



Instituto de Física
Universidade de São Paulo

**ARTIGO DE PESQUISADORAS DO IFUSP PUBLICADO NA
REVISTA PHYSICAL REVIEW B**

“Single vacancy defect in graphene: Insights into its magnetic properties from theoretical modeling”

Autoras: A. M. Valencia and M. J. Caldas Instituto de Física,
Universidade de São Paulo

<https://journals.aps.org/prb/kaleidoscope/September2017>

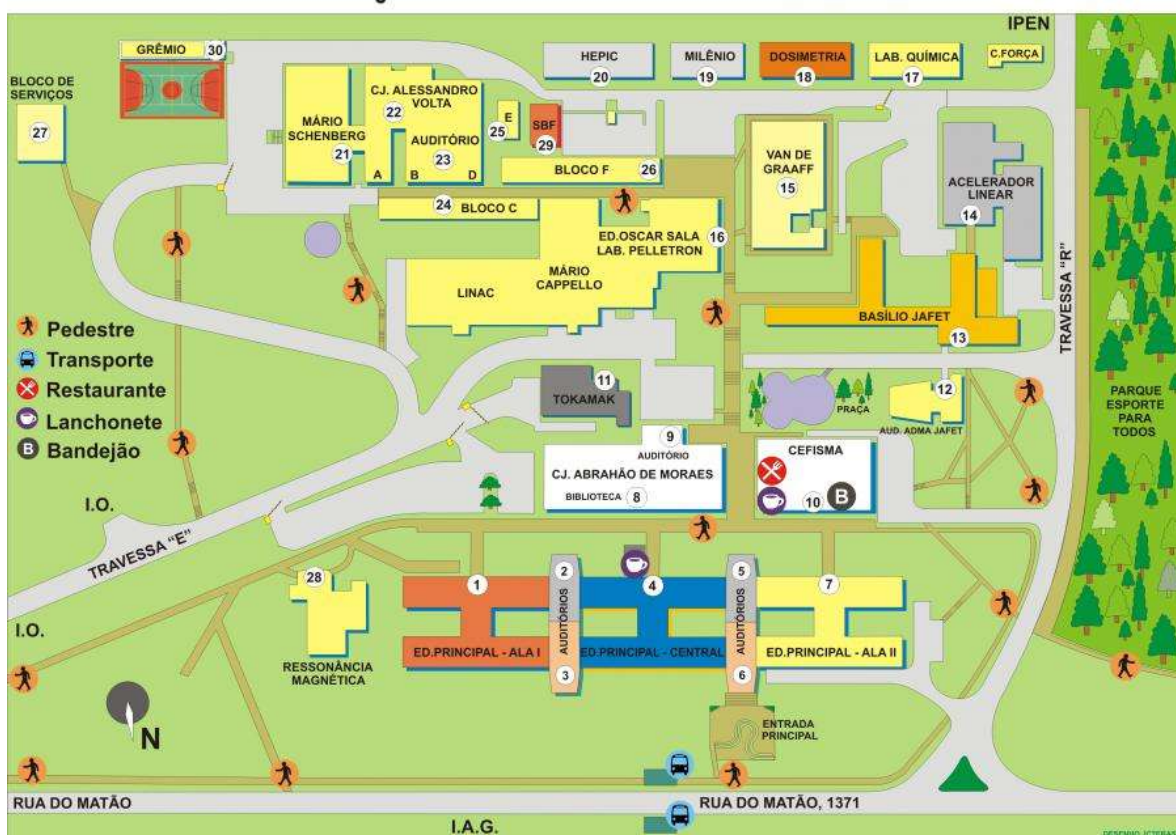
O artigo acima foi publicado na Revista Physical Review B, uma das mais prestigiadas da área e vem de pesquisa teórica realizada durante o trabalho de doutoramento de Ana Maria Valencia, sob orientação de Marília J. Caldas, tendo sido a tese recentemente apresentada. Trata-se de um tema de longa discussão entre a comunidade que estuda defeitos em grafeno: será a vacância (ausência de um átomo de carbono da rede) responsável por um momento magnético forte, fraco? Quanto será forte a interação entre vacâncias? Havia divergência de longa data nos resultados teóricos apresentados por pesquisadores renomados de vários institutos internacionais. Os resultados apresentados pela dupla do IFUSP explicam a razão das divergências anteriores, colocando ênfase na escolha dos métodos de simulação (de primeiros princípios). A figura destacada pelo “Kaleidoscopes” da revista Physical Review B ilustra a reconstrução estrutural realizada pelos átomos vizinhos à vacância, na forma mais simples conhecida como “ball-and-stick”, e se torna visualmente tão bonita graças à simetria hexagonal do material-base: novamente, o grafeno é material interessantíssimo e particularmente especial. Dados do artigo: PHYSICAL REVIEW B 96, 125431 (2017) Single vacancy defect in graphene: Insights into its magnetic properties from theoretical modeling A. M. Valencia and M. J. Caldas Instituto de Física, Universidade de São Paulo.

Link para Kaleidoscopes:

<https://journals.aps.org/prb/kaleidoscope/September2017>

Link para a figura do artigo:

<https://journals.aps.org/prb/kaleidoscope/prb/96/12/125431>



Mais informações:

Departamento de Física dos Materiais e Mecânica
Instituto de Física da USP

Grupo Nanomol

Ed. Alessandro Volta, Bloco C, Sala [217](#) (localização nº 22, no mapa)

Rua do Matão, 1371 - Cidade Universitária

CEP 05508-090 - São Paulo, SP

Tel (11) 3091-6922 / 3091-7023 Fax (11) 3091-6831

<http://nanomol.if.usp.br/>
