

Estados magnéticos em nanoflocos de grafeno.

Caio Vitor Teixeira Costa (Departamento de Física - UFPI; bolsista PIBIC/CNPq);

Eduardo Costa Girão (Departamento de Física – UFPI);

caiovitor33@hotmail.com

Introdução

A quantidade de alótropos do carbono – como grafite, diamante, fulereno – e as propriedades particulares que cada um possuía fez com que a química do carbono fosse vista como potencialmente capaz de gerar uma nova geração de dispositivos. Nesse contexto, o grafeno, com sua elevada mobilidade eletrônica[1] e resistência mecânica[1], mostra-se como um dos materiais mais indicados a ocupar o posto hoje pertencente ao Silício. Porém, o grafeno é um semicondutor de *gap* (expressão do inglês relacionado ao espaço entre as bandas de condução e de valência do material) zero[2], e a existência dessa lacuna de energia é fundamental para se controlar o transporte eletrônico[3]. Tendo isso em vista, buscam-se maneiras de se abrir esse *gap* de energia em torno do nível de Fermi, com o objetivo de tornar mais fácil sua integração em dispositivos eletrônicos. As duas estratégias mais usadas pela comunidade científica se baseiam na dopagem e em “cortes” do grafeno ao longo de uma ou de duas de suas direções. A primeira estratégia se baseia na inclusão de impurezas na estrutura do grafeno, como por exemplo substituindo-se átomos de carbono por outros de diferentes elementos, como Boro e Nitrogênio, de forma estratégica. Já o segundo método gera estruturas finitas em uma das dimensões do sistema, chamadas de nanoflocos de grafeno (ou GNFs, do inglês *graphene nanoflakes*) que são subunidades do grafeno com tamanho e geometria limitado nas suas duas dimensões. Essas estruturas apresentam propriedades que dependem da largura da fita e da geometria de suas bordas. Em particular, as GNFs chamam a atenção por ter estados localizados nas bordas, facilitando o estudo por meio de cálculos computacionais de suas propriedades elétricas e magnéticas[4].

Neste trabalho tem-se como objetivo realizar um estudo teórico dos GNFs contendo estados de borda com spin polarizado e descrever as propriedades de diferentes configurações magnéticas.

Metodologia

A mecânica quântica é a ferramenta fundamental para analisarmos as propriedades eletrônicas de um sistema molecular. Assim, neste trabalho, o estudo das estruturas eletrônicas das GNFs foi realizado pela Teoria Funcional da Densidade (DFT). Essa teoria baseia-se nos teoremas de Hohenberg-Kohn e nas equações de Kohn-Sham.

Os cálculos foram executados por meio do pacote computacional SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms). Inicialmente foram consideradas simulações sem polarização de spin. Em seguida, introduziu-se o spin explicitamente nos cálculos, considerando-se diferentes possibilidades para a distribuição de spin, resultando em diferentes estados magnéticos.

Resultados e discussão

Neste trabalho foi escolhida uma geometria específica para o GNF, a saber, um formato de losango. Esta estrutura é mostrada na Fig.1(a) e contém 8 átomos de carbono em cada uma de suas bordas. Por esta razão, este sistema será chamado de LGNF-8 (do inglês *Lozenge Graphene Nanoflake*)

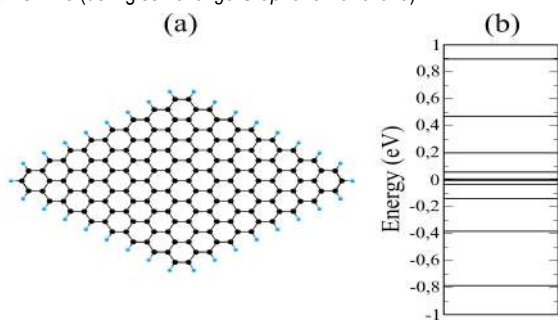


Figura 1: (a) Representação da figura LGNF-8. (b) níveis eletrônicos não polarizados do LGNF-8

Primeiro foi realizado um cálculo sem polarização de spin, configuração chamada de NP (do inglês *non polarized*). Os níveis de energia deste estado estão representados na Fig.1(b). Nota-se a ocorrência de estados eletrônicos sobre o nível de Fermi. A presença desses estados de fronteira sugere a ocorrência de diferentes configurações eletrônicas com spin polarizado. Tais configurações são características de várias estruturas gráficas de borda zigzag, nas quais a polarização de spin se concentra nas bordas. Em seguida, foram realizados cálculos considerando o spin explicitamente, sob diferentes configurações iniciais. Essas configurações iniciais, que se distinguem umas das outras pelos diferentes alinhamentos de spin entre as 4 bordas do sistema, podem ser classificadas como ferromagnéticas, antiferromagnéticas e ferrimagnéticas.

Os cálculos mostram que todas essas configurações constituem estados estáveis do sistema. Na fig.3 mostramos o plot da densidade de spin para todas as configurações possíveis. Note que a polarização de spin se concentra principalmente nas bordas do sistema.

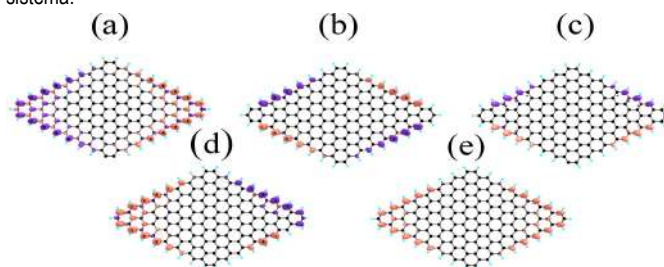


Figura 2: Plot da densidade de spin das diferentes configurações magnéticas. (a) AFM-A, (b) AFM-B, (c) AFM-C, (d) Fim, (e) FM

Os níveis eletrônicos das configurações estudadas estão representadas abaixo:

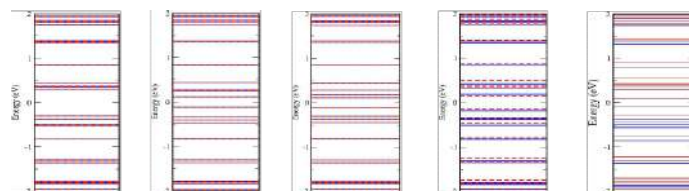


Figura 3: Estados eletrônicos das estruturas de spin polarizado. (a) AFM-A, (b) AFM-B, (c) AFM-C, (d) FIM, (e) FM. As linhas em azul representam os estados com spin up e as vermelhas os estados com spin down

Apesar de possuírem o mesmo número de bordas com spin-up e spin-down, os estados AFM-A, AFM-B e AFM-C possuem diferentes intervalos de energia (ou *gap*) entre o nível ocupado mais alto e o nível desocupado mais baixo. Nesses três casos, observamos que os níveis eletrônicos são todos degenerados com relação ao spin. Já as configurações FIM e FM apresentam níveis de energia diferentes para os estados com spin-up e spin-down. Entretanto, o *gap* no estado FIM é entre dois níveis de spin-down, enquanto no caso FM este *gap* é entre estados de spins opostos.

Conclusão

Por fim, a partir da análise dos valores de energia de cada configuração, tem-se que o estado AFM-A possui um maior grau de estabilidade. Esse índice de estabilidade é referente ao fato de sua energia total representar um valor menor que as energias de outras configurações magnéticas. Nos próximos passos, serão consideradas configurações de dois GNFs empilhados, visando entender como cada floco interfere nas propriedades eletrônicas do outro.

Agradecimento

Agradeço à UFPI e ao CNPq pelo apoio e contribuição no incentivo à pesquisa.

Referências

- [1] E. O. Vilar, J. E. D. Vieira Segundo. Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. *Revista Eletrônica de Materiais e Processos*, 11(2):54–57, 2016.
- [2] KS Novoselov, SV Morozov, TMG Mohinddin, LA Ponomarenko, DC Elias, R Yang, II Barbolina, P Blake, TJ Booth, D Jiang, et al. Electronic properties of graphene. *physica status solidi (b)*, 244(11):4106–4111, 2007.
- [3] A. Geim and K. Novoselov. *Nat.*, 6(2), 2007.
- [4] Daniel Alejandro Solis Lerma et al. Efeitos das bordas sobre as propriedades eletrônicas do grafeno no regime hall quântico. 2015.