

ESTADOS LOCALIZADOS NA INTERFACE ENTRE UMA JUNÇÃO P-N E UMA BORDA ZIGZAG DE GRAFENO.

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Brehmer Braga Bernardo, Joao Milton Pereira Junior

O grande interesse no estudo do grafeno, assim como de outros materiais 2d é justificado pelas suas propriedades incomuns, assim como pela possibilidade do seu uso em novos dispositivos eletrônicos. Um dos problemas ainda encontradas para a aplicação do grafeno em sistemas lógicos é a dificuldade de se confinar elétrons em pequenas regiões desse material. Diversas abordagens já foram propostas para se resolver esse problema, tal como o uso de nanofitas e vacâncias. Por outro lado, a presença de cortes em folhas de grafeno leva por sua vez a novos efeitos, tais como estados de bordas (isto é, estado eletrônicos nos quais a densidade de probabilidade é concentrada na vizinhança da terminação da folha) e polarização de spin nas bordas. Neste trabalho investigamos uma maneira de se obter estados confinados em 0 dimensões nas bordas de um fragmento de grafeno (nanoflake). O sistema considerado consiste de uma amostra retangular de grafeno contendo tanto bordas armchair como zigzag, sobre o qual é estabelecido um potencial em parte do sistema (isto é, uma junção p-n através da amostra). Sabe-se que a presença de uma junção p-n em um nanoflake de grafeno pode gerar estados altamente localizados na interface entre a junção e uma borda zigzag. Neste trabalho estudamos especificamente o efeito da orientação da junção em relação à rede cristalina sobre a localização desses estados. Resultados numéricos são obtidos utilizando-se o modelo tight-binding e a junção p-n é introduzida alterando-se a energia on-site do modelo na região de maior potencial.

Palavras-chave: grafeno. nano-flake. tight-binding. junção p-n.