**UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS**
**PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**
**DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA**
**PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA**

# INTRODUÇÃO Á FÍSICA E APLICAÇÕES DO GRAFENO DO PROGRAMA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA NA UFAM

**Bolsista : Virgilia Monteiro da Silva Neta, FAPEAM**

MANAUS
**2016**

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

# RELATÓRIO PARCIAL
# PIB – E – 009/2015
# INTRODUÇÃO Á FÍSICA E APLICAÇÕES DO GRAFENO DO PROGRAMA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA NA UFAM

**Bolsista : Virgilia Monteiro da Silva Neta, FAPEAM**
**Orientador: Prof$^{o}$. Dr. Oleg Grigorievich Balev**

**MANAUS**
**2016**

**Resumo**

As pesquisas relevantes ao grafeno enfatizam suas propriedades de aplicações no meio tecnológico, é de suma importância compreender os conceitos físicos que envolvem as aplicações do grafeno, bem como as propriedades físicas e sua estrutura cristalina que revelam a importância desse material bidimensional, e alguns conceitos principais da física da matéria condensada como dispersão de energia, massa efetiva do elétron e do buraco, densidade de estados em banda de condutância e valência. Estados de elétron bidimensional em poço quântico em aplicação para uma heteroestrutura semicondutora. Estados de elétron (buraco) bidimensionais no grafeno e dispersão de energia em banda de condutância (valência). O estudo sobre o grafeno revelou-se bem instigante já que é um material novo, e suas aplicações nas diversas áreas do conhecimento são revolucionarias o tornam um "material do futuro", atraindo todos os holofotes da física da matéria condensada.

**Palavras-chave:** Física e Aplicações do Grafeno, Modelo de Wallace do Grafeno, Método do Tight-binding.

**Abstract**

The research of graphene properties have produced a lot of physical effects that already are investmented in technological environment or are a subject of strong interest It is extremely important to understand the physical concepts involving graphene applications, as well as the physical properties and its crystalline structure that reveal the importance of this two-dimensional quantum material. In particular, such key concepts of the Physics of Condensed Matter as energy dispersion, effective mass of electrons and holes, density of states in conductance and valence bands,. two-dimensional electron states in a quantum well, also in application to a semiconductor heterostructures. The studies on graphene already have revealed exciting properties of this new material and its realized and propozed applications in various areas are revolutionary and make it a "material of the future", attracting all the spotlight of Condensed Matter Physics.

# sumário


0.1 Introdução . . . . . 5
0.2 Revisão Bibliográfica . . . . . 6
0.3 Métodos Utilizados . . . . . 9
0.4 Resultados e Discussões . . . . . 10
0.5 Aplicações do Grafeno . . . . . 14
0.6 Conclusão . . . . . 17
0.7 Referencias bibliográficas . . . . . 18
0.8 Cronograma . . . . . 20

# List of Figures


1 Rede direta . . . . . 6
2 Nesta figura temos alguns dos principais Allotropos do Carbono, o grafite, fulereno, nanotubo entre outros. . . . . 10
3 Na Fig.2 a) temos Rede direta com a célula primitiva na parte rachurada ,e na Fig.2 b) temos a rede cristalina especificando as duas subredes com atomos do tipo A e tipo B. . . . . 11
4 Rede Recíproca . . . . . 12
5 Dispersão eletrônica em linha no favo de mel rede. Esquerda: espectro de energia em unidades de $t$ para valores finitos de $t$ e $t^{'}$ , com $t = 2,7eV$ e $t^{'} = -0.2t$ . Direita: amamenta na bandas de energia perto de um dos pontos de Dirac . . . . . 13
6 Esquema de um Transístor de Grafeno de alta velocidade . . . . . 15
7 primeiro fone de ouvido de grafeno, desenvolvido por pesquisadores da Universidade da Califórnia . . . . . 15
8 Raquete GRAPHENE XT, feita com material armado com Grafeno. . . . . 16
9 O efeito antibacteriano do grafeno. . . . . 16
10 Conograma das atividades . . . . . 20

## 0.1 Introdução

A pesquisa, visar conhecer as ideias e os conceitos físicos envolvidos no estudo sobre o grafeno, focando no trabalho teórico [9], comparando suas bandas e dispersão de energia e os fenômenos físicos e aplicações relevantes a ele, grafeno é o nome dado a uma monocamada de átomos de carbono densamente empacotada numa estrutura de anel de benzeno na forma hexagonal como "favos de mel" é amplamente utilizado para descrever as propriedades de diversos materiais, pois é um alótropo carbono, logo ele é a base de construção de diversos materiais tais como, grafite, fulerenos, nanotubos, etc.

Pioneiros à descrever sobre o plano do grafite foi P.R.Wallace , em 1947. As previsões teóricas que haviam na época sobre estabilidade termodinamica as películas como grafeno, afirmava-se que este material estritamente bidimensional, não seria estável sob condições ambientes. Acreditava , que devido à instabilidade termodinâmica dessas películas, estas não poderiam existir em estado livre na natureza. Porém em 2004, André K. Geim e sua equipe do centro de Nanotecnologia da Universidade de Manchester conseguiram isolar pela primeira vez o grafeno [1,2,3], através de Clivagem Mecânica. Este procedimento deu origem as primeiras estruturas bidimensionais de carbono isoladas, que se apresentaram termodinamicamente estáveis [3,7].

O grafeno é um nano material possui uma gama de aplicações que vão da eletrônica até a área biomédica, devido a suas propriedades peculiares devido a seu espectro eletrônico relativístico, o grafeno, nos oferece novos caminhos na física da matéria condensada .

Revelou-se não só estável sobre condições ambientes, mas também possuidor de uma excelente qualidade cristalina e eletrônica é um material formado por uma camada única de átomos de carbono no estado de hibridização , que se apresenta estruturado na forma de hexágonos ou "favos de mel" e é um bloco de construção básica para materiais de grafite de todas as outras dimensionalidades [3,9]. E continuará proporcionando um terreno fértil para aplicações. A pesquisa sobre o as propriedades físicas e aplicações foram de fontes confiáveis como artigos e livros.

## 0.2 Revisão Bibliográfica

Embora a estrutura do grafeno, não seja uma rede de Bravais que é definida como um arranjo infinito de pontos dispostos e orientados de tal maneira que parece exatamente o mesmo, independente do ponto do qual a estrutura é observada. Cujas posições são definidas pelos vetores R, da forma $\overrightarrow{R} = n_1 a_1 + n_2 a_2$ [10] é uma rede que possui qualquer ponto com a vizinhança idêntica ,a vizinhança de qualquer outro ponto [9]. No grafeno isso não ocorre, sua estrutura de hexagonal bidimensional pode ser vista como uma estrutura triangular com uma base de dois átomos de carbono, que formam célula unitária identificados por dois átomos A e B. É possível então, através dos vetores primitivos, localizar qualquer ponto da rede, uma vez definido um referencial nessa rede. É definida pelos vetores primitivos da rede direta :

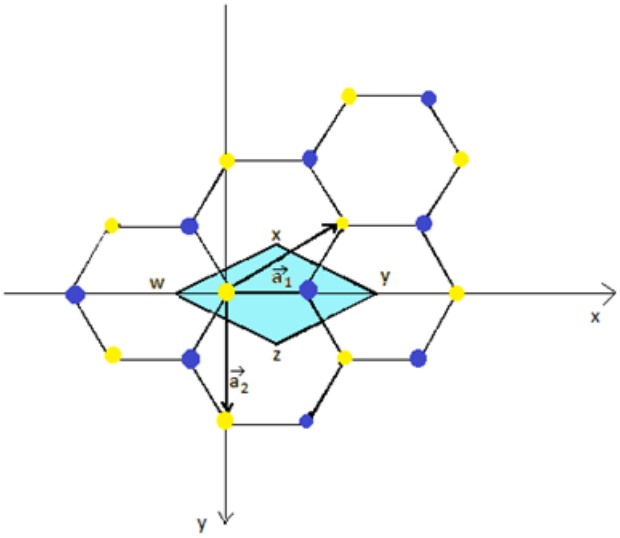



Figure 1: Rede direta

$$\overrightarrow{a_1} = \frac{a\sqrt{3}}{2}\widehat{x} - \frac{a}{2}\widehat{y} \qquad \overrightarrow{a_2} = a\widehat{y} \tag{1}$$

Onde os vetores unitários $\widehat{x}, \widehat{y}$ da rede direta e recíproca são os mesmos. A distância entre dois atomos de carbono mais proximos $a_{cc} = 1.42\mathring{A}$. Comprimento os vetores primitivos $a = |\vec{a_1}| = |\vec{a_2}|$ de rede de Bravais é $a = \sqrt{3} \times 1.42\mathring{A} = 2,46\mathring{A}$ é uma constante da rede cristalina. Por sua vez a Rede de Recíproca é definida como conjunto de pontos $\vec{R}$ constituindo uma rede de Bravais, e uma condição sobre onda plana, $e^{i\vec{k.r}}$. Para um $\vec{k}$ geral, essa onda plana, evidentemente,não terá a periodicidade da rede de Bravais, mas, certamente, terá, para certas escolhas especiais valores de $\vec{K}$ do vetor de onda. Analiticamente, $\vec{K}$ pertence à rede recíproca de uma rede de Bravais de pontos $\vec{R}$, se a relação,

$$e^{i\vec{K}.(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}.\vec{r}} \tag{2}$$

for válida para qualquer r, e para todos os R na rede de Bravais. Fatorando $e^{i\vec{K}.\vec{r}}$,onda $\vec{K}$, satisfazendo a relação ,

$$e^{i\vec{K}.\vec{R}} = 1. \tag{3}$$

Podemos caracterizar a rede recíproca como o conjunto de três vetores primitivos $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$,$\vec{b}_3$. E calcular os vetores primitivos da rede recíproca, através da relação:

$$\begin{aligned}
\vec{b}_1 &= 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{V_{cel}}\\
\vec{b}_2 &= 2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{V_{cel}}\\
\vec{b}_3 &= 2\pi\frac{\vec{a}1\times\vec{a}_2}{V_{cel}},
\end{aligned} \tag{4}$$

de onde para nossa (rede cristalina bidimensional) são importante só primeiros dois vetores primitivos da rede recíproca quais nos podem apresentar em tal forma

$$\begin{aligned}
\vec{b}_1 &= 2\pi\frac{\vec{a}_2\times\widehat{z}}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\widehat{z})}\\
\vec{b}_2 &= 2\pi\frac{\widehat{z}\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\widehat{z})}
\end{aligned} \tag{5}$$

em principio $a_3$ é linearmente independente está na direção z,valor absoluto de $a_3$ não importa pois se ,cancela a única coisa que importa é a direção.

Vetores primitivos de rede recíproca também podemos achar de sistema dos equações

$$\vec{b_i}.\vec{a_j} = 2\pi\delta_{ij}, \tag{6}$$

sendo $\delta_{ij}$ é o delta de Kronecker:

$$\delta_{ij} = 0, \quad i\neq j \quad \delta_{ij} = 1, \quad i = j. \tag{7}$$

Como resultado destes equações, obtemos:

$$\begin{aligned}
\vec{b}_1 &= \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}\widehat{x}\\
\vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}\widehat{x}+\frac{2\pi}{a}\widehat{y}.
\end{aligned} \tag{8}$$

Vale ressaltar também o Método do Tight-bindig (Método Ligação Forte) que faz uma aproximação de primeiros vizinhos para a estrutura eletrônica de bandas onde é possível calcular o espectro eletrônico em potenciais periódicos, que é uma combinação linear dos orbitais atômicos supondo a existência de sobre posições de onda. Para o grafeno faz-se uma aproximação esses elétrons possuem interação somente com seus primeiros e segundos vizinhos, temos:

$$H = -t\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle,\sigma}(a^{\dagger}_{\sigma,i}b_{\sigma,i}+h.c) - t'\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle,\sigma}(a^{\dagger}_{\sigma,i}a_{\sigma,j}+b^{\dagger}_{\sigma,j}b_{\sigma,j}+h.c), \tag{9}$$

onde $a_{\sigma i}(a^{\dagger}_{i,\sigma})$ destrói (cria) elétrons com spin $\sigma(\sigma=\uparrow\downarrow)$ no sítio $\vec{R}_i$.da sub-rede A (consideram-se apenas os átomos do tipo A). Para a sub-rede B uma definição equivalente é utilizada. Aqui $t\approx 2.8$eV e $t'\approx 0.1$eV são as energias para os elétrons saltarem para os primeiros e segundos vizinhos [9]. As bandas de energia para esse Hamiltoniano devem ficar [9]:

$$E = E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t\sqrt{3+f(\vec{k})} - t'f(\vec{k}), \tag{10}$$

onde

$$f(\vec{k}) = 2\cos(\sqrt{3}k_y \cdot a_{cc}) + 4\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y \cdot a_{cc})\cos(\frac{3}{2}k_x \cdot a_{cc}). \tag{11}$$

Em Eq. (22) o sinal positivo representa a banda de energia superior (condução) ($\pi^*$) e o sinal negativo a banda inferior (valência) ($\pi$).

A estrutura de bandas próxima aos pontos de Dirac tem uma dispersão cônica:

$$E\pm(\vec{q}) \approx \pm v_f|\vec{q}| + O[(q/k)^2] \tag{12}$$

Temos que as bandas de valência e de condução se tocam nos pontos de Dirac, onde passa exatamente o nível de Fermi. Cálculos de Densidade de estados mostram que no nível de Fermi a densidade de estados é nula. Como consequência desse resultado temos que o grafeno é um semicondutor de gap de energia (buraco) nulo [14]. Sendo que energia da luz visível é da ordem de poucos eV, as transições ópticas vão ocorrer próximas ao ponto de Dirac. A dispersão linear das bandas de energia próximo do ponto K, tem semelhança com a energia de partículas sem massa chamadas de ultra -relativísticas e a energia destas partículas é descrita quanticamente pela equação de Dirac.

O grafeno se tornou um ícone importante na Física da matéria condensada, pois sua transparência não depende de nenhum parâmetro do material, é controlada apenas por uma constante fundamental, a constante de estrutura fina, que está associada normalmente à Física das partículas e de altas energias, uma situação raríssima em Física da matéria condensada. As propriedades incomuns de portadores de carga no grafeno são consequências do seu gap de energia e da dispersão linear de elétrons no nível de Fermi a dois pontos não equivalentes da zona de Brillouin. No limite de baixas energias, as quase-partículas, são descritas em termos de férmions relativísticos governados pela equação de Dirac. Esse sistema já encontrou aplicações na indústria de células solares, dispositivos de cristais líquidos, em sensores moleculares e na fabricação de transistores em nano escala.

## 0.3 Métodos Utilizados

Para o desenvolvimento deste projeto o método utilizado foi a revisão bibliográfica de títulos artigos e livros especializados no assunto,na qual foram utilizados fontes direta e indireta, para haver um embasamento teóricos sobre conceitos fundamentais de Física do Estado Solido para entender as ideias físicas relativas ao grafeno focando nos artigos [1-9] e partes relevante do artigo [7]. Fazendo uma analise da estrutura cristalina do grafeno, através rede direta e reciproca, o método do Tight-binding, para compreender os conceitos de dispersão de energia, massa efetiva do elétron, densidade de estados em banda de condutância e valência. No decorrer do projeto foi revisado o artigo de Wallece [9] que descreve sobre o plano do grafite observando também estados em banda de condutância e valência e estados de elétron bidimensional em poço quântico em aplicação para uma heteroestrutura semicondutora e comportamento do elétron e dispersão de energia em banda de condutância (valência) no grafeno. E baseando-se em artigos e nos livros texto do Estado Solido [10,11] , no trabalho de revisão [7] foi revisado os trabalhos [1-6,8] e outros relevantes aos efeitos físicos e aplicações do grafeno.

## 0.4 Resultados e Discussões

O carbono é a matéria prima para a vida e a base de toda Química Orgânica é o elemento está entre os mais abundante na natureza . Devido à flexibilidade da sua ligação onde sua configuração eletrônica é $1s^2 2s^2 2p^2$ na qual permite que as ligações covalentes entre os átomos de carbono sofram hibridação (ou hibridização) ou seja, os orbitais dos subníveis atômicos $s$ e $p$ se misturam dando origem a orbitais híbridos $sp, sp^2, sp^3$ possibilitando alótropos com um número ilimitado de estruturas diferentes com uma grande variedade de igualmente propriedades físicas [ 3,5 ]. Estas propriedades físicas são, em grande parte, o resultado da dimensionalidade destas estruturas. Entre esse alótropos com apenas átomos de carbono, temos um em especial o grafeno (uma monocamada de átomos) é um material bidimensional que desempenha um papel importante, sendo ele a base de todos os outros alótropos de carbono , é necessário partir dele para compreender propriedades eletrônicas em outras alotropias.O grafeno é feito de átomos de carbono arranjados em uma estrutura alveolar feito de hexágonos, possui uma excelente qualidade cristalina[3,5 ].

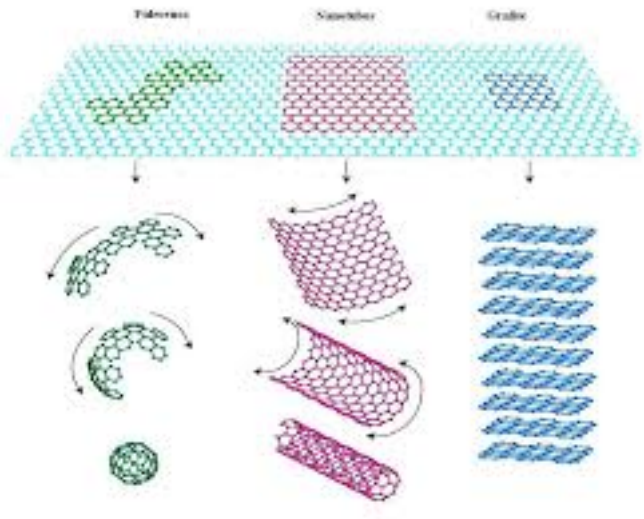
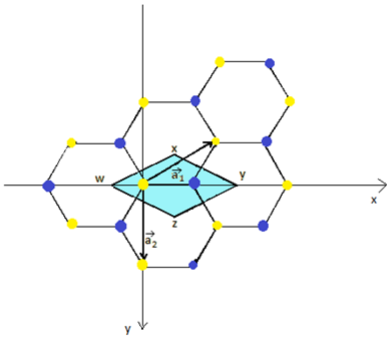
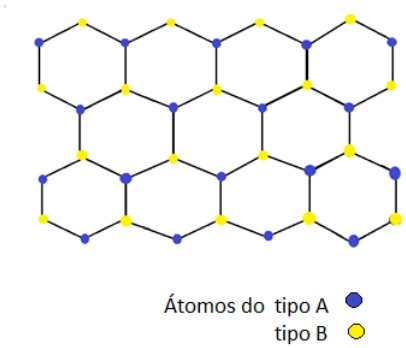


Figure 2: Nesta figura temos alguns dos principais Allotropos do Carbono, o grafite, fulereno, nanotubo entre outros.

O Grafeno é um cristal bidimensional e como todos os cristais ideais, consiste de uma repetição infinita periódica para dois vetores (não-colineares) primitivos $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ de uma célula primitiva com um grupo específico de átomo(s) dentro dela, onde este grupo recebe o nome de base ver na Fig. 2. O conjunto de pontos matemáticos recebidos para translação periódica $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$ de um ponto matemático inicial dentro da célula primitiva ($n_1, n_2$ é qualquer conjuntos de números integrais) é chamado de rede cristalina ou rede direta. O grafeno apresenta que uma estrutura cristalina hexagonal bidimensional pode ser vista como uma estrutura cristalina triangular com uma base de dois átomos de carbono em posições inequivalentes identificados como átomo A e B. A repetição periódica de base forma duas subredes triangulares sobrepostas: subrede A e subrede B de átomos de carbono veja na Fig. 2. É possível , através dos vetores primitivos, localizar qualquer ponto da rede, uma vez definido um referencial nessa rede. Vamos definir vetores primitivos de rede direta, na Fig.2, como [9]




a)




b)

Figure 3: Na Fig.2 a) temos Rede direta com a célula primitiva na parte rachurada ,e na Fig.2 b) temos a rede cristalina especificando as duas subredes com atomos do tipo A e tipo B.

$$\overrightarrow{a_1} = \frac{a\sqrt{3}}{2}\widehat{x} - \frac{a}{2}\widehat{y} \qquad \overrightarrow{a_2} = a\widehat{y} \tag{13}$$

Onde os vetores unitários $\widehat{x}, \widehat{y}$ da rede direta e recíproca são os mesmos. A distância entre dois átomos de carbono mais proximos $a_{cc} = 1.42$ Å. Comprimento os vetores primitivos $a = |\vec{a_1}| = |\vec{a_2}|$ de rede de Bravais é $a = \sqrt{3} \times 1.42$ Å$= 2,46$ Å é uma constante da rede cristalina. Por sua vez a Rede Recíproca é definida como conjunto de pontos $\vec{K}$ constituindo uma rede de Bravais,que satisfaz uma condição sobre onda plana, $e^{i\vec{K}.\vec{r}}$. Para um $\vec{r}$ geral, essa onda plana, evidentemente,não terá a periodicidade da rede de Bravais, mas, certamente, terá, para certas escolhas especiais valores de $\vec{R}$ do vetor de rede direta. Analiticamente, $\vec{K}$ pertence à rede recíproca de uma rede de Bravais, se para qualquer ponto de rede direta $\vec{R}$, é valido a propriedade [10,11]

$$e^{i\vec{K}.(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}.\vec{r}}. \tag{14}$$

Fatorando $e^{i\vec{K}.\vec{r}}$ em Eq. (2), recebemos a relação

$$e^{i\vec{K}.\vec{R}} = 1. \tag{15}$$

Podemos caracterizar a rede recíproca como o conjunto de três vetores primitivos $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$, $\vec{b}_3$. E calcular os vetores primitivos da rede recíproca, através das relações [10,11]

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi\frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_{cel}}, \\ \vec{b}_2 &= 2\pi\frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_{cel}}, \\ \vec{b}_3 &= 2\pi\frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_{cel}}, \end{aligned} \tag{16}$$

onde para nossa rede cristalina bidimensional são importante só primeiros dois vetores primitivos da rede recíproca. Em quais $\vec{a}_3 = |\vec{a}_3|\hat{z}$ e $|\vec{a}_3|$ é cancelado, como resultado

temos

$$\begin{aligned} \vec{b_1} &= 2\pi \frac{\vec{a_2} \times \widehat{z}}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \widehat{z})} \\ \vec{b_2} &= 2\pi \frac{\widehat{z} \times \vec{a_1}}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \widehat{z})} \end{aligned} \tag{17}$$

Vetores primitivos de rede recíproca também podemos achar de sistema dos equações

$$\vec{b_i}.\vec{a_j} = 2\pi\delta_{ij}, \tag{18}$$

sendo $\delta_{ij}$ é o delta de Kronecker:

$$\delta_{ij} = 0, \quad i \neq j \quad \delta_{ij} = 1, \quad i = j. \tag{19}$$

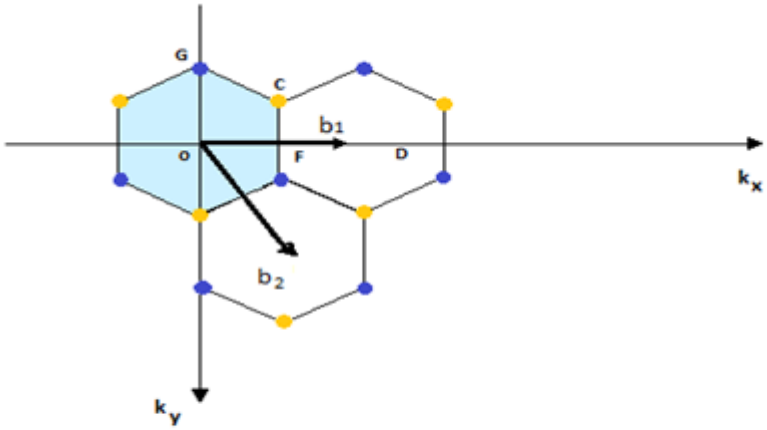



Figure 4: Rede Recíproca

Como resultado destes equações, obtemos:

$$\begin{aligned} \vec{b_1} &= \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}\widehat{x} \\ \vec{b_2} &= \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}\widehat{x} + \frac{2\pi}{a}\widehat{y}. \end{aligned} \tag{20}$$

O trabalho de Wallece desenvolveu uma base para a explicação de algumas das propriedades físicas de grafite através da teoria banda de sólidos. Onde estruturação das bandas eletrônicas de energia e zonas de Brillouin para grafite é desenvolvido usando a aproximação de ligação forte. Nesse caso o Método do Tight-bindig (Método Ligação Forte) que faz uma aproximação de primeiros vizinhos para a estrutura eletrônica de bandas onde é possível calcular o espectro eletrônico em potenciais periódicos, que é uma combinação linear dos orbitais atômicos supondo a existência de sobre posições de onda.

Para o grafeno faz-se uma aproximação esses elétrons possuem interação somente com seus primeiros e segundos vizinhos, temos [9,10] :

$$H = -t \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle,\sigma} (\hat{a}^{\dagger}_{\sigma,i}\hat{b}_{\sigma,i} + h.c) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle,\sigma} (\hat{a}^{\dagger}_{\sigma,i}\hat{a}_{\sigma,j} + \hat{b}^{\dagger}_{\sigma,j}\hat{b}_{\sigma,j} + h.c), \tag{21}$$

onde $\hat{a}_{\sigma i}(\hat{a}^{\dagger}_{i,\sigma})$ é operador que destrói (cria) elétron com spin $\sigma(\sigma = \uparrow\downarrow)$ no sítio $\vec{R}^A_i$ da sub-rede A (consideram-se apenas os átomos do tipo A); $\hat{b}_{\sigma i}(\hat{b}^{\dagger}_{i,\sigma})$ é operador que destrói (cria) elétron com spin $\sigma(\sigma = \uparrow\downarrow)$ no sítio $\vec{R}^B_i$ da sub-rede B (consideram-se apenas os átomos do tipo B). Aqui $t \approx 2.8$eV e $t' \approx 0.1$eV são as energias para os elétrons saltarem para os primeiros e segundos vizinhos [9]. As bandas de energia para esse Hamiltoniano devem ficar [9]:

$$E = E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t\sqrt{3 + f(\vec{k})} - t' f(\vec{k}), \tag{22}$$

onde

$$f(\vec{k}) = 2\cos(\sqrt{3}k_y \cdot a_{cc}) + 4\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y \cdot a_{cc})\cos(\frac{3}{2}k_x \cdot a_{cc}). \tag{23}$$

Na Eq. (22) o sinal positivo representa a banda de energia superior (condução) ($\pi^*$) e o sinal negativo a banda inferior (valência) ($\pi$).

A estrutura de bandas próxima aos pontos de Dirac tem uma dispersão cônica:

$$E\pm(\vec{q}) \approx \pm v_F|\vec{q}| + O[(q/k)^2] \tag{24}$$

onde $v_F = 3ta_{cc}/2$ é velocidade de Fermi, $\vec{q}$ é momento medido em relação ao relavante ponto de Dirac ($\vec{K}$ ou $\vec{K}'$); $v_F \cong 1 \times 10^6 m/s$. A Fig. 4 mostra a dispersão do espectro de energia da Eq. (10) e aumenta da Fig. 4 mostra o espectro energia relativístico perto de um ponto de Dirac.

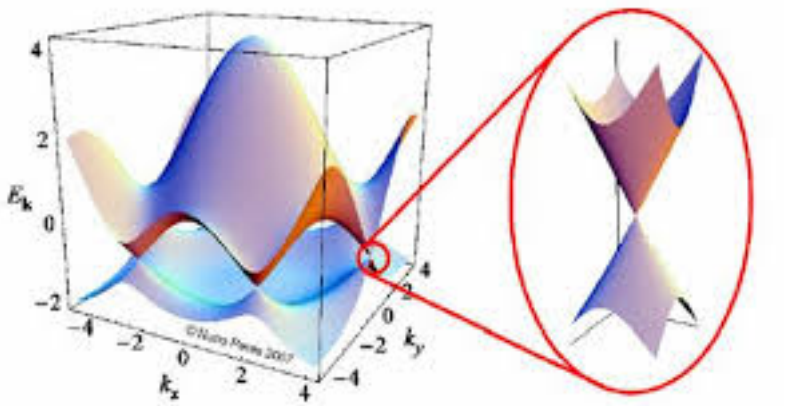



Figure 5: Dispersão eletrônica em linha no favo de mel rede. Esquerda: espectro de energia em unidades de $t$ para valores finitos de $t$ e $t'$ , com $t = 2,7eV$ e $t' = -0.2t$ . Direita: amamenta na bandas de energia perto de um dos pontos de Dirac .

Um ponto interessante no grafeno é o fato de ele ser composto dos átomos de carbono que é um elemento químico tetravalente. Isso significa que cada átomo pode fazer quatro ligações, em grafeno logo nas ligações entre carbono-carbono cada átomo de carbono na padrão hexagonal (ou seja, com estrutura de favos de mel) fica ligado a três vizinhos mais próximos e compartilha seus três elétrons com seus três vizinhos mais próximos. Ou

seja cada átomo de carbono no grafeno está usando três elétrons de valência para criar ligação forte para vizinhos mais próximo, um elétrons que sobra da camada de valência é capaz passear pela sua banda de energia, esse é chamado elétron livre. É conivente chamar parte dessa banda de energia que fica acima da energia do ponto de Dirac como banda de condutância e parte que fica abaixo do ponto de Dirac como banda de valência. Isso torna o grafeno um bom condutor de eletricidade já que os elétrons livres ajudam a passar o fluxo de corrente elétrica com grande mobilidade efetiva ainda em temperatura ambiente [7]. Lembrando que isso só ocorre porque as bandas de valência e de condução se tocam nos seis pontos de Dirac na Primeira Zona de Brillouin, onde passa exatamente o nível de Fermi para um grafeno puro. Cálculos de Densidade de Estados mostram que no nível de Fermi a Densidade de Estados é nula. Como consequência desse resultado temos que o grafeno é um semicondutor de gap de energia nulo [14]. Sendo que energia da luz visível é da ordem de poucos eV, as transições ópticas vão ocorrer próximas ao ponto de Dirac. A dispersão linear das bandas de energia próximo do ponto K, tem semelhança com a energia de partículas relativísticas sem massa de repouso chamadas de neutrino pois autovalores e autofunções dos elétrons no grafeno perto de um ponto de Dirac, são descritos pela equação de Dirac 2D, que tem mesmo comportamento que a equação de Dirac 2D para neutrino, com troca da velocidade da luz $c$ para $v_F$. Com as matrizes de Pauli ,

$$\hat{\sigma}_x = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \tag{25}$$

sendo $\vec{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y)$, $\vec{\sigma}^* = (\hat{\sigma}_x, -\hat{\sigma}_y)$ à equação Dirac 2D para elétrons perto do ponto $K$ tem uma forma,

$$-i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \tag{26}$$

perto do ponto $K^{'}$ tem uma forma,

$$-i\hbar v_F \vec{\sigma^*} \cdot \vec{\nabla}\Psi^{'}(\vec{r}) = E^{'}\Psi^{'}(\vec{r}), \tag{27}$$

onde as funções de onda ,

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{vmatrix} A\Psi_A(\vec{r}) \\ B\Psi_B(\vec{r}) \end{vmatrix}, \quad \Psi^{'}(\vec{r}) = \begin{vmatrix} A^{'}\Psi^{'}_A(\vec{r}) \\ B^{'}\Psi^{'}_B(\vec{r}) \end{vmatrix}. \tag{28}$$

$\int d\vec{r}|\Psi_A(\vec{r})|^2 = 1$, $\int d\vec{r}|\Psi_B(\vec{r})|^2 = 1$ onde $|A|^2 + |B|^2 = 1$.

Eqs. (26),(28) admite soluções de funções de onda $\Psi(\vec{r}) \propto \exp(i\vec{q}\cdot\vec{r})$ neste caso temos o espectro de elétrons na forma relativística dada pela Eq. (24).

## 0.5 Aplicações do Grafeno

O grafeno se tornou um ícone importante na Física da matéria condensada, pois sua transparência não depende de nenhum parâmetro do material, é controlada apenas por uma constante fundamental, a constante de estrutura fina, que está associada normalmente à Física das partículas e de altas energias, uma situação raríssima em Física da matéria condensada. As propriedades incomuns de portadores de carga no grafeno são consequências do seu gap de energia e da dispersão linear de elétrons no nível de Fermi a dois pontos não equivalentes da zona de Brillouin. No limite de baixas energias, as quase-partículas, são descritas em termos de férmions relativísticos sem massa de repouso governados pela Hamiltoniano de Dirac 2D. Esse sistema já encontrou aplicações

na indústria de células solares, dispositivos de cristais líquidos, em sensores moleculares e na fabricação de transístores em nano escala. Também como elemento principal para criação materiais altamente resistentes e leves, pois a resistência de grafeno contra tensão de tração é 100 vezes maior do que a folha de aço de mesma espessura.

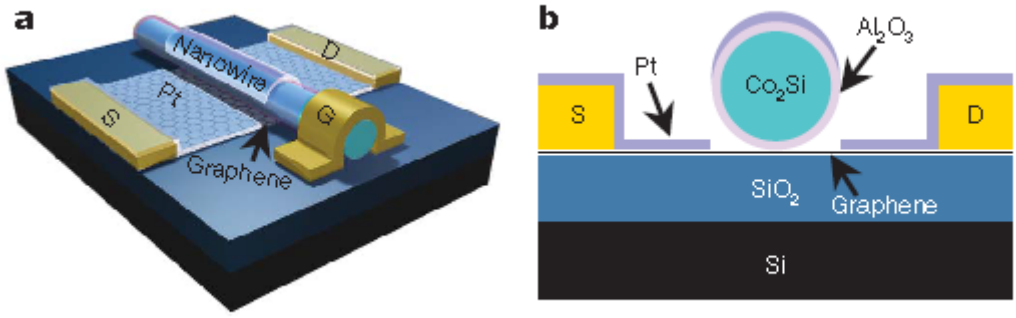



Figure 6: Esquema de um Transístor de Grafeno de alta velocidade

A aplicações do grafeno, provém de suas propriedades físicas que o tornam bem peculiar, com umas variedades de aplicações nas diversas áreas do conhecimento aqui vamos citar algumas em áreas distintas. Devido a mobilidade eletrônica alta ainda em temperatura ambiente, ele pode ser utilizado para fabricação de transístores [20], onde também é relatada uma tecnologia para fabricação de transístores de grafeno de alta velocidade mostrado esquematicamente na Fig. 6 [20].

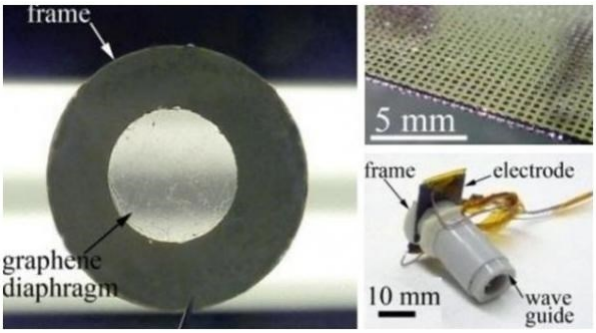



Figure 7: primeiro fone de ouvido de grafeno, desenvolvido por pesquisadores da Universidade da Califórnia

Uma das aplicações interessante é a criação de fones de ouvido com ótima qualidade. A ideia partiu de alguns pesquisadores da Universidade da Califórnia, que desenvolveram o primeiro fone de ouvido de grafeno. O que eles fizeram foi recriar a tradicional estrutura de um alto-falante, aproveitando todas as propriedades revolucionárias do material. Trocando em miúdos, sabemos que um alto-falante tradicional trabalha com a vibração de um diafragma de papel; é a sua movimentação que produz as frequências sonoras. O problema é que ele precisa contar com "amortecedores", além de se desgastar com o tempo e não ter 100 % de fidelidade. A invenção dos cientistas traz um diafragma feito de grafeno e que possui apenas 30 nanômetros de espessura ver na Fig . 7. Preso entre dois eletrodos de silício (são eles que permitem a vibração do material para a produção

do som), ele se mostrou incrivelmente resistente e fiel, trazendo uma alta qualidade de áudio [17].

Outra aplicação lançada pela Head na última temporada, revolucionou a forma de jogar tênis, a próxima geração desta novidade vai ser praticamente uma garantia de vitória: GRAPHENE XT ver na Fig 8. A exclusiva tecnologia Head fez com que o grafeno (material mais forte e leve do mundo), aplicado na armação do centro e de grip da raquete fazem dela 30 % mais resistente. Desta forma, um peso ainda mais significativo pode ser tirado ou adicionado para a cabeça e/ou grip, com o objetivo de oferecer aos jogadores distribuição de peso otimizada, manuseio perfeito e performance mais veloz. Head Graphene XT ASP, padrão de encordoamento adaptável é mostrada na Fig. 8.

Figure 8: Raquete GRAPHENE XT, feita com material armado com Grafeno.

A nova tecnologia HEAD ASP possibilita um padrão de encordoamento adaptável às necessidades do jogador em cada momento ou estratégia de jogo. As raquetes com esta tecnologia apresenta dois grommet sets alternáveis, para que o tenista possa escolher entre o padrão 16/16, que confere mais spin e potência, ou o padrão 16/19, que garante maior controle [18].

Na medicina também temos uma aplicação bem interessante, os cientistas estão estudando O efeito antibacteriano do grafeno. Este trabalho publicado na Revista Polyteck, onde uso generalizado de nanomateriais em biomedicina tem sido acompanhado por um crescente interesse em compreender as suas interações com tecidos, células e biomoléculas ver na Fig 9.

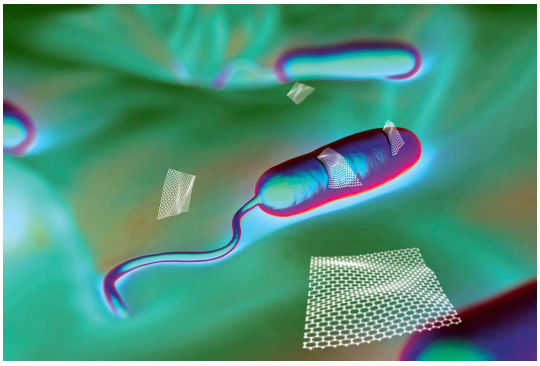


Figure 9: O efeito antibacteriano do grafeno.

Além disso, a forma como eles afetam a integridade de membranas celulares e proteínas também tem sido estudada. Pesquisadores da Shanghai University, na China, demonstraram, de forma experimental e teórica, que grafeno puro e nanofolhas de óxido de grafeno podem induzir a degradação das membranas celulares de Escherichia coli. Eles

mostraram que nanofolhas de grafeno podem penetrar e extrair grandes quantidades de fosfolipídios das membranas celulares. A compreensão relativa à interação dos nanomateriais com membranas celulares auxilia no entendimento sobre como eles causam citotoxicidade, o que é fundamental para a concepção de aplicações biomédicas mais seguras envolvendo nanomateriais[19].

## 0.6 Conclusão

Neste trabalho foi realizado uma revisão de Literatura, conhecer as ideias e os conceitos físicos envolvidos no estudo sobre o grafeno foi de grande relevância, pois para compreender a potencialidade das aplicações que foram abordados,onde foi feito uma análise sobre a estrutura cristalina do grafeno e as bandas de energia dentro da Primeira Zona de Brillouin, onde é possivel descrever todas as propriedades físicas do grafeno. Da forma que essas ocorrem nos seis pontos de Dirac, e por causa da dispersão linear das bandas de energia próximo do ponto K, ter semelhança com a energia de partículas relativísticas sem massa de repouso chamadas de neutrino pois autovalores e autofunções dos elétrons no grafeno perto de um ponto de Dirac tornam o grafeno bem peculiar, com uma variedades de aplicações.

## 0.7 Referencias bibliográficas

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morosov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films", Science, 306, 666-669 (2004).

[2] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, "Two-dimensional atomic crystals", Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 102, 10451-10453 (2005) .

[3] A. K. Geim and K. S. Novoselov, "The rise of graphene", Nature Materials, 6, 183-191 (2007).

[4] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, A. K. Geim, "Room-temperature Quantum Hall Effect in graphene", Science, 315, 1379 (2007).

[5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morosov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, "Two-dimensional gas of massless Dirac férmions in graphene", Nature, 438, 197-200 (2005).

[6] S. V. Morosov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, D. Jiang, and A. K. Geim, "Strong Suppression of Weak Localization in Graphene", Phys. Rev. Lett., 97, 016801 (2006).

[7] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, "The electronic properties of graphene", Reviews of Modern Physics, 81, 109-162 (2009).

[8] S.-H. Park, H.-K. Kim, S.-B. Yoon, C.-W. Lee, D. Ahn, S.- I. Lee, K. C. Roh, and K.-B. Kim, "Spray-assisted deep-frying process for the in situ spherical assembly of grapheme for energy-storage devices", Chemistry of Materials, 27, 457-465 (2014).

[9] P. R. Wallace, "The band theory of graphite", Phys. Rev., 71, 622-634 (1947).

[10] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, "FISICA DO ESTADO SOLIDO", Cengage Learning,São Paulo, p. 870 (2011).

[11] C. Kittel, "INTRODUÇÃO À FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO", LTC Editora, Oitava Edição, Rio de Janeiro, p. 578 (2006).

[12] S.V. Morozov, K.S.Novoselov, M.I.Katsnelson, F.Schedim, D.C.Elias, J.A. Jaszeazak e A.K.Geim,Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer,Physical Review Letters,100,016602-016605 (2008).

[13] A.A.Balandin, S.Ghosh, W.Bao, I.Calizo, D.Teweldebrhan, F.Miao e C.N.Lau, Superior Thermal Condutivity of Single-Layer Graphene, Nano Letters,8,902-907(2008).

[14] R. Saito, G.Dresselhaus, and M.S.S Dresselhaus Physical Properties of Carbon Nanotubes, Imperial College Press, London , (1998).

[15] A.K. Geim and K.S. Novoselov, Nature Materials (2007).

[16]A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R Peres, K.S. Novoselov, and A.K.Geim ; Cond-Mat 0709.1163V2 (2008).

[17] http://www.tecmundo.com.br/grafeno/38557-6-formas-como-o-grafeno-podera-mudar-o-mundo.htm.

[18] http://www.prospin.com.br/raquetes/tenis/head/graphene/head-graphene-xt.

[19] http://www.polyteck.com.br/posts/o-efeito-antibacteriano-do-grafeno/.

[20] L. Liao, Y.C Lin, M .Bao, R. Cheng, J. Bai, Y. Liu, Y. Qu, K.L .Wang, Y .Huang, X.Duan High-speed graphene transistors with a self-aligned nanowire gate ,Nature 467 (7313), 305-308

## 0.8 Cronograma

| Nº | Descrição | Ago 2015 | Set | Out | Nov | Dez | Jan 2016 | Fev | Mar | Abr | Mai | Jun | Jul |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | Estudar os trabalhos pioneiros [1], [2] e [9] sobre grafeno e conhecer as ideais físicas envolvidas nestes estudos, com foco em trabalho teórico [9]. | X | X | X | X | X | X | X | X | | | | |
| 2 | Estudar bandas da energia de condutância e valência dos semicondutores Si,Ge,GaAs, heteroestruturas semicondutores e estruturas MOS (Si-SiO2-metal, *etc*). Comparar suas bandas com os do grafeno. | X | X | X | X | X | X | X | X | | | | |
| 3 | Baseado no [9] e trabalho de revisão [7], estudar os trabalhos [1-6,8] sobre o grafeno e os efeitos físicos de transporte, ópticos e aplicações mais interessantes neste material de baixa-dimensionalidade. | | | X | X | X | X | X | X | X | X | X | X |
| 4 | - | | | | | | | | | | | | X |
| 4a | - Elaboração do Resumo e Relatório Final (atividade obrigatória) | | | | | | X | X | X | X | X | X | X |
| 4b | - Preparação da Apresentação Final para o Congresso (atividade obrigatória) | | | | | | X | X | X | X | X | X | X |

Figure 10: Conograma das atividades