



E0422

REPRESENTAÇÃO GRÁFICA DAS DENSIDADES DE CARGA ELÉTRICA EM MONO E BICAMADAS DE GRAFENO

Marília Aparecida Rodrigues Pavani (Bolsista PIBIC/CNPq) e Profa. Dra. Ana Luiza Cardoso Pereira (Orientadora), Faculdade de Ciências Aplicadas da Unicamp - Limeira - FCA, UNICAMP

O grafeno é um material bidimensional, que consiste de única camada de átomos de carbono ligados numa rede hexagonal e apresenta altíssimas mobilidades eletrônicas mesmo à temperatura ambiente, se tornando um forte candidato para substituir o silício em nano-dispositivos eletrônicos. O grupo de pesquisas onde este projeto de Iniciação Científica está sendo desenvolvido tem investigado, através de simulações numéricas, como as propriedades eletrônicas de grafeno são afetadas por diferentes geometrias da folha de grafeno, por diferentes tipos de terminação atômica nas bordas e pela desordem na rede cristalina do grafeno. O projeto tem como objetivo o aprimoramento das imagens e representações gráficas das distribuições de densidades de carga eletrônica calculadas para mono e bicamadas de grafeno. Foram explorados diversos programas para gerar essas imagens das densidades de cargas, como Origin 8.0, Mathematica 6, MatLab e Octave, sendo que este último forneceu excelentes recursos gráficos, além de ser interessante por ser uma versão gratuita semelhante ao MatLab. Com isso, conseguiu-se o aperfeiçoamento das imagens desejado, usando recursos até então não explorados, que contribuíram de forma importante para a visualização e interpretação dos dados fornecidos pelas simulações.

Grafeno - Densidade de carga - Simulações numéricas