida pelo grupo (*Edge Fraction*³) para analisar estados de borda, identificando ocorrência maior de localização nas bordas zigzag do que no tipo armchair.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pelo apoio financeiro.

¹ K. S. Novoselov *et al.*, “*Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*” *Science* **306**, 666 (2004)

² A. H. Castro Neto, A. K. Geim, *et al.*, “*The electronic properties of graphene*”, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009)

³ Daniel Solis “Efeitos das bordas sobre as propriedades eletrônicas do grafeno no regime Hall quântico” Dissertação de mestrado - IFGW/Unicamp (2015)