

## **PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE NANOFITAS DE GRAFENO**

**Antonio Rafael Moreira Camilo<sup>1</sup>, Silvia Helena Roberto de Sena<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências Exatas e da Natureza, e-mail: rafaelmcamilo@outlook.com, silviahelena@unilab.edu.br.

### **RESUMO**

Obtido pela primeira vez em 2004 por meio de clivagem micromecânica da grafite, o grafeno é um cristal bidimensional constituído de átomos de carbono dispostos em rede do tipo “favo de mel”, que é comumente descrita como duas sub-redes triangulares interpenetradas, A e B [1,2]. A descoberta rendeu aos pesquisadores Andre Geim e Konstantin Novoselov da universidade de Manchester, o Prêmio Nobel da Física em 2010. Esse material possui características peculiares, tais propriedades se devem em grande parte à ausência de um gap de energia no seu espectro eletrônico, bem como ao seu espectro linear no regime de baixas energias, o que faz com que os elétrons no grafeno se comportem como partículas relativísticas de massa zero [3,4]. Neste projeto foi estudado o espectro eletrônico de nanofitas de grafeno através da aproximação de ligação forte, comumente chamada de “tight-binding”. Investigamos, através de uma abordagem analítico-computacional alisando como os estados energéticos são afetados tanto pelo tamanho da fita, como pelo o formato de suas bordas.

**PALAVRAS-CHAVE:** Grafeno, Nanofitas, Espectro Eletrônico.

### **INTRODUÇÃO**

Cada átomo de carbono no grafeno está ligado a três primeiros vizinhos por meio de ligações sigma fortes que formam ângulos de 120° entre si. Cada ligação sigma é resultado da hibridização  $sp^2$  entre os orbitais 2s, 2p<sub>x</sub> e 2p<sub>y</sub>. Assim, o orbital p<sub>z</sub> correspondente ao quarto

elétron de valência fica perpendicular ao plano definido pelas ligações sigma. Dessa forma, cada átomo de carbono possui um orbital parcialmente preenchido que se superpõem aos orbitais de átomos vizinhos dando origem a ligações fracas  $\pi$ . Esses elétrons quase livres, chamados elétrons  $\pi$ , são os principais responsáveis pelas propriedades de transporte no grafeno [5, 6].

## MATERIAL E MÉTODOS

Foi usada uma aproximação chamada de tight-binding (TB) para encontrar os níveis de energia eletrônicos do grafeno. O modelo TB é o modelo microscópico mais simples para se descrever elétrons em um cristal. A ideia básica desse modelo é assumir que o elétron está fortemente ligado ao átomo, de forma que sua função de onda possui apenas um pico elevado na em torna da posição atômica. Assim, a função de onda do cristal pode ser expandida em termos da função de cada átomo isolado. Nós consideramos aqui que o alcance da função de onda atômica é da ordem de  $a$ , o que significa que o elétron pode transitar apenas entre átomos vizinhos.

Com o intuito de estudar o espectro eletrônico de nanofitas de grafeno, consideramos pedaços de grafeno suficientemente longos ao longo da direção  $x$  e possuindo um número finito  $N$  de linhas de átomos na direção  $y$ . Em particular, vamos admitir dois tipos de bordas, zigzag e armchair. Em ambos os tipos de fita, começamos a enumerar as linhas de átomos de baixo pra cima ao longo da direção positiva do eixo  $y$ . Além disso, assumimos que as ligações pendentes nas bordas das fitas são ocupadas por átomos de hidrogênio e que, portanto, não contribuem para estados eletrônicos próximos ao nível de Fermi.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

As bandas de energia do grafeno são dadas pela equação abaixo e seu gráfico é mostrado na Figura 1. A estrutura é composta de duas partes: a banda de valência ( $E_v \leq 0$ ) e a banda de condução e ( $E_c \geq 0$ ). Essas bandas se tocam em seis pontos que correspondem os vértices da primeira zona de Brillouin e que, nesse caso, são chamados de pontos de Dirac pelo fato do espectro ser cônico ao redor desses pontos, similar ao que ocorre com elétrons relativísticos descritos pela equação de Dirac.

$$E(k_x, k_y) = \pm t \left[ 3 + 4 \cos\left(\frac{3k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

As figuras 2 e 3 mostram resultados obtidos para o espectro eletrônico através da expansão do modelo TB para o caso de nanofitas de grafeno com bordas armchair e zigzag com tamanhos variando de 9 a 12 linhas de átomos.

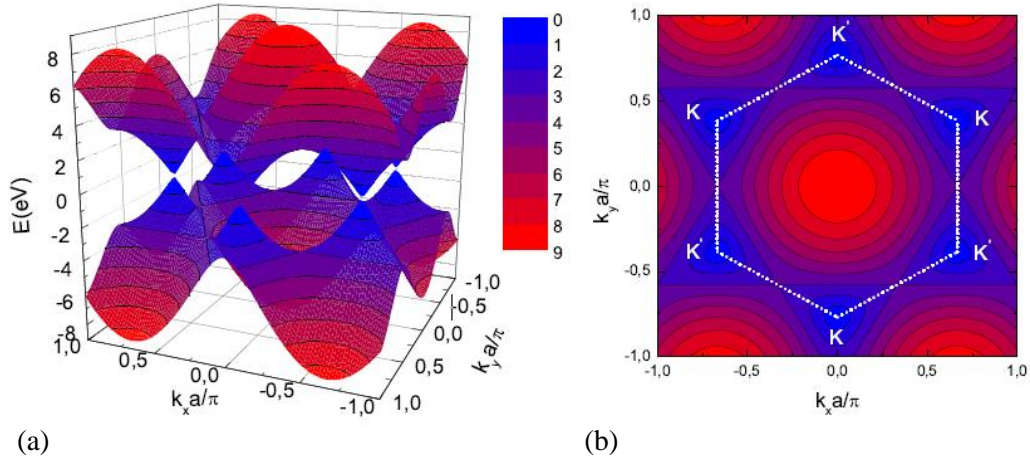


Figura 1: (a). As bandas de energia dos elétrons  $\pi$  do grafeno obtidos pela aproximação tight-binding; (b). Gráfico de contorno da banda de condução na primeira zona de Brillouin [7].

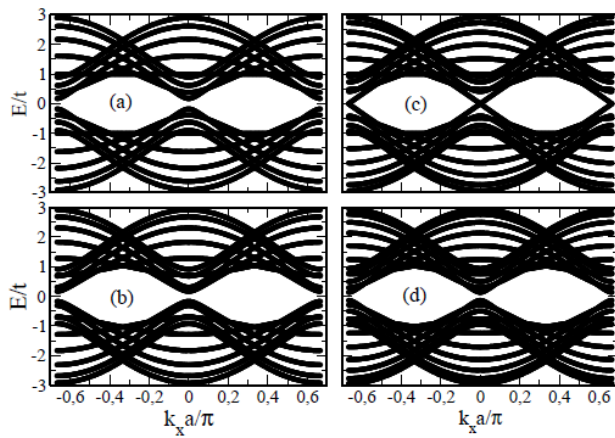


Fig. 2

Fig. 2: Espectro eletrônico de nanofitas de grafeno com bordas armchair com 9 (a), 10 (b), 11 (c) e 12 (d) linhas de átomos.

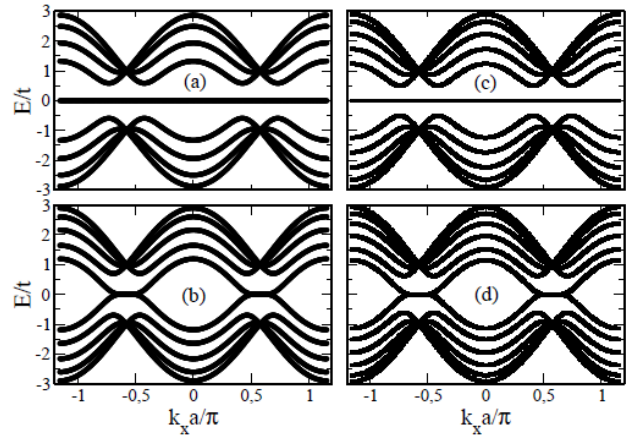


Fig.3

Fig. 3: Espectro eletrônico de nanofitas de grafeno com bordas zigzag com 9 (a), 10 (b), 11 (c) e 12 (d) linhas de átomos.

## CONCLUSÕES

Verificamos, por tanto, que as nanofitas com bordas armchair são metálicas sempre que  $N = 3m - 1$ , com  $m$  inteiro [8]. E para o caso de fitas isolantes, o gap direto tende a desaparecer com o aumento do número de linhas, recuperando, assim, o espectro do grafeno [9]. No caso de fitas com bordas zigzag, observamos que todos os  $N - 2$  modos, com exceção

do último modo da banda de valência e o primeiro modo da banda de condução, são degenerados apenas nos pontos  $\frac{K_x a}{\pi} = \pm \frac{1}{\sqrt{3}}$ , e tendem a reproduzir o espectro linear que é peculiar ao grafeno. Enquanto que os outros dois modos degeneram-se no nível de Fermi, formando bandas planas. Quando o número de linhas N é ímpar, esses estados estão presentes ao longo de toda a zona de Brillouin [10].

## REFERÊNCIAS

- [1] NOVOSELOV, K. S et al., *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*. [S.I]. Science 306, 666-669. 2004.
- [2] NOVOSELOV, K. S et al., *Two-dimensional atomic crystals*, PNAS 102 (30), 10451. 2005.
- [3] GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S., *The rise of graphene*, Nature Materials 6, 183-191. 2007.
- [4] NOVOSELOV, K. S et al., *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature 438, 197-200. 2005.
- [5] SAITO, R.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London 1998.
- [6] NETO, A. H. C et al., *The electronic properties of graphene*. [S.I]. Reviews of Modern Physics, Vol. 81, Janeiro Março 2009.
- [7] SENA, S. H. R. de. *Electronic properties of trilayer graphene and strained carbon nanoribbons*. 2012. 112 f. Tese (Doutorado em Física) – Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza. 2012. Fortaleza: Universidade Federal do Ceará, 2012. 112 f.
- [8] SON, Y. -W.; COHEN, M. L.; LOUIE, S. G., *Energy Gaps in Graphene Nanoribbons*, Phys. Rev. Lett. 97, 216803. 2006.
- [9] EZAWA, M., *Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons*, Phys. Rev. B 73, 045432. 2006.
- [10] FUJITA, M. et al., *Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge*, J. Phys. Soc. Jpn. 65, 1920. 1996.