

## PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DE NANOFITAS DE GRAFENO<sup>1</sup>

Alan Vieira de Souza<sup>2</sup>, Sandra Cristina Ramos<sup>3</sup>

### RESUMO

O grafeno é uma estrutura cristalina bidimensional composta por uma única camada de átomos de carbono, que em sua valência possui três orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  e outro  $p_z$ , conferindo-lhe mobilidade eletrônica. Adotando as nanofitas de grafeno como objeto de estudo, temos que experimentalmente, as nanofitas de grafeno se agrupam em famílias semicondutores e condutoras. A alternância das características do material é melhor explicada com o desnivelamento provocado pela junção p-n, condições ligadas à abertura de gap de energia nas nanofitas de grafeno. Ao usarmos o modelo Tight-binding, modelo ao qual podemos entender o comportamento dos elétrons de materiais que ainda mantêm forte ligação com o núcleo, aplicando ao elétron  $p_z$  do grafeno, obtemos as bandas de energia das nanofitas de grafeno e aplicando a fórmula de Landauer nos níveis de energia. Os resultados foram obtidos a partir do software Kwant que usa como base a linguagem de programação Python. Assim, o entendimento dessas propriedades eletrônicas atreladas aos tipos de bordas das nanofitas de grafeno possibilita aplicações, como na eletrônica de semicondutores e qubit.

**PALAVRAS-CHAVE:** Bandas de energia, Nanofitas de grafeno, Kwant, Semicondutor.

### ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHENE NANORIBBONS

#### ABSTRACT

Graphene is a two-dimensional crystalline structure composed of a single layer of carbon atoms, which in its valence has three  $sp^2$  hybrid orbitals and another  $p_z$  orbital, giving it electronic mobility. Taking graphene nanoribbons as the object of study, we have found experimentally that graphene nanoribbons are grouped into semiconductor and conductor families. The alternating characteristics of the material are best explained by the unevenness caused by the p-n junction, conditions linked to the opening of the energy gap in graphene nanoribbons. By using the tight-binding model, a model that allows us to understand the behavior of electrons in materials that still maintain a strong bond with the nucleus, applying it to the  $p_z$  electron of graphene, we obtain the energy bands of graphene nanoribbons and apply Landauer's formula to the energy levels. The results were obtained using Kwant software, which is based on the Python programming language. Thus, understanding these electronic properties linked to the types of edges of graphene nanoribbons enables applications such as semiconductor electronics and qubits.

**KEYWORDS:** Energy bands, Graphene nanoribbons, Kwant, Semiconductor.

#### INTRODUÇÃO

O carbono, elemento fundamental da química orgânica e dos materiais avançados, destaca-se por sua extraordinária capacidade de formar estruturas diversas

através do processo de hibridização de orbitais. Esse fenômeno, que combina orbitais atômicos, que permite a formação de ligações covalentes estáveis, originando alótropos com propriedades únicas. O grafeno, a exemplo, desde sua síntese por Novoselov e Geim (NOVOSELOV et al., 2004), vem sendo explorado cada vez mais principalmente no ramo da nanotecnologia no setor de eletrônica de semicondutores. As novas perspectivas para o mesmo, tais como qubits, colocam-no na rota de estudos em aspectos fundamentais da Física Quântica e Relatividade, já que a sua aplicação apresenta implicações que contornam estas duas grandes áreas da física. A literatura nos diz que o grafeno é um semicondutor de gap nulo à temperatura ambiente e que, na ausência de perturbações, esboça bandas de energia cônicas, os famosos cones de Dirac, que se tocam no entorno dos níveis de Fermi no ponto de Dirac (ARAÚJO et al., 2022). Tendo isto em vista, investigamos como alterar essas implicações diretas da estrutura e constatar como as propriedades eletrônicas das nanofitas de grafeno são resultados diretos das suas estruturas.

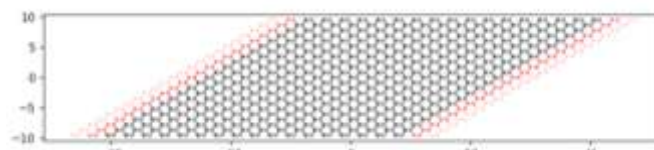
### MATERIAIS E MÉTODOS

O grafeno é uma estrutura cristalina bidimensional composta por uma única camada de átomos de carbono, que em sua valência possui três orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  e outro  $p_z$ , conferindo-lhe certa mobilidade eletrônica. Ao efetuarmos cortes numa dada direção no plano de grafeno, obtemos diferentes tipos de nanofitas do material, onde adotaremos duas delas: as nanofitas de grafeno armchair e outra do tipo zigzag, nomes dados ao tipo de borda apresentada após o corte. Experimentalmente, as nanofitas de grafeno armchair se agrupam em famílias semicondutores e condutoras a depender da largura, já zigzag são sempre metálicas (SILVA, 2016). Todavia, a análise geométrica não é suficiente para concluir se o material possui características metálicas ou não, tendo em vista que, dada uma junção p-n de desnivelamento do elétron  $p_z$  nos níveis de Fermi, caracteriza-o com propriedades condutoras. Para o entendimento de como a estrutura está associada às propriedades eletrônicas destas nanoestruturas de grafeno, usamos o modelo Tight-binding para estudar o elétron  $p_z$ , este modelo permite estudarmos os elétrons de materiais que ainda mantêm forte ligação do núcleo atômico (COSTA, 2017), o Hamiltoniano deste não faz menção à energia potencial do sistema, que pode ser incluído permitindo novas análises dentro do método.

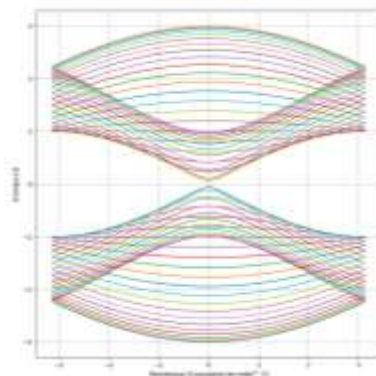
### RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados foram obtidos utilizando a extensão *Kwant* (GROTH et al., 2014) sob linguagem Python, que nos permite resolver problemas com o modelo *Tight-binding*,

solucionar a equação de Schrödinger e calcular funções de Green para a propagação de elétrons. Ao aplicarmos o modelo *Tight-binding* para as nanofitas de grafeno e considerando a teoria de bandas de Landau submetido a um campo magnético externo constante, é possível notar que as bandas de energia para as nanofitas de grafeno zigzag possui um gap de energia próximo ao ponto de Dirac. Esta condição mantém-se inalterada independente da largura da nanofita. A Figura 1, apresenta o resultado deste modelo para uma estrutura do tipo *armchair*. Nesta condição, o *gap* pode ser modulado, diminuído ou fechado, para as nanofitas *armchair*, já que quando o elétron p-z dado uma junção p-n salta da banda de valência (junção p) e passa ocupar a banda de condução (junção n), há no material abertura de um gap de energia, ou seja, nanofita metálica (ARAÚJO et al., 2022). Ao aplicarmos a fórmula de Landauer nesses níveis energéticos, podemos observar a probabilidade de transmissão do elétron respeitando a quantização no formalismo de Landau (ARAÚJO, 2017). A Figura 2, apresenta o resultado do modelo aplicado à estrutura *armchair* em que mostra os pontos de Dirac e as bandas de valência e condução. Esse resultado revela que o grafeno possui uma condutância discretizada, que esboça o efeito Hall Quântico.

**FIGURA 1**Nanofita de grafeno *armchair*

Fonte: Os autores (2025), adaptado do *Kwant* (GROTH et al., 2014).

**FIGURA 2**Bandas energia - Nanofita *armchair*

Fonte: Os autores (2025), adaptado do *Kwant* (GROTH et al., 2014).

## CONCLUSÕES/CONSIDERAÇÕES

Assim, durante este percurso foi possível notar a complexidade e o rigor nos estudos de materiais como o grafeno e suas nanoestruturas. Constatamos que a dependência da estrutura com as propriedades expostas pelas nanofitas circula características geométrico-experimentais, quando agrupamos as nanofitas *armchair* em

famílias condutoras a partir da largura e do número de átomos, ou quânticas quando discretizamos os níveis de energia acessíveis para o elétron pz e a interação entre vetor de onda e linhas de quantização. Também foi possível entender a influência desta quantização quando obtemos o elétron sendo transmitido como platôs exprimindo quantização Hall do material. O entendimento dessas propriedades eletrônicas atreladas aos tipos de bordas das nanofitas de grafeno abre espaço para a discussão das aplicações, como eletrônica de semicondutores e qubits (componente essencial desta nova revolução tecnológica). Contudo, novas pesquisas poderão ser realizadas a partir da alteração dos códigos e/ou adicionando potenciais térmicos, químicos, etc. no hamiltoniano do sistema.

#### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1) ARAÚJO, Francisco Ronan V. Transporte em Phased Arrays de Nanofitas de Grafeno. Fortaleza: UFC-CC, 2017.
- 2) ARAÚJO, F. R. V.; MAGALHÃES, R. N. S.; de SOUSA Jr., I. V.; NASCIMENTO, A. C. S.; da COSTA, D. R. Análogos eletrônicos de dispositivos ópticos em grafeno: da junção p-n à lente de Veselago. Revista Brasileira de Ensino de Física (Online), v. 44, 2022. DOI: 10.1590/1806-9126-rbef-2022-0132.
- 3) COSTA, David da S. Propriedades de Transporte em Nanofitas de Grafeno. Teresina: IF-PI, 2017.
- 4) GROTH, C. W.; WIMMER, M.; AKHMEROV, A. R.; WAIN TAL, X. Kwant: a software package for quantum transport. New Journal of Physics, v. 16, art. 063065, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1088/1367-2630/16/6/063065>.
- 5) NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA, I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. Science, Washington, v. 306, n. 5696, p. 666-669, 2004. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
- 6) SILVA, Christine H. S. da. Propriedades do Transporte Eletrônico em Nanofitas de Grafeno. Niterói: UFF-IF, 2016.