



INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DO PIAUÍ - IFPI
CAMPUS SÃO RAIMUNDO NONATO-PI
CURSO DE LICENCIATURA EM FÍSICA

RAIMUNDA NONATA DOS SANTOS MAGALHÃES

**UMA REVISÃO SOBRE A DIAGONALIZAÇÃO DO GRAFENO E OS PONTOS DE
DIRAC: FORMALISMO DE SEGUNDA QUANTIZAÇÃO NO MODELO TIGHT-BINDING**

SÃO RAIMUNDO NONATO - PI

2024

RAIMUNDA NONATA DOS SANTOS MAGALHÃES

UMA REVISÃO SOBRE A DIAGONALIZAÇÃO DO GRAFENO E OS PONTOS DE
DIRAC: FORMALISMO DE SEGUNDA QUANTIZAÇÃO NO MODELO TIGHT-BINDING

Trabalho de Conclusão de Curso (monografia) apresentado como exigência parcial para obtenção do diploma do Curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí, Campus São Raimundo Nonato-Pi .

Orientador: Prof. Dr. Francisco Nogueira Lima.

RAIMUNDA NONATA DOS SANTOS MAGALHÃES

REVISÃO SOBRE A DIAGONALIZAÇÃO DO GRAFENO E OS PONTOS DE DIRAC:
FORMALISMO DE SEGUNDA QUANTIZAÇÃO NO MODELO TIGHT-BINDING

Trabalho de Conclusão de Curso (monografia) apresentado como exigência parcial para obtenção do diploma do Curso de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí, Campus São Raimundo Nonato-PI.

Aprovada em:
12/09/2024

Banca Examinadora:

Orientador: Prof. Dr. Francisco Nogueira Lima
Instituto Federal do Piauí (IFPI)

Prof. Dr. Guilherme Severino Mendes de Araujo
Instituto Federal do Piauí (IFPI)

Prof. Dr. Rafael de Alencar Rocha
Instituto Federal do Piauí (IFPI)

Dedicatória: Dedico este trabalho à minha mãe e meu marido. Este trabalho é dedicado a todos vocês, que, de alguma forma, contribuíram para a minha formação. Minha gratidão eterna por acreditarem em mim e me ajudarem a chegar até aqui.

Dedicatória: Dedico este trabalho à minha mãe e meu marido. Este trabalho é dedicado a todos vocês, que, de alguma forma, contribuíram para a minha formação. Minha gratidão eterna por acreditarem em mim e me ajudarem a chegar até aqui.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Jeová por me conceder a força e a perseverança necessárias para continuar minha jornada acadêmica. Sua orientação e apoio espiritual foram essenciais em cada etapa deste caminho, e sem Ele, eu não teria conseguido superar os desafios que encontrei.

À minha mãe, minha gratidão. Mesmo morando no interior, ela não mediu esforços para me apoiar financeiramente, permitindo que eu permanecesse na cidade para cursar a faculdade. Seu sacrifício e dedicação foram fundamentais para que eu pudesse seguir meus sonhos e atingir meus objetivos. Seu amor e apoio incondicional me motivaram a continuar, mesmo nos momentos mais difíceis.

Ao meu marido, que sempre esteve ao meu lado, oferecendo suporte emocional e prático, agradeço profundamente. Sua presença constante e seu encorajamento tornaram a experiência universitária mais leve e agradável. Ele sempre soube como me ajudar a manter o equilíbrio entre os estudos e a vida pessoal, tornando essa caminhada mais serena e significativa.

Não posso deixar de mencionar as bolsas de estudo que recebi durante minha graduação, as quais foram de fundamental importância para a conclusão deste trabalho: a bolsa Residência Pedagógica(RP)/CAPES, o Programa Institucional de Bolsas de Iniciação à Docência (PIBID)/CAPES, e a Bolsa Permanência via MEC. Esses auxílios não apenas proporcionaram o apoio financeiro necessário, mas também me deram a motivação para continuar me dedicando aos estudos. Sou eternamente grata por essas oportunidades que contribuíram significativamente para a minha formação.

Agradeço ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí (IFPI) – Campus São Raimundo Nonato, pela estrutura e oportunidades que ofereceram durante minha formação acadêmica. Sou grata por todo o conhecimento e suporte que recebi ao longo da minha trajetória.

Agradeço também aos meus professores e colegas de curso, que contribuíram de inúmeras maneiras para o meu crescimento acadêmico e pessoal. As discussões, os trabalhos em grupo e o apoio mútuo foram valiosos ao longo desta jornada. Por fim, agradeço a todos que, direta ou indiretamente, fizeram parte desta trajetória. Cada palavra de incentivo, cada gesto de apoio e cada momento de compreensão foram essenciais para que eu pudesse concluir esta etapa da minha vida. Este trabalho é dedicado a todos vocês, que, de alguma forma, contribuíram para a minha formação. Minha gratidão eterna por acreditarem em mim e me ajudarem a chegar até aqui.

RESUMO

O grafeno, uma única camada atômica de carbono, destaca-se por suas propriedades eletrônicas, mecânicas e térmicas excepcionais, o que o torna promissor para diversas aplicações tecnológicas. Para compreender essas propriedades, é fundamental analisar sua estrutura cristalina e os aspectos matemáticos associados. O grafeno pode ser descrito como duas sub-redes de Bravais triangulares interpenetradas, com sua rede recíproca associada aos vetores de onda k , que exibem a periodicidade da estrutura. Particularmente, os pontos K e K' , conhecidos como pontos de Dirac, são de grande importância devido aos fenômenos eletrônicos singulares que ocorrem nessas regiões. O formalismo de segunda quantização, uma ferramenta crucial na física quântica, é aplicado ao modelo tight-binding para descrever as interações entre os átomos de carbono e diagonalizar o sistema, facilitando a compreensão das bandas de energia do grafeno. Este trabalho revisa o processo de diagonalização do grafeno, explorando o formalismo de segunda quantização no modelo tight-binding e oferece uma análise detalhada dos pontos de Dirac. O objetivo principal foi mostrar a estrutura do grafeno e a parte matemática sobre as energias permitidas e os pontos de Dirac. Neste contexto, o presente trabalho se propõe a servir como um guia para aqueles que desejam iniciar seus estudos sobre o grafeno.

Palavras-Chave: grafeno; formalismo de segunda quantização; modelo tight-binding; diagonalização; pontos de Dirac.

ABSTRACT

Graphene, a single atomic layer of carbon, stands out for its exceptional electronic, mechanical, and thermal properties, making it promising for various technological applications. To understand these properties, it is essential to analyze its crystal structure and associated mathematical aspects. Graphene can be described as two interpenetrating triangular Bravais sublattices, with its reciprocal lattice linked to wave vectors k that exhibit the periodicity of the structure. Particularly, the K and K' points, known as Dirac points, are of great importance due to the unique electronic phenomena occurring in these regions. The second quantization formalism, a crucial tool in quantum physics, is applied to the tight-binding model to describe the interactions between carbon atoms and diagonalize the system, facilitating the understanding of graphene's energy bands. This work reviews the diagonalization process of graphene, exploring the second quantization formalism within the tight-binding model and providing a detailed analysis of Dirac points. The main objective was to show the structure of graphene and the mathematical part about the allowed energies and the Dirac points. In this context, the present work aims to serve as a guide for those who wish to begin their studies on graphene.

Keywords: graphene; second quantization formalism; tight-binding model; diagonalization; Dirac points.

LISTA DE SÍMBOLOS

a Constante de rede do grafeno

t Parâmetro de hopping no modelo tight-binding

E Energia

H Hamiltoniano

k Vetor de onda (ou número de onda)

$\vec{K}$ Ponto de Dirac no grafeno

$\vec{K}'$ Ponto de Dirac no grafeno

$a^\dagger$ Operador de criação

$b^\dagger$ Operador de criação

a operador de aniquilação

δ Função delta de Dirac

Δ_k Fator geométrico da rede

V_F Velocidade de Fermi

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
2	PROPRIEDADES E ESTRUTURA CRISTALINA DO GRAFENO	14
2.1	Rede direta	15
2.2	Rede recíproca	16
3	FORMALISMO DE SEGUNDA QUANTIZAÇÃO	19
4	DIAGONALIZAÇÃO DO GRAFENO DENTRO DO MODELO TIGHT-BINDING	22
5	PROPRIEDADES DOS PONTOS DE DIRAC	32
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	35
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	36

1 INTRODUÇÃO

O grafeno é um material altamente promissor, apresentando-se como uma alternativa inovadora para diversas tecnologias. Suas excelentes propriedades mecânicas, elétricas, térmicas e ópticas foram evidenciadas pelos físicos Andre Geim e Konstantin Novoselov, que, por meio de experimentos, demonstraram seu extraordinário potencial eletrônico. Esse trabalho pioneiro rendeu à dupla o Prêmio Nobel de Física em 2010. Desde então, o grafeno tem recebido grande destaque na comunidade científica, devido à sua leveza, resistência e desempenho superior em comparação com materiais de uso semelhante, confirmando o fascínio e a importância de suas aplicações potenciais (Rebello; Nascimento; Amarante, 2018).

Embora o termo grafeno só tenha sido associado à sua descoberta em 2004, ele foi utilizado pela primeira vez em 1987. A definição oficial do grafeno foi estabelecida apenas em 1994 pela International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) (Silva; Cária, 2017). O grafeno desempenha um papel significativo na ciência dos nanomateriais devido às suas notáveis características, como flexibilidade, excelente condução elétrica e quase total transparência. Essas propriedades fazem do grafeno um material mais revolucionário do que o silício e o plástico. Com um enorme potencial de aplicação em diversas áreas, o grafeno destaca-se na micro e nanoeletrônica, sensores, nanoengenharia, entre outras (Hasan; Marion et al., 2016).

O grafeno foi obtido pela primeira vez em 2004 por Novoselov, Geim e seus colaboradores através da microesfoliação mecânica. Este método consiste na esfoliação de flocos de grafite de alta pureza utilizando fitas adesivas. Embora essa técnica seja a mais comum e barata, existem outras técnicas de produção, como a deposição química na fase vapor, a sublimação de carbeto e a esfoliação química (Cadore, 2013). Diante disso, estudos recentes demonstraram a possibilidade de obtenção do grafeno em larga escala. Podemos citar a síntese reprodutível de grafeno de alta qualidade, a qual utiliza o método de deposição química de vapor sem oxigênio. A presença de oxigênio no grafeno é responsável por defeitos estruturais. Sendo assim, por meio desse método, torna-se possível, através da integridade do material, a utilização em aplicações eletrônicas e tecnológicas de ponta, bem como sua viabilidade para comercialização em larga escala (Amontree et al., 2024).

Os elétrons no grafeno se comportam como partículas relativísticas sem massa, com mobilidade de aproximadamente 10^6 m/s. Além de ser um excelente condutor elétrico, o grafeno também é um ótimo condutor térmico, devido à livre circulação dos elé-

trons em sua estrutura única. O grafeno possui um alto grau de transparência, permitindo a passagem da luz com uma transmitância superior a 95% em filmes finos de apenas 2 nm. Por fim, a flexibilidade é uma característica intrínseca do grafeno; mesmo quando dobrado, ele retorna ao seu estado plano original sem sofrer danos à sua estrutura(Araujo, 2022).

Como será discutido ao longo deste trabalho, o grafeno apresenta o que chamamos de gap nulo, ou seja, não possui uma banda proibida entre a banda de valência e a banda de condução. Isso dificulta sua aplicação em dispositivos eletrônicos, pois é através dessa banda proibida que se torna possível controlar o fluxo de corrente elétrica, permitindo, de forma simplificada, ligar ou desligar o dispositivo(Gomes, 2024). Para resolver esse problema, diversos estudos têm sido realizados. Um deles, publicado recentemente, propõe a introdução de materiais híbridos, como o grafeno temperado com hBN, como uma possível solução. Outra alternativa ainda mais promissora é o grafino, um alótropo do carbono que, devido à sua menor rigidez em comparação ao hBN, oferece vantagens adicionais(Cruz, 2024).

Ferramentas como softwares de simulação computacional são amplamente utilizadas para estudar as propriedades eletrônicas do grafeno, que envolvem cálculos numéricos complexos. Um exemplo prático do uso dessas ferramentas é a simulação do comportamento de uma nanofita de grafeno sob a aplicação de um campo elétrico, permitindo a reprodução detalhada dos fenômenos eletrônicos em escala nanométrica (Bigon; Tedesco, 2022). O Kwant, um pacote de software livre baseado em Python, é especialmente focado no transporte quântico e é utilizado, por exemplo, para realizar cálculos numéricos complexos, como a determinação da densidade de corrente de probabilidade(Araújo et al., 2022). Outra ferramenta utilizada é o o software pybinding o qual usa python como linguagem de programação(Cavalcante, 2021).

Diversos estudos estão sendo conduzidos sobre o grafeno, com o objetivo de promover inovações em várias áreas. Um exemplo recente é o estudo intitulado "Avanços Recentes em Dispositivos Eletroanalíticos Baseados em Grafeno para Aplicações em Saúde"(Avanços..., s.d.). Além disso, há revisões abrangentes sobre as propriedades, síntese e aplicações do grafeno (Urade; Lahiri; Suresh, 2023), e investigações relacionadas ao uso da membrana corioalantoica (HET-CAM) como método alternativo para avaliar a biocompatibilidade de pontos quânticos de grafeno (GQDs) com fins biomédicos (Santos, 2023). Outros estudos focam na síntese de óxido de grafeno dopado com nanopartículas de ouro e Fenil-Tio-Ftalocianina, com potencial para tratamento fotodinâmico e fototérmico do câncer de pele (Junior et al., 2024).

Diante disso, este trabalho oferece uma introdução ao estudo do grafeno, com o intuito de ser um recurso útil para aqueles que desejam compreender as principais características desse material, como sua estrutura cristalina e sua rede recíproca. A abordagem inclui uma análise detalhada do comportamento eletrônico do grafeno, abordando a formação da sua banda de energia e a diagonalização dentro do modelo tight-binding, com especial atenção aos pontos de Dirac. Ao empregar o formalismo de segunda quantização, este material busca proporcionar uma base sólida para a compreensão dos fenômenos eletrônicos associados ao grafeno, preparando o leitor para estudos mais aprofundados sobre esse material fascinante.

Sendo assim, este trabalho tem como objetivo fazer uma revisão sobre diagonalização do grafeno, permitindo a compreensão das bandas de energia desse material. Para isso, será utilizado o formalismo de segunda quantização dentro do modelo tight-binding. Este modelo é amplamente empregado para descrever sistemas cristalinos, proporcionando uma compreensão detalhada das propriedades eletrônicas do grafeno. O formalismo de segunda quantização oferece uma abordagem matemática robusta para resolver problemas de muitos corpos, permitindo a análise precisa dos estados eletrônicos do grafeno.

Além disso, este trabalho realizará um estudo detalhado dos pontos de Dirac. Os pontos de Dirac são locais no espaço de momento onde a estrutura de bandas do grafeno exibe uma dispersão linear, similar ao comportamento de partículas relativísticas. Para essa análise, utilizaremos uma abordagem matemática rigorosa e detalhada, visando torná-la de fácil compreensão para leitores iniciantes no tema, embora o tema seja muito pesquisado, sua abordagem foi pensada para ser acessível e didática, ajudando a formar a próxima geração de pesquisadores que trabalharão com o grafeno.

A presente pesquisa é organizada da seguinte forma: inicialmente, discutiremos as propriedades e a estrutura cristalina do grafeno, estabelecendo a base para a compreensão de suas características eletrônicas. Em seguida, apresentaremos o formalismo de segunda quantização, que fornece uma estrutura matemática poderosa para a descrição de sistemas quânticos de muitos corpos. A diagonalização do grafeno dentro do modelo tight-binding será então explorada em detalhe. E por fim, analisaremos os pontos de Dirac e suas implicações físicas.

2 PROPRIEDADES E ESTRUTURA CRISTALINA DO GRAFENO

O grafeno, um alótropo do carbono, assume uma disposição bidimensional em um retículo, com espessura equivalente à de um átomo. Este material é organizado em uma estrutura cristalina conhecida como "favo de mel". De acordo com a referência (De Jesus; Freire; Guimarães, 2012), o grafeno pode ser considerado o bloco fundamental para todas as formas alotrópicas do carbono, como os fulerenos, nanotubos de carbono, grafite e etc. Os fulerenos, por exemplo, podem ser entendidos como uma folha de grafeno enrolada formando uma esfera, enquanto os nanotubos de carbono consistem em uma folha de grafeno enrolada em torno de seu próprio eixo, formando um cilindro. Por outro lado, o grafite corresponde ao empilhamento de várias folhas de grafeno. Além de suas notáveis propriedades térmicas, mecânicas e de alta condutividade, o grafeno apresenta grande potencial como substituto do silício na indústria de microeletrônica. Isso se deve ao fato de que o silício perde estabilidade quando manipulado em escalas nanométricas, como indicado por Frazier et al. em (Frazier et al., 2009).

Até 2005, acreditava-se que o isolamento estruturas cristalinas bidimensionais fosse impossível, devido à instabilidade termodinâmica de materiais com essa característica (Santos; Souza, 2019). No entanto, os físicos Andre Geim e Konstantin Novoselov demonstraram que essa convicção estava equivocada (Novoselov et al., 2004). Utilizando o grafite, um alótropo do carbono, eles utilizaram um método simples para isolar o grafeno, conhecido como clivagem micromecânica (Camargos; Oliveira Semmer; Silva, 2017). Esse processo envolveu a remoção de camadas do grafite com o uso de fita adesiva, repetindo o procedimento várias vezes até obterem uma camada tão fina que consistia apenas em um único plano de átomos de carbono, ou seja, o grafeno. A descoberta do grafeno em 2004 culminou no Prêmio Nobel de Física concedido a Geim e Novoselov em 2010. (Segundo; Vilar, 2016; Novoselov, 2011).

O grafeno é o resultado da hibridização sp^2 do carbono, no qual os átomos desse elemento químico são ligados por meio de ligações covalentes. Cada átomo de carbono no grafeno forma três ligações σ e uma ligação π . As ligações σ estão no mesmo plano e formam ângulos de 120° entre si, enquanto a ligação π é perpendicular ao plano do grafeno e é responsável pela mobilidade eletrônica no material (SÁ et al., 2015). Nas próximas seções, discutiremos detalhadamente a rede direta e a rede recíproca do grafeno, conceitos fundamentais para compreender sua estrutura cristalina. A análise dessas redes é crucial para entender a formação das bandas de energia e, conseqüentemente, os fenômenos eletrônicos que tornam o grafeno um material tão promissor. A partir da definição das redes, será possível explorar com mais profundidade as propriedades ele-

trônicas, especialmente em torno dos pontos K e K' , que desempenham um papel central na dinâmica dos elétrons no grafeno.

2.1 Rede direta

Os sólidos são estruturas cristalinas que são formadas por arranjos regulares de átomos, dessa forma os elétrons que se movem sobre essa estrutura cristalina são submetidos a um potencial periódico. Uma forma tradicional de descrever redes cristalinas é através da chamada rede de Bravais, que representa pontos que correspondem as posições discretas no espaço (Junior; Francisco, 2024). A rede de Bravais é periódica e permanece inalterada por translações discretas

$$R \rightarrow R + T$$

onde

$$T = La_1 + Ma_2 + Na_3$$

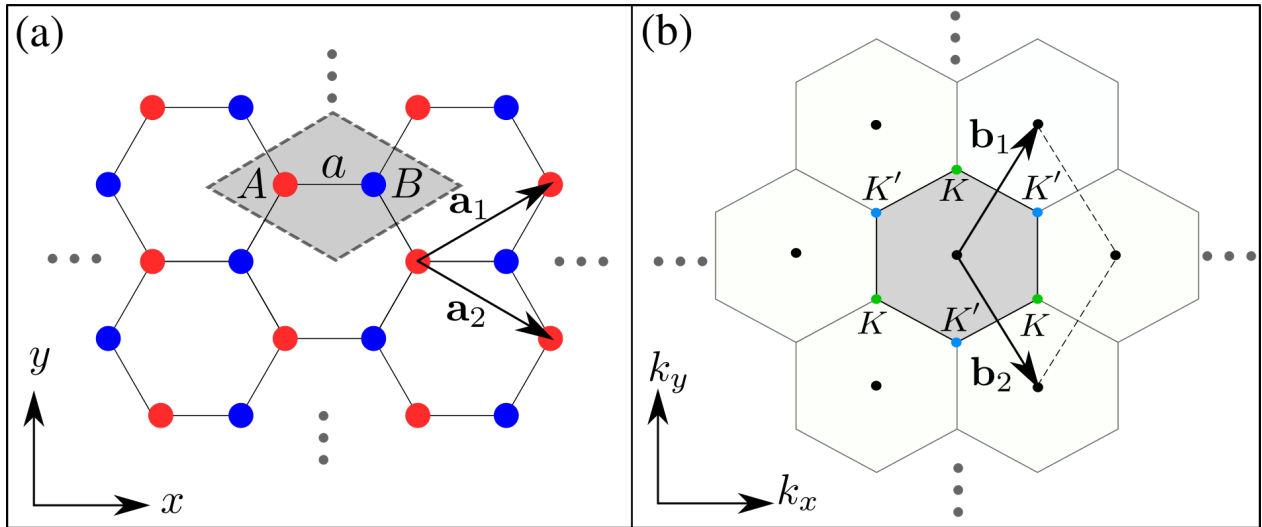
sendo L, M, N valores inteiros.

A rede hexagonal do grafeno não é uma rede de Bravais, ou seja, não existe dois vetores primitivos, no qual realizando operações de translações podem gerar qualquer outro sítio da estrutura cristalina. Mas podemos enxergá-lo como duas sub-redes de Bravais triangulares interpenetrada, contendo dois átomos de carbono na base. Essas sub-redes serão chamadas de sub-rede A e sub-rede, B, como ilustrado a figura 1 (Gross; Wiese, 2011).

Na ilustração esquemática da figura ?? das duas redes, a imagem (a) representa a rede cristalina (rede direta ou real), com os vetores de translação primitivo, identificados como a_1 e a_2 , a imagem (b) representa a rede recíproca, com os vetores b_1 e b_2 . Como mostra na figura (a), a base do grafeno é constituída por dois átomos de carbono, um da sub-rede A (átomo vermelho) e outro da sub-rede B (átomo azul). A célula unitária de cada rede é representada pela figura geométrica na cor cinza. Os vetores da sub-rede A e sub-rede B serão escritos em coordenadas cartesianas. A distância entre os átomos de carbono adjacentes é 1.42 Å (Araújo, 2021). Fazendo a decomposição dos vetores primitivos a_1 e a_2 , encontramos as componentes de cada um,

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{3a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2}\right), \quad \mathbf{a}_2 = \left(\frac{3a}{2}, -\frac{\sqrt{3}a}{2}\right) \quad (1)$$

Figura 1: Imagem (a) representa a estrutura cristalina, e (b) a rede recíproca.



Fonte:(Araújo et al., 2022)

Os vetores para os três vizinhos próximos no espaço real são dados por

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{\delta} = -a(1, 0) \quad (2)$$

É interessante observar que os três primeiros vizinhos de um determinado sítio da sub-rede B sempre é os sítios da sub-rede A, assim como os três primeiros vizinhos de um determinado sítio da sub-rede A são sítios da sub-rede B. Já os segundos vizinhos de cada sub-rede são seis sítios da sub-rede equivalente. Na próxima subseção, discutiremos a rede recíproca e apresentaremos matematicamente o processo de conversão entre a rede direta e a rede recíproca.

2.2 Rede recíproca

É a partir da rede de Bravais que a rede recíproca é definida, a rede de Bravais é frequentemente referida como rede direta. Se considerarmos um conjunto de pontos R constituindo uma rede de Bravais e uma onda plana associada a essa rede. Em geral, para um vetor de onda k arbitrário, essa onda plana não seguirá a periodicidade da rede de Bravais. No entanto, para certas escolhas específicas do vetor de onda, a onda plana exibirá a mesma periodicidade da rede. A rede recíproca é, portanto, o conjunto de todos os vetores de onda K que garantem que as ondas planas tenham a periodicidade de uma rede de Bravais específica (Ashcroft; Mermin; Rodriguez, 1978).

Essa periodicidade pode ser formalmente expressa utilizando a relação entre o vetor posição R e o vetor de onda K da rede recíproca. Podemos demonstrar essa periodicidade através da equação:

$$e^{iKR} = 1 \quad (3)$$

Essa expressão indica que, ao transladar o vetor posição R , a onda plana mantém sua periodicidade em relação à rede de Bravais. Para um vetor de onda K pertencente à rede recíproca, temos:

$$e^{iKr} = e^{iK(R+r)} \quad (4)$$

Aplicando a propriedade distributiva, obtemos:

$$e^{iKr} = e^{iKR} e^{iKr} \quad (5)$$

Dividindo ambos os lados da equação por e^{iKr} chegamos à seguinte expressão:

$$e^{iKR} = 1 \quad (6)$$

A equação (6) evidencia a operação de simetria da rede, na qual a translação de uma molécula, átomo ou partícula ao longo da rede recíproca resulta em uma posição final indistinguível da inicial, preservando assim a configuração do sistema.

Para fazermos a mudança de base da estrutura cristalina para a base recíproca, ou seja, espaço dos momentos é necessário utilizar a seguinte relação (Kittel, 2005):

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \cdot a_2 \times a_3}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_1 \cdot a_2 \times a_3} \quad (7)$$

$$\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi\sqrt{3}}{3a} \right), \quad \vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi\sqrt{3}}{3a} \right) \quad (8)$$

Os vetores b_1 e b_2 do espaço recíproco são construídos por meio de uma transformada de Fourier a partir do espaço real, e seguem a condição de ortogonalidade (Cadore, 2013):

$$b_j \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij} \quad (9)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{para } i = j \\ 0 & \text{para } i \neq j \end{cases} \quad (10)$$

δ_{ij} é o delta de Kronecker.

Os pontos K e K' tem uma importância particular no estudo teórico do grafeno, e são escrito no espaço recíproco da seguinte forma(Sousa, 2014)

$$K = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \quad , \quad K' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right) \quad (11)$$

3 FORMALISMO DE SEGUNDA QUANTIZAÇÃO

O formalismo da segunda quantização é amplamente utilizado para descrever sistemas de muitos corpos, compostos por múltiplas partículas indistinguíveis, como elétrons ou fótons em contextos quânticos. Nesse formalismo, empregam-se operadores de criação ($a_i^\dagger$) e destruição (a_i), responsáveis por representar a criação e aniquilação dessas partículas. A relevância da segunda quantização é destacada no estudo de sistemas com várias partículas, uma vez que o formalismo de primeira quantização, adequado para sistemas de uma única partícula, não atende a esses casos. Portanto, este trabalho se concentrará no formalismo de segunda quantização, com ênfase na análise detalhada das propriedades dos operadores de criação ($a_i^\dagger$) e destruição (a_i), fundamentais para compreender o processo de diagonalização do hamiltoniano do grafeno(Paniagua, s.d.).

No formalismo de segunda quantização, o estado de um sistema de N partículas pode ser escrito da seguinte forma, utilizando a notação de Ket's de Dirac:

$$|\Psi\rangle = |n_1, n_2, n_3, \dots, n_i, \dots\rangle \quad (12)$$

Nos limitaremos ao estudo de sistema de partículas fermiônicas. Férmions podem ser definidos como partículas de spin semi-inteiro idênticas que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, isto é, duas partículas fermiônicas não podem ocupar o mesmo estado quântico. O operador de criação ($a_i^\dagger$) criou um elétron no orbital χ_i (Castro, 2014). Veja a expressão

$$a_i^\dagger |\chi_k \dots \chi_l\rangle = |\chi_i \chi_k \dots \chi_l\rangle$$

Esses operadores tem a propriedade de que quando atuam em um estado criam ou destroem uma partícula nesse estado. A ordem de aplicação do operador vai influenciar na ordem de criação do elétron no orbital(SANTOS JUNIOR et al., 2020). Por exemplo,

$$a_i^\dagger a_j^\dagger |\chi_k \dots \chi_l\rangle = a_i^\dagger |\chi_j \chi_k \dots \chi_l\rangle = |\chi_i \chi_j \chi_k \dots \chi_l\rangle$$

Invertendo a posição dos operadores, podemos observar que a ordem vai influenciar. veja o exemplo,

$$a_j^\dagger a_i^\dagger |\chi_k \dots \chi_l\rangle = a_j^\dagger |\chi_i \chi_k \dots \chi_l\rangle = |\chi_j \chi_i \chi_k \dots \chi_l\rangle = -|\chi_i \chi_j \chi_k \dots \chi_l\rangle$$

Sendo assim, podemos escrever a seguinte relação

$$(a_j^\dagger a_i^\dagger + a_i^\dagger a_j^\dagger) |\chi_k \dots \chi_l\rangle = 0$$

O anti-comutador de dois operadores de criação sempre será 0. Para trocar a ordem de aplicação dos operadores, basta mudar o sinal do operador $a_j^\dagger a_i^\dagger$. Logo, podemos escrever a relação

$$a_j^\dagger a_i^\dagger = -a_i^\dagger a_j^\dagger$$

Se os índices forem iguais, temos

$$a_i^\dagger a_i^\dagger = -a_i^\dagger a_i^\dagger = 0$$

Veja a seguinte expressão

$$a_1^\dagger a_1^\dagger |\chi_2 \chi_3\rangle = a_1^\dagger |\chi_1 \chi_2 \chi_3\rangle = |\chi_1 \chi_1 \chi_2 \chi_3\rangle = 0$$

Logo, podemos verificar que é impossível criar dois elétrons no mesmo orbital χ_1 , além disso, não é possível criar um elétron em um orbital que já está ocupada. Sendo assim, obedece o princípio de exclusão de Pauli, esse princípio estabelece que duas partículas idênticas, como elétrons, prótons e nêutrons, não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente em um sistema quântico (Silva, 2021) (Pauli, 1994).

Neste momento, dedicaremos nossa análise às propriedades do operador de aniquilação a_1 . É fundamental ressaltar que essas propriedades guardam semelhança com aquelas do operador de criação $a_1^\dagger$. Veja a expressão

$$a_i |\chi_i \chi_j\rangle = \chi_j$$

O operador aniquilação a_i removeu uma partícula do orbital χ_i .

$$a_i |\chi_i \chi_k \dots \chi_l\rangle = |\chi_k \dots \chi_l\rangle$$

Podemos concluir que matematicamente o a_i diminui o número de partículas do sistema.

$$a_i |\chi_k \chi_l \chi_i\rangle = -a_i |\chi_i \chi_l \chi_k\rangle = -|\chi_l \chi_k\rangle = |\chi_k \chi_l\rangle$$

Para que o operador a_i aniquile uma partícula do orbital χ_i , é fundamental que esse orbital esteja ocupado. O sinal de menos presente na expressão indica a transição do orbital χ_k para o orbital χ_i , essa transição é necessária para a aplicação do operador, uma vez que a ordem de aplicação é crucial, pois só é possível aniquilar uma partícula se ela estiver presente no orbital correspondente (Altland; Simons, 2010).

$$a_j a_i + a_i a_j = 0 \Rightarrow a_j a_i = -a_i a_j \quad (13)$$

A relação anti-comutação também é válida para o operador aniquilação, assim como para o operador criação.

Se $j = i$

$$a_i a_i = -a_i a_i = 0 \quad (14)$$

Portanto, não se pode aniquilar um elétron duas vezes no mesmo orbital.

4 DIAGONALIZAÇÃO DO GRAFENO DENTRO DO MODELO TIGHT-BINDING

O modelo de ligação forte, do inglês (tight-binding) do grafeno, foi implementado inicialmente por P.R. Wallace, visando a descrição de um plano atômico no grafite, em 1947. O plano atômico do grafite consiste em múltiplas camadas de grafeno empilhadas (Jimenez, 2015). No entanto, esse modelo só é útil se considerarmos a superposição dos orbitais eletrônicos entre os vizinhos mais próximos, primeiros e segundos vizinhos, e terceiro para casos mais complicados. O método de tight-binding, inicialmente desenvolvido por Bloch em 1928, envolve a combinação linear de orbitais atômicos localizados em diferentes átomos do cristal. Utilizando essa abordagem, obtemos um número reduzido de funções base em comparação com a combinação de ondas planas. Na aproximação tight-binding, os estados eletrônicos de um cristal são determinados com base nos orbitais dos átomos isolados (Silva Júnior et al., 2018).

A diagonalização do grafeno nos permite entender quais são as energias permitidas pelo sistema e como funciona as bandas de energia desse material. Na prática, trabalhar com o grafeno, que é composto por diversos átomos, é resolver a equação de Schödinger, para muitos corpos (NASCIMENTO et al., 2012). Assim, utilizaremos o formalismo de segunda quantização, dentro do modelo de ligação forte para diagonalizar o hamiltoniano e entender as energias permitidas por ele. O Hamiltoniano será expresso em termos de operadores de criação e aniquilação, assim como no formalismo de segunda quantização.

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j + a_j^\dagger a_i + b_j^\dagger b_i) \quad (15)$$

Onde $t = 2.8eV$ é o parâmetro de hopping associado a transição de elétrons entre os sítios mais próximos (primeiros vizinhos), enquanto o hopping para os segundos vizinhos é $t' = 0,2 < eV$, isto significa que t' é da ordem de 10% de t (Nunes, 2015). $a_i(a_i^\dagger)$ é um operador fermiônico que aniquila (cria) um elétron no sítio i da sub-rede A e $b_i(b_i^\dagger)$ é um operador fermiônico que aniquila (cria) um elétron no sítio i átomo na sub-rede B. O termo $\langle i,j \rangle$ representa a soma entre os primeiros vizinhos e o termo $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ representa a soma dos segundos vizinhos.

Vamos analisar inicialmente as bandas de energia para os primeiros vizinhos. Para fazer esse processo, será utilizado a referência (Neto et al., 2009) (LINS et al., 2018). Para

diagonalizar o primeiro termo do Hamiltoniano (15) associado aos primeiros vizinhos, vamos recorrer as transformadas de Fourier, para passar do espaço real, ou direto para o espaço recíproco, onde temos vetores de onda $\vec{k}$ associado a rede. Essas transformadas são dadas por

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}; & a_i^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \\ b_j &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j}; & b_j^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \end{aligned} \quad (16)$$

Onde N representa a quantidade de de átomos em cada sub-rede e $\vec{k}$ é o vetor de onda no espaço recíproco. Agora vamos substituir as transformadas de fourier no local dos operadores de criação de aniquilação na equação do Hamiltoniano (15), assim, temos

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^\dagger e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \right) \quad (17)$$

. Organizando a equação 17, temos a seguinte expressão

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \right] \quad (18)$$

.

Denotando o vetor relativo δ_n entre um átomo na posição $\vec{r}_i$ e seus primeiros vizinhos, assim $\delta_n = \vec{r}_j - \vec{r}_i$, fixando o sub-índice j, temos $\vec{r}_j = \vec{r}_i + \delta_n$. Reescrevendo o hamiltoniano

$$H = -t \left[\sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_i + \delta_n)} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_i + \delta_n)} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \right] \quad (19)$$

Reorganizando o hamiltoniano, temos

$$H = -t \left[\sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \delta_n} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} e^{-i\vec{k}' \cdot \delta_n} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \right] \quad (20)$$

$$H = -t \left[\sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_n} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \sum_{n=1}^3 e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_n} \right] \quad (21)$$

Com essa manipulação algébrica conseguimos montar um delta de Kronecker que simplificará termos no somatório

$$\delta_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{1}{N} \sum_i \pm e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} = \begin{cases} 1, & \vec{k} = \vec{k}' \\ 0, & \vec{k} \neq \vec{k}' \end{cases} \quad (22)$$

. Assim, para $\vec{k} = \vec{k}'$, o hamiltoniano pode ser escrito como

$$H = -t \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} - t \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \sum_{n=1}^3 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} \quad (23)$$

Vamos considerar que

$$\Delta_{\vec{k}} \equiv \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} \quad e \quad \Delta_{\vec{k}}^* \equiv \sum_{n=1}^3 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} \quad (24)$$

Onde esse termo caracteriza a geometria da rede, chamado de fator geométrico. Reescrevendo o hamiltoniano, temos (23)

$$H = -t \sum_{\vec{k}} \left[\Delta_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}} \right]. \quad (25)$$

O vetor relativo $\vec{\delta}_n$ conecta um átomo da sub-rede A aos primeiros vizinhos da sub-rede B. Sabemos, que um átomo da sub-rede A tem três vizinhos na sub-rede B, assim, teremos três vetores relativos, ligando esse átomo da sub-rede A a cada vizinho da sub-rede B. Em coordenadas cartesianas esses vetores são escritos como

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}) \quad , \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}) \quad e \quad \vec{\delta}_3 = -a\hat{x} \quad (26)$$

Fazendo o produto desses vetores com os respectivos $\vec{k} = \vec{k}_x \hat{x} + \vec{k}_y \hat{y}$, e reescrevendo $\Delta_{\vec{k}}$

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{k}} &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} \left[1 + e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2)} + e^{i\vec{k} \cdot (\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3)} \right] \\ &= e^{-iak_x} \left[1 + e^{i\frac{3}{2}ak_x} \left(e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y} + e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y} \right) \right].\end{aligned}\quad (27)$$

Sabendo que $2 \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a) = e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y} + e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y}$

$$\Delta_{\vec{k}} = e^{-iak_x} \left[1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) e^{i\frac{3}{2}ak_x} \right]. \quad (28)$$

Assim, o complexo conjugado de $\Delta_{\vec{k}}$ pode ser escrito como

$$\Delta_{\vec{k}^*} = e^{iak_x} \left[1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) e^{-i\frac{3}{2}ak_x} \right]. \quad (29)$$

No espaço recíproco da rede hexagonal do grafeno, as funções $\Delta_{\vec{k}}$ e $\Delta_{\vec{k}^*}$ descrevem as interações entre os primeiros vizinhos da rede recíproca.

Multiplicando $\Delta_{\vec{k}}$ e $\Delta_{\vec{k}^*}$, temos

$$\Delta_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}^*} = \left(e^{-iak_x} \left(1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{i2ak_x} \right) \right) \left(e^{iak_x} \left(1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{-i2ak_x} \right) \right) \quad (30)$$

Organizando os termos:

$$\Delta_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}^*} = \left(e^{-iak_x} e^{iak_x} \right) \left(1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{i2ak_x} \right) \left(1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{-i2ak_x} \right) \quad (31)$$

Simplificando os expoentes:

$$= \left(1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{i2ak_x} \right) \left(1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{-i2ak_x} \right) \quad (32)$$

Aplicando a distributiva:

$$= 1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{-i2ak_x} + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{i2ak_x} + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \quad (33)$$

Usando a identidade trigonométrica $e^{ix} + e^{-ix} = 2 \cos(x)$:

$$= 1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right)(e^{-i2ak_x} + e^{i2ak_x}) + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \quad (34)$$

$$= 1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right)2 \cos(2ak_x) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \quad (35)$$

$$= 1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \cos(2ak_x) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \quad (36)$$

Usando outra identidade trigonométrica para simplificar ainda mais $\cos^2(x) = \frac{1+\cos(2x)}{2}$.

Temos:

$$= 1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \cos(2ak_x) + 4\left(\frac{1 + \cos(\sqrt{3}ak_y)}{2}\right) \quad (37)$$

$$= 1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \cos(2ak_x) + 2(1 + \cos(\sqrt{3}ak_y)) \quad (38)$$

$$= 1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \cos(2ak_x) + 2 + \cos(\sqrt{3}ak_y) \quad (39)$$

Logo, a expressão para a multiplicação de $\Delta_{\vec{k}}$ e $\Delta_{\vec{k}^*}$ é:

$$\Delta_{\vec{k}}\Delta_{\vec{k}^*} = 3 + 2 \cos(\sqrt{3}ak_y) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_ya\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \quad (40)$$

Assim

$$\Delta_{\vec{k}}\Delta_{\vec{k}^*} = 3 + f(\vec{k}) \quad (41)$$

Onde $f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}ak_y) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_ya\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right)$

Para obtermos as bandas de energia do grafeno, é necessário diagonalizar o Hamiltoniano tight-binding no espaço recíproco. Reescrevendo a (23) da seguinte forma

$$\hat{H} = -t \sum_{\vec{k}} [\Delta_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}^*} b_{\vec{k}}^\dagger a_{\vec{k}}]$$

$$\hat{H} = -t \sum_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}}^\dagger) \cdot \hat{H}_0 \cdot \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix}$$

Que também pode ser escrito como

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{H}_0 \psi_{\vec{k}} \quad (42)$$

Onde,

$$\psi_{\vec{k}}^{\dagger} \equiv (a_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}}^{\dagger}) \quad \psi_{\vec{k}} \equiv \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad \hat{H}_0 \equiv \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\vec{k}} \\ \Delta_{\vec{k}^*} & 0 \end{pmatrix} \quad (43)$$

A equação de autovalores para a diagonalização do Hamiltoniano de primeiros vizinhos é dada por:

$$\text{Det}(\hat{H}_0 - IE) = 0 \Rightarrow \text{Det} \begin{pmatrix} -E & -t\Delta_{\vec{k}} \\ -t\Delta_{\vec{k}^*} & -E \end{pmatrix} = 0 \quad (44)$$

Dessa forma, as energias eletrônicas são dadas por:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{\Delta_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}^*}} \quad (45)$$

Substituindo a equação (40) na equação (45)

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})} \quad (46)$$

As bandas de energia associada aos primeiros vizinhos, são simétricas ao plano de energia nula ($E_F = 0$). Assim $E_{-}(\vec{k})$ representa a banda de valência (banda negativa), e $E_{+}(\vec{k})$ a banda de condução (banda positiva) (LINS et al., 2018; Araújo et al., 2022). É importante destacar que existem duas soluções ($\pm$) para a dispersão eletrônica do grafeno para os primeiros vizinhos, justificadas pela presença de dois orbitais na célula unitária do grafeno (Silva Júnior et al., 2018).

O segundo termo da equação (15) corresponde à interação entre os segundos vizinhos. Para o salto t' , os elétrons se deslocam entre sítios dentro da mesma sub-rede, ou seja, de um sítio da sub-rede A para outro sítio também da sub-rede A. Seguindo o mesmo procedimento de diagonalização utilizado para os primeiros vizinhos, encontraremos a dispersão eletrônica total do sistema.

O Hamiltoniano para os segundos vizinhos é dado por:

$$H = -t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (a_i^{\dagger} a_j + b_i^{\dagger} b_j + a_j^{\dagger} a_i + b_j^{\dagger} b_i) \quad (47)$$

Aplicando a transformada de Fourier, o Hamiltoniano assume a seguinte forma:

$$\begin{aligned}\hat{H} = -t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} & \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^{\dagger} b_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} \right] \\ & -t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^{\dagger} b_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} \right].\end{aligned}$$

Denotando O vetor relativo δ_n entre um átomo na posição $\vec{r}_i$ e seus segundos vizinhos, assim $\delta_n = \vec{r}_j - \vec{r}_i$, fixando o sub-índice j, temos $\vec{r}_j = \vec{r}_i + \delta_n$. Reescrevendo o hamiltoniano

$$\begin{aligned}\hat{H} = -t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} & \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \sum_{n=1}^6 e^{i\vec{k} \cdot \delta'_n} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^{\dagger} b_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} \sum_{n=1}^6 e^{i\vec{k}' \cdot \delta'_n} \right] \\ & -t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \left[\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \sum_{n=1}^6 e^{i\vec{k} \cdot \delta'_n} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^{\dagger} b_{\vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i} \sum_{n=1}^6 e^{i\vec{k}' \cdot \delta'_n} \right].\end{aligned}\quad (48)$$

Definindo o fator geométrico para os segundos vizinhos

$$\Delta_{\vec{k}} \equiv \sum_{n=1}^3 e^{\pm i\vec{k} \cdot \delta'_n} \quad ; \quad \Delta_{\vec{k}}^* \equiv \sum_{n=1}^3 e^{\pm i\vec{k} \cdot \delta'_n} \quad ; \quad \Delta_{\vec{k}'} \equiv \sum_{n=1}^3 e^{\pm i\vec{k}' \cdot \delta'_n} \quad e \quad \Delta_{\vec{k}'}^* \equiv \sum_{n=1}^3 e^{\pm i\vec{k}' \cdot \delta'_n} \quad (49)$$

Reescrevendo a equação (48)

$$\hat{H} = \frac{-t'}{N} \left[\sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^{\dagger} b_{\vec{k}'} + \sum_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^* a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}'} \Delta_{\vec{k}'}^* b_{\vec{k}'}^{\dagger} b_{\vec{k}'} \right] \quad (50)$$

Reorganizando a equação, temos

$$\hat{H} = \frac{-t'}{N} \left[\sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} (\Delta_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^*) + \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^{\dagger} b_{\vec{k}'} (\Delta_{\vec{k}'} + \Delta_{\vec{k}'}^*) \right] \quad (51)$$

Reorganizando a expressão, o Hamiltoniano é escrito de forma matricial:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (a_{\vec{k}}^{\dagger} b_{\vec{k}'}^{\dagger}) \cdot \hat{H}_0 \cdot \begin{pmatrix} a_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}'} \end{pmatrix} \quad (52)$$

Onde o operador $\hat{H}_0$ é:

$$\hat{H}_0 = -t' \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^* \\ \Delta_{\vec{k}'} + \Delta_{\vec{k}'}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (53)$$

Para a obtenção das autoenergias do hamiltoniano será escrito a equação de auto-valor, assim como foi feito para os primeiros vizinhos

$$\text{Det}(\hat{H}_0 - IE) = 0 \Rightarrow \text{Det} \begin{pmatrix} -E & -t'(\Delta_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^*) \\ -t'(\Delta_{\vec{k}'} + \Delta_{\vec{k}'}^*) & -E \end{pmatrix} \quad (54)$$

A relação de dispersão para os segundos vizinhos na rede hexagonal é dada por:

$$E(\vec{k}) = -t' \sqrt{(\Delta_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^*)(\Delta_{\vec{k}'} + \Delta_{\vec{k}'}^*)} \quad (55)$$

Para $\vec{k} = \vec{k}'$, a equação simplifica para:

$$E(\vec{k}) = -t'(\Delta_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^*) \quad (56)$$

Substituindo o fator geométrico correspondente:

$$\Delta_{\vec{k}} = \sum_{n=1}^3 e^{\pm i\vec{k} \cdot \delta'_n} = e^{i\vec{k} \cdot \delta'_1} + e^{i\vec{k} \cdot \delta'_2} + e^{i\vec{k} \cdot \delta'_3} \quad (57)$$

Com os vetores relativos δ'_n :

$$\delta'_1 \equiv \pm \frac{a}{2}(3\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad \delta'_2 \equiv \pm \frac{a}{2}(3\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}), \quad e \quad \delta'_3 \equiv \pm(-\sqrt{3}a\hat{y}) \quad (58)$$

Substituindo os vetores relativos no fator geométrico da rede

$$\Delta_{\vec{k}} = e^{\pm i\frac{a}{2}((3k_x + \sqrt{3}k_y))} + e^{\pm i\frac{a}{2}((3k_x - \sqrt{3}k_y))} + e^{\mp i\sqrt{3}ak_y} \quad (59)$$

$$= e^{\mp i\sqrt{3}ak_y} + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) e^{\pm i\frac{3}{2}ak_x} \quad (60)$$

Tomando o conjugado de $\Delta_{\vec{k}}$ e somando, temos a seguinte equação

$$\Delta_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}}^* = 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) \cos\left(\frac{3}{2}ak_y\right) = f(\vec{k}) \quad (61)$$

Portanto, temos a energia do grafeno, descrito pela interação dos segundos vizinhos

$$E(\vec{k}) = -t' f(\vec{k}). \quad (62)$$

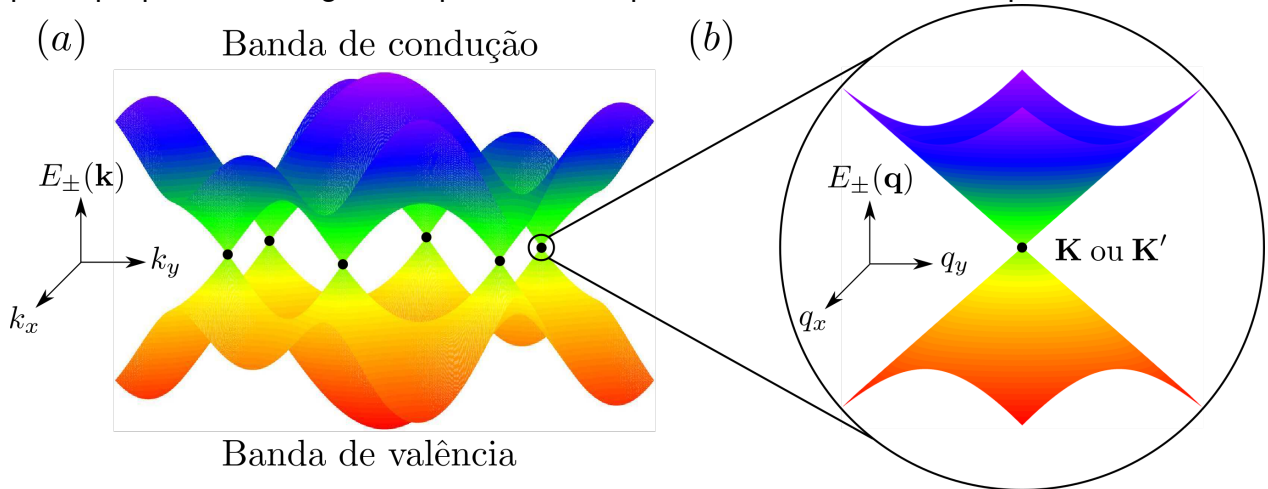
Assim, a energia para o grafeno considerando interações de primeiros e segundos vizinhos é:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})} - t' f(\vec{k}) \quad (63)$$

O termo $-t' f(\vec{k})$ na equação (63) quebra a simetria perfeita entre as bandas em torno de $E_F = 0$. Por contraste, alguns autores optam por negligenciar as interações entre átomos de carbono mais distantes(segundos vizinhos), porque o parâmetro de ligação entre os primeiros vizinhos é aproximadamente uma ordem de grandeza maior que o parâmetro de ligação/salto entre segundos vizinhos.(Araújo et al., 2022). Nesta aproximação, a simetria em torno de $E_F = 0$ é restaurada, e a energia é descrita por:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})} \quad (64)$$

Figura 2: As bandas de energia do grafeno para os primeiros vizinhos são mostrados em 3D na imagem (a). A superfície superior representa a banda de condução e a superfície inferior representa a banda de valência. As duas bandas se tocam nos pontos K. A direita, está a visão 3D da equação plotada para pequenas energias e próximo ao ponto K, chamados de pontos de Dirac.



Fonte:(Araújo et al., 2022)

O espectro de energia de uma partícula é representado por duas superfícies ($E > 0$ e $E < 0$) que se interceptam quando a energia de Fermi $E_F = 0$ é igual a zero, em seis pontos localizados nos vértices da primeira zona de Brillouin (Bueno et al., 2011). Podemos observar esse comportamento na figura (2). Pode-se observar que as bandas de condução e de valência tocam a energia de Fermi, indicando a ausência de um intervalo de energia proibida, o que faz com que o grafeno seja classificado como um semicondutor de gap nulo. É essencial ressaltar que o comportamento do grafeno difere dos metais convencionais, uma vez que a energia de Fermi não reside na banda de condução típica dos metais, nem está contida em uma faixa estreita de energia, como ocorre em semicondutores tradicionais (SILVA et al., 2018).

5 PROPRIEDADES DOS PONTOS DE DIRAC

Uma das características mais importantes do espectro de energia do grafeno é a relação linear entre a energia e o momento nos pontos onde as bandas de valência e condução se tocam, conhecidos como pontos de Dirac. Essas duas bandas se encontram nos cantos das zonas de Brillouin, formando os chamados cones de Dirac (Nascimento et al., 2019). Neste capítulo iremos fazer uma abordagem detalhada sobre o análogo da equação de Dirac para o Grafeno. Para essa abordagem iremos fazer uma expansão de Taylor da equação $\Delta_{\vec{k}}$ relacionado a diagonalização dos primeiros vizinhos, em relação ao ponto $\vec{K}$. Para essa analogia, usaremos a referência (SANTOS JUNIOR et al., 2020).

$$\Delta_{\vec{k}} = e^{-iak_x} \left[1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right) e^{i\frac{3}{2} ak_x} \right] \quad (65)$$

Definindo o vetor de onda relativo como a diferença entre o vetor de onda geral e a posição do ponto Dirac $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$. Vamos substituir na equação (65)

$$\Delta_{\vec{K}+\vec{q}} = e^{-ia(K_x+q_x)} \left[1 + 2 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a(K_x + q_x)\right) e^{i\frac{3}{2} a(K_x+q_x)} \right]$$

Fazendo as substituições das componentes K_x e K_y do ponto de Dirac $\vec{K} = (\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a})$

$$= e^{-iaK_x} e^{-iaq_x} \left[1 - 2e^{i\frac{3}{2} aq_x} \cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2} aq_y\right) \right]. \quad (66)$$

Para chegarmos ao resultado esperado vamos expandir a equação (66) em uma série de Taylor, considerando apenas os termos de primeira ordem, visto que estamos considerando pequenas variações do vetor de onda em torno dos pontos de Dirac. A forma geral da série de Taylor é escrita obedecendo o seguinte formato (Rosa et al., 2012):

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + \dots \quad (67)$$

Vamos realizar esse processo expandindo cada termo separadamente. Inicialmente vamos expandir o termo e^{-iaq_x} até a primeira ordem em q_x :

$$e^{-iaq_x} = 1 - iaq_x$$

Agora vamos expandir o segundo termo $e^{i\frac{3}{2}aq_x}$ até a primeira ordem em q_x :

$$e^{i\frac{3}{2}aq_x} = 1 + i\frac{3}{2}aq_x$$

Para expandir o termo $\cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}aq_y\right)$ vamos recorrer a identidade trigonométrica da soma dos ângulos para o cosseno $\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b$

$$\cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}aq_y\right) = \cos\frac{\pi}{3} \cos\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y - \sin\frac{\pi}{3} \sin\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y$$

Sabemos que o $\cos\frac{\pi}{3} = 1$ e o $\sin\frac{\pi}{3} = \frac{\sqrt{3}}{2}$, fazendo as devidas substituições, temos a seguinte expressão:

$$\cos\left(\frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}aq_y\right) = \frac{1}{2} \cos\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y. \quad (68)$$

Vamos expandir o cosseno $\cos\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y$ e seno $\sin\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y$

$$\cos\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y = 1$$

$$\sin\frac{\sqrt{3}}{2}aq_y = \frac{\sqrt{3}}{2}aq_y$$

Agora, substituindo essa expressão de volta na equação original (66)

$$\Delta_{\vec{K}+\vec{q}} = e^{-iaK_x} (1 - iaq_x) \left[1 - 2 \left(1 + i\frac{3}{2}aq_x \right) \left(\frac{1}{2} - \frac{3}{4}aq_x \right) \right] \quad (69)$$

Realizando as manipulações matemáticas necessárias e considerando apenas os termos de primeira ordem, obtemos a seguinte expressão:

$$\Delta_{\vec{K}+\vec{q}} = -ie^{-iaK_x} \frac{3a}{2} (q_x + iq_y).$$

O fator de fase ie^{-iaK_x} será ignorado, pois não possui significado físico, já que as bandas de energia são dadas por $\Delta_{\vec{K}+\vec{q}} = \pm t \sqrt{\Delta_{\vec{K}+\vec{q}}^* \Delta_{\vec{K}+\vec{q}}}$. A velocidade de Fermi é $v_f = 3at/2$. Com $t = 2,8eV$ e $a = 0.142nm$, ao realizar as substituições, obtemos $v_f \approx 1 \times 10^6 m/s$ que corresponde à velocidade dos elétrons próximos aos pontos de Dirac.

$$\Delta_{\vec{K}+\vec{q}} = -\frac{3a}{2}(q_x + iq_y). \quad (70)$$

O Hamiltoniano no ponto de Dirac $\vec{K}$ é escrito da seguinte forma:

$$\hat{H}_0 = v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (71)$$

Escrevendo a relação de dispersão para os primeiros vizinhos $E(\vec{q}) = t\sqrt{\Delta_{\vec{K}+\vec{q}}^* \Delta_{\vec{K}+\vec{q}}}$, obtemos a dispersão de energia linear dada pela equação nos pontos $\vec{K}$

$$E(\vec{q}) = v_F |\vec{q}| \quad (72)$$

No grafeno, os portadores de carga se propagam como se fossem férmions sem massa, ou seja, como partículas relativísticas com spin 1/2, que obedecem a equação de Dirac (Araújo et al., 2022). Assim, podemos destacar que dispersão de energia linear dada pela equação (72) é semelhante a dispersão de energia de partículas relativísticas, ou seja:

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4 \quad (73)$$

Assim, podemos observar que, ao considerarmos $m = 0$, a energia total para partículas relativísticas se resume a $E = cp$. Dessa forma, a dispersão linear encontrada nos pontos próximos aos pontos K e k' obedece à equação de Dirac, onde a velocidade da luz é substituída pela velocidade de Fermi, correspondendo a 1/300 da velocidade da luz no vácuo. Aqui podemos perceber o motivo de se referir aos portadores de carga no grafeno como férmions de Dirac sem massa e a razão dos pontos K e k' serem normalmente referidos como cones de Dirac (Nascimento et al., 2019; ALVES et al., 2015; Dartora; Jimenez; Zanella, 2015). Devido às propriedades do grafeno, próximo aos pontos de Fermi, ele se comporta como um metal, exibindo elevada mobilidade. Os elétrons nesses orbitais são considerados elétrons livres (Bueno et al., 2011).

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A diagonalização do grafeno evidenciou que o gap de energia é nulo, o que dificulta sua aplicação direta em transistores. Sem uma diferença de energia entre a banda de valência e a banda de condução, o controle da corrente elétrica em um transistor de grafeno torna-se inviável, impossibilitando o desligamento completo do dispositivo. Entretanto, esse problema pode ser superado com o uso de nanofitas de grafeno, que são fitas estreitas quase unidimensional, que podem ser fabricadas com tamanhos variados. Nessa configuração, o grafeno adquire características semicondutoras, criando uma lacuna de energia (bandgap) entre as bandas, que pode ser controlada através da largura e altura da fita, permitindo que o dispositivo seja ligado e desligado de forma eficiente(Propriedades. . . , s.d.)(Junior; Francisco, 2024).

Existem outras formas de contornar a ausência do gap no grafeno, como junções PN, dopagem química e a criação de heteroestruturas de grafeno com outros materiais bidimensionais ou semicondutores(Cardoso; Bruschi, 2023). Para a produção de junções PN é utilizado a inserção de impurezas, no entanto no grafeno, é possível produzir zonas com concentrações de portadores de carga apenas com a aplicação de potenciais externo, como a aplicação de um campo magnético(Cavalcante, 2021).

Um dos maiores desafios na aplicação prática do grafeno está relacionado à produção em larga escala de dispositivos que mantenham a qualidade e as propriedades excepcionais desse material. Embora o grafeno possua características promissoras, como alta mobilidade eletrônica e resistência mecânica, a produção em massa ainda enfrenta obstáculos significativos. Métodos como a deposição química a vapor (CVD), que são frequentemente usados para sintetizar grafeno em grandes áreas, podem resultar em imperfeições no material, como defeitos estruturais e variações na espessura, que comprometem o desempenho dos dispositivos. Além disso, a integração do grafeno com a eletrônica tradicional exige técnicas avançadas de fabricação e controle de qualidade, o que eleva os custos e a complexidade do processo de produção(Liu et al., 2021).

Foi obtido nesse trabalho ao expandirmos o fator de estrutura do grafeno em uma série de Taylor, que os elétrons se comportam como partículas relativísticas em torno dos pontos K e K' e os portadores de carga se comportam como férmions sem massa. Esse resultado é importante pois abre espaço para a pesquisa relacionada a física de altas energias, como também na eletrônica de altas velocidades(Dartora; Jimenez; Zanella, 2015).

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Discutimos a estrutura cristalina bem como as propriedades eletrônicas do grafeno. Fizemos uma análise detalhada da rede direta e da rede recíproca do grafeno revelando a complexidade dessa sua estrutura bidimensional, composta por duas sub-redes interpenetrantes e um padrão de ligações que contribui para sua propriedade. Além disso, analisamos de forma detalhada o formalismo de segunda quantização, a qual mostrou-se de extrema importância para a compreensão dos elétrons em sistemas de muitos corpos permitindo uma descrição matemática precisa dos estados eletrônicos e a diagonalização do Hamiltoniano do grafeno. Diante disso, essa análise possibilitou uma compreensão aprofundada da formação das bandas de energia e das implicações dos pontos de Dirac, onde a dispersão linear dos elétrons se comporta de maneira semelhante a partículas relativísticas.

Outrossim, ao abordarmos a aplicação do modelo tight-binding para a diagonalização dos estados eletrônicos no grafeno, foi possível demonstrarmos como a interação entre os átomos de carbono define a estrutura de bandas e influencia as propriedades eletrônicas do material. Além disso, por meio da análise dos pontos de Dirac, que são essenciais para a compreensão das características eletrônicas do grafeno, destacamos a importância desses locais no espaço recíproco para o comportamento dos elétrons. Diante do exposto, através da síntese desses pontos, enfatizamos a relevância do grafeno, não apenas como um material inovador, mas também como um sistema físico fundamental para a física do estado sólido e a nanotecnologia. Assim, este trabalho contribui para uma base sólida no entendimento dos fenômenos eletrônicos associados ao grafeno, preparando o terreno para futuras pesquisas e aplicações tecnológicas que poderão explorar ainda mais o potencial deste material revolucionário.

Desse modo, por meio da presente pesquisa, evidenciamos a compreensão aprofundada da estrutura eletrônica do grafeno, incluindo a diagonalização dentro do modelo tight-binding e a análise dos pontos de Dirac, qual de, demonstra-se fundamental para desbloquear o potencial completo deste material. Esses aspectos teóricos não apenas explicam o comportamento eletrônico único do grafeno, mas também fornecem uma base sólida para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos avançados, sensores ultra-sensíveis, e novas tecnologias de armazenamento de energia. Assim, a pesquisa sobre o grafeno não só amplia nosso conhecimento fundamental da física de materiais, mas também abre novas possibilidades para a inovação tecnológica em áreas como a microeletrônica, a nanotecnologia e a optoeletrônica.

Os resultados mais relevantes incluem a descrição detalhada da estrutura eletrônica do grafeno e a caracterização dos pontos de Dirac como regiões de comportamento linear dos elétrons. Esses pontos, localizados nos vértices da zona de Brillouin, representam a singularidade topológica do grafeno, onde a massa efetiva dos elétrons se anula, resultando em um comportamento peculiar e promissor para aplicações em dispositivos eletrônicos.

Elencamos nesse trabalho os principais aspectos do grafeno e a sua importância na área de nanotecnologia, uma vez que consolidam o conhecimento sobre sua diagonalização dentro do modelo tight-binding e reforçam a relevância dos pontos de Dirac. No entanto, é importante reconhecer as limitações deste estudo. A abordagem teórica utilizada simplifica certos aspectos da interação eletrônica no grafeno, desconsiderando, por exemplo, efeitos de correlação eletrônica e desordem no material. Além disso, a análise foi restrita ao modelo tight-binding, que, embora eficaz, pode não capturar todos os detalhes da física do grafeno em situações mais complexas. Investigações futuras podem incluir abordagens mais sofisticadas, como o uso de técnicas de primeiros princípios ou simulações numéricas mais avançadas, para complementar e aprofundar os resultados aqui apresentados.

Em suma, este trabalho reafirma a importância do estudo do grafeno no contexto da física do estado sólido e da nanotecnologia. A capacidade de entender com precisão a estrutura eletrônica do grafeno pode levar a descobertas e inovações em campos relacionados, como a física do estado sólido e a ciência dos materiais. O formalismo de segunda quantização, aplicado neste estudo, é uma ferramenta vital para abordar sistemas complexos e pode ser extrapolado para entender outros materiais bidimensionais e sistemas quânticos. Portanto, o impacto potencial do estudo do grafeno é vasto e multidimensional, fornecendo não apenas avanços teóricos, mas também benefícios tangíveis para a sociedade através de novas tecnologias e aplicações práticas. O aprofundamento na compreensão do grafeno é, portanto, não apenas uma conquista científica, mas também um catalisador para a evolução de tecnologias que podem transformar a nossa vida cotidiana e a forma como interagimos com o mundo ao nosso redor. Desse modo ao compilarmos e explicarmos os conceitos expostos nesse trabalho de maneira acessível, o trabalho ajuda a preencher lacunas no entendimento dos fenômenos eletrônicos do grafeno. Ao analisarmos as propriedades cristalinas e eletrônicas do grafeno, juntamente com uma análise das redes direta e recíproca, oferecemos uma base sólida para que os estudantes compreendam não apenas as propriedades fundamentais do grafeno, mas também como essas propriedades são derivadas e descritas matematicamente. Diante disso, esse entendimento torna-se crucial para qualquer estudante que pretende se

aprofundar no campo da física de materiais e da nanotecnologia, proporcionando uma visão clara das interações e comportamentos dos elétrons em sistemas bidimensionais. Sendo assim, por meio das referências supramencionadas, o trabalho contribui para a formação de uma base teórica robusta. Para os estudantes de licenciatura, que objetivavam uma contribuição para aqueles que precisarem encontrar informações com um certo nível de detalhamento sobre o grafeno. Dessa forma, o trabalho não apenas contribui para a educação acadêmica dos estudantes, mas também promove a construção de um conhecimento mais profundo e integrado sobre as propriedades do grafeno.

REFERÊNCIAS

- Altland, Alexander; Simons, Ben D. **Condensed matter field theory**. [S.l.]: Cambridge university press, 2010.
- ALVES, Renan de Oliveira et al. Dinâmica eletrônica em grafeno na presença de um campo magnético externo. Universidade Federal de Campina Grande, 2015.
- Amontree, Jacob et al. Síntese de grafeno reproduzível por deposição química de vapor sem oxigênio. **Nature**, 2024. DOI: 10.1038/s41586-024-07454-5.
- Araujo, Caio Lucas Azevedo. Grafeno: composição, propriedades, aplicabilidade e perspectivas. **Revista Brasileira de Processos Químicos**, v. 3, n. 2, p. 33–47, 2022.
- Araújo, Francisco Ronan Viana. Theoretical proposals of graphene-based electronic devices, 2021.
- Araújo, FRV et al. Análogos eletrônicos de dispositivos ópticos em grafeno: da junção pn à lente de Veselago. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 44, e20220132, 2022.
- Ashcroft, Neil W; Mermin, N David; Rodriguez, Sergio. Solid state physics. **American Journal of Physics**, AIP Publishing, v. 46, n. 1, p. 116–117, 1978.
- Avanços recentes em dispositivos eletroanalíticos baseados em grafeno para aplicações em saúde. Edição: Royal Society of Chemistry. [S.l.: s.n.].
- Bigon, Christophe Bertrand; Tedesco, Daniel Guimarães. Simulação computacional da condutividade hall quântica no grafeno. **Caderno Intersaberes**, v. 11, n. 34, p. 137–154, 2022.
- Bueno, Maria Jannaira et al. Propriedades eletrônicas de grafeno com defeitos. Universidade Federal da Paraíba, 2011.
- Cadore, Alisson Ronieri. Influência de impurezas ionizadas e moléculas adsorvidas no mecanismo de transporte elétrico de grafeno. Universidade Federal de Minas Gerais, 2013.
- Camargos, Juliana Sofia Fonseca; Oliveira Semmer, Adriana de; Silva, Sidney Nicodemos da. Características e aplicações do grafeno e do óxido de grafeno e as principais rotas para síntese. **The Journal of Engineering and Exact Sciences**, v. 3, n. 8, p. 1118–1130, 2017.

Cardoso, João Vitor Falco; Bruschi, João Vitor Gozzo. Grafeno e a sua relação com super e semicondutores. **Environmental Science & Technology Innovation-ISSN 2965-1158**, v. 2, n. 01, 2023.

Castro, Luan Vieira de. Método Tight-Binding aplicado a nanofita de grafeno com campo elétrico, 2014.

Cavalcante, Pedro Júnior Araújo. **Propriedades estruturais, eletrônicas e de transporte de nanofitas de grafeno: um estudo baseado em primeiros princípios**. 2021. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Ceará. Acessado em: 4 set. 2024. Disponível em: <<https://repositorio.ufc.br/handle/riufc/58146>>.

Cruz, Yan Lucas Rocha. **Propriedades mecânicas de monocamadas híbridas de grafeno e grafino**. 2024. B.S. thesis – Universidade Federal do Rio Grande do Norte.

Dartora, CA; Jimenez, Miguel J Saldaña; Zanella, Fernando. Os fundamentos da física dos férmions de Dirac sem massa em $(1+2)$ -D e o grafeno. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, SciELO Brasil, v. 37, p. 3301–1, 2015.

De Jesus, Karla Acemano; Freire, Estevão; Guimarães, Maria José OC. Grafeno: aplicações e tendências tecnológicas. **Dep. Process. Orgânicos**, v. 737, p. 14–19, 2012.

Frazier, Rachel M et al. Recent progress in graphene-related nanotechnologies. **Recent patents on nanotechnology**, Bentham Science Publishers, v. 3, n. 3, p. 164–176, 2009.

Gomes, Arthur Santos. Propriedades eletrônicas do grafeno e de nanofitas de grafeno. Universidade Federal da Paraíba, 2024.

Gross, Carla; Wiese, Uwe-Jens. Energy Spectrum of the Electrons in Graphene, 2011.

Hasan, Nasser Mahmoud; Marion, Bianca Dall Gallo et al. Grafeno: Inovações, aplicações e sua comercialização. **Interfaces Científicas-Exatas e Tecnológicas**, v. 2, n. 1, p. 29–40, 2016.

Jimenez, Miguel Jorge Saldaña. Estudo de transporte e tunelamento quântico em estruturas de grafeno dopadas, 2015.

Junior, Santos; Francisco, Washington. Transporte em nanodispositivos na presença de interação elétron-elétron, 2024.

Junior, Silva et al. Síntese de óxido de grafeno dopado com nanopartículas de ouro e Fenil-Tio-Ftalocianina com potencial para tratamento fotodinâmico e fototérmico de câncer de pele. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2024.

Kittel, Charles. **Introduction to solid state physics**. [S.l.]: John Wiley & sons, inc, 2005.

LINS, Alexandre Rodrigo da Silva et al. Estudo dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi na polarização dos vales no Grafeno. Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2018.

Liu, Naixu et al. Graphene synthesis: method, exfoliation mechanism and large-scale production. **Crystals**, MDPI, v. 12, n. 1, p. 25, 2021.

Nascimento, Alexandro das Chagas de Sousa et al. Propriedades de transporte em estruturas de grafeno com modulação na velocidade de Fermi. Universidade Federal de Alagoas, 2019.

NASCIMENTO, Clerisson Monte do et al. Transporte eletrônico em nanofitas de grafeno sob a influência de fatores externos, via primeiros princípios. Universidade Federal do Pará, 2012.

Neto, AH Castro et al. The electronic properties of graphene. **Reviews of modern physics**, APS, v. 81, n. 1, p. 109, 2009.

Novoselov, Kostya S et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004.

Novoselov, KS. Nobel lecture: Graphene: Materials in the flatland. **Reviews of modern physics**, APS, v. 83, n. 3, p. 837, 2011.

Nunes, Edvam de Oliveira. Propriedades de transporte em barreiras magnéticas em grafeno. Universidade Federal de São Carlos, 2015.

Paniagua, Juan Carlos. Second Quantization Formalism.

Pauli, Wolfgang. Exclusion principle and quantum mechanics. In: Writings on physics and philosophy. [S.l.]: Springer, 1994. P. 165–181.

Propriedades, síntese e aplicações do grafeno: uma revisão. Edição: Springer. v. 75.

Rebello, Erick Velasco; Nascimento, Gustavo Amorim do; Amarante, Mayara. Grafeno. **Revista Pesquisa e Ação**, v. 4, n. 1, p. 209–218, 2018.

Rosa, Carlos Fabiano et al. Série de Taylor e aplicações, 2012.

SÁ, Louis Gustavo da Costa Sobral et al. Estudo das propriedades eletrônicas de grafeno e grafeno/Cu (111). Universidade Federal de Campina Grande, 2015.

Santos, Florença Sayuri Mikawa dos. Avaliação do potencial reparador de matriz de quitosana associada a óxido de grafeno funcionalizado com FGF2: aplicações no tratamento da mucosite oral. Universidade Estadual Paulista (Unesp), 2023.

Santos, Leonardo TakeoShimazu; Souza, Diego Moreira. Grafeno: propriedades e aplicações, 2019.

SANTOS JUNIOR, Marconi Silva et al. Efeitos da modulação da velocidade de Fermi e de localização em nanofitas de grafeno. Universidade Federal Rural de Pernambuco, 2020.

Segundo, JEDV; Vilar, Eudésio Oliveira. Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. **Revista Eletrônica de Materiais e Processos**, v. 11, n. 2, p. 54–57, 2016.

Silva, Fabrício Ramos da. **O Princípio de Exclusão de Pauli e a tabela periódica: uma análise na coleção dos livros didáticos PNLD 2018**. 2021. B.S. thesis – Brasil.

Silva, Jorge Eustáquio da; Cária, Jefferson Davis Pena. Grafeno: Aplicações Tecnológicas, set 2017. Disponível em: <file:///home/nonata/Downloads/Grafeno%20-%20Aplica%C3%A7%C3%B5es%20Tecnol%C3%B3gicas.pdf>.

SILVA, NMC et al. Estudo das propriedades eletrônicas do grafeno. Instituto Federal de Educação. **Ciência e Tecnologia do Piauí**, 2018.

Silva Júnior, João Batista Pereira de et al. Cálculo da estrutura de bandas usando o método Tight-binding. Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Piauí, 2018.

Sousa, Gabriel Oliveira de. Tunelamento de Klein através de uma barreira dependente do tempo, 2014.

Urade, Akanksha R; Lahiri, Indranil; Suresh, KS. Graphene properties, synthesis and applications: a review. **Jom**, Springer, v. 75, n. 3, p. 614–630, 2023.