



PIVIC/CNPq/UFPG-2013

## O ESTUDO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA DE COBRE FCC

Alexsandro Silva Santos<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier<sup>2</sup>

### RESUMO

O elemento Cobre é um metal de transição e vem sendo amplamente utilizado na indústria pelas suas características estruturais e eletrônicas é considerado o metal com maior capacidade de conduzir corrente elétrica e calor, após a prata. Por apresentar uma forma cristalina Cúbica de face centrada (FCC) e pela sua capacidade de fazer ligações com outros elementos ele se torna de grande interesse para pesquisas que futuramente podem vir a descobrir novas utilidades para esse excepcional elemento. Neste trabalho nos realizamos cálculo de primeiros princípios das propriedades eletrônicas e estruturais de Cobre, utilizando o método "Full Potential Linearized Augmented Planes Waves"(FP-LAPW), baseado no formalismo Teoria Funcional da Densidade (DFT) implementado nos códigos computacionais WIEN2k. A densidade de estados e a estrutura de bandas mostram que o Cobre é um metal e a densidade eletrônica nos mostra uma ligação metálica.

**Palavras-chaves:** Cobre, metal, primeiros princípios.

## THE STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF COPPER FCC

### ABSTRACT

The element copper is a transition metal and has been widely used in the industry for its structural and an electronic characteristic is considered the metal with greater ability to conduct electrical current and heat, after silver. By presenting a crystalline form face centered cubic (FCC) and their ability to make connections with other elements it becomes of great interest for future research that may come to find new uses for this exceptional element. In this work we perform first-principles calculations of the electronic and structural properties of copper, using the "Full Potential Linearized Augmented Planes Waves" (FP-LAPW) method and based on Density Functional Theory (DFT) formalism implemented in the computer code WIEN2k. A density of states and the band structure shows that copper is a metal and the electron density shows a metallic bond.

**Keywords:** copper, metal, ab initio

<sup>1</sup> Aluno do Curso de Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB,  
E-mail: alex.s.s\_pb@hotmail.com

<sup>2</sup> Física, Professor. Doutor, Unidade Acadêmica de Educação, UFPG, Cuité, PB,  
E-mail: lterrazo@ufcg.edu.br \*Autor para correspondências.