



ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DO GRAFENO NA SUPERFÍCIE DE NIQUEL

José Luciano de Brito Silva¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

Na literatura existem muitos trabalhos de grafeno na superfície de metais devido ao interesse tecnológico. Tivemos como objetivo neste trabalho estudar o grafeno na superfície (111) de Níquel na aproximação da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando o método de Full-Potential Linear Augmented Plane Waves (FP-LAPW). Calculamos a densidade eletrônica que mostra a existência de transferência de carga entre o grafeno e o níquel. Na densidade de estados mostramos as contribuições dos átomos de carbono, em energias mais profundas, e níquel atuando próximo a energia de Fermi. Na estrutura de bandas observamos como as bandas do grafeno são alteradas devido o contato com a superfície metálica. Observamos que há a abertura de um pequeno gap de 0,25 eV entre as bandas de valência e de condução no grafeno. A interação entre o grafeno e a superfície de níquel é fraca devido às pequenas alterações sofridas pelo grafeno

Palavras-chave: Grafeno, Níquel, Primeiros Princípios

STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF GRAPHENE ON NICKEL SURFACE

ABSTRACT

In the literature there are many studies of graphene on the metal surfaces due to the technological interest. Our aims in this work are to study graphene on Nickel(111) surface in the approximation of the Density Functional Theory (DFT), using the Full-Potential Linear Augmented Plane Waves (FP-LAPW). We calculate the electron density that shows the existence of charge transfer between graphene and nickel. In the density of states we show the contributions of carbon atoms are in deeper energies, and nickel acting near the Fermi energy. The band structure we observed how bands of graphene are changed due to contact with the metal surface. We note that there is an opening of a small gap of 0.25 eV between the valence bands and conduction bands in graphene. The interaction between graphene and the surface of nickel is weak due to small changes experienced by the graphene

Keywords: Graphene, Nickel, ab-initio

¹Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB, E-mail: brito.luciano912@gmail.com

²Licenciatura em Física, Professor. Doutor, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB, E-mail: lterrazo@ufcg.edu.br