

Explorando Nanofitas de Phagrafeno: Um Estudo de Propriedades Eletrônicas via Teoria do Funcional da Densidade (DFT)

Cássia Débora Silva Semeão¹; Ariana Cristina Santos Muniz²; Mateus Silva Rêgo³; Anderson Gomes Vieira⁴

Estudante do curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal do Maranhão – IFMA, Cássia Débora Silva Semeão, e-mail: cassiasemeao@acad.ifma.edu.br¹

Estudante do curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal do Maranhão – IFMA, Ariana Cristina Santos Muniz, e-mail: a.muniz@acad.ifma.edu.br²

Professor da Universidade Federal do Piauí – UFPI, Mateus Silva Rêgo, e-mail: mateusgto@msn.com³

Professor do Instituto Federal do Maranhão – IFMA, Orientador Me Anderson Gomes Vieira, e-mail: anderson.gomesvieira@ifma.edu.br⁴

Resumo

Este trabalho apresenta um estudo sobre as propriedades eletrônicas de nanofitas de phagrafeno por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). O phagrafeno, um alótropo do carbono proposto em 2015, destaca-se pela presença de anéis 5-6-7 e por seus cones de Dirac distorcidos, que conferem comportamento eletrônico anisotrópico. A pesquisa foi realizada a partir de modelagem computacional com o código SIESTA, avaliando diferentes geometrias de borda (armchair e zigzag) e larguras de nanofitas. Os resultados indicam que as nanofitas armchair apresentam caráter metálico em todas as larguras analisadas, enquanto as zigzag exibem uma transição de semicondutor (em larguras reduzidas) para metálico (em maiores dimensões). Esses achados reforçam o potencial do phagrafeno para aplicações em nanoeletrônica e optoeletrônica, onde o controle do band gap é um fator crítico.

Palavras-chave: Carbono; Grafeno; Phagrafeno; Propriedades eletrônicas; Nanofitas.

Financiamento: Instituto Federal do Maranhão – IFMA, Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC

1. Introdução

Os materiais bidimensionais (2D) têm se destacado na ciência dos materiais devido às suas propriedades eletrônicas, mecânicas e térmicas excepcionais. Entre eles, o grafeno se

tornou referência por apresentar alta condutividade elétrica, mobilidade eletrônica superior e estabilidade estrutural, sendo promissor para aplicações em eletrônica, sensores e dispositivos optoeletrônicos. Contudo, a ausência de band gap no grafeno limita sua utilização em componentes eletrônicos que exigem controle preciso do fluxo de corrente, como transistores. Nesse contexto, o phagrafeno, um alótropo teórico proposto em 2015, surge como alternativa promissora. Diferentemente do grafeno, o phagrafeno apresenta cones de Dirac inclinados, permitindo anisotropia eletrônica e potencial modulação do band gap, características que podem viabilizar seu uso em nanoeletrônica e spintrônica. O presente estudo visa investigar o comportamento eletrônico de nanofitas de phagrafeno, com foco na análise de suas propriedades eletrônicas e na identificação de condições que permitam a modulação da condutividade. A compreensão desses aspectos é essencial para avaliar a aplicabilidade do phagrafeno em dispositivos eletrônicos avançados, contribuindo para o avanço do conhecimento sobre materiais 2D e suas potenciais aplicações tecnológicas.

2. Objetivos

Objetivo geral: Calcular a estrutura de bandas de Nanofitas de Phagrafeno considerando diferentes larguras e topologias de bordas, utilizando o método *DFT*.

Objetivos específicos:

- Analisar e descrever os fenômenos quânticos que determinam as propriedades eletrônicas das estruturas que serão estudadas.
- Conhecer o contexto histórico de desenvolvimento do estudo do surgimento de materiais alótropos de carbono (Fulereno, Grafeno e Nanotubos de Carbono);
- Entender o desenvolvimento de escrita de um arquivo de dados de entrada para realização de cálculos via DFT;
- Obter a familiaridade com o método DFT como meio de descrição da estrutura eletrônica de sistemas cristalinos e moleculares;
- Descrever e analisar as propriedades eletrônicas provenientes dos cálculos obtidos da metodologia DFT.

3. Metodologia

O presente estudo foi conduzido por meio de simulações computacionais fundamentadas na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), uma abordagem amplamente utilizada para investigar propriedades eletrônicas de materiais em nível quântico. As simulações foram realizadas utilizando o pacote computacional SIESTA, que permite o cálculo preciso de propriedades estruturais e eletrônicas de sistemas periódicos e finitos. Para a análise, foram construídas células unitárias de phagrafeno com base em dados estruturais previamente reportados na literatura, garantindo a fidelidade do modelo em relação à configuração atômica teórica do material. A partir dessas células, nanofitas de diferentes larguras foram geradas para investigar efeitos de confinamento quântico sobre suas propriedades eletrônicas. Foram consideradas duas topologias de borda, armchair e zigzag, pois essas influenciam significativamente a dispersão de elétrons e a abertura de band gap em nanofitas bidimensionais. As condições periódicas de contorno foram aplicadas para simular a repetição infinita do material ao longo da direção longitudinal das nanofitas, enquanto a direção transversal foi tratada de forma a manter as bordas livres, permitindo a observação de efeitos de borda característicos. Foram calculadas propriedades eletrônicas fundamentais, incluindo a estrutura de bandas e a densidade de estados (DOS), com o objetivo de analisar a mobilidade eletrônica, a presença de cones de Dirac inclinados e a possibilidade de modulação do band gap em função da largura e da geometria das bordas. Essa metodologia possibilita compreender de forma detalhada o comportamento eletrônico das nanofitas de phagrafeno, fornecendo subsídios teóricos para sua aplicabilidade em dispositivos nanoeletrônicos avançados.

4. Resultados e Discussão

Os resultados obtidos a partir das simulações computacionais confirmaram a presença de cones de Dirac inclinados no phagrafeno bidimensional, evidenciando a anisotropia eletrônica característica deste alótropo. A análise das nanofitas de phagrafeno revelou que a geometria das bordas e a largura da fita exercem influência significativa sobre suas propriedades eletrônicas. Para as nanofitas com borda armchair, observou-se comportamento metálico em todas as larguras estudadas, indicando ausência de abertura de band gap mesmo sob confinamento quântico. Esse comportamento sugere que tais nanofitas podem manter alta condutividade elétrica, sendo adequadas para aplicações que requerem transporte eletrônico eficiente. Já as nanofitas com borda zigzag apresentaram características mais complexas. Em larguras reduzidas, aproximadamente 8,9 Å, foi detectado um pequeno band gap, conferindo comportamento semicondutor ao material. Esse resultado é consistente com o efeito de confinamento quântico, no qual a redução da largura intensifica a influência das bordas sobre a estrutura eletrônica. Para larguras maiores, superiores a 16,9 Å, o material apresentou caráter metálico, evidenciando a tendência do phagrafeno a recuperar a condutividade do plano bidimensional à medida que a fita se alarga. Esses achados corroboram estudos prévios reportados na literatura (Wang et

al., 2015; Liu et al., 2016), reforçando a potencialidade do phagrafeno para aplicações em dispositivos onde a engenharia de band gap é essencial, como transistores, sensores e componentes optoeletrônicos. Além disso, os resultados indicam que o controle da largura e da topologia das bordas pode ser uma estratégia eficaz para modular propriedades eletrônicas, abrindo caminho para o desenvolvimento de nanoestruturas eletrônicas customizáveis.

Figura 1: Estrutura de bandas eletrônicas e densidade de estados (DOS) do phagrafeno obtidas via DFT.

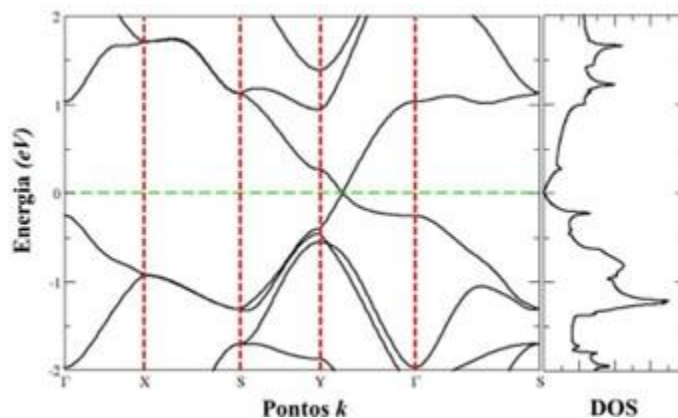


Figura 2: Estrutura de bandas das nanofitas de phagrafeno com bordas armchair para larguras $n = 1$, $n = 2$ e $n = 3$.

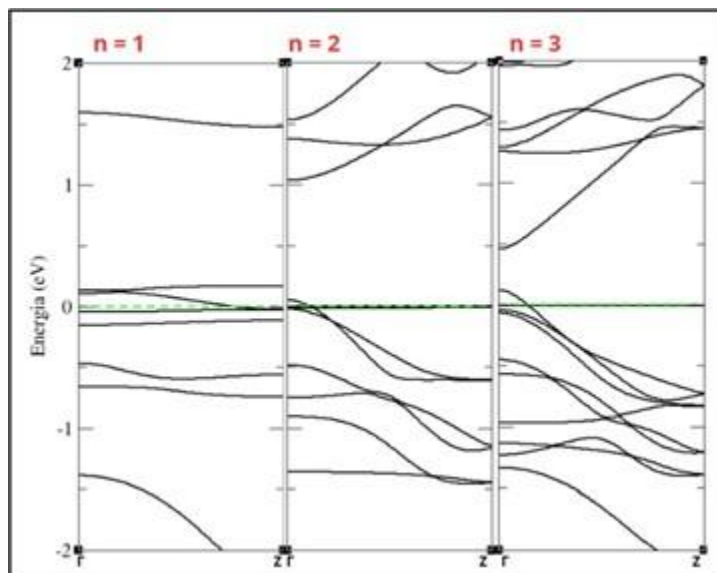
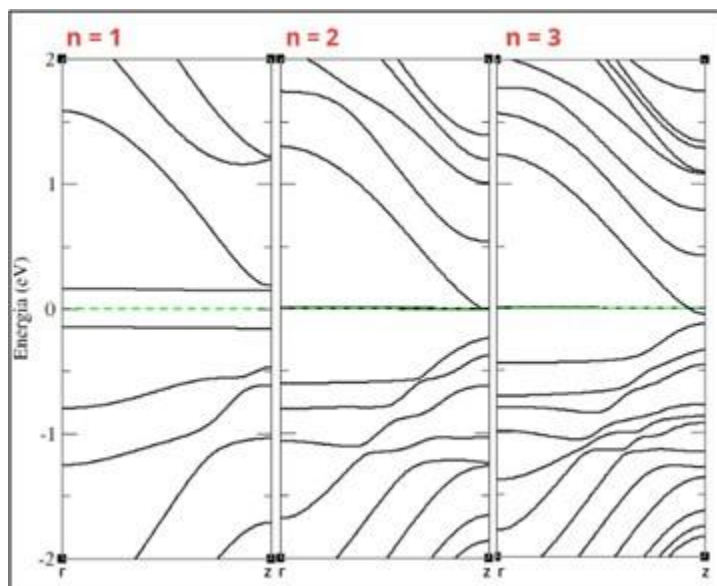


Figura 3: Estrutura de bandas das nanofitas de phagrafeno com bordas zigzag para larguras:(a) $n = 1$, (b) $n = 2$ e (c) $n = 3$.



5. Considerações Finais

A partir das simulações computacionais realizadas neste estudo, conclui-se que o phagrafeno apresenta propriedades eletrônicas altamente dependentes da largura e da geometria das bordas de suas nanofitas. As nanofitas com borda armchair mantêm comportamento metálico independente da largura, enquanto as nanofitas zigzag exibem comportamento semiconductor em larguras reduzidas, devido à abertura de um pequeno band gap, e metálico em larguras maiores. Esse controle sobre as propriedades eletrônicas evidencia o potencial do phagrafeno como alternativa promissora ao grafeno em aplicações que exigem modulação de band gap, como transistores, sensores e dispositivos optoeletrônicos. Além disso, os resultados indicam que a engenharia de bordas e o ajuste da largura das nanofitas são estratégias eficazes para modular a condutividade e a dispersão eletrônica do material. Essas características tornam o phagrafeno particularmente atrativo para a nanoeletrônica, onde a precisão no controle do fluxo de elétrons é fundamental, bem como para aplicações em fotônica e spintrônica, onde a anisotropia eletrônica pode ser explorada. Tais estudos são essenciais para viabilizar a implementação prática do phagrafeno em dispositivos avançados, consolidando seu papel como um material bidimensional versátil e tecnologicamente relevante.

Agradecimentos

Agradeço ao IFMA/PRPGI pela bolsa e oportunidade, ao IFMA e à UFPI pelo apoio institucional, e ao Grupo de Física Computacional em Nanomateriais (GFCN) pelo auxílio técnico e científico que tornou possível a realização deste trabalho.

Referências

- WANG, Z. et al. Phagraphene: a low-energy graphene allotrope composed of 5-6-7 carbon rings with distorted Dirac cones. *Nano Letters*, v. 15, n. 9, p. 6182-6186, 2015.
- LIU, Y. et al. Two-dimensional phagraphene: structural, electronic, and mechanical properties. *Carbon*, 2020.
- NOVOSELOV, K. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, v. 306, n. 5696, p. 666-669, 2004.
- PISANI, L. et al. Electronic structure of graphene nanoribbons. *Physical Review B*, v. 75, p. 195-202, 2007.