

Figura 5.10: Vista superior dos planos de grafeno e *h*-BN dispostos em arranjo turbostrático ( $30^\circ$ ). Em (a) a rede de cor verde (laranja) representa o grafeno (*h*-BN). Em (b) a representação da supercélula  $7 \times 7$  da rede de grafeno (verde) e do *h*-BN (amarelo e magenta). Em (c) a orientação da célula periódica turbostrática  $7 \times 7$  do *h*-BN/grafeno nas redes.

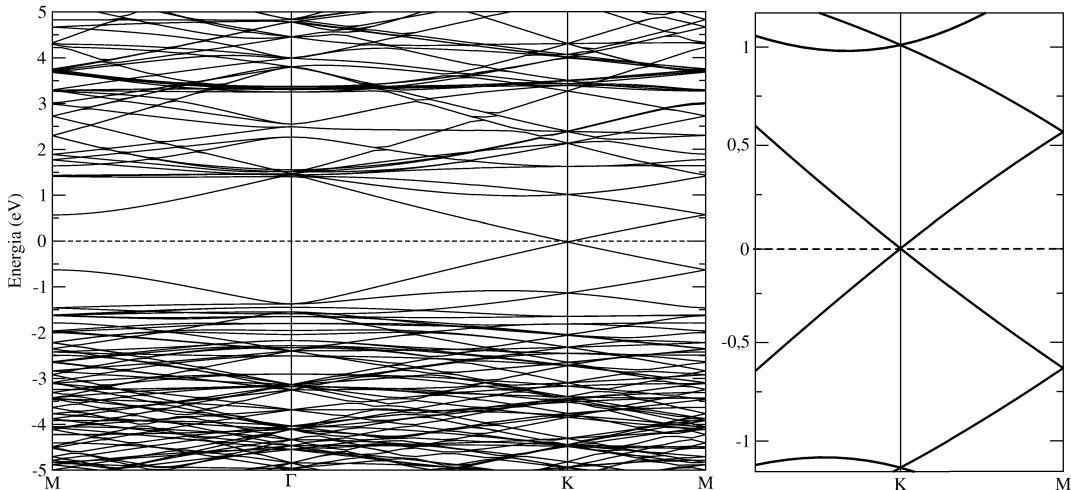


Figura 5.11: Estrutura de bandas da monocamada de *h*-BN/grafeno turbostrático. A esquerda a região do ponto de Dirac ampliada. O zero na energia é o nível de Fermi.

No sistema de monocamadas de *h*-BN e grafeno suspensas no vácuo, MC-(*h*-BN/grafeno)-2D, com arranjo turbostrático, os níveis  $2p$  do grafeno não quebram como ocorre no empilhamento regular das folhas. A disposição turbostrática de  $30^\circ$  posiciona os átomos das redes de maneira a diminuir a interação entre os níveis  $2p$  dos átomos B, N e C. Desta forma os estados  $2p$  do grafeno não sofrem as modificações que resultam o *gap* no empilhamento regular das redes.

Em suma, do ponto de vista de estabilidade energética, nossos cálculos mostram que as heteroestruturas que estudamos são possíveis. Vimos também que as heteroestruturas de ZnO e AlN não modificam a simetria do grafeno em torno do ponto  $k$ . No SiC, vimos que a interação entre os estados do Si e C do semicondutor e da folha desfaz a simetria de Dirac no ponto  $k$  da estrutura de bandas do grafeno. O *h*-BN adsorvido em grafeno abre um gap na ordem de *meV* contudo, na disposição turbostrática (*h*-BN/grafeno), nossos cálculos mostraram que a simetria original do grafeno no ponto  $k$  se mantém. A Tabela 5.2, apresenta os principais dados estruturais das monocamadas dos semicondutores hexagonais planos adsorvidos em folha de grafeno. Note que sistemas foram calculados suspensos no vácuo. As estruturas de duplacamadas suspensas no vácuo e as estruturas intercaladas (semicondutor/grafeno) periodicamente em  $z$ , sendo também compostas com mono e duplacamada do semicondutor plano, apresentam aproximadamente os mesmos valores informados na tabela.

Tabela 5.2: Dados estruturais das monocamadas de semicondutores adsorvidas em grafeno.

	ZnO	AlN	SiC	<i>h</i> -BN (turbostrático)
Energia de adsorção	-0,13 eV/par(ZnO)	-0,20 eV/par(AlN)	-0,08 eV/par(SiC)	-0,06 eV/par(h-BN)
Parâmetro de Rede Teórico	3,257 Å	3,075 Å	3,080 Å	2,481 Å
Planicidade: Max- $\Delta z$	Zn-O:0,095 ; C-C:0,103 Å	Al-N:0,097 ; C-C:0,213 Å	Si-C:0,08 ; C-C:0,194 Å	N-N:0,011 ; C-C:0,004 Å
Distância média semicondutor/grafeno	2,995 Å	3,248 Å	3,405 Å	3,274 Å
<i>mismatch</i> das redes	(3x4)ZnO/C: 0,70%	(4x5)AlN/C: 0,0%	(4x5)SiC/C: 0,16%	(7x7)BN/C: 0,84%

## 6 Conclusão

*"Existem muitas hipóteses em ciência que estão erradas. Isso é perfeitamente aceitável, elas são a abertura para achar as que estão certas."*

Carl Sagan

As investigações (*ab initio*) que realizamos nessa tese contribuem com esclarecimentos das propriedades eletrônicas, magnéticas e estruturais de materiais confinados (2D) em situações ainda até então não estudadas como o caso das interfaces planas metal-semicondutor e semicondutor-semicondutor bidimensionais. A dopagem das estruturas estudadas com os metais de transição apontou que o Fe substitucional ao Zn na rede resulta em sistemas antiferromagnéticos. Contudo, podemos obter um acoplamento ferromagnético para o Fe (e os demais metais de transição investigados) se diminuirmos a distância em décimos de Å entre as impurezas. Esse resultado pode ter aplicações tecnológicas interessantes, como variar o estado magnético local com a aplicação de tensões direcionais no material. Os estados dos substratos devido a adsorção das folhas de  $ZnO$  dopadas com Fe na superfície semicondutora  $Si(111)$ , em superfície de grafite, em grafeno não interferiram substancialmente na estabilidade do acoplamento antiferromagnético do acoplamento Fe-Fe.

No caso dos dopantes  $Co_{Zn}$ , nossos cálculos mostraram que a inclusão de uma segunda camada de  $ZnO$ -2D causou uma inversão no acoplamento magnético de ferromagnético para antiferromagnético. Sabemos que este fato se dá devido ao mecanismo de *superexchange* mediado pelos átomos de oxigênio das folhas de  $ZnO$ . Esse fato é comprovado pelo abaixamento da estabilidade do acoplamento ferromagnético de todos os metais de transição que doparam os sistemas com duplacamada de  $ZnO$ . Com impurezas de Co em monocamadas de  $ZnO$ -2D suspensas no vácuo, observa-se que o acoplamento magnético Co-Co é ferromagnético. De outro modo, quando a monocamada  $ZnO$ -2D é adsorvida na superfície metálica  $Ag(111)$ , os estados metálicos favorecem o acoplamento antiferromagnético das impurezas. O  $ZnO$ -2D adsorvido na superfície reconstruída semicondutora de Si,  $Si(111)7\times7$ , volta a apresentar um acoplamento ferromagnético Co-Co. A estabilidade desse acoplamento aumenta consideravelmente na ad-

sorção do  $ZnO$  em  $Si(111)$  não reconstruída, devido a interação Si-O, que diminui o efeito de *superexchange* provindo do oxigênio nos metais de transição. Na adsorção das folhas de  $ZnO$  nas superfícies de grafite e grafeno, assim como nos acoplamentos Fe-Fe, nossos cálculos mostraram que os estados do carbono não modificou consideravelmente, as energias  $E^{FM}$ - $E^{AFM}$  dos acoplamentos Co-Co comparados ao mesmo acoplamento no sistema  $ZnO$ - $2D$  suspenso no vácuo.

Para as impurezas de níquel,  $Ni_{Zn}$ , nossos cálculos mostraram que a presença da monocamada de  $ZnO$  aumenta a estabilidade *FM* do acoplamento Ni-Ni comparado aos dímero Ni-Ni no vácuo. Com a adsorção das folhas de  $ZnO$  em superfície metálica  $Ag(111)$  observamos que a estabilidade diminui, contudo o sistema ainda se mantém ferromagnético. A maior redução da estabilidade magnética no acoplamento Ni-Ni foi observada no sistema adsorvido na superfície semicondutora  $Si(111)$ . A maior estabilidade do acoplamento Ni-Ni foi observada no sistema  $ZnO$ - $2D$  adsorvido em superfície de grafite e grafeno. Aqui o acoplamento é ferromagnético com energias  $E^{FM}$ - $E^{AFM}$  cerca de 2x maior que no dímero Ni-Ni livre no vácuo.

Nosso estudo das propriedades das heteroestruturas bidimensionais de semicondutores tipo-grafite adsorvido em grafeno mostraram resultados igualmente interessantes para futuras possibilidades de aplicação na tecnologia envolvendo esse material. Para os sistemas de mono e duplacamadas dos semicondutores  $ZnO$  e  $AlN$  planos tipo-grafite adsorvidos em grafeno, encontramos uma interação onde a estrutura permanesse plana podendo assim ser constituídas por *waffles* de semicondutor/grafeno preservando a simetria do grafeno em torno do ponto K. Esse resultado mostra que a arquitetura de heteroestruturas formadas por empilhamentos de grafeno e semicondutores com a manutenção das propriedades de interesse do grafeno é possível. Para a heteroestrutura formada pela adsorção so  $SiC$  em grafeno, nossos cálculos mostraram que as interações do carbono da folha de grafeno com o carbono do semicondutor quebra a simetria do material na região em torno do ponto K, desconstruindo o cone de dirac.

No caso das folhas de *h*-BN adsorvidas em grafeno nossos resultados mostraram, para um empilhamento regular, do BN/grafeno ocorre uma abertura de gap na ordem de *meV* no ponto k. No entanto ao combinarmos turbostraticamente o BN com o grafeno observamos a manutenção do cone de Dirac. As redes *h*-BN e  $C_{grafeno}$  são bastante semelhantes, e assim como o grafite não apresenta as propriedades do grafeno, aqui também esperávamos uma quebra da simetria do grafeno devido aos estados do BN. A disposição turbostrática foi então uma maneira de alterar a interação desses estados de forma a anular a quebra da simetria do grafeno.

Finalmente, esperamos que este trabalho contribuido com o avançodo conhecimento do comportamento magnético de metais de transição em sistemas confinados bidimensionalmente

mais realísticos, já que nossa investigação levou em conta os substratos onde as folhas de ZnO são adsorvidas. Observamos um comportamento interessante do níquel nesses sistemas mostrando uma robustez no acoplamento ferromagnético. O estudo da interface dos semicondutores 2D tipo-grafite com o grafeno nos mostrou quais compostos não alteram a estrutura eletrônica dos estados do grafeno próximos ao nível de Fermi. O trabalho nos levou a novas perspectivas de pesquisa desses materiais como investigações das propriedades magnéticas e eletrônicas de metais de transição dopados nas heteroestruturas (semicondutor-grafeno). Acreditamos também que o conteúdo aqui apresentado possa contribuir com novas ideias na engenharia de materiais nanoestruturados com aplicações de interesse tecnológico.

# ***APÊNDICE A – Amorfização das folhas de ZnO em superfície de Si(111)5x5: Teste do acoplamento magnético do cobalto Co<sub>Zn</sub>***

Estudamos aqui as propriedades magnéticas do sistema confinado  $ZnO$ -2D adsorvido em um substrato semicondutor,  $Si(111)$ . Para isso, primeiramente buscamos uma interface plana entre os sistemas. Já dizemos anteriormente que as interfaces nestes filmes finos de  $ZnO$  e  $Si$  não são geralmente planas (KU et al., 2010; LEE; SON, 2012; WONG et al., 2012). Primeiramente calculamos (capítulo 3) a interação entre folhas de  $ZnO$  e  $Si(111)5x5$  onde encontramos o melhor *mismatch*. Contudo, neste sistema, ocorre uma forte interação do óxido  $ZnO$  com o semicondutor  $Si$  amorfizando a folha de  $ZnO$ . Calculamos o magnetismo de  $Co_{Zn}$  nesse sistema e encontramos forte estabilização *FM*. Ao relaxarmos o sistema onde folhas planas de  $ZnO$  interagem com a superfície não reconstruída de  $Si(111)5x5$ , observamos uma amorfização das camadas do  $ZnO$  e a descontinuidade da periodicidade e forma das folhas planas do óxido. Assim podemos explicar porque é difícil crescer filmes de  $ZnO$  em superfícies de  $Si$ . Contudo, a fim de estudar o magnetismo dos dopantes nesse sistema, consideramos as impurezas magnéticas  $Co_{Zn}$ . Devido as fortes relaxações da monocamada de  $ZnO$  na superfície de  $Si(111)5x5$ , observamos que há preferências mais acentuadas para as impurezas de  $Co$  em alguns sítios de  $Zn$ .

Desse modo, calculamos a energia total para vários sítios de  $Zn$ . Como podemos ver na Tabela A.1, a energia a variação da energia total entre os sítios de  $Zn$  não equivalentes alcança valores acima de 0,5 eV. Como os átomos de  $O$  interagem fortemente com substrato de  $Si$ , o número de coordenação do  $Co$  varia de 2 a 4 ligações. Em algumas posições do  $Co_{Zn}$ , ao lado de ligações  $Co-O$ , há também ligações  $Co-Si$ . A diferença de energia total do sistema considerando diversas posições dos  $Co_{Zn}$  estão apresentadas na Tabela A.1 e esquematizadas na figura A.1. Da tabela, vemos que os sítios não equivalentes  $Co_{Zn}$  induzem uma variação do momento magnético total, de 2,5 a 3,6  $\mu_B$  por impureza de  $Co$ .

Tabela A.1: Energia total do sistema em relação ao sítio mais estável(em  $eV$ ), momento magnético total (em magnetons de Bohr) para  $Co_{Zn}$  na monocamada de  $ZnO$  adsorvida em superfície de  $Si(111)5 \times 5$ . As indicações dos sítios estão esquematizadas na Figura A.1.

$\Delta E_T$	Magnetizao	$Co_{Zn}$ posição
0.000	3.62	I
0.063	2.50	C
0.148	3.12	B
0.375	3.37	D
0.422	3.40	H
0.430	3.29	A
0.445	2.86	L
0.469	3.09	K
0.508	3.04	J
0.516	3.20	F
0.516	3.27	E
0.523	3.17	G

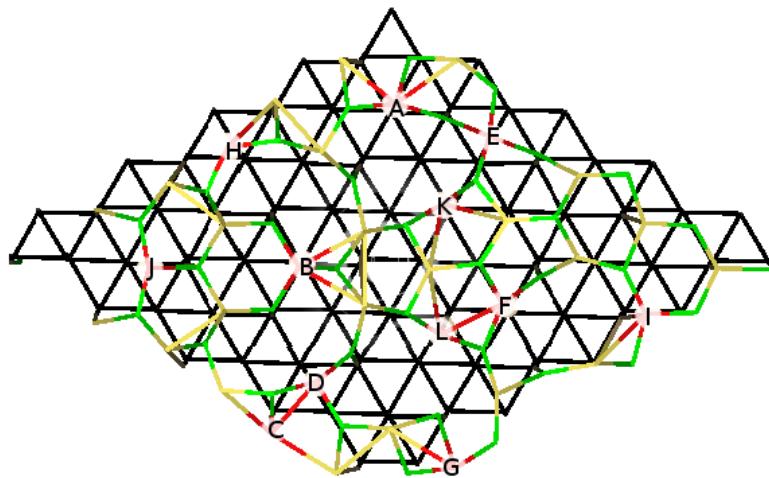


Figura A.1: Vista superior da representação esquemática da geometria atômica de  $Co$  dopante em monocamada de  $ZnO$  adsorvida em superfície  $Si(111)5 \times 5$ . As indicações são dos sítios de  $Co$  referidos na Tabela A.1

Escolhemos as posições mais estáveis das impurezas individuais  $Co_{Zn}$  e fixamos pares vizinhos de impurezas de  $Co$ . Como podemos observar na tabela A.2, todas configurações  $Co-Co$  apresentam acoplamento  $FM$ . Devido a forte relaxação da folha de  $ZnO$ , a estabilização do ordenamento magnético  $FM$  depende dos sítios dos  $MT$ . Por isso, verificamos também intensas variações na diferença de energia  $E^{FM} - E^{AFM}$ .

Na mesma tabela, vemos que a estabilização  $FM$  independe tanto da distância  $Co-Co$  como da energia total do sistema. Interessante notar que para alguns sítios, a preferência para estabilidade  $FM$  é muito alta, chegando a valores maiores que 1  $eV$ . A presença do substrato de

*Si* aumenta a estabilidade do acoplamento *FM*, que em alguns casos é maior comparado a folha suspensa no vácuo, *ZnO-MC* dopada com impureza de *Co* (-320 eV, ver tabela 4.3).

Tabela A.2: Energia total relativa (em eV), momento magnético total (em magneto de Bohr), diferença de energia entre os acoplamentos *FM* e *AFM* (em *meV*), e a distância *Co-Co* (em Å), para uma monocamada de *ZnO* adsorvida em superfície de *Si(111)5x5*.

$\Delta E_T$	Magnetizao	$E^{FM-AFM}$	$d_{Co-Co}$
0.00	5.21	-161.37	2.64
0.05	6.25	-1002.71	2.36
0.14	4.71	-157.75	2.68
0.21	6.66	-1285.91	3.42
0.35	5.95	-618.97	2.88
0.42	5.65	-314.96	2.66
0.45	5.73	-268.50	3.23
0.54	4.64	-263.10	2.68
0.63	6.53	-1224.34	3.57
0.67	6.42	-1155.07	2.77
0.76	5.48	-383.94	3.96
0.78	6.50	-106.81	3.45
0.88	6.35	-1168.34	4.16
0.94	6.78	-142.70	3.46
1.08	6.38	-941.80	2.41

Comparando os sistemas *ZnO-MC6x6/Si(111)5x5* e *ZnO-MC7x7/Ag(111)8x8*, podemos dizer que o aumento da estabilidade do acoplamento *FM* pode ser atribuído à diminuição das energias *AFM* de *superexchange* mediados pelos estados metálicos da *Ag* e ao aumento das energias *FM* de *direct exchange* presentes nos estados do *Si*. A figura A.2 mostra a densidade de estados do sistema *ZnO-MC6x6/Si(111)5x5*. Da figura vemos que os níveis minoritários não ocupados se encontram no interior do *gap* do *ZnO*, e os níveis ocupados estão logo abaixo do nível de Fermi. A interação de *direct exchange* entre os dois metais de transição (impurezas *MT*) desloca os estados vazios minoritários para cima, e os ocupados para baixo, diminuindo a energia total do sistema para um estado *FM*. Aumentando o número de camadas, adicionamos a segunda folha de *ZnO*, formando o sistema *ZnO-DC6x6/Si(111)5x5*. Neste caso, vimos que a relaxação da camada superior de *ZnO* é menor comparada com o sistema *ZnO-MC6x6/Si(111)5x5*. No entanto ainda nota-se a amorfização da estrutura plana de *ZnO* (veja a figura A.3(b)). Diferentemente do sistema *ZnO-DC7x7/Ag(111)8x8*, as impurezas de *Co* podem ser dopadas tanto em sítios da camada superior como nos da camada inferior. As configurações de acoplamentos *FM* mais estáveis apresentam  $E^{FM}-E^{AFM} \simeq -175$ , -828 e -773 *meV*, valores similares aos encontrados no sistema *ZnO-MC6x6/Si(111)5x5*, mas também bastante diferentes comparados aos encontrados na estrutura *ZnO-DC7x7/Ag(111)8x8*. Aqui

a estabilização *FM* pode ser explicada pela diminuição das energias de *superexchange AFM* e aumento das energias de *direct exchange FM*, devido a ausência dos estados metálicos da *Ag*. Comparando os sistemas *ZnO-MC6x6/Si(111)5x5* e *ZnO-DC6x6/Si(111)5x5* (tabela A.2 e

Tabela A.3: Assim como apresentado na Tabela A.2, aqui para a duplacamada *ZnO* adsorvida na superfície *Si(111)5x5*.

$\Delta E_T$	Magnetizao	$E^{FM-AFM}$	$d_{Co-Co}$
top-top			
0.00	6.79	-174.50	3.19
0.12	6.61	-36.50	2.75
0.20	6.44	-418.19	3.11
0.47	6.58	-325.93	3.72
top-down			
0.08	6.20	-827.80	3.22
0.62	6.71	-411.18	2.98
0.67	6.72	-439.13	2.77
0.78	6.01	-925.39	3.11
down-down			
0.08	6.20	-773.41	3.00
0.44	6.36	-309.45	2.96
0.58	6.66	-410.03	3.16
0.75	5.84	-204.51	3.17

tabela A.3), observamos que a média aritmética dos valores  $E^{FM}-E^{AFM}$  é similar nos dois sistemas. Os efeitos relacionados ao confinamento e à amorfização das folhas de *ZnO* intensifica o mecanismo de *direct exchange*, favorecendo o acoplamento *FM*. A redução da estabilidade da fase *FM*, como consequencia da adição de uma camada de *ZnO*, como nos casos das estruturas *ZnO-DC7x7/Ag(111)8x8* e *ZnO-DC* suspensa, não é observada quando adicionamos a segunda camada no substrato de *Si*. A amorfização ajuda a manter o confinamento eletrônico, mesmo aumentando o número de camadas de *ZnO*. Essa ausência de estados delocalizados diminui o acoplamento *AFM* mediado por interações de *superexchange*, favorecendo, assim o estado total *FM*. A diferença de energia  $E^{FM}-E^{AFM}$  dos sistemas *ZnO-MC6x6/Si(111)5x5* e *ZnO-DC6x6/Si(111)5x5* alcança valores bastante altos, chegando, em alguns casos valores maiores que 1 *eV*, como podem ser vistos nas tabelas A.2 e A.3. Essa energia é 3 vezes maior que as promissoras nanoestruturas III-V (*In,Mn*)As e (*Ga,Mn*)As, que apresentam valores de  $E^{FM}-E^{AFM}$  entorno de 230 *meV* (GALICKA; BUCZKO; KACMAN, 2011; SILVA et al., 2003).

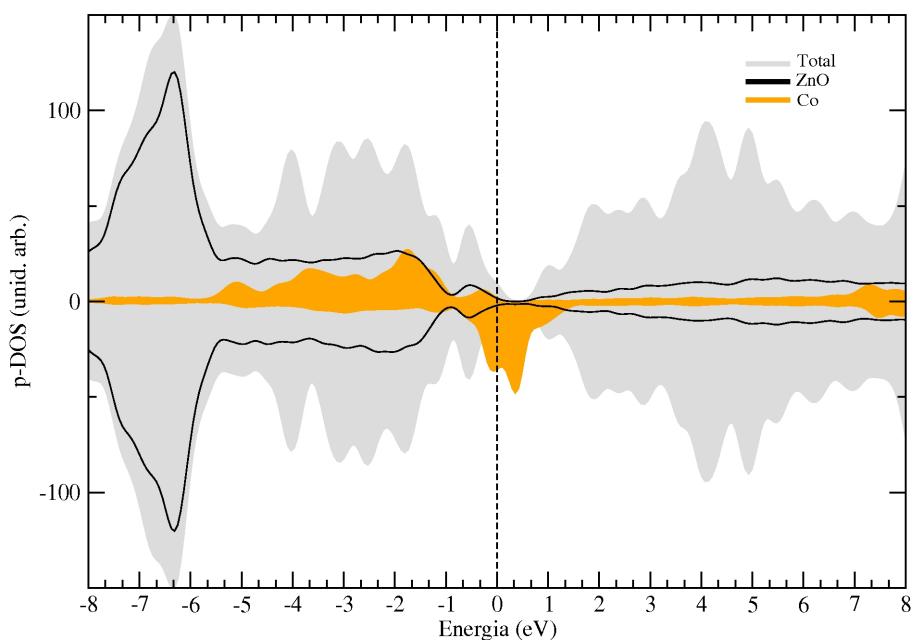


Figura A.2: Densidade de estados projetada da impureza  $Co_{Zn}$  (área de cor mostarda), da monocamada (amorfizada) de  $ZnO$  (em preto) adsorvida em superfície de  $Si$ -(111)5x5. Nível de Fermi  $E_F = 0$

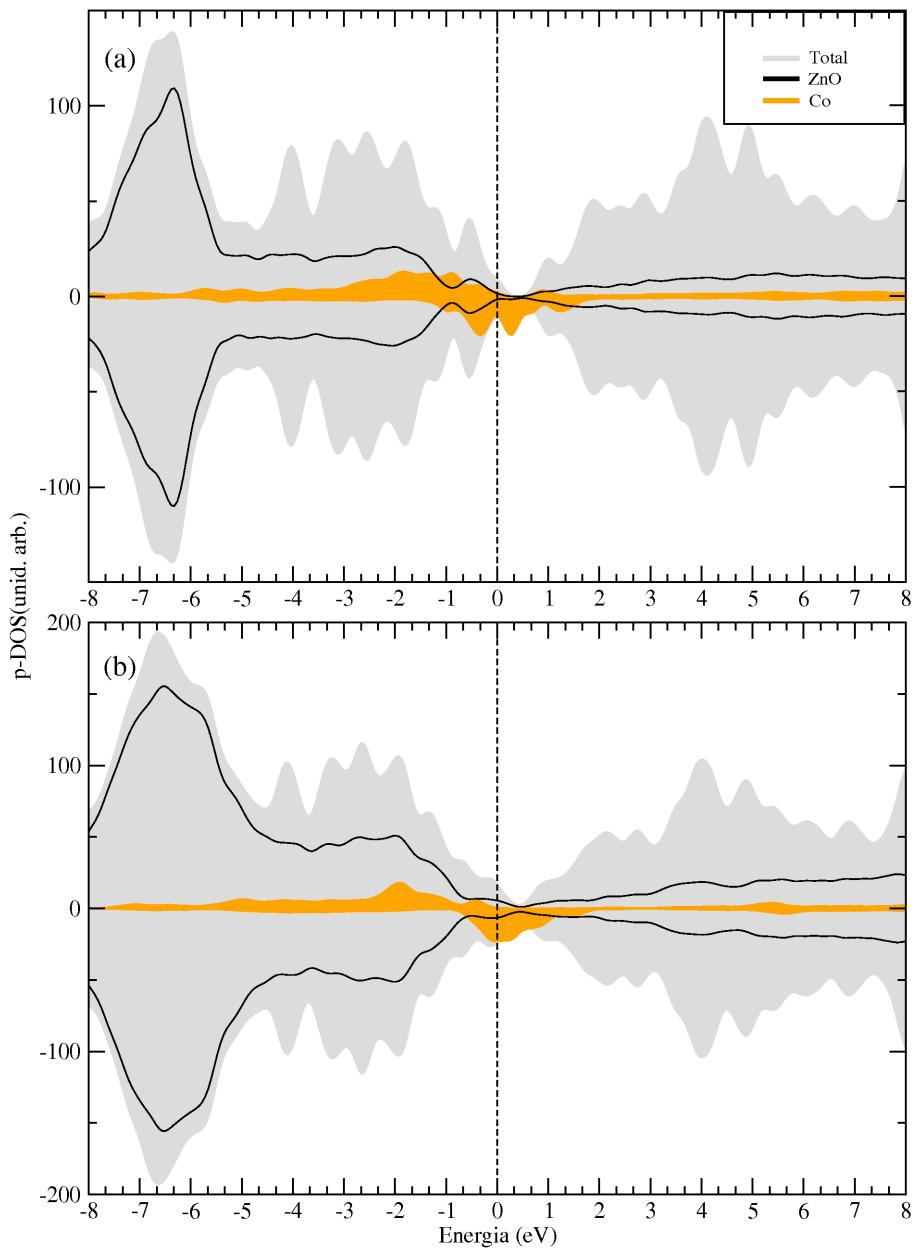


Figura A.3: Densidade de estados projetada do par de impurezas  $Co_{Zn}$  (área de cor mostarda) na monocamada (a) e duplacamada (b) amorfizadas da folhas de  $ZnO$  (p-DOS em preto) adsorvidas em superfície de  $Si$ -(111)5x5. Nível de Fermi  $E_F = 0$

## Referências Bibliográficas

- AKASAKI, I.; AMANO, H. Crystal growth and conductivity control of group III nitride semiconductors and their application to short wavelength light emitters. *Jpn. J. Appl. Phys.*, v. 36, p. 5393–5408, 1997.
- ANDERSON, P. W. Antiferromagnetism. theory of superexchange interaction. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 79, p. 350–356, Jul 1950. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.79.350>>.
- ANDREI, E. Y.; LI, G.; DU, X. Electronic properties of graphene: a perspective from scanning tunneling microscopy and magnetotransport. *Rep. Prog. Phys.*, IOP Publishing, v. 75, p. 056501, 2012.
- ANTONCIK, E. Approximate formulation of the orthogonalized plane-wave method. *J.Phys.Chem.solids*, v. 10, p. 314, 1959.
- ARTACHO, E. et al. Linear-scaling ab-initio calculations for large and complex systems. *physica status solidi (b)*, WILEY-VCH Verlag, v. 215, n. 1, p. 809–817, 1999. ISSN 1521-3951. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3951\(199909\)215:1<809::AID-PSSB809>3.0.CO;2-0](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(199909)215:1<809::AID-PSSB809>3.0.CO;2-0)>.
- AUSTIN, B. J.; HEINE, V.; SHAM, L. J. General theory of pseudopotentials. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 127, p. 276–282, Jul 1962. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.127.276>>.
- BACHELET, G. B.; HAMANN, D. R.; SCHLÜTER, M. Pseudopotentials that work: From H to Pu. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 26, p. 4199–4228, Oct 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.26.4199>>.
- BOLOUDENINE, M. et al. Antiferromagnetism in bulk Zn(1-x)Co(x)O magnetic semiconductors prepared by the coprecipitation technique. *Applied Physics Letters*, v. 87, n. 5, p. –, 2005. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/apl/87/5/10.1063/1.2001739>>.
- BRITNELL, L. et al. Field-effect tunneling transistor based on vertical graphene heterostructures. *Science*, v. 335, n. 6071, p. 947–950, 2012.
- CEPERLEY, D. M.; ALDER, B. J. Ground state of the electron gas by a stochastic method. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 45, p. 566–569, Aug 1980. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.566>>.
- CHEN, Z. et al. Graphene nano-ribbon electronics. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 40, p. 228–232, 2007.

- CHENGGANG, T. et al. Spatially resolving edge states of chiral graphene nanoribbons. *Nature Physics*, v. 7, p. 616–620, 2011.
- DALPIAN, G. M. et al. Phenomenological band structure model of magnetic coupling in semiconductors. *Solid State Communications*, v. 138, p. 353–358, 2006.
- FERNANDES, M.; SCHMIDT, T. M. Magnetism of Co doped graphitic ZnO layers adsorbed on Si and Ag surfaces. *Journal of Applied Physics*, v. 114, n. 12, p. –, 2013. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/114/12/10.1063/1.4823733>>.
- FREEMAN, C. L. et al. Graphitic nanofilms as precursors to wurtzite films: Theory. *Physical Review Letters*, v. 96, p. 066102, 2006.
- GALICKA, M.; BUCZKO, R.; KACMAN, P. Structure-dependent ferromagnetism in mn-doped III–V nanowires. *Nano Letters*, v. 11, p. 3319–3323, 2011.
- GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials*, v. 6, p. 183–191, 2007.
- GIESSIBL, F. J. Atomic resolution of the silicon (111)-(7x7) surface by atomic force microscopy. *Science*, v. 267, p. 68–71, 1995.
- GIOVANNETTI, G. et al. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 073103, 2007.
- GOLDBERG, Y. In: \_\_\_\_\_. *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 2001. p. 31–47.
- HAMANN, D. R.; SCHLÜTER, M.; CHIANG, C. Norm-conserving pseudopotentials. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 43, p. 1494–1497, Nov 1979. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.43.1494>>.
- HAN, M. Y. et al. Energy band-gap engineering of graphene nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 98, p. 206805, May 2007. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.206805>>.
- HASKAL, E. I. et al. Evolution of quasiépitaxial growth of a crystalline organic semiconductor on graphite. *Applied Physics Letters*, v. 60, p. 3223, 1992.
- HEER, W. A. de et al. Epitaxial graphene. *Solid State Communications*, v. 143, n. 1–2, p. 92–100, 2007.
- HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, v. 49, p. 619–636, 1928.
- HERRING, C. A new method for calculating wave functions in crystals. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 57, p. 1169–1177, Jun 1940. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.57.1169>>.
- HIROSE, Y.; FORREST, S. R.; KAHN, A. Quasiepitaxial growth of the organic molecular semiconductor 3,4,9,10-perylenetetracarboxylic dianhydride. *Physical Review B*, v. 52, p. 14040, 1995.

- HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, v. 136, p. B864, 1964.
- JEDRECY, N.; RENAUD, G.; LAZZARI, R. Flat-top silver nanocrystals on the two polar faces of ZnO: An all angle x-ray scattering investigation. *Physical Review B*, v. 72, p. 045430, 2005.
- JUNQUERA, J. et al. Numerical atomic orbitals for linear-scaling calculations. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 64, p. 235111, Nov 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.64.235111>>.
- KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics* 2, 620 - 625 (2006), v. 2, p. 620–625, 2006.
- KERKER, G. P. Non-singular atomic pseudopotentials for solid state applications. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, v. 13, n. 9, p. L189, 1980. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0022-3719/13/i=9/a=004>>.
- KITTEL, C. In: \_\_\_\_\_. *Introduction to Solid State (sixth ed.)*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 1986.
- KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, v. 140, p. A1133, 1965.
- KRAMERS, H. L'interaction entre les atomes magnétogènes dans un cristal paramagnétique. *Physica*, v. 1, n. 1–6, p. 182–192, 1934. ISSN 0031-8914. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031891434900239>>.
- KU, C.-S. et al. Annealing effect on the optical response and interdiffusion of n-ZnO/p-Si(111) heterojunction grown by atomic layer deposition. *Applied Physics Letters*, v. 97, p. 181915, 2010.
- LEE, S. K.; SON, J. Y. Epitaxial growth of thin films and nanodots of ZnO on Si(111) by pulsed laser deposition. *Applied Physics Letters*, v. 100, p. 132109, 2012.
- LENSKI, D. R.; FUHRER, M. S. Raman and optical characterization of multilayer turbostratic graphene grown via chemical vapor deposition. *Journal of Applied Physics*, v. 110, n. 1, p. –, 2011. Disponível em: <<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jap/110/1/10.1063/1.3605545>>.
- LIMA, E. N.; SCHMIDT, T. M. Confinement-dependent ferromagnetism in Mn-doped InAs quantum dots embedded in InP nanowires. *Physical Review B*, v. 86, p. 125445, 2012.
- LIN, Z.; BRISTOWE, P. D. Microscopic characteristics of the Ag(111)/ZnO(0001) interface present in optical coatings. *Physical Review B*, v. 75, p. 205423, 2007.
- MADAR, R. Materials science: Silicon carbide in contention. *Nature*, n. 430, p. 974–975, 2004.
- MORKOC, H. et al. Large band gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe based semiconductor device technologies. *Journal of Applied Physics*, v. 76, n. 3, 1994.
- NANDI, S. K. et al. Structural and optical properties of ZnO films grown on silicon and their applications in MOS devices in conjunction with  $ZrO_2$  as a gate dielectric. *Bulletin of Materials Science*, v. 30, p. 247–254, 2007.

NATURE: Site. 1950. Disponível em: <<http://www.nature.com/nature/journal/v166/n4227/abs/166777a0.html>>. Acesso em: 4 nov. 1950.

NOVOSELOV, K. S. et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, v. 306, p. 666–669, 2004.

NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, v. 438, p. 197–200, 2005.

OKADA, Y.; TOKUMARU, Y. Precise determination of lattice parameter and thermal expansion coefficient of silicon between 300 and 1500 k. *Journal of Applied Physics*, v. 56, p. 314, 1984.

PEMMARAJU, C. D. et al. Impurity-ion pair induced high-temperature ferromagnetism in Co-doped ZnO. *Physical Review B*, v. 78, p. 054428, 2008.

PHILLIPS, J. C.; KLEINMAN, L. New method for calculating wave functions in crystals and molecules. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 116, p. 287–294, Oct 1959. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.116.287>>.

RUMYANTSEV, S. et al. In: \_\_\_\_\_. *Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. [S.l.]: John Wiley & Sons, Inc., 2001. p. 67–92.

SCHLUETER, C. et al. Growth of iron oxides on Ag(111) Reversible Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> transformation. *Surface Science*, v. 605, p. 1986–1993, 2011.

SCHMIDT, T. M.; MIWA, R. H.; FAZZIO, A. Ferromagnetic coupling in a Co-doped graphenelike ZnO sheet. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 81, p. 195413, May 2010. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.195413>>.

SCHUBERT, E. F.; KIM, J. K. Solid-state light sources getting smart. *Science*, v. 308, p. 1274–1278, 2005.

SCHWIERZ, F. Graphene transistors. *Nature Nanotechnology*, v. 5, p. 487–496, 2010.

SHARMA, P. et al. Ferromagnetism above room temperature in bulk and transparent thin films of mn-doped zno. *Nature Materials*, v. 2, p. 673–677, 2003.

SILVA, A. J. da et al. Electronic structure and origin of ferromagnetism in Ga(1-x)Mn(x)As semiconductors. *Physica B: Condensed Matter*, v. 340–342, n. 0, p. 874–877, 2003. ISSN 0921-4526. Proceedings of the 22nd International Conference on Defects in Semiconductors. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921452603008718>>.

SLATER, J. C. The ferromagnetism of nickel. *Physical Review*, v. 49, p. 537, 1936.

SOLER, J. M. et al. The siesta method for ab initio order- n materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 14, n. 11, p. 2745, 2002. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/14/i=11/a=302>>.

SON, Y.-W.; COHEN, M. L.; LOUIE, S. G. Energy gaps in graphene nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 97, p. 216803, Nov 2006. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.97.216803>>.

- SUENAGA, K. et al. Synthesis of nanoparticles and nanotubes with well-separated layers of boron nitride and carbon. *Science*, v. 278, n. 5338, p. 653–655, 1997.
- TANIYASU, Y.; KASU, M.; MAKIMOTO, T. An aluminium nitride light-emitting diode with a wavelength of 210 nanometres. *Nature*, v. 441, p. 325–328, 2006.
- TROULLIER, N.; MARTINS, J. L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 43, p. 1993–2006, Jan 1991. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.1993>>.
- TUSCHE, C.; MEYERHEIM, H. L.; KIRSCHNER, J. Observation of Depolarized ZnO(0001) Monolayers: Formation of Unreconstructed Planar Sheets. *Physical Review Letters*, v. 99, p. 026102, 2007.
- VANDERBILT, D. Optimally smooth norm-conserving pseudopotentials. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 32, p. 8412–8415, Dec 1985. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.32.8412>>.
- VENKATESAN, M. et al. Anisotropic ferromagnetism in substituted zinc oxide. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 93, p. 177206, Oct 2004. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.177206>>.
- WANG, H. et al. Bn/graphene/bn transistors for rf applications. *IEEE Electron Device Letters*, v. 32, n. 9, p. 1209–1211, 2011.
- WANG, H. et al. Integrated Circuits Based on Bilayer MoS<sub>2</sub> Transistors. *Nano Letters*, v. 12, p. 4674–4680, 2012.
- WANG, Q. H. et al. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nature Nanotechnology*, v. 7, p. 699–712, 2010.
- WANG, X. et al. Scaling Dopant States in a Semiconducting Nanostructure by Chemically Resolved Electron Energy-Loss Spectroscopy: A Case Study on Co-Doped ZnO. *Journal of American Chemical Society*, v. 132, p. 6492–6497, 2010.
- WONG, T. I. et al. Epitaxial growth of ZnO film on Si(111) with CeO<sub>2</sub>(111) as buffer layer. *Journal of Physics D*, v. 45, p. 415306, 2012.
- WU, D.; LAGALLY, M. G.; LIU, F. Stabilizing graphitic thin films of wurtzite materials by epitaxial strain. *Physical Review Letters*, v. 107, p. 236101, 2011.
- YIN, M. T.; COHEN, M. L. Structural theory of graphite and graphitic silicon. *Physical Review*, v. 29, p. 6996, 1984.
- ZACH, M. P.; NG, K. H.; PENNER, R. M. Molybdenum nanowires by electrodeposition. *Science*, v. 290, p. 2120–2123, 2000.
- ZHANG, C.-W. et al. First-principles study on ferromagnetism in two-dimensional ZnO nanosheet. *Chemical Physics Letters*, v. 548, p. 60–63, 2012.
- ZHANG, Y. et al. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature*, v. 438, p. 201–204, 2005.

- ZHANG, Z. H. et al. Evidence of intrinsic ferromagnetism in individual dilute magnetic semiconducting nanostructures. *Nature Nanotechnology*, v. 4, p. 523–527, 2009.
- ZHAO, C. J. et al. Relative contributions of surface and grain boundary scattering to the spin-polarized electrons transport in the *AlN/NiFe/AlN* heterostructures. *Applied Surface Science*, v. 297, p. 70–74, 2014.
- ZHONG, Y. et al. Synthesis of silicon carbide nanopowder using silica fume. *Journal of the American Ceramic Society*, Blackwell Publishing Inc, v. 93, n. 10, p. 3159–3167, 2010. ISSN 1551-2916. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1111/j.1551-2916.2010.03867.x>>.
- ZHONGA, G. et al. Low temperature growth of well-aligned ZnO nanorods/nanowires on flexible graphite sheet and their photoluminescence properties. *Materials Research Bulletin*, v. 47, p. 1467–1470, 2012.
- ZHOU, S. Y. et al. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature Materials*, v. 6, p. 770–775, 2007.
- ZOVAL, J. V. et al. Electrochemical preparation of platinum nanocrystallites with size selectivity on basal plane oriented graphite surfaces. *The Journal of Physical Chemistry B*, v. 102, p. 1166–1175, 1998.
- ZUNGER, A.; COHEN, M. L. First-principles nonlocal-pseudopotential approach in the density-functional formalism: Development and application to atoms. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 18, p. 5449–5472, Nov 1978. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.18.5449>>.