

Estudo da estabilidade estrutural e distribuição de cargas dos grafinos I-V via simulação computacional

G. F. Campos^a, A. B. Moraes^a e F. Sato^a

a) Grupo de Física da Matéria Condensada, Departamento de Física, ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora

Resumo

Assim como o grafeno, um material que ganhou grande atenção por suas propriedades únicas e notórias, o grafino também é uma forma cristalina do carbono 2D que, embora seja ainda um material teórico, mostra perspectivas de apresentar propriedades também muito interessantes e inovadoras para diversas aplicações. O objetivo deste trabalho é avaliar, através de simulação computacional, a estabilidade estrutural de alguns alótropos monocamadas de grafino. Os alótropos investigados têm de 1 a 5 carbinos ligando cada par de anéis benzênicos ao longo do cristal. Para cada alótropo, utilizamos um fragmento de grafino cristalino que representa uma unidade repetidora completa, e para cada fragmento, consideramos duas versões diferentes de estrutura. Através de simulações de otimização, buscamos arranjos mais estáveis dessas estruturas. E sobre as versões otimizadas obtidas, avaliamos suas estabilidades através do valor de energia do estado fundamental e através da distribuição de cargas na estrutura — ambos os dados foram obtidos também através de simulações. Para tal estudo, foi usado o pacote computacional DFTB+, uma implementação do método quântico computacional semi-empírico *Density Functional Tight Binding* (DFTB), que usa uma aproximação da equação de energia total de Kohn-Sham, da Teoria do Funcional de Densidade (DFT), para fazer os cálculos de energia.