

EFEITO QUÂNTICO E SUAS APLICAÇÕES TECNOLÓGICAS EM ESTRUTURA DE GRAFENO¹

Ewerton Fernando Bandeira Bonfim², Sandra Cristina Ramos³

RESUMO:

O EFEITO QUANTIZADO EM ESTRUTURA DE GRAFENO FOI INVESTIGADO VISANDO O ENTENDIMENTO DESTE IMPORTANTE E SINGULAR FENÔMENO PARA APLICAÇÕES NA ÁREA QUÂNTICA DA FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO E ENGENHARIA DE MATERIAIS. A ÊNFASE FOI DADA AO EFEITO HALL QUÂNTICO, A PARTIR DA ANÁLISE DA ESTRUTURA HEXAGONAL DO GRAFENO E A DESEJÁVEL PRESENÇA DOS PONTOS DE DIRAC E BANDAS DE ENERGIA COM CARACTERÍSTICAS SEMICONDUTORAS. CAMPOS MAGNÉTICOS APLICADOS À ESTRUTURA DO GRAFENO PERMITEM MODIFICAR AS BANDAS DE ENERGIA FORMANDO SISTEMAS DE TRANSPORTES QUÂNTICOS IMPORTANTES. A INVESTIGAÇÃO FOI CONDUZIDA POR MEIO DE SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS PELO SOFTWARE KWANT. OS RESULTADOS OBTIDOS DESTACAM A RELEVÂNCIA DO GRAFENO PARA APLICAÇÕES TECNOLÓGICAS E FÍSICA COMPUTACIONAL QUÂNTICA.

PALAVRAS-CHAVE: Grafeno, Semicondutor, Transporte Quântico, Simulação Computacional.

QUANTUM EFFECT AND ITS TECHNOLOGICAL APPLICATIONS IN THE STRUCTURE OF GRAPHENE

ABSTRACT:

THE QUANTIZED EFFECTS IN GRAPHENE STRUCTURES WERE STUDIED TO UNDERSTAND THIS IMPORTANT AND UNIQUE PHENOMENON FOR APPLICATIONS IN QUANTUM SOLID-STATE PHYSICS AND MATERIALS ENGINEERING. FOCUS WAS PLACED ON THE QUANTUM HALL EFFECT, BASED ON AN ANALYSIS OF GRAPHENE'S HEXAGONAL STRUCTURE AND THE PRESENCE OF DIRAC POINTS AND ENERGY BANDS WITH SEMICONDUCTOR-LIKE CHARACTERISTICS. APPLYING MAGNETIC FIELDS TO GRAPHENE'S STRUCTURE ALLOWS THE ENERGY BANDS TO BE ALTERED, FORMING KEY QUANTUM TRANSPORT SYSTEMS. THE RESEARCH WAS PERFORMED USING COMPUTATIONAL SIMULATIONS WITH KWANT SOFTWARE. THE FINDINGS EMPHASIZE THE SIGNIFICANCE

¹ Bolsa de iniciação científica UESB

² Graduando em Física pela Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia, ewertonfernando20@gmail.com

³ Professora Titular da Universidade Estadual da Bahia, sandraramos@uesb.edu.br

OF GRAPHENE FOR TECHNOLOGICAL APPLICATIONS AND QUANTUM COMPUTATIONAL PHYSICS. RESEARCHERS INVESTIGATED THE QUANTIZED EFFECTS IN GRAPHENE TO UNDERSTAND THIS UNIQUE PHENOMENON FOR APPLICATIONS IN QUANTUM SOLID-STATE PHYSICS AND MATERIALS ENGINEERING. THE STUDY CONCENTRATED ON THE QUANTUM HALL EFFECT, ANALYZING GRAPHENE'S HEXAGONAL STRUCTURE ALONG WITH DIRAC POINTS AND ENERGY BANDS THAT RESEMBLE SEMICONDUCTORS. APPLYING MAGNETIC FIELDS MODIFIES THESE ENERGY BANDS, ENABLING THE DEVELOPMENT OF ESSENTIAL QUANTUM TRANSPORT SYSTEMS. THE RESEARCH UTILIZED COMPUTATIONAL SIMULATIONS WITH KWANT SOFTWARE. RESULTS HIGHLIGHT THE IMPORTANCE OF GRAPHENE IN TECHNOLOGICAL APPLICATIONS AND QUANTUM COMPUTING PHYSICS.

KEYWORDS: Graphene, Semiconductor, Quantum Transport, Computer Simulation.

INTRODUÇÃO

O grafeno é um material bidimensional formado por uma única camada de átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal (Castro Neto, 2009). Desde sua descoberta, tem despertado grande interesse na comunidade científica devido às suas propriedades físicas e eletrônicas singulares, como alta mobilidade eletrônica, resistência mecânica e condutividade térmica.

Entre os fenômenos mais relevantes associados ao grafeno está o Efeito Hall Quântico (EHQ), que se manifesta de maneira distinta em comparação a outros sistemas bidimensionais. No grafeno, a presença de níveis de Landau não convencionais e a quantização da condutividade podem ser observadas mesmo em temperaturas relativamente altas.

A relevância do estudo está na compreensão das propriedades eletrônicas e quânticas do grafeno visando aplicações, como o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos de altíssima precisão. A escolha por uma abordagem teórica e numérica, fundamentada na simulação computacional (Kwant), possibilita investigar de forma robusta o transporte eletrônico em nanoestrutura semicondutora e as condições em que emergem fenômenos quânticos, especificamente no grafeno.

MATERIAIS E MÉTODOS

O estudo foi realizado por meio de simulações computacionais, utilizando o *Kwant* (Groth et al., 2014), um software de código aberto voltado para simulações de transporte quântico, simulado pelo *OrangePI*.

O procedimento metodológico consistiu em:

- 1 Construções de modelos teóricos da nanoestrutura do grafeno, considerando sua estrutura hexagonal e a presença dos pontos de Dirac.
- 2 Aplicação de campo magnético perpendicular ao sistema, a fim de reproduzir as condições experimentais do EHQ.
- 3 Cálculo da condutividade Hall por meio da quantização dos níveis de Landau, assumindo temperatura ideal, onde a função distribuição de Fermi-Dirac se reduz a um delta de energia.
- 4 Análise complementar do efeito de proximidade supercondutor, avaliando o surgimento de gap nulo de energia e o comportamento da densidade de estados.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

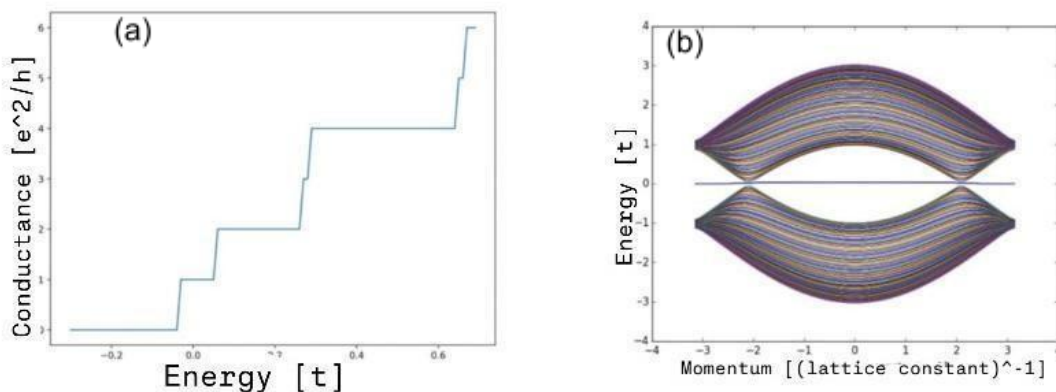
Os cálculos indicaram a quantização da condutividade Hall de acordo com a relação [1] onde N representa o número de níveis de Landau preenchidos. Os resultados confirmam que, no grafeno, os elétrons se comportam como partículas relativísticas de massa nula, refletindo o caráter singular dos pontos de Dirac.

Além disso, foi analisado o efeito de proximidade semiconductor (Datta, 1995), no qual a interação com estados supercondutores gera um gap de energia. A densidade de estados obtida nas simulações não apresentou estados localizados, comportamento esperado para sistemas supercondutores, reforçando a validade do modelo empregado.

Esses resultados destacam a singularidade do grafeno frente a outros materiais bidimensionais, evidenciando seu potencial como plataforma para tecnologias quânticas e para a padronização de unidades de resistência elétrica.

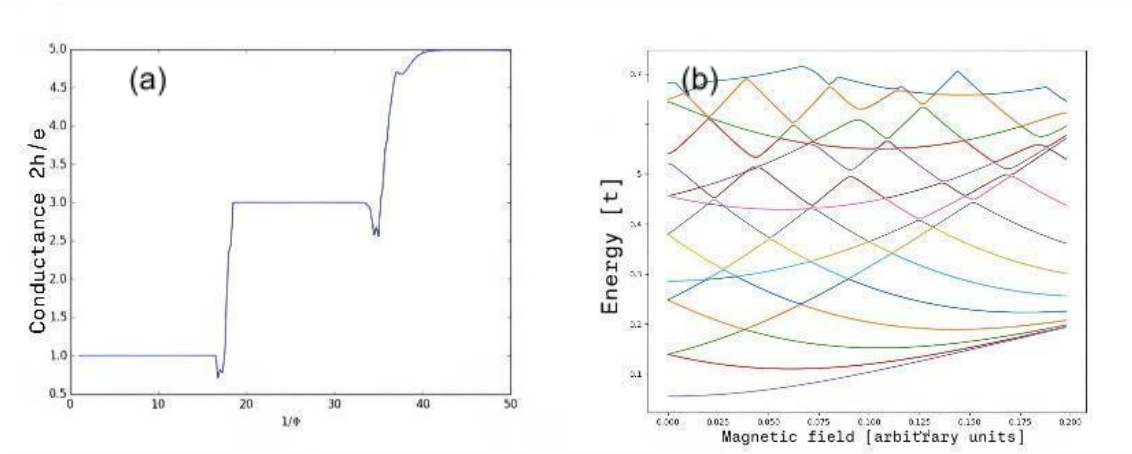
$$[1] \sigma = 2e^2/h N$$

FIGURA 1: (a) Efeito Hall quântico no Grafeno seguido dos cones de Dirac, **(b)** bandas de condição e valência.



Fonte: Os autores (2025), adaptado de GROTH, et all (2014)

FIGURA 2: (a) Efeito Hall quântico com perturbação de campo magnético seguido das **(b)** bandas de condução modificadas sob perturbação magnética.



Fonte: Os autores (2025)

CONCLUSÕES/CONSIDERAÇÕES

O presente estudo reforça a importância do Efeito Hall Quântico no grafeno, confirmando que sua estrutura eletrônica peculiar possibilita a observação de condutância quantizada em condições experimentais acessíveis. A análise numérica com o software *Kwant* demonstrou ser uma ferramenta eficiente para investigar sistemas bidimensionais, fornecendo subsídios para compreender fenômenos quânticos em materiais de interesse tecnológico.

Com este estudo particularizado para o grafeno, ampliamos o entendimento da Física do Estado Sólido e ainda apresentamos perspectivas para aplicações inovadoras, como sensores quânticos, transistores de nova geração e padrões de resistência elétrica. Trabalhos futuros poderão incluir o estudo em diferentes regimes de temperatura, bem como a exploração de heteroestruturas com grafeno para avaliar efeitos de proximidade e possíveis aplicações em computação quântica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

CASTRO NETO, A. H. et al. The electronic properties of graphene. **Reviews of Modern Physics**, v. 81, p. 109–162, 2009.

DATTA, S. **Electronic Transport in Mesoscopic Systems.** Cambridge University Press, 1995.

GROTH, M. WIMMER, A. R. AKHMEROV, AND X. WAIN TAL, “Kwant: a software package for quantum transport,” *New Journal of Physics*, vol. 16, art. 063065, 2014.

MANESCO, Antônio Lucas Rigotti. **Transporte quântico em nanofitas de grafeno.** 2016. 78 f. Monografia (Graduação em Engenharia Física) – Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena, 2016.