

Estados Magnéticos em Nanoflocos de Grafeno Contendo Anti-dots

Herus Teixeira Lopes (bolsista IC/UFPI);

Prof. Dr. Eduardo Girão Costa (Orientador, Departamento de Física – UFPI);

herustlopes@gmail.com.

Introdução

A sociedade anseia por inovações tecnológicas, como dispositivos cada vez menores e mais eficientes. Por consequência, a busca por possíveis substitutos ao silício movimentam a comunidade científica. Hoje estudam-se diversos candidatos a componentes básicos de uma futura eletrônica visando o alcance da escala nanométrica. Entre os diversos novos materiais estudados em Física da Matéria Condensada, pode-se citar o grafeno.

Neste trabalho, são investigadas as propriedades eletrônicas de nano flocos hexagonais de grafeno com borda zig zag com defeitos estruturais compostos de poros. Os poros são constituídos de “furos” triangulares centrais como uma modificação da estrutura. Este estudo utiliza a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para a investigação dos estados eletrônicos dos sistemas estudados, como será descrito adiante.

Revisão de Literatura

De base para este trabalho, observou-se o artigo de Rossier e Palacios, de 2007 [1]. Com isso, observa-se que em estruturas gráficas limitadas em duas dimensões, diferentes propriedades eletrônicas surgem dependendo do seu formato, ou das sub-redes que o compõe. O spin total do estado fundamental está fortemente relacionado à diferença entre o número de átomos que compõe cada sub-rede, como explica o Teorema de Lieb [2].

Além disso, verificou-se o artigo de 2008, dos mesmo autores [3]. Nele, observou-se que a remoção de átomos das sub-redes é outra forma de produzir diferentes propriedades eletrônicas em sistemas de grafeno. As mudanças nas propriedades são diretamente ligadas aos átomos removidos.

Metodologia

A fim de se estudar as propriedades eletrônicas dos nano flocos de grafeno hexagonais com defeitos, utilizou-se o pacote SIESTA. Este programa faz uso da DFT. Este método se baseia nos teoremas de Hohenberg-Kohn [4]. Além disso, a solução do problema eletrônico é possibilitada pelas equações de Kohn-Sham [5].

Resultados e discussão

Neste trabalho foram estudadas as propriedades eletrônicas de nano flocos de grafeno (ou *graphene nanoflakes* - GNFs, do inglês). Os GNFs aqui considerados possuem forma hexagonal com bordas de geometria em zig zag. O primeiro sistema considerado foi um GNF sem defeitos, como indicado na Fig. 1(a). Essa estrutura será identificada como HGNF-5 (do inglês *hexagonal graphene nanoflake*). Neste sistema, o número de átomos na sub-rede A é igual ao da sub-rede B, mostrando uma preferência a estruturas não-magnetizadas, como previsto pelo teorema de Lieb. Em seguida foi considerada uma segunda estrutura a partir da primeira, na qual foi inserido um poro, ou *anti-dot*, de formato triangular, como indicado na Fig. 1(b). Em razão do “furo”, existe um desbalanceamento das sub-redes A e B da estrutura, o que resulta na preferência de um estado com polarização de spin, o qual é aqui designado como ferromagnético. Como este desbalanceamento é de um átomo e como o formato do defeito é triangular, chamaremos esta estrutura de HGNF-5-T1.

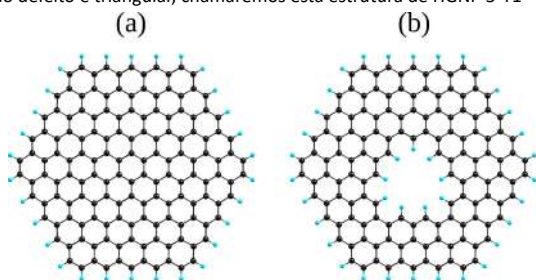


Figura 1: (a) GNF hexagonal com 5 átomos de carbono em cada borda (HGNF-5). (b) GNF hexagonal com um *anti-dot* triangular no centro, promovendo desbalanceamento de um átomo entre as sub-redes A e B da rede do grafeno (HGNF-5-T1). Fonte: HERUS(2018)

Inicialmente foi simulado o sistema HGNF-5 sem polarização de spin (NP, do inglês *non polarized*), resultando nos níveis de energia mostrados na Fig. 2. Observa-se um intervalo de energia (ou *gap HOMO-LUMO*) de cerca de 1.0 eV. Este resultado sugere a ausência de estados de spin polarizado.

De fato, ao realizarmos simulações com polarização de spin atribuindo diferentes distribuições iniciais, como as configurações ferromagnética ou antiferromagnética, o sistema sempre converge para a configuração não-polarizada.

Passa-se agora para a discussão do sistema HGNF-5-T1 na configuração NP. Os níveis de energia para esse estado eletrônico são mostrados na Fig. 3(a). Nota-se a presença de um estado sobre o nível de Fermi. Isso é esperado, devido ao desbalanceamento entre as redes A e B causado pelo poro triangular.

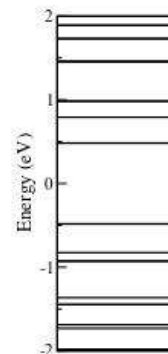


Figura 2: Níveis de energia do HGNF-5 na configuração não-polarizada. Fonte: HERUS(2018)

Em seguida, foram feitos cálculos de configurações com *spin* polarizado. Observa-se apenas uma configuração diferente do caso NP. Essa distribuição eletrônica resulta em um estado de energia 0,06 eV menor que o caso NP. Seus níveis eletrônicos são mostrados na Fig. 3(b). Nota-se a abertura de um gap de 0,24 eV entre o *HOMO* (de *spin-up*) e o *LUMO* (de *spin-down*).

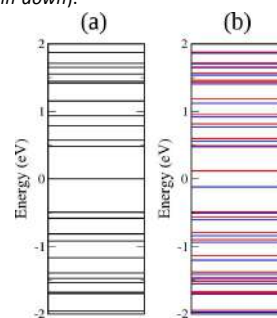


Figura 3: Níveis de energia do sistema HGNF-5-T1 nas configurações (a) NP e (b) FM. Fonte: HERUS(2018)

Na Fig. 4 é mostrado o *plot* de densidade de *spin* do sistema HGNF-5-T1. Observa-se que as três bordas do poro possuem *spins* alinhados, de modo que essa configuração será chamada de ferromagnética (FM). Além disso, a polarização do poro também está alinhada com duas das três bordas mais próximas do *flake*. Percebe-se que há uma maior densidade de spin nas bordas da estrutura que estão mais próximas do *anti-dot*. Esses resultados enfatizam que é o furo na estrutura, causador do desbalanceamento, o responsável pelo surgimento da configuração ferromagnética.

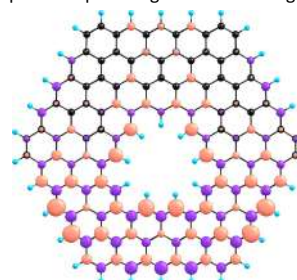


Figura 4: Densidade de spin da estrutura HGNF-5-T1 no estado FM. Fonte: HERUS(2018)

Conclusão

Conclui-se que um floco hexagonal gráfitico de tamanho 5 apresenta uma configuração sem polarização de *spin* quando na ausência de defeitos. Uma vez que é inserido um defeito no floco, surge um estado ferromagnético de *gap* de 0,24 eV.

O gap no floco defeituoso abre possibilidades para a investigação de outras configurações visando a proposta de possíveis dispositivos lógicos baseados no alinhamento de spin de diferentes setores da estrutura.

Assim, nas perspectivas do trabalho, visa-se estudar, por exemplo, um sistema de dois flocos acoplados visando entender como os estados eletrônicos de cada um destes é afetado pelo outro.

Referências

- [1] J. Fernández-Rossier and J. J. Palacios. Magnetism in graphene nanolands. *Physical Review Letters*, 99:177204, 2007.
- [2] E. H. Lieb. Two theorems on the hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 62:1201(1204, Mar 1989.
- [3] J. J. Palacios, J. Fernández-Rossier, and L. Brey. Vacancy-induced magnetism in graphene and graphene ribbons. *Physical Review B*, 77:195428, 2008.
- [4] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Phys. Rev.*, 136:B864(B871, Nov 1964.
- [5] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140:A1133(A1138, Nov 1965.