



UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO – UFMA
CENTRO DE CIÊNCIAS DE SÃO BERNARDO
CURSO DE LICENCIATURA EM CIÊNCIAS NATURAIS – QUÍMICA

EZEQUIAS OLIVEIRA RODRIGUES

**APLICAÇÕES DA EQUAÇÃO DE DIRAC À FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA
(GRAFENO)**

**SÃO BERNARDO – MA
2024**

EZEQUIAS OLIVEIRA RODRIGUES

**APLICAÇÕES DA EQUAÇÃO DE DIRAC À FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA
(GRAFENO)**

Monografia apresentada ao curso de Ciências Naturais/Química da Universidade Federal do Maranhão UFMA – Centro de Ciências de São Bernardo, como requisito parcial para obtenção do título de Licenciatura em Ciências Naturais/Química.

Orientador: Prof. Dr. Josberg Silva Rodrigues

**São Bernardo – MA
2024**

Ficha gerada por meio do SIGAA/Biblioteca com dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Diretoria Integrada de Bibliotecas/UFMA

Rodrigues, Ezequias Oliveira.

Aplicações da equação de Dirac à física da matéria condensada grafeno / Ezequias Oliveira Rodrigues. - 2024.
49 p.

Orientador(a): Josberg Silva Rodrigues.

Curso de Ciências Naturais - Química, Universidade Federal do Maranhão, Ufma- São Bernardo, 2024.

1. Grafeno. 2. Espinores de Weyl. 3. Equação de Dirac. 4. Materiais Bidimensionais. 5.

Conjugação de carga. I. Silva Rodrigues, Josberg. II.

Título.

EZEQUIAS OLIVEIRA RODRIGUES

**APLICAÇÕES DA EQUAÇÃO DE DIRAC À FÍSICA DA MATÉRIA
CONDENSADA (GRAFENO)**

Monografia apresentada ao Curso de Ciências Naturais/Química da Universidade Federal do Maranhão UFMA – Centro de Ciências de São Bernardo, como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Ciências Naturais/Química.

Aprovada em: 13/09/2024

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado digitalmente
 **JOSBERG SILVA RODRIGUES**
Data: 20/09/2024 18:00:40-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Josberg Silva Rodrigues (orientador)
UFMA – Campus São Bernardo

Documento assinado digitalmente
 **MARCELO OLIVEIRA RIBEIRO**
Data: 21/09/2024 09:09:51-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Marcelo Oliveira Ribeiro
UFMA – Campus São Bernardo

Documento assinado digitalmente
 **THIAGO TARGINO GURGEL**
Data: 20/09/2024 22:23:19-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Thiago Targino Gurgel
UFMA – Campus São Bernardo

“Sabemos que todas as coisas cooperam para o bem daqueles que amam a Deus, daqueles que são chamados segundo o seu propósito.”

(Romanos 8:28, Bíblia, ARA)

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente acima de tudo e de todos, a Deus, por ter me ajudado ao longo desses anos de curso, por ter me ouvido e me proporcionado forças para passar pelas dificuldades e adversidades que encontrei. Por ter me ajudado a vencer minhas limitações e anseios.

Ao meu orientador Josberg Silva Rodrigues, uma pessoa ímpar que sempre tive admiração enquanto meu professor nas disciplinas do curso antes de ser meu orientador, que tanto me ajudou do projeto de pesquisa à finalização deste trabalho, com uma orientação excelente. Sempre apoiando e cobrando quando necessário, além de sempre demonstrar positividade quanto a conclusão deste trabalho.

As minhas irmãs, irmão e pais que foram quem me incentivaram a entrar no curso, e me aconselharam durante o percurso, em especial ao meu pai e minha mãe. Por sempre me darem suporte quando necessário, também pelo apoio da minha namorada que sempre se preocupou comigo e me incentivou, dizendo que eu conseguiria quando estava com dificuldades em algumas disciplinas.

Meus sinceros agradecimentos aos professores que proporcionaram um ótimo ambiente de aprendizagem ao longo desses anos de curso, e gratidão aos meus colegas mais próximos que fizeram parte da minha vida acadêmica enquanto graduando, que compartilharam momentos singulares, anseios, alegrias e de troca de saberes, uma caminhada se torna mais leve com boas companhias que agregam coisas boas a nossa vida, em especial aos meus colegas que compunham o “quarteto”, onde sempre houve apoio mútuo ao longo do curso com um auxiliando o outro, sem eles não estaria onde estou, restam lembranças que levarei pra sempre comigo.

RESUMO

O grafeno é um material que tem atraído grande atenção nos últimos anos devido ao seu imenso potencial para aplicações tecnológicas, que variam de eletrônicos avançados a sensores e nanotecnologia. Este trabalho foca na análise das bandas de energia do grafeno, utilizando uma abordagem multidisciplinar para compreender as interações elétron-fônon, essenciais para a eficiência de dispositivos eletrônicos baseados nesse material. As características bidimensionais do grafeno conferem propriedades eletrônicas únicas e revelam efeitos quânticos intrínsecos de relevância para o desenvolvimento científico e tecnológico.

A pesquisa adota a Teoria Quântica de Campos como base teórica, com ênfase na aplicação da equação de Dirac para descrever o comportamento dos elétrons no grafeno. Um levantamento bibliográfico em mecânica quântica, física da matéria condensada e mecânica quântica relativística assegura o suporte teórico necessário. A investigação explora a aplicação da equação de Dirac em materiais bidimensionais, analisando as soluções dessa equação no contexto do grafeno.

O estudo também aborda espinores de Weyl, que estão intimamente relacionados às propriedades eletrônicas e quânticas do grafeno, e a Conjugação de Carga, que explora as simetrias de carga no material. Finalmente, o fenômeno do Zitterbewegung, previsto em sistemas quânticos relativísticos, é examinado no contexto bidimensional, revelando possíveis manifestações vibratórias do elétron no grafeno.

O principal resultado desta pesquisa é a análise detalhada das bandas de energia do grafeno, contribuindo para uma compreensão mais ampla das suas propriedades eletrônicas e potenciais aplicações tecnológicas.

Palavras Chave: Grafeno, espinores de Weyl, Equação de Dirac, materiais bidimensionais, conjugação de carga.

ABSTRACT

Graphene is a material that has attracted great attention in recent years due to its immense potential for technological applications, ranging from advanced electronics to sensors and nanotechnology. This work focuses on analyzing graphene's energy bands, using a multidisciplinary approach to understand electron-phonon interactions, essential for the efficiency of electronic devices based on this material. The two-dimensional characteristics of graphene confer unique electronic properties and reveal intrinsic quantum effects of relevance for scientific and technological development.

The research adopts Quantum Field Theory as a theoretical basis, emphasizing the application of the Dirac equation to describe the behavior of electrons in graphene. A bibliographical survey in quantum mechanics, condensed matter physics, and relativistic quantum mechanics ensures the necessary theoretical support. The investigation explores the application of the Dirac equation in two-dimensional materials, analyzing the solutions of this equation in the context of graphene.

The study also addresses Weyl spinors, which are closely related to the electronic and quantum properties of graphene, and Charge Conjugation, which exploits the charge symmetries in the material. Finally, the Zitterbewegung phenomenon, predicted in relativistic quantum systems, is examined in the two-dimensional context, revealing possible vibrational manifestations of the electron in graphene.

The main result of this research is the detailed analysis of graphene's energy bands, contributing to a broader understanding of its electronic properties and potential technological applications.

Keywords: Graphene, Weyl spinors, Dirac equation, two-dimensional materials, charge conjugation.

Lista de Símbolos

\vec{F}	Força
m	Massa
a	Aceleração
\vec{x}	Posição
k	Constante de mola
$V(x)$	Energia potencial
ω_0	Frequência natural de vibração
A	Amplitude
φ_0	Constante de fase
γ	Coefficiente de amortecimento
H	Hamiltoniano
\hat{H}	Operador Hamiltoniano
\hat{p}_x	Operador momento
\hbar	Constante de Planck reduzida
$\psi(x)$	Função de onda
α	Operador (Matriz de Dirac)
β	Operador (Matriz de Dirac)
γ^μ	Matrizes de Dirac
E	Energia
p	Momento Linear
c	Velocidade da luz
t	Tempo
v	Frequência
ω	Frequência angular
$\vec{\sigma}$	Matrizes de Pauli
∂	Derivada parcial
A_μ	Potencial eletromagnético
Σ	Operador de spin
\hat{x}_0	Posição inicial
\hat{p}_x	Operador de momento no eixo x
$\hat{\alpha}_x$	Operador de aceleração no eixo x
$\vec{\alpha}$	Vetor das matrizes de Dirac
$\vec{\nabla}$	Operador nabla (gradiente)
γ^5	Matriz de Dirac gama cinco
\hat{C}	Operador de conjugação de carga
$ \psi\rangle$	Ket da função de onda
φ	Vetor espinorial
χ	Vetor espinorial

Sumário

Sumário	1
1 Introdução	2
2 Fundamentação Teórica	4
2.1 Estudo da Rede Cristalina	4
2.1.1 Oscilador Harmônico Simples	7
2.1.2 Oscilador Harmônico Amortecido	9
2.1.3 Oscilador Harmônico Quântico	10
2.2 Equação de Schrödinger	12
2.3 A equação de Klein Gordon	13
2.4 Equação de Dirac	13
2.4.1 Soluções da Equação de Dirac	16
2.4.2 Equação de Dirac em baixas dimensões	17
2.4.3 a) Em uma Dimensão (1+1)D	17
2.5 Grafeno	18
2.5.1 Estrutura do Grafeno e Energia do Sistema	22
2.5.2 A equação de Dirac em um espaço-tempo de (1+2) dimensões	30
2.5.3 Conjugação de Carga	32
2.5.4 Massa Nula	33
2.5.5 Efeito Zitterbewegung	34
3 Metodologia	36
4 Considerações Finais	38
Referências	39

1 Introdução

A teoria quântica de campos é uma estrutura ampla que se desenvolveu a partir da década de 1920. Basicamente, é a estrutura para sistemas de modelagem quântica que, classicamente descritos, contêm um número muito grande ou um número infinito de graus de liberdade. É na perspectiva da teoria de campos que teorias bem fundamentadas como a eletrodinâmica quântica, a teoria eletrofraca e o modelo padrão são formuladas.

Estudamos o desenvolvimento e as dificuldades de interpretação da mecânica quântica relativística que obrigaram os cientistas a reformular as teorias e incluir a teoria de campos. Este trabalho será dividido em duas partes. Primeiro, haverá a motivação por trás do surgimento da teoria de campo, desde os primórdios com os trabalhos de Max Planck, Einstein e outros (NUSSENZVEIG, 1998). Serão apresentadas as principais dificuldades da mecânica quântica, em particular suas extensões relativísticas.

Uma teoria quântica para o elétron completa e consistente com os postulados da relatividade especial foi introduzida em 1928 por Paul Adrien Maurice Dirac (DIRAC; FOWLER). Ele propôs uma equação que descreve a dinâmica do elétron como uma partícula quântica e relativística em que introduz de forma natural o conceito de spin, escrita numa linguagem covariante, dando origem aos espinores. A equação de Dirac livre é usada para expressar o movimento de partículas massivas de spin-1/2 (GREINER, 2000).

A equação de Dirac apresenta uma linguagem matemática covariante e introduz de maneira natural o conceito de spin. Dada a sua relevância, iremos explorar suas implicações tanto na teoria quântica de campos como na física da matéria condensada, como o conceito de quasi-partículas (OLIVEIRA, 2005).

Além disso, um aspecto crucial deste trabalho é o estudo da aplicação da equação de Dirac em baixas dimensões, particularmente no contexto da física do grafeno. O grafeno, um material bidimensional composto por átomos de carbono dispostos em uma malha hexagonal, apresenta propriedades eletrônicas que podem ser eficazmente descritas pela equação de Dirac. Este estudo proporciona um campo rico para explorar fenômenos quânticos em sistemas de dimensões baixas (GREINER, 2000).

Assim, este trabalho se propõe a fornecer uma compreensão da mecânica quântica relativística, teoria quântica de campos e física da matéria condensada, com um enfoque especial na relevância da

equação de Dirac para sistemas em baixas dimensões. O trabalho é organizado da seguinte forma:

Primeiramente estudamos os osciladores para entender as oscilações da Rede Cristalina com ênfase particular na importância dos fônons. Essas excitações quânticas da rede são cruciais para entender diversas propriedades do material (OLIVEIRA, 2005).

Em seguida estudamos a origem da Equação de Dirac e suas soluções tanto em 4D como em Baixas Dimensões: Abordamos como o grafeno pode ser descrito por uma versão da equação de Dirac que é válida em regimes de baixa dimensionalidade, revelando propriedades quânticas intrínsecas do material (GREINER, 2000) .

Estudamos também os Espinores de Weyl: Nesta seção aborda-se como os espinores de Weyl são aplicáveis ao grafeno, fornecendo uma linguagem para descrição de quase-partículas no espaço de Hilbert.

Além de abordarmos a Conjugação de Carga e suas implicações para a simetria da estrutura de bandas do grafeno, estudamos o efeito Zitterbewegung (GREINER, 2000).

Ao reunir esses tópicos sob o arcabouço da teoria quântica de campos e da física de matéria condensada, esta pesquisa pretende não apenas avançar no entendimento sobre materiais bidimensionais, mas também elucidar como essas duas áreas da física podem ser mutuamente enriquecedoras.

A Justificativa neste trabalho é investigar a física de materiais bidimensionais como o grafeno a partir de aplicações de Teoria Quântica de Campos e física da matéria condensada. Fazendo uma revisão bibliográfica desde a mecânica quântica através da equação de Schrodinger, Klein Gordon e Dirac.

Tendo como Objetivos:

- **Geral:** Investigar as aplicações de física da matéria condensada além de estudar a fenomenologia e propriedades de materiais como o grafeno
 - **Específicos:** Utilizar o ferramental matemático da teoria quântica de campos como linguagem para expressar os fenômenos acerca da estrutura da matéria e compreender as propriedades do grafeno.
- Fazer uso de softwares computacionais como Mathematica, Maple para a confecção de gráficos e algoritmos específicos da pesquisa.

2 Fundamentação Teórica

A radiação térmica de um corpo negro explicada a partir de aspectos da física clássica apresentava sérios problemas. Quando um corpo é aquecido, ele começa a emitir radiação em função de sua temperatura, que pode ser medida com um sensor, tratando-se da análise espectral. Quando comparamos a teoria e o experimento, percebeu-se que a teoria só funciona com os comprimentos de onda pequenos, por outro lado existe uma diferença com os comprimentos de onda altos (NUSSENZVEIG, 1998). Rayleigh e Jeans, propõem outra teoria, mas que funciona apenas para grandes comprimentos de onda e dá resultados que tendem ao infinito para pequenos comprimentos de onda, é o que se chamou-se de “catástrofe do ultravioleta”.

Usando seus conhecimentos de termodinâmica e eletromagnetismo, Max Planck resolve este problema. Ao contrário de Rayleigh e Jeans que partiram do postulado de que o espectro de emissão é contínuo, Max Planck introduz a energia quantizada, e obtém resultados em conformidade com os experimentos, nasce assim a teoria quântica:

$$E = hv = \hbar\omega, \quad (1)$$

em que h é uma nova constante universal, conhecida como constante de Planck.

Estudou-se os modelos atômicos, primeiramente o modelo de Thomson, embora teve o êxito da descoberta do elétron, foi fortemente abalado pelas descobertas de Rutherford. Mas somente no modelo de Borh, que foi demonstrado como a matéria mantém sua estrutura e permanece estável sem que os átomos colapsassem.

Nas seções seguintes apresentamos o estudo da estrutura da rede cristalina e os osciladores harmônicos, equação de Schrödinger, equação de Klein Gordon e Equação de Dirac.

2.1 Estudo da Rede Cristalina

É comum ouvirmos sobre cristais algumas vezes ao longo da nossa vida, na escola, Tv, no cotidiano, ou qualquer situação corriqueira, de fato ao menos uma vez você ouvirá falar de cristais, mas o que de fato são? quem os estuda? uma característica intrínseca do cristal é a periodicidade e padrões

de simetria. Em estudos relacionados a natureza é possível observar esses padrões em outros lugares no mundo e em que vivemos, além possibilitar aspectos de simetria e periodicidade em plantas, em minerais, até mesmo em níveis invisíveis a olho nu em alguns materiais, ou até mesmo num ser vivo como zebras, além do próprio ser humano que possui um corpo simétrico. Entretanto nos minerais a um destaque para os cristais com estruturas e leis únicas e fascinantes que regem sua existência.

A cristalografia é a área da ciência que se dedica ao estudo dos cristais, das leis que regem a sua formação, suas propriedades intrínsecas de cada tipo de material cristalino, explorando suas características físico-químicas. A palavra cristalografia vem do grego *Kristallos* + *gráfico* = cristal mais descrição. Os gregos determinaram a água congelada como cristal. O quartzo claro é chamado de cristal rochoso, que se formou quando a água congelou e ficou petrificada. Essa interpretação foi válida até a Idade Média. A definição atual é que um cristal é todo mineral com formas poliédricas (Duarte, 2019).

Algumas substâncias como sal ou açúcar são compostas de pequenos cristais. Suas partículas estão dispostas em padrões tridimensionais regulares, como cubos ou hexágonos. A maioria dos metais se cristaliza em três estruturas cristalinas cúbicas: cúbica simples; cúbica de corpo centrado e cúbica de face centrada (GARCIA, et al.2020).

Figura 1: Representação gráfica em sequência das estruturas cristalinas cúbica simples, cúbica de corpo centrado e cúbica de face centrada

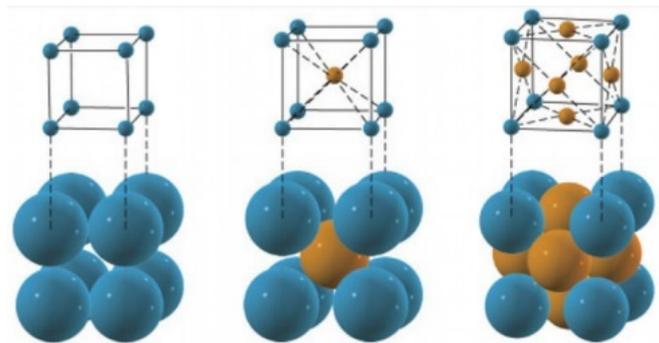


Figura 2: PUC 2022

Geralmente, um cristal é constituído de uma formação estrutural com características periódicas, ou seja, que se repetem ao longo da rede cristalina. A periodicidade se dá pelas repetições de estruturas básicas contendo um átomo ou mais ligados entre eles (Oliveira, 2005). Isso equivale a dizer que o

cristal é constituído de pequenos blocos que se repetem ao longo de toda a rede do material cristalino.

Há casos de simetrias tão perfeitas em cristais, que se torna até duvidoso se sua origem é natural ou artificial, por possuírem faces bem formadas e lapidadas mesmo na natureza sem ação humana. Quando não há essa padronização na estrutura, ela é chamada de sólido amorfo, formado a partir do super resfriamento de um líquido abaixo de seu ponto de congelamento, tendo como exemplo o vidro. Genericamente, todos os sólidos amorfos são chamados de vidro (Garcia, 2020).

Segundo Ostachuk, na rede cristalina encontram-se os chamados nós, que possuem um arranjo próprio que depende do material observado. Cada nó da rede possui os mesmos arranjos de nós vizinhos, essa propriedade resulta na periodicidade e características macroscópicas da estrutura cristalina. Além de tornar possível a separação da rede em unidades menores, como blocos que se repetem e, agrupados de forma tridimensional, geram o cristal como um todo. Denomina-se essas partes menores com propriedades periódicas de células unitárias.

Os minerais com sua estrutura cristalina podem se desenvolver a partir de sete sistemas cristalinos distintos, que originam-se a partir da célula unitária com características geométricas bem definidas que regem toda a formação da estrutura do material. Cada um dos sistemas contém diferentes formas (células unitárias), e cada cristal se desenvolve a partir de um dos sistemas possíveis, uma propriedade que é essencial do material (Garcia, 2020). Nota-se a impossibilidade da existência da formação de uma rede cristalina e conseqüentemente de um cristal como um todo a partir de dois sistemas simultaneamente.

Deste modo, pela infinidade de tipos de cristais conhecidos, conseguiríamos imaginar que o número de sistemas poderia ser gigantesco. Porém, como percebeu-se, possivelmente há a existência de somente sete sistemas, que devem obedecer a critérios para serem considerados como tais, como o fato de ser necessário a capacidade de se unirem em um arranjo tridimensional de células unitárias capazes de preencher todo o espaço. Porém, existem arranjos de nós nos mesmos sistemas, que satisfazem a regra de que cada nó possua o mesmo número e disposições de seus nós vizinhos, o que causaria a existência de algumas formas de redes. No entanto, apenas em 1848 foi demonstrada a existência dessas redes por Augusto Bravais, sendo elas 14 possíveis, que ficaram conhecidas como redes de Bravais (Ostachuk, 2016).

Em uma linguagem sistemática, a rede de Bravais consiste em um arranjo infinito de pontos dispostos de forma regular no espaço, sendo possível a localização de qualquer um dos pontos pertencendo

centes à rede por meio do vetor:

$$\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \quad (2)$$

em que n_1 , n_2 e n_3 são números inteiros e \vec{a}_1 , \vec{a}_2 e \vec{a}_3 são vetores, chamados de primitivos, que se estendem por toda a rede a partir de um ponto comum (célula básica da rede). A rede de Bravais consiste em um conceito matemático, por ser composta de dimensões infinitas e pontos equivalentes entre eles (Oliveira, 2005).

Além do conceito de rede de Bravais, outro conceito relacionado é o de rede recíproca quando tratamos do estudo dos elétrons na rede cristalina. Segundo Oliveira (Oliveira, 2005), a rede recíproca associada a uma dada rede cristalina é aquela formada por vetores de onda K que satisfazem a seguinte condição:

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} = 1 \quad (3)$$

para todo vetor \vec{R} da rede direta. Esta definição caracteriza a propriedade de periodicidade da rede de Bravais.

Assim como é possível a divisão da rede cristalina em células unitárias, a rede recíproca é dividida em zonas de Brillouin. A primeira zona de Brillouin é formada a partir de um ponto da rede recíproca. Em seguida, é necessário fazer a ligação com seus vizinhos mais próximos. Logo após, traçamos planos perpendiculares a essas retas formadas, tendo como preocupação a localização de onde elas devem ser traçadas, sendo o local adequado os pontos médios das retas. Após a ligação de todas as retas perpendiculares, restará no centro somente um ponto da rede recíproca. As demais zonas são construídas de forma análoga. Porém, dependendo de qual zona de Brillouin será construída, deve-se escolher o vizinho na zona desejada. Se for, por exemplo, a segunda zona, os pontos escolhidos serão os vizinhos mais próximos da primeira zona; os da terceira devem ser os vizinhos mais próximos da segunda zona, e assim sucessivamente (Oliveira, 2005).

2.1.1 Oscilador Harmônico Simples

Em uma rede cristalina, os átomos oscilam em torno de suas posições de equilíbrio, podendo ser modelados como sistemas oscilatórios. Nas próximas seções, exploraremos o comportamento dos osciladores.

A força restauradora do sistema massa-mola é dada pela lei de Hooke,

$$m\vec{a} = \vec{F}_r = m\ddot{\vec{x}} = -k\vec{x}, \quad (4)$$

$$m\ddot{\vec{x}} = -k\vec{x}, \quad (5)$$

pelo fato da força restauradora ser conservativa, temos uma energia potencial associada

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2, \quad (6)$$

pela segunda lei de Newton, a equação de movimento será,

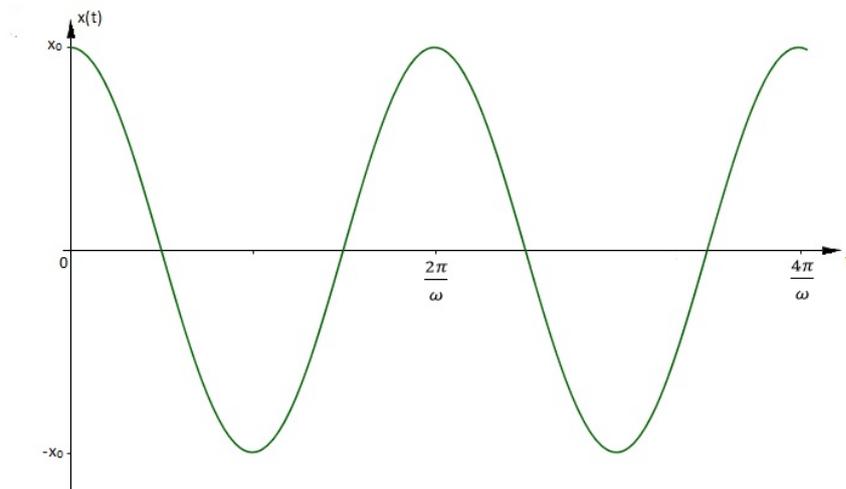
$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0, \quad (7)$$

em que os dois pontos indicam a derivada segunda em relação ao tempo e $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ é a frequência natural de vibração. Resolvendo essa equação diferencial, obtemos funções tipo exponencial ou funções periódicas tipo seno ou cosseno

$$x(t) = A \sin(\omega t + \varphi_0), \quad (8)$$

em que A é a amplitude e φ_0 é a constante de fase.

Figura 3: Gráfico do oscilador harmônico simples



Fonte: Autoria Própria feito no programa Mathematica

2.1.2 Oscilador Harmônico Amortecido

Tornando a força de atrito do ar do sistema massa mola proporcional à velocidade:

$$\vec{F} = -b\dot{\vec{x}} \quad (9)$$

De modo que a equação diferencial, obtida da segunda lei de Newton é:

$$\ddot{\vec{x}} + 2\gamma\dot{\vec{x}} + \omega_0^2\vec{x} = 0 \quad (10)$$

sendo a solução geral dependente da relação entre γ e ω_0 , teremos três casos:

Quando $\gamma < \omega_0$, a solução é:

$$\vec{x}(t) = Ae^{-\gamma t} \sin(\omega_1 t + \varphi_0) \quad (11)$$

em que $\omega_1 = \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$.

quando $\gamma = \omega_0$, temos:

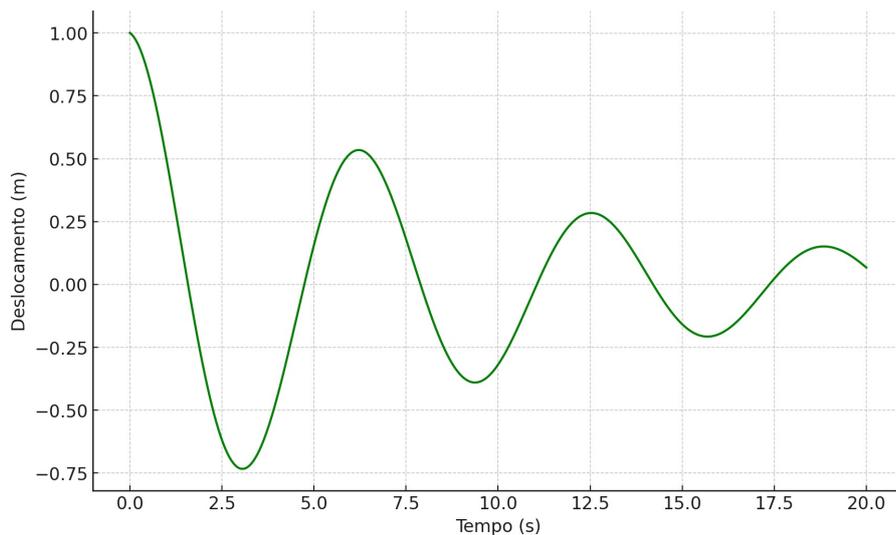
$$x(t) = (A + Bt)e^{-\gamma t} \quad (12)$$

por fim, caso $\gamma > \omega_0$. A solução geral é

$$x(t) = Ae^{-\gamma t} \sinh(\omega_1 t + \varphi_0) \quad (13)$$

sendo $\omega_1 = \sqrt{\gamma^2 - \omega_0^2}$.

Figura 4: Gráfico do deslocamento do oscilador harmônico amortecido



Fonte: Autoria Própria feito no programa Mathematica

2.1.3 Oscilador Harmônico Quântico

O oscilador harmônico quântico corresponde ao tratamento do oscilador clássico usando as ferramentas teóricas da mecânica quântica, solucionando a equação de Schrodinger, que possui solução analítica.

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \rightarrow \omega^2 m = k \quad (14)$$

operadores

Na mecânica quântica, o hamiltoniano de um oscilador harmônico unidimensional é escrito na forma:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2, \quad (15)$$

no qual o acento circunflexo indica que estamos lidando com operadores, são os operadores de posição e momento, dados por:

$$\hat{x} = x\hat{i}; \quad (16)$$

e

$$\hat{p}_x \equiv \frac{i}{\hbar} \frac{d}{dx}. \quad (17)$$

O operador hamiltoniano pode ser escrito de modo mais simplificado, utilizando operadores reduzidos X e P:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} \quad \text{e} \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}, \quad (18)$$

\hat{X} e \hat{P} satisfazem a seguinte equação notável:

$$[\hat{X}, \hat{P}] = \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = i\hat{1}, \quad (19)$$

$[\hat{X}, \hat{P}]$ sendo o comutador de X e P.

O operador \hat{H} pode ser expresso em termos de \hat{X} e \hat{P} :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2). \quad (20)$$

Vamos procurar os autovalores e os autovetores de H:

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (21)$$

Para isso é necessário utilizar três novos operadores: o operador \hat{a} , seu conjugado hermitiano (indicado com uma cruz sobrescrita) e o operador número \hat{N} :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad \text{e} \quad \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (22)$$

O comutador de \hat{a} e de \hat{a}^\dagger é o operador identidade:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{1} \quad (23)$$

desse modo constata-se que:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \hat{1} \right) \quad (24)$$

Assim podemos escrever:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \hat{1} \right) \quad (25)$$

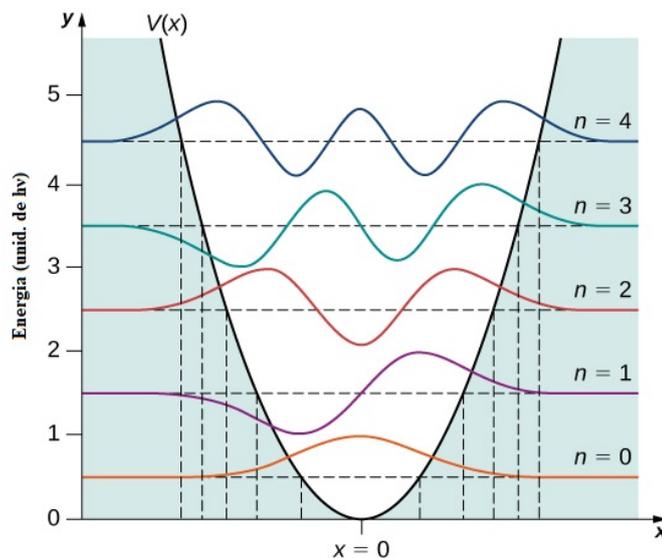
Levando à quantização da energia do oscilador harmônico e observamos que autovetores do operador \hat{H} também são os autovetores do operador \hat{N} .

Já as autofunções de \hat{H} são obtidas da equação abaixo:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (26)$$

Tem como soluções os polinômios de Hermite.

Figura 5: Gráfico do oscilador harmônico quântico



Fonte: Ling; Sanny; Moebis, 2016

2.2 Equação de Schrödinger

Erwin Schrödinger estava à procura de uma equação de onda para o elétron,

$$H|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle \quad (27)$$

ou na base das posições

$$H\psi(x) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) \quad (28)$$

Para uma partícula livre de spin nulo e massa m podemos escrever o Hamiltoniano clássico,

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (29)$$

Promovemos os observáveis, que neste caso é apenas o momento \vec{p} e energia H , para operadores

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (30)$$

O operador momento \hat{p} na base de posição

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad (31)$$

Assim, a equação de Schrödinger para uma partícula livre

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) \quad (32)$$

A derivada temporal acima é de primeira ordem, mas a derivada espacial é de segunda ordem. Por esta razão, não é invariante de Lorentz, o que implica que não satisfaz a teoria da RR. Poderíamos tentar incorporar a invariância de Lorentz escrevendo o Hamiltoniano como

$$\hat{H} = \sqrt{\hat{p}^2c^2 + m^2c^4} \quad (33)$$

que advem da relação de energia da RR. Assim, a equação de Schrödinger torna-se-ia

$$\sqrt{-\hbar^2\nabla^2c^2 + m^2c^4}\psi(x) = i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial t} \quad (34)$$

2.3 A equação de Klein Gordon

A equação de Klein-Gordon-Fock, é uma versão relativística da equação de Schrödinger que descreve partículas massivas de spin zero.

E se operarmos ambos os lados com operador hamiltoniano mais uma vez?

$$(-\hbar^2 \nabla^2 c^2 + m^2 c^4) \psi(x) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial t^2} \quad (35)$$

rearranjando os termos

$$\hbar^2 \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial t^2} - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (36)$$

$$\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (37)$$

$$\hbar^2 \left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (38)$$

Eq. de Klein-Gordon.

Em geral, trabalhamos nas unidades naturais $\hbar = c = 1$. Neste sistema de unidades, a eq. torna-se,

$$(\square + m^2) \psi(x) = 0 \quad (39)$$

As transformações de Lorentz para as coordenadas,

$$x^{\mu'} = \Lambda^\mu_{\nu'} x^\nu \text{ ou } x^\mu = (\Lambda^{-1})^\mu_{\nu'} x^{\nu'} \quad (40)$$

$$\left[(\Lambda^{-1})^\mu_{\alpha} \partial'^\alpha (\Lambda^{-1})^\beta_{\mu} \partial'_\beta + m^2 \right] \psi(\Lambda^{-1} x') = 0 \quad (41)$$

$$[\delta_\alpha^\beta \partial'^\alpha \partial'_\beta + m^2] \psi(\Lambda^{-1} x') = 0 \quad (42)$$

$$[\partial'^\beta \partial'_\beta + m^2] \psi'(x') = 0, \quad (43)$$

verdade, se a função de onda for invariante por TL (escalar de Lorentz):

$$\psi(x) = \psi(\Lambda^{-1} x') = \psi'(x') \quad (44)$$

2.4 Equação de Dirac

Em 1928, Paul Dirac publicou a equação de onda que descreve o movimento relativístico de férmions na forma covariante, na tentativa de resolver as dificuldades que tinham na equação de Klein-Gordon. Com este trabalho, Dirac conseguiu restaurar a positividade da densidade de probabilidade.

No entanto, ele enfrentou discussões sobre as soluções de energia negativa, o que o levou a levantar a hipótese da existência de um mar de partículas que preenche todos os estados com energia negativa. Esses estados foram posteriormente interpretados como descrevendo antipartículas (Dirac, 1928).

Em 1932, nos laboratórios do Instituto de Tecnologia da Califórnia, Carl D. Anderson, colaborador de Robert Millikan, reconheceu e confirmou a existência do antielétron (pósitron), o que lhe valeu o Prêmio Nobel. A descoberta recebeu imediatamente a aprovação da comunidade científica. A equipe europeia de Blackett e Occhialini, no Laboratório Cavendish de Cambridge, obteve os mesmos resultados, mas manteve uma postura mais cautelosa (Anderson, 1932).

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2 \right) \psi(x, t) = 0 \quad (45)$$

Fazendo $c = \hbar = 1$, as energias correspondentes à equação seguem da relação relativística:

$$E^2 = p^2 + m^2. \quad (46)$$

Insatisfeito com as limitações das descrições quânticas relativísticas existentes para o elétron, Dirac buscava encontrar uma equação de onda que fosse de primeira ordem em relação às derivadas de espaço e tempo. Seu objetivo era criar uma formulação que fosse consistente tanto com a mecânica quântica quanto com a teoria da relatividade especial, além de incorporar as propriedades de spin do elétron. A equação deveria ter a seguinte forma:

$$H_D \psi = i \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (47)$$

Obedecendo à expressão relativística para a energia, ele propôs uma equação do tipo:

$$(E - \alpha \cdot p - \beta m) \psi = 0 \quad (48)$$

em que $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ e β são operadores que atuam em ψ .

Exigir que a equação acima obedeça à relação de energia leva a:

$$(E^2 - p^2 - m^2) \psi = 0 \quad (49)$$

Multiplicando a equação (48) pela esquerda por $(E - \alpha \cdot p - \beta m)$, temos:

$$(E^2 - \beta^2 m^2 - (\alpha \cdot p)(\alpha \cdot p)) \psi = 0 \quad (50)$$

$$(E^2 - \beta^2 m^2 - (\alpha_k \alpha^k p_k p^k)) \psi = 0 \quad (51)$$

Usando as propriedades $\alpha_k^2 = \beta^2 = \mathbb{I}$, e notando que $\beta^2 m^2 = m^2$ e $(\alpha_k)^2 (p_k)^2 = p_k^2 = p^2$ a equação acima se simplifica para:

$$(E^2 - m^2 - p^2) \psi = 0 \quad (52)$$

Esta é uma confirmação de que a equação de Dirac é compatível com a relação de energia em uma teoria relativística.

Os operadores α e β devem satisfazer as condições:

$$\alpha_k^2 = \mathbb{I}, \quad \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = 0; \quad (53)$$

$$\beta^2 = \mathbb{I}, \quad \beta \alpha^k + \alpha^k \beta = 0 \quad (54)$$

Finalmente, chegamos à equação de Dirac:

$$(E - \alpha \cdot p - \beta m) \psi = 0 \quad (55)$$

A equação de Dirac na forma $(E - \alpha \cdot p - \beta m)\psi = 0$ pode ser convertida para a sua forma covariante utilizando as matrizes γ^μ em quatro dimensões. A conexão entre as matrizes α e β e as matrizes γ^μ é geralmente estabelecida como:

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta \alpha_i \quad \text{para } i = 1, 2, 3 \quad (56)$$

Começemos por reescrever a equação original em termos de γ^μ :

$$E\psi - \alpha \cdot p\psi - \beta m\psi = 0 \quad (57)$$

Substituindo E por $i\partial_t$ e p por $-i\nabla$, podemos reescrever a equação como:

$$i\partial_t\psi + i\alpha \cdot \nabla\psi - \beta m\psi = 0 \quad (58)$$

Agora, combinamos as derivadas temporais e espaciais em um único vetor quadrimomento $p^\mu = (E, -p)$ e um único vetor de derivadas $\partial^\mu = (\partial_t, -\nabla)$. A equação então toma a forma:

$$i\gamma^0\partial_t\psi + i\gamma^i\partial_i\psi - m\psi = 0 \quad (59)$$

Ou, em notação indicial com a soma sobre μ :

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0 \quad (60)$$

Esta é a forma covariante da equação de Dirac. Ela é invariante sob transformações de Lorentz, e dessa forma é compatível com os princípios da teoria da relatividade especial.

2.4.1 Soluções da Equação de Dirac

Se buscarmos soluções tipo ondas planas da forma

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= e^{-ikx}u(k) \quad \text{para energias positivas,} \\ \psi_-(x) &= e^{ikx}v(k) \quad \text{para energias negativas,} \end{aligned}$$

onde u e v são bi-espinores. Obtemos para as quantidades espinoriais $u(k)$ e $v(k)$ as seguintes equações lineares

$$\begin{aligned} (\not{k} - m)u(k) &= 0, \\ (\not{k} + m)v(k) &= 0. \end{aligned}$$

Admitiremos que as soluções dessas equações são dadas por

$$\begin{aligned} u^\alpha(k) &= \frac{\not{k} + m}{\sqrt{2m(m+E)}}u^\alpha(m,0), \\ v^\alpha(k) &= -\frac{\not{k} - m}{\sqrt{2m(m+E)}}v^\alpha(m,0), \end{aligned}$$

em que $E = k^0 = \sqrt{p^2 + m^2}$ e as soluções para $k = 0$ na forma canônica são

$$u^{(1)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u^{(2)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$v^{(1)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v^{(2)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Os espinores canônicos satisfazem as seguintes normalizações

$$\bar{u}^\alpha(k)u^\beta(k) = \delta_{\alpha\beta}, \quad \bar{u}^\alpha(k)v^\beta(k) = 0,$$

$$\bar{v}^\alpha(k)v^\beta(k) = -\delta_{\alpha\beta}, \quad \bar{v}^\alpha(k)u^\beta(k) = 0.$$

Estes vetores base também são estados próprios do operador de spin definido por $\Sigma_3 = \frac{1}{2}\sigma_3 \otimes \sigma_3$.

2.4.2 Equação de Dirac em baixas dimensões

2.4.3 a) Em uma Dimensão (1+1)D

A equação mais simples de Dirac é escrita em uma dimensão espacial e uma temporal e é expressa por

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\hbar c \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + mc^2 \beta \psi(x, t), \quad (61)$$

em que a solução geral pode ser escrita em ondas planas

$$\psi(x, t) = Au_+ e^{i(kx - \omega t)} + Bu_- e^{i(kx + \omega t)}. \quad (62)$$

Substituindo na equação de Dirac e calculando termo a termo

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -i\hbar \omega Au_+ e^{i(kx - \omega t)} - i\hbar \omega Bu_- e^{i(kx + \omega t)} \quad (63)$$

$$-\hbar c \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = i\hbar ck Au_+ e^{i(kx - \omega t)} - i\hbar ck Bu_- e^{i(kx + \omega t)} \quad (64)$$

$$mc^2 \beta \psi(x, t) = mc^2 (Au_+ e^{i(kx - \omega t)} - Bu_- e^{i(kx + \omega t)}). \quad (65)$$

A equação para as constantes A e B na forma matricial se torna

$$\begin{pmatrix} -\omega - mc^2 & ck - \omega \\ ck - \omega & -\omega - mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (66)$$

cujo determinante da matriz será

$$\det \begin{pmatrix} -\omega - mc^2 & ck - \omega \\ ck - \omega & -\omega - mc^2 \end{pmatrix} = (-\omega - mc^2)^2 - (ck - \omega)^2 = 0 \quad (67)$$

$$\omega^2 = c^2 k^2 + m^2 c^4 \quad (68)$$

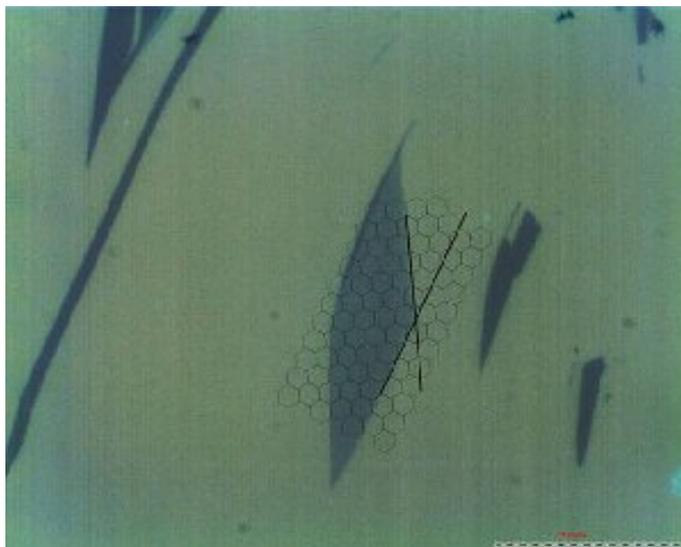
que é a relação de dispersão envolvendo energia da partícula com seu momento e sua massa.

2.5 Grafeno

O grafeno, segundo Nunes Filho et al. (2021), é uma forma alotrópica do carbono com uma estrutura totalmente bidimensional, composta por uma malha de hexágonos regulares de átomos de carbono com orbitais do tipo sp^2 . Este material, derivado do carbono, também é a base para a formação de outros materiais amplamente utilizados na indústria mundial, como o grafite e o diamante, conforme destacado por Vieira e Vilar (2017).

O grafeno é essencialmente uma folha plana de átomos de carbono, formando uma camada monoatômica. Sua estrutura peculiar confere-lhe propriedades notáveis, como elevada mobilidade eletrônica, resistência superior a ligas metálicas como o aço e excelente condutividade térmica, entre outras. Essas características explicam o crescente interesse por esse material nas pesquisas atuais.

Figura 6: Visualização Estrutural do Grafeno: Uma Rede de Átomos de Carbono Dispostos em Hexágonos Perfeitos



Fonte: <https://siteantigo.faperj.br/>, acesso em 29/09/2024

O termo “grafeno” já era utilizado em estudos teóricos antes de sua descoberta prática, geralmente para explicar as propriedades alotrópicas do carbono e suas diversas formas. Acreditava-se que o grafeno possuía uma estrutura instável, o que impossibilitava sua obtenção prática (Vieira e Vilar, 2017).

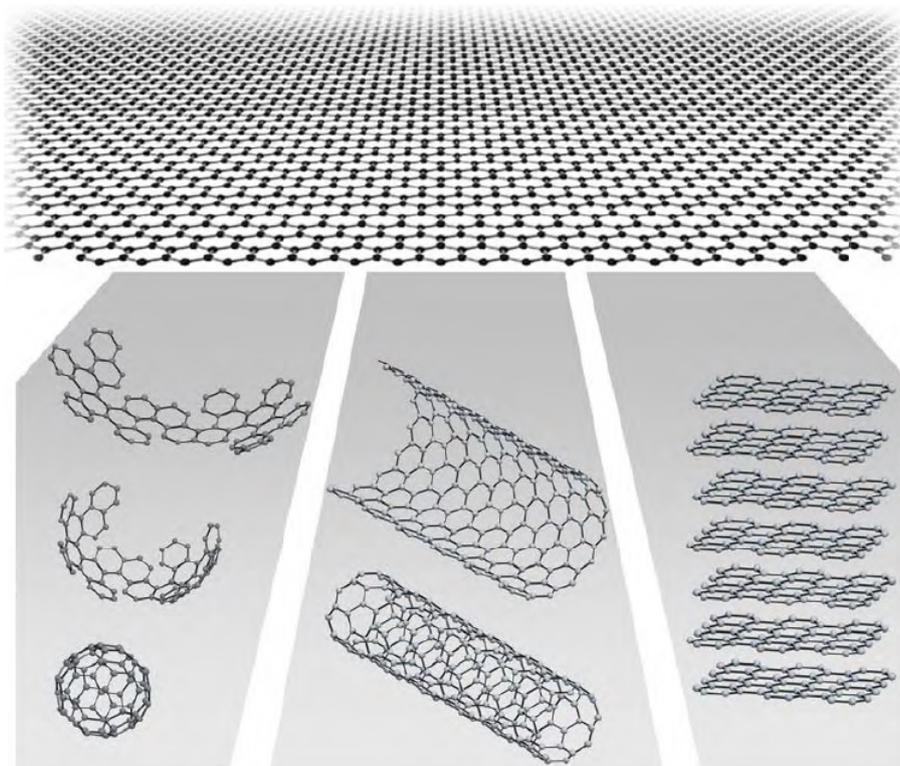
Segundo Alencar e Santana (2016): O termo grafeno originou-se em 1987, entretanto sua definição oficial surgiu em 1994, embora a extração desse material não tenha sido realizada. Em 2004, dois professores e pesquisadores da Universidade de Manchester conseguiram extrair o grafeno a partir do grafite através da esfoliação mecânica, uma das técnicas utilizadas para a extração desse material.

Vieira e Vilar (2017) afirmam que o termo “grafeno” foi adotado em 1962, combinando o termo “grafite”, uma forma alotrópica do carbono, com o sufixo “-eno”, devido à presença de ligações duplas em sua estrutura molecular. Isso demonstra que o termo era utilizado muito antes de sua descoberta prática em 2004 e antes da data mencionada por Alencar e Santana (2016).

Devido à hibridização sp^2 em sua estrutura, o grafeno pode se organizar em duas dimensões, formando uma rede de hexágonos de carbono, comumente chamada de “estrutura favo de mel”. Essa versatilidade estrutural faz do grafeno a base para diversas formas alotrópicas do carbono (Sá, 2011).

Segundo Alencar e Santana (2016), há três principais estruturas na família dos alótropos do carbono baseadas no grafeno: o fulereno, com formato esférico; os nanotubos, com formato cilíndrico; e o grafite, formado por um empilhamento de camadas bidimensionais de grafeno.

Figura 7: Estrutura do grafeno e formas alotrópicas



Fonte: Ars Physica, 2011.

As imagens gráficas acima representam as estruturas formadas a partir da malha hexagonal do grafeno, em sequência na parte inferior temos os fulerenos e nanotubos que mesmo possuindo um formato esférico ou cilíndrico ainda mantêm as características 2D por haver somente uma camada com periodicidade em suas estruturas e o grafite.

O grafeno é o primeiro material bidimensional estável descoberto, com várias características únicas devido à sua estrutura cristalina bidimensional, como transparência óptica, flexibilidade inerente, alta condutividade térmica, grande área superficial e aplicações em processos energéticos (Nunes Filho et al., 2021). Essas propriedades conferem ao grafeno uma vasta aplicabilidade.

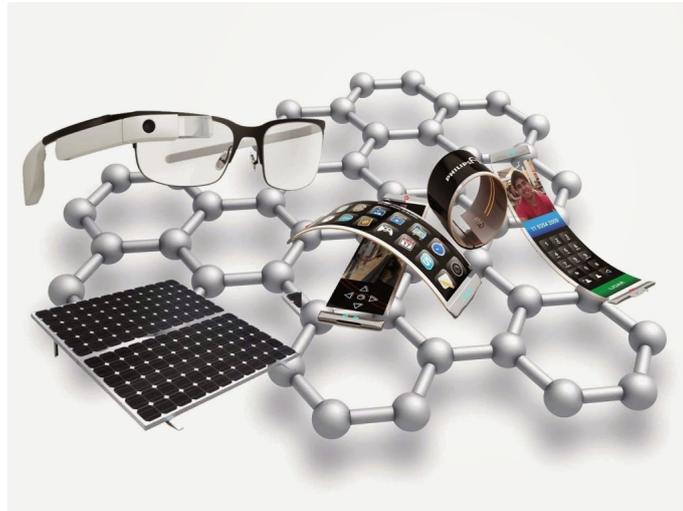
Essas propriedades despertam grande interesse em pesquisadores, que buscam aplicações em áreas como biologia, ciências de materiais, sensores, dispositivos microeletrônicos e processos energéticos

(FILHO et al., 2021). O destaque geralmente recai sobre a alta mobilidade eletrônica do grafeno, impulsionando o desenvolvimento de nanotecnologias.

Alencar e Santana (2016) reforçam que, devido às características do material, ele pode ser utilizado em diversos setores sem limitações aparentes, permitindo avanços significativos no mercado. O potencial do grafeno no ramo da tecnologia, como supercondutor, e na química, como elemento filtrante, destaca sua versatilidade. Este potencial, juntamente com o alto valor comercial do grafeno, aumenta gradualmente o volume de pesquisas sobre o material.

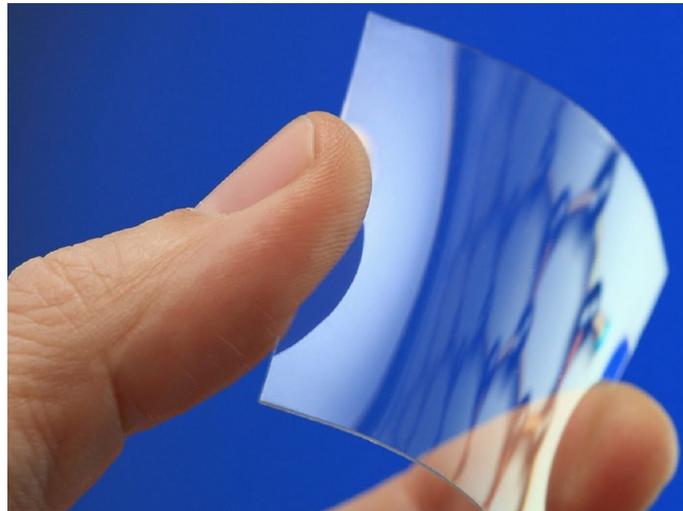
O grafeno, como mencionado anteriormente, possui propriedades singulares que o diferenciam de materiais já considerados excepcionais. Entre essas características, destacam-se de forma notável sua alta mobilidade eletrônica, resistência superior às ligas metálicas atualmente disponíveis, transparência, flexibilidade e excelente condutividade. Essa combinação de atributos permite que o grafeno seja utilizado em uma ampla variedade de áreas (SOUZA; SANTOS, 2019). Apesar de ainda não ter uma aplicação prática amplamente difundida, principalmente devido à sua descoberta relativamente recente e aos métodos de extração pouco eficientes para produção em escala comercial, o grafeno já mostra grande potencial em diversos campos. O alto custo de obtenção por métodos sofisticados e a dificuldade em alcançar um grau elevado de pureza, por exemplo, através da esfoliação mecânica, são desafios a serem superados. No entanto, há inúmeras aplicações experimentais sendo estudadas, com possibilidades que vão desde o setor da construção civil até a medicina, onde o grafeno pode auxiliar em diagnósticos mais rápidos e até mesmo em tratamentos de doenças graves, como o câncer (SOUZA; SANTOS, 2019; FIGUEIREDO et al., 2022).

Figura 8: Grafeno na Tecnologia de Dispositivos: O Futuro da Inovação



Fonte: <https://www.atraccionweb.com>, acesso em 29/09/2024

Figura 9: Estrutura Flexível de Grafeno: Aplicações em Dispositivos Eletrônicos e Materiais Avançados



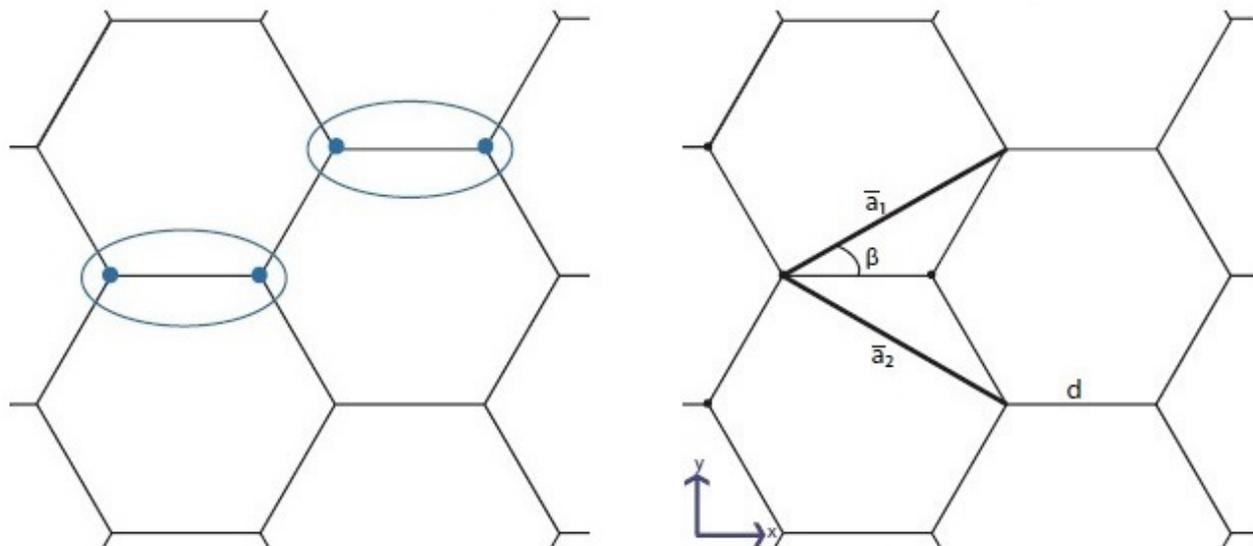
Fonte: <https://agencia.ufc.br/>, acesso em 29/09/2024

2.5.1 Estrutura do Grafeno e Energia do Sistema

Como citado anteriormente, o grafeno possui uma estrutura característica de favo de mel, com arranjos de átomos de carbono em uma rede cristalina. Esta organização em favos possibilita a formação

da rede de Bravais, tendo como base dois átomos, pertencentes às sub-redes A e B, ambas triangulares, sendo a segunda rotacionada em 108° em relação à primeira. Porém, esta estrutura é descrita apenas como base para estudos, pois não satisfaz todos os requisitos matemáticos da rede de Bravais (Dartora et al., 2015).

Figura 10: a) Rede do grafeno no espaço real b) Rede de Bravais do grafeno



Fonte: Figuras adaptadas da Ref. Dartora; Jimenes; Zanella, 2015

Na figura a esquerda os pontos circulos correspondem à base formada pelos átomos de carbono das sub-redes A e B, e na figura a direita é correspondente à rede de Bravais formada a partir das sub-redes que geram “estruturas” triangulares independentes, pois a estrutura cristalina não forma uma rede de Bravais por não possuir os critérios necessários.

De acordo com Dartora et al. (2015), “a base constitui-se de um átomo da sub-rede A e um átomo da sub-rede B, formando um haltere, cuja distância entre os átomos de carbono vale $a = 1.42 \text{ \AA}$ ”. A rede bidimensional do grafeno é constituída necessariamente de dois vetores primitivos \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 &= \sqrt{3}a\hat{x}, \\ \mathbf{a}_2 &= \sqrt{3}a \left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right), \end{aligned} \quad (69)$$

em que \hat{x} e \hat{y} são vetores que indicam a direção no plano x e y .

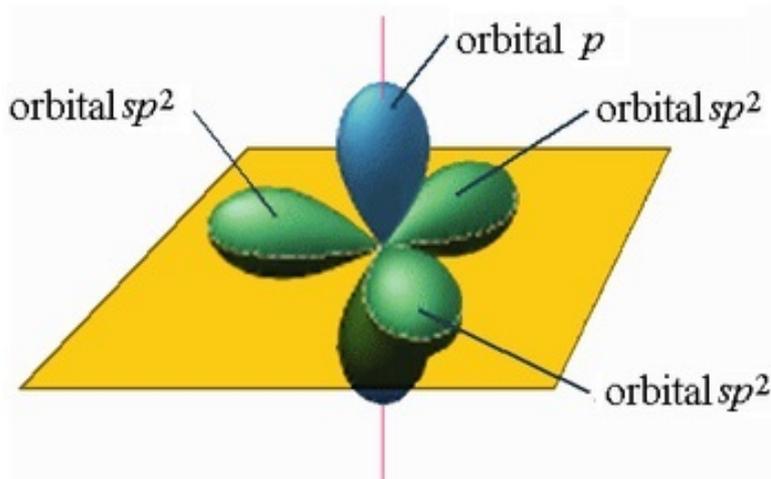
O carbono no seu estado fundamental possui uma estrutura eletrônica descrita por $1s^2 2s^2 2p^2$, tendo como número quântico principal $n = 2$ correspondendo à camada de valência, possuindo quatro funções de onda duplamente degeneradas sp, p_x, p_y e p_z devido ao spin eletrônico, resultando em um espaço para 8 elétrons na camada de valência, sendo metade já preenchida. Por esse motivo, o carbono só pode fazer quatro ligações com outros elementos ou com ele mesmo, no caso da estrutura do grafeno que é totalmente composta de carbono (Dartora et al., 2015).

As principais hibridizações do carbono são sp^2 e sp^3 , sendo a segunda correspondente à estrutura cristalina do diamante, enquanto o grafite e o grafeno possuem estruturas que podem ser entendidas utilizando a hibridização sp^2 . Esta, unida aos orbitais do tipo p , pode gerar orbitais híbridos dados por:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|s\rangle + |p_x\rangle + |p_y\rangle), \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|s\rangle + |p_x\rangle - 2|p_y\rangle), \\ |\psi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|s\rangle - |p_x\rangle), \end{aligned} \tag{70}$$

o orbital p_z não se mistura aos demais, restando os orbitais x e y , que ficam perpendiculares a ele, formando funções orbitais ortogonais entre si no espaço de Hilbert e com ângulo de 120° no espaço real.

Figura 11: Orbitais tipo p e sp^2



Fonte: Wenzhong, 2012

Com a combinação de orbitais do tipo s com dois p , origina-se três orbitais sp^2 e um orbital p , o

que cria a forma hibridizada sp^2 do carbono, como mostrado na figura acima.

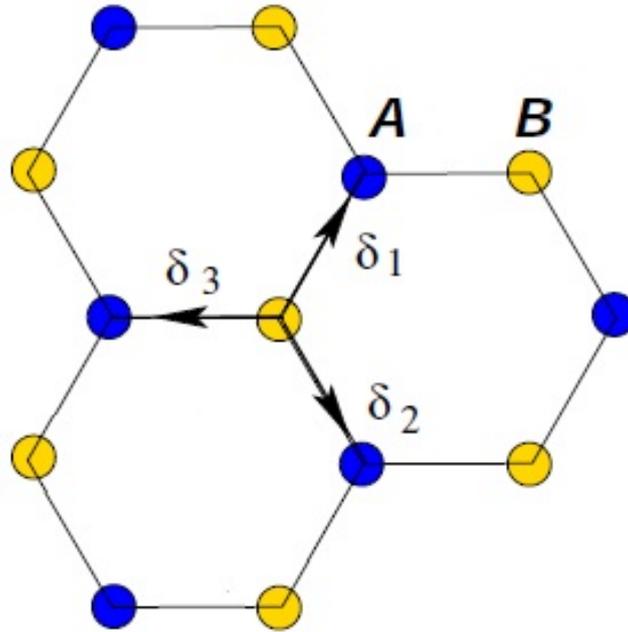
Seguindo essa organização, os átomos de carbono são capazes de formar ligações do tipo σ no plano x, y , ligações altamente resistentes e direcionais. Estas ligações formam-se nos orbitais sp^2 ao se ligarem com outros átomos de carbono. Nesse processo, três dos quatro elétrons da camada de valência ficam localizados nos orbitais do tipo sp^2 , os quais se conectam aos respectivos orbitais dos seus vizinhos mais próximos, criando ligações do tipo σ . Enquanto o quarto elétron se posiciona no orbital p_z perpendicular aos demais orbitais, este, quando ligado a outro orbital p_z , é capaz de gerar uma ligação do tipo π , resultante da união linear dos orbitais p_z entre dois átomos de carbono.

Na estrutura característica do grafeno de favo de mel, contendo uma grande quantidade de átomos de carbono, ocorre a ligação dos orbitais p_z entre si, formando uma nuvem eletrônica, chamada de bandas de energia π e π^* , sendo elas de maior e menor energia, respectivamente. Se analisarmos as ligações no sistema, podemos facilmente imaginar que o transporte ao longo da estrutura fica a cargo das ligações do tipo π e π^* , sendo as ligações σ as que menos irão influenciar no transporte ao longo da rede cristalina do grafeno.

A rede cristalina já sendo conhecida no espaço real pode-se determinar os vetores relativos entre primeiros vizinhos e também a rede recíproca. Os vetores relativos δ_1, δ_2 e δ_3 ao conectar os 3 primeiros vizinhos de um carbono da sub-rede A , são dados por:

$$\begin{aligned}\delta_1 &= a\hat{y}, \\ \delta_2 &= \frac{a}{2} \left(\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y} \right), \\ \delta_3 &= \frac{a}{2} \left(-\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y} \right).\end{aligned}\tag{71}$$

Figura 12: Vetores $\delta_{1,2,3}$ dos primeiros vizinhos da sub-rede A



Fonte: Figura adaptada da referência Castro Neto; Guiné; Peres, 2009

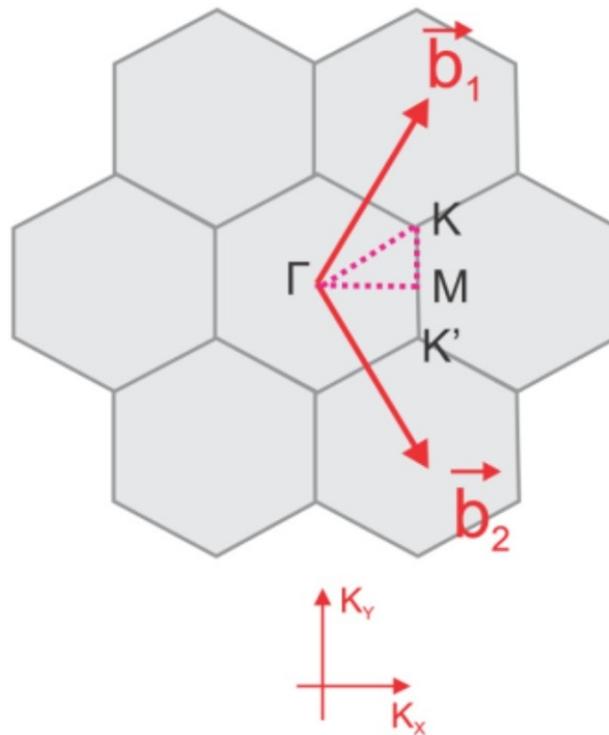
A figura acima representa a estrutura reticulada do grafeno, composto por duas redes triangulares A e B interpenetrantes (representadas em cores azul e amarelo) onde δ_i , $i = 1, 2, 3$ são os vetores vizinhos mais próximos.

Em relação à sub-rede B, os vetores relativos ligados aos três primeiros vizinhos da sub-rede A, são $-\delta_1$, $-\delta_2$ e $-\delta_3$, já que a sub-rede B é rotacionada 180° em relação à sub-rede A, o contrário também é válido. Após obtermos os vetores primitivos \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 da rede recíproca, é possível determiná-la:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \hat{z}}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \hat{z}} = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} - \frac{1}{2} \hat{y} \right), \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\hat{z} \times \mathbf{a}_1}{(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \hat{z}} = \frac{4\pi}{3a} \hat{y}. \end{aligned} \quad (72)$$

Construindo a rede recíproca utilizando os vetores acima e tendo um ponto de origem, e realizando translações do ponto determinado na forma $\mathbf{K}_{hk} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2$, sendo h e k números inteiros.

Figura 13: Os pontos da rede recíproca Γ , M , K e os vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2

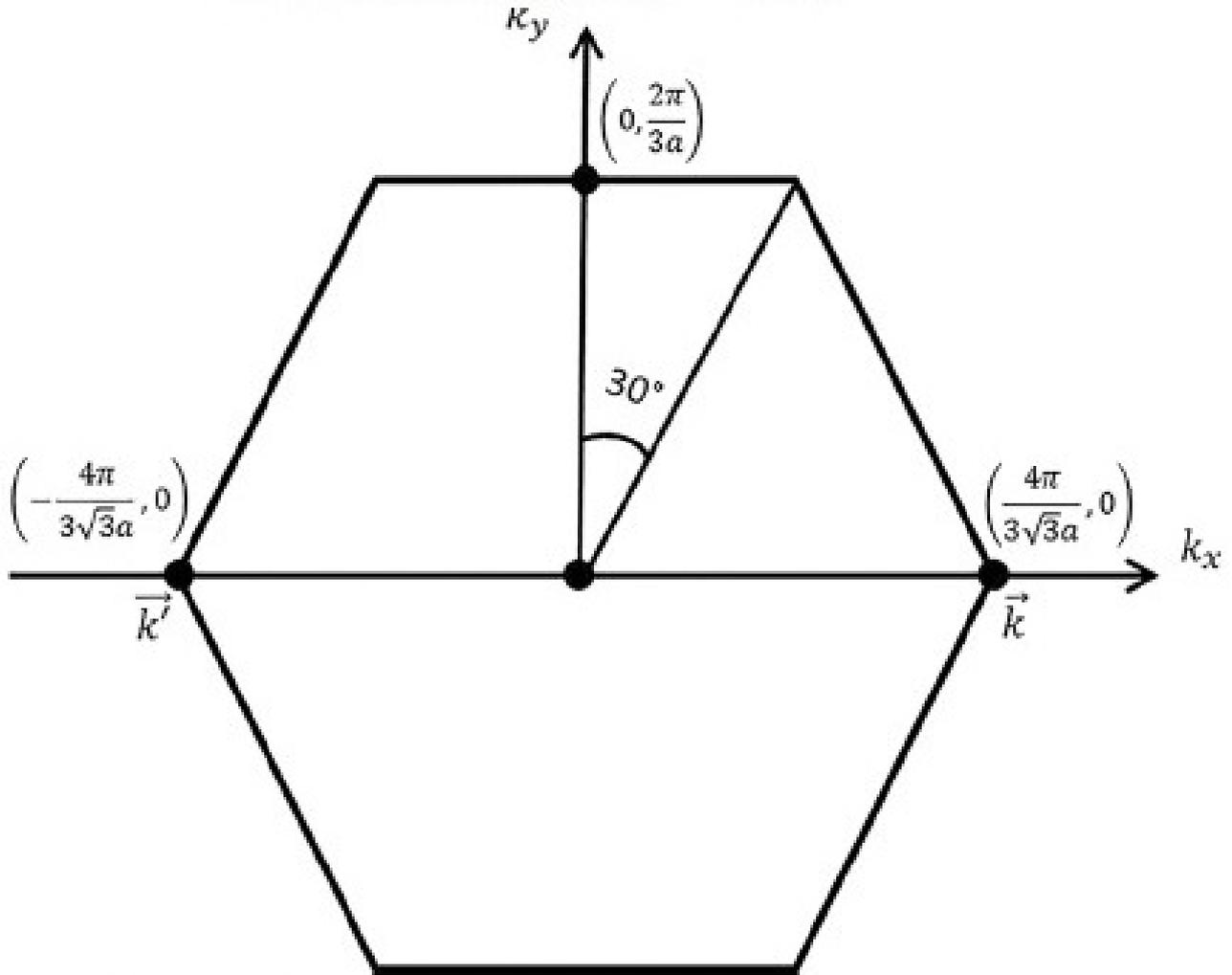


Fonte: Antoniazzi, 2016

Os pontos Γ , M , K e K' são pontos de alta de simetria. As propriedades elétricas incomuns do grafeno são observadas para elétrons com vetor de onda próximo aos pontos K e K' , estes são conhecidos como pontos de Dirac. \vec{b}_1 e \vec{b}_2 são vetores da rede recíproca, determinados na equação (72).

Segundo Dartora et al. (2015), utilizando retas entre um ponto de referência da rede com os demais pontos, e em seguida traçando retas também entre os pontos médios de forma perpendicular às primeiras, obtém-se a primeira zona de Brillouin do grafeno, sendo o resultado a menor entidade geométrica fechada. Após a construção, percebe-se a existência de pontos inequivalentes $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x}$ e $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$, esses pontos não podem ser ligados pelos vetores da rede recíproca, conforme a imagem a seguir.

Figura 14: As coordenadas dos pontos da rede recíproca



Fonte: Dartora; Jimenez; Zanella, 2015

Primeira zona de Brillouin na rede recíproca, com as coordenadas necessárias na sua construção, nas extremidades esquerda e direita do hexágono observa-se dois pontos K' e K que são inequivalentes e que não podem ser ligados por nenhum dos vetores da rede recíproca, são os pontos de Dirac.

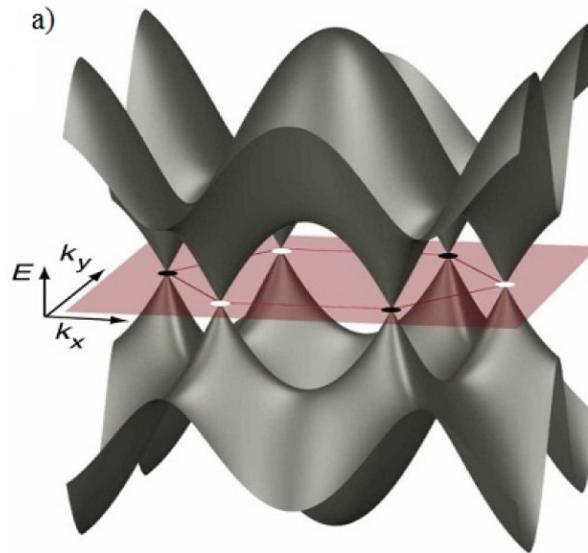
Por meio do modelo *tight-binding*, obtemos duas soluções para a energia do sistema:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm |f(\mathbf{k})| = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \quad (73)$$

sendo cada uma das funções responsáveis por determinar uma banda de energia no grafeno, onde

$E_+(\mathbf{k})$ é a banda de maior energia e $E_-(\mathbf{k})$ a de menor energia. De acordo com Dartora et al. (2015), “em relação à linha de energia $E = 0$, o potencial químico $\mu(T = 0) = E_F$ do grafeno em temperatura nula ($T = 0$) passa exatamente por zero, ou seja, o nível de Fermi no grafeno é exatamente zero”. Demonstrado nas imagens a seguir:

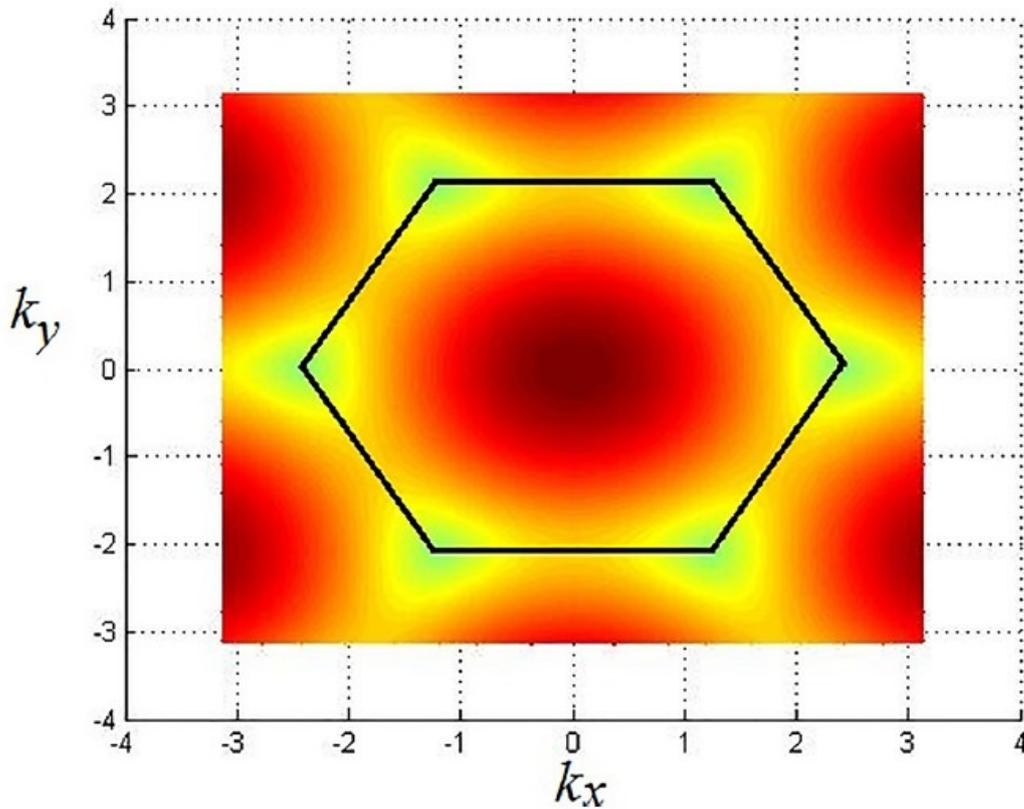
Figura 15: Energia de banda do grafeno



Fonte: Machado, 2017

Essa figura em cinza retrata as bandas de energia do grafeno na sua primeira Zona de Brillouin ou cones de Dirac obtidas a partir das funções 3.73 apresentadas anteriormente, em função de $\mathbf{K}=(K_x \times K_y)$, no destaque em vermelho encontra-se o plano onde passa o nível de Fermi com $E=0$.

Figura 16: Contorno de energia da banda superior do grafeno na primeira zona de Brillouin



Fonte: Dartora; Jimenez; Zanella, 2015

Contorno da banda de energia, as manchas esverdeadas são onde os “cones” se encontram, os pontos da sub-rede A e sub-rede B.

Devido à existência de dois pontos inequivalentes, $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x}$ e $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$, pode-se expandir a função $f(\mathbf{k})$ em séries de Taylor em torno desses pontos, para criar uma teoria efetiva dos férmions de Dirac.

2.5.2 A equação de Dirac em um espaço-tempo de (1+2) dimensões

Equação de Dirac em duas dimensões espaciais e uma temporal

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} + mc^2\beta)\Psi \quad (74)$$

em que $\Psi(\vec{r}, t)$ é a função de onda da partícula em um ponto \vec{r} do espaço e no tempo t , $\vec{\sigma}$ é o vetor matriz de Pauli que descrevem as projeções do spin e β é a matriz que atua como operador de inversão

temporal.

A equação de Dirac 2D descreve a propagação da função de onda de partículas relativísticas com spin-1/2 em duas dimensões do espaço e é fundamental para a descrição de elétrons em sistemas bidimensionais, como em materiais semicondutores, topológicos, grafenos dentre outros.

As funções $f(k)$ anulam-se nos pontos $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x}$ e $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$, além dos outros quatro vértices da primeira zona de Brillouin, que é um hexágono. Como demonstrado no tópico anterior, percebe-se a formação de cones duplos próximos a esses pontos, sendo um para cima e outro para baixo. No entanto, apenas 1/3 desses cones está localizado na zona de Brillouin. Observa-se que $6 \times \frac{1}{3} = 2$ cones duplos são inequivalentes, e a forma completa pode ser construída por meio de translações dos vértices com vetores da rede recíproca.

Expandindo a função $f(k)$ em torno do ponto $\mathbf{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\hat{x}$ em séries de Taylor, temos:

$$f(q) = f(k - K) = q \cdot \nabla_k f(k) \Big|_{k=K} = \frac{3at}{2} [q_x - iq_y]$$

onde o vetor $q(q_x, q_y) = k - K$ corresponde a um deslocamento no vetor de onda k em torno do ponto K e ∇_k é o operador gradiente em relação às variáveis k .

A constante $\frac{3at}{2}$ pode ser expressa por $\hbar v_F$, onde v_F é a velocidade de Fermi. Isso vale para este caso porque o nível de Fermi passa pelo ponto K . No caso do grafeno, a velocidade de Fermi tem a mesma função da velocidade da luz no vácuo. Se utilizarmos os valores de algumas constantes do grafeno ($t = 2,8 \text{ eV}$, $a = 1,42 \text{ \AA}$, e para a constante de Planck $\hbar = 6,59 \times 10^{-16} \text{ eV.s}$), podemos determinar a velocidade de Fermi $v_F = 9 \times 10^5 \approx 10^6 \text{ m/s}$.

Podemos escrever o hamiltoniano expandido em torno do ponto K na forma:

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{q\sigma} \psi_{q\sigma}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \psi_{q\sigma}$$

onde $\psi_{q\sigma} = \begin{pmatrix} a_{q\alpha} \\ b_{q\alpha} \end{pmatrix}$ é um pseudo-spinor de Nambu, em que $a_{q\alpha}(b_{q\alpha})$ é a amplitude de probabilidade de um elétron ocupar um átomo na sub-rede A ou B com spin verdadeiro σ e o momento q em relação ao vetor K . Sendo assim, o vetor total é dado por $k = K + q$.

Considerando as matrizes de Pauli para um pseudo-spin, afim de demonstrar que o hamiltoniano acima é correspondente a um férmion de Dirac sem massa, temos:

$$\begin{aligned}\tau_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \tau_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \tau_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

possibilitando escrever o hamiltoniano na forma:

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{q\sigma} \psi_{q\sigma}^\dagger (\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{q}) \psi_{q\sigma}$$

2.5.3 Conjugação de Carga

Na presença de um campo eletromagnético, o acoplamento mínimo requer a transformação

$$\partial_t \rightarrow \partial_t + ieA_\mu \quad (75)$$

a eq. de Dirac fica

$$(i\partial - eA - m)\psi = 0 \quad (76)$$

procuramos uma solução ψ^C (conjugado de ψ) tq mudando o sinal da carga $e \rightarrow -e$, obtemos a eq.

$$(i\partial + eA - m)\psi^C = 0 \quad (77)$$

conectamos ψ e ψ^C pela operação de conjugação de carga

$$\psi = \hat{C}\psi^C \quad (78)$$

em que \hat{C} é o op. conjugação de carga. Verificado por

$$\hat{C}^\dagger = \hat{C}^T = \hat{C}^{-1} = -\hat{C} \quad (79)$$

e a relação de unitariedade modificada

$$\hat{C}\gamma_\mu^\dagger\hat{C}^{-1} = -\gamma_\mu \quad (80)$$

ainda podemos verificar que na representação de Dirac, o op. de conjugação de carga tem a expressão

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \quad (81)$$

assim a eq. para ψ^C dar uma solução na forma de um espinor

$$\psi^C = \begin{pmatrix} u_{\uparrow}^e \\ u_{\downarrow}^e \\ v_{\uparrow}^h \\ v_{\downarrow}^h \end{pmatrix} \quad (82)$$

as notações e e h significando elétron e hole (buraco) e as setas indicando a orientação do spin das partículas.

2.5.4 Massa Nula

No caso onde a massa m dos elétrons é nula, é prático escrever na base quirial. A mudança de base envolve uma modificação da expressão das matrizes de Dirac, e assim, temos nesta base

$$\gamma_c^0 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma_c^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad (83)$$

A passagem de uma base para outra é realizada através da relação de mudança de base $\gamma_c^i = U\gamma_D U^{-1}$, em que a matriz de mudança de base U é dada por

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (84)$$

nesta base a equação de Dirac torna-se

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{c}\partial_t + \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \\ -\frac{1}{c}\partial_t - \vec{\sigma} \cdot \nabla & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0 \quad (85)$$

Assim, obtemos as duas equações diferenciais desacopladas

$$\left(-\frac{1}{c}\partial_t + \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \varphi = 0 \quad (86)$$

$$\left(-\frac{1}{c}\partial_t - \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \chi = 0 \quad (87)$$

Em que os vetores φ e χ são chamados de espinores de Weyl.

A base na qual trabalhamos aqui chama-se quiral, pois ao aplicarmos a matriz

$$\gamma_c^5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (88)$$

aos espinores $\begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}$, obtemos reciprocamente o vetor inicial e seu oposto. Esses dois vetores representam as soluções das equações diferenciais desacopladas. Assim, temos uma simples mudança de sinal para a segunda solução. Entretanto, quando a massa é diferente de zero, a aplicação dessa matriz em espinores com componentes relacionados por equações diferenciais acopladas resultaria na mistura de estados puros. Dessa forma, a presença da massa causa uma mistura de autoestados, exibindo um comportamento oscilatório entre os diferentes autoestados. Esse fenômeno de oscilação dos autoestados é o que possibilita a atribuição de massa aos neutrinos por exemplo, que oscilam entre os três sabores: eletrônico, muônico e tauônico. Portanto, a presença da massa nos neutrinos está relacionada a esse fenômeno de oscilação, permitindo que os neutrinos tenham massa mesmo que inicialmente sejam considerados de massa nula.

2.5.5 Efeito Zitterbewegung

Iniciamos com o Hamiltoniano de Dirac para uma partícula livre em duas dimensões:

$$\hat{H}_D = c\alpha_x\hat{p}_x + c\alpha_y\hat{p}_y \quad (89)$$

A relação de comutação entre o momento angular orbital \hat{l}_z e \hat{H}_D é calculada como:

$$[\hat{l}_z, \hat{H}_D] = i\hbar(\vec{\alpha} \times \vec{p})_z \quad (90)$$

Isso implica que o momento angular orbital não é conservado.

No entanto, o momento angular total, $\hat{J} = \hat{l} + \hat{s}$, onde $\hat{s} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\Sigma}$, é conservado.

Para encontrar a trajetória de uma partícula de Dirac, resolvemos a equação:

$$\frac{d\hat{r}}{dt} = c\hat{\alpha} \quad (91)$$

A aceleração é dada por:

$$\frac{d\hat{\alpha}_x}{dt} + \frac{2\hat{H}_D\alpha_x}{i\hbar} = \frac{2c\hat{p}_x}{i\hbar} \quad (92)$$

Integrando, obtemos a trajetória:

$$\hat{x} = \hat{x}_0 + c^2 \hat{p}_x \hat{H}_D^{-1} t - \frac{1}{2} i \hbar \hat{H}_D^{-1} \left(c \alpha_x(t) - c^2 \hat{p}_x \hat{H}_D^{-1} \right) \quad (93)$$

Este resultado mostra que um termo oscilatório é sobreposto à trajetória retilínea da partícula, correspondendo ao efeito Zitterbewegung.

3 Metodologia

Na elaboração deste trabalho utilizou-se/baseou-se da/na pesquisa bibliográfica como metodologia, sendo o mesmo de cunho teórico, sem uma parte prática, experimental propriamente dita. A pesquisa científica é iniciada com a pesquisa bibliográfica, que consiste na busca de obras relacionadas ao tema do trabalho a ser realizado, que estão publicadas e reconhecidas no meio científico, esse meio de pesquisa torna-se relevante para saber se o assunto a ser estudado já possui trabalhos sobre e se ainda faz-se necessário em termos de contribuição para o meio científico e social a construção de outro trabalho envolvendo o tema desejado (DE SOUSA,2021).

Entretanto, há aquelas pesquisas científicas em que são escritas somente com intuito de revisar um determinado assunto, porém de uma outra perspectiva das já existentes, em que por meio da procura por referências teóricas existentes o pesquisador consegue adquirir o conhecimento necessário para que se torne possível elaborar uma resposta para o problema proposto inicialmente no trabalho (FONSECA,2002,p.32). No presente trabalho utilizou-se de fontes provenientes de sites de universidades nacionais, Scielo, google acadêmico, entre outros, que antes de serem utilizados foram observados se eram confiáveis, o que garante a diminuição de riscos de adicionar conteúdo equivocado à pesquisa.

Essa é uma etapa crucial para o trabalho a ser desenvolvido, pois, além de garantir um embasamento sólido para o desenvolvimento do estudo a ser realizado, ainda garante uma confiabilidade e seriedade nos dados que serão obtidos após a finalização do trabalho científico, o que torna de suma importância a procura de informações por meio da revisão de trabalhos existentes, como artigos, monografias, teses, dissertações entre tantos outros, que sejam confiáveis e não se origine de fontes duvidosas (DE SOUSA,2021).

A Busca por fontes para a realização das pesquisas geralmente preocupa pesquisadores iniciantes, pela diversidade de locais com arquivos disponíveis, principalmente no meio digital, porém temos a disposição sites com um grau de confiabilidade satisfatória, o que garante a aceitação do trabalho científico no meio acadêmico. Cabe ao pesquisador ser crítico na análise dos arquivos, mesmo que seja vantajoso a utilização desses documentos pela praticidade, ainda tem como ponto negativo a análise errônea por meio do pesquisador, ocasionando um escrita com dados infundados ou que não agregue tanta credibilidade ao trabalho como deveriam.

Segundo ANDRADE(2010) “A pesquisa bibliográfica é habilidade fundamental nos cursos de

graduação, uma vez que constitui o primeiro passo para todas as atividades acadêmicas. Uma pesquisa de laboratório ou de campo implica, necessariamente, a pesquisa bibliográfica preliminar”.

Para a realização do trabalho iniciou-se com uma revisão bibliográfica do cálculo diferencial e integral, os conteúdos abordados como embasamento para os estudos principais referente neste trabalho monográfico foram: limites e seus conceitos iniciais, as diferentes formas de teoremas para a resolução de problemas envolvendo limites, conceito de derivadas e boa parte dos diversos teoremas relacionados às derivadas e integrais. Fez-se uma revisão sobre o surgimento da mecânica quântica desde a hipótese de Planck, os modelos atômicos de Thomson, Borh e Schrodinger. Além de estudar a física da matéria condensada com o estudo inicial dos osciladores para entendimento das oscilações da rede cristalina.

Revisou-se o surgimento da mecânica quântica desde a hipótese de Planck, catástrofe do ultravioleta, comportamento corpuscular e ondulatória da matéria de De Broglie. Como aplicação estudou-se o Efeito fotoelétrico e o Efeito Compton.

Foram estudados os modelos atômicos de Thomson, Rutherford, Bohr e Schrödinger por meio de seminários apresentados pelos integrantes do grupo de pesquisa, além de microaulas do professor, abordando o átomo totalmente quântico regido pela equação de Schrödinger, com aplicações da partícula livre e oscilador harmônico. Também foram realizados estudos das tentativas de elaborar uma equação relativística para o elétron, incluindo a abordagem de Klein-Gordon e a abordagem de Dirac.

4 Considerações Finais

Ao analisar a equação de Dirac em baixas dimensões, descobrimos que o grafeno oferece uma oportunidade única para estudar a física quântica e relativística em um sistema de matéria condensada. Os espinores de Weyl fornecem uma descrição mais completa dessas quase-partículas, lançando luz sobre a dualidade entre partículas e antipartículas no grafeno.

A conjugação de carga, outro tópico abordado, explicando sua importância na estrutura de banda do grafeno e como ela se relaciona com as simetrias, como a reversão temporal. Essas simetrias que têm aplicações práticas em eletrônica de spin e optoeletrônica.

Por último, discutimos o Efeito Zitterbewegung, que, embora ainda seja uma área de estudo em progresso, sugere fenômenos quânticos de oscilação rápida que poderiam ser observados experimentalmente em sistemas bidimensionais. Este efeito pode ter implicações tanto para a compreensão fundamental da mecânica quântica como para aplicações práticas em dispositivos eletrônicos.

Em síntese, o grafeno não é apenas um material com excelentes propriedades mecânicas e elétricas, mas também um laboratório bidimensional de aprendizagem para a mecânica quântica relativística e física da matéria condensada.

Ainda há uma série de questões não resolvidas e nuances a serem exploradas. Pretendemos dar continuidade a esta pesquisa, focando na resolução das equações diferenciais da equação de Dirac bidimensional tanto no aspecto teórico como nas resoluções via simulação computacional.

Referências

- [1] NUSSENZVEIG, H. Moysés. **Curso de Física Básica: Ótica, Relatividade e Física Quântica**. 1. ed. São Paulo: Editora Blucher, 1998. p. 245-279.
- [2] DIRAC, P. A. M.; FOWLER, R. H. The quantum theory of the electron. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, v. 117, p. 610-624, 1928.
- [3] GREINER, Walter. **Relativistic Quantum Mechanics: Wave Equations**. Berlin: Springer, 2000. p. 99-126.
- [4] DUARTE, A. et al. **Cristalografia e suas Aplicações**. Recife: Editora Universitária, 2019.
- [5] GARCIA, B. et al. **Fundamentos de Cristalografia**. 2. ed. São Paulo: Editora Científica, 2020.
- [6] OSTACHUK, A. **Estrutura Cristalina dos Materiais**. São Paulo: Editora Técnica, 2016.
- [7] OLIVEIRA, Ivan S. **Introdução à física do estado sólido**. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2005.
- [8] DIRAC, P. A. M. The quantum theory of the electron. **Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 117, n. 778, p. 610-624, 1928.
- [9] ANDERSON, C. D. The apparent existence of easily deflectable positives. **Science**, v. 76, n. 1967, p. 238-239, 1932.
- [10] FONSECA, J. J. S. **Metodologia da pesquisa científica**. Fortaleza: UECE, 2002. p. 32. Disponível em: <http://www.ia.ufrj.br/ppgea/conteudo/conteudo-2012-1/1SF/Sandra/apostilaMetodologia.pdf>. Acesso em: 12 ago. 2024.
- [11] DE SOUSA, A. S.; DE OLIVEIRA, G. S.; ALVES, L. H. A pesquisa bibliográfica: princípios e fundamentos. **Cadernos da FUCAMP**, v. 20, n. 43, 2021. Disponível em: <https://revistas.fucamp.edu.br/index.php/cadernos/article/view/2336>. Acesso em: 17 ago. 2024.

- [12] SEGREÈ, E.; CHAMBERLAIN, O. Antiprotons. **Physical Review**, v. 100, n. 3, p. 947-950, 1955.
- [13] GARCIA, I. B. **O estudo da geometria espacial motivado pela cristalografia**. 2020. Dissertação (Mestrado em Matemática) Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2020. Disponível em: <https://repositorio.ufsc.br/handle/123456789/216350>. Acesso em: 21 ago. 2024.
- [14] DARTORA, C. A.; JIMENEZ, M. J. S.; ZANELLA, F. Os fundamentos da física dos férmions de Dirac sem massa em (1+2)-D e o grafeno. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 37, n. 3, p. 3301-1-3301-13, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/s1806-11173731713>. Acesso em: 25 jun. 2024.
- [15] CASTRO NETO, A. H.; GUINÉ, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The electronic properties of graphene. **Revista de Física Moderna**, v. 81, p. 109, 2009. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/0709.1163>. Acesso em: 25 jun. 2024.
- [16] ANTONIAZZI, I. S. L. **Grafeno epitaxial sobre SiC(0001): crescimento, intercalação e efeitos de interface**. 2016. Dissertação (Mestrado em Física) Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2016. Disponível em: https://repositorio.ufmg.br/bitstream/1843/SMRA-BDPHAR/1/disserta_o_igor.pdf. Acesso em: 26 jun. 2024.
- [17] MACHADO, R. S. **Propriedades de transporte de um plano de grafeno com átomos adsorvidos**. 2017. Tese (Doutorado em Ciência dos Materiais) Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira de São Paulo, Ilha Solteira, 2017. Disponível em: https://repositorio.unesp.br/bitstream/11449/152631/5/machado_rs_dr_ilha.pdf. Acesso em: 26 jun. 2024.
- [18] ALENCAR, E.; SANTANA, D. Processos de obtenção do grafeno, suas aplicações e sua importância para o Brasil. **Artigo Científico (Pós Graduação)** Centro de Graduação Oswaldo Cruz, São Paulo, 2016.
- [19] VIEIRA, J. E. D.; VILLAR, E. O. Grafeno: uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. **Artigo Científico**

- (Pós Graduação) Universidade Federal de Campina Grande, 2017. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/316459823_Grafeno_Uma_revisao_sobre_propriedades_mecanismos_de_producao_e_potenciais_aplicacoes_em_sistemas_energeticos. Acesso em: 26 abr. 2024.
- [20] ARS PHYSICA. Estrutura do Grafeno. 2011. Ilustração 1. Disponível em: <https://arsphysica.wordpress.com/2011/08/02/materiais-em-poucas-dimensoes/>. Acesso em: 26 abr. 2024.
- [21] OSTACHUK, Agustin. Redes de Bravais (Bravais Lattices). **Archivo Histórico del Museo de La Plata (Ed.)**. Dicionario Histórico de Ciencias de la Tierra en la Argentina, p. 334-335, 2016. Disponível em: https://papers.ssrn.com/sol3/papers.cfm?abstract_id=3568510. Acesso em: 28 jun. 2024.
- [22] ANDRADE, M. M. **Introdução à metodologia do trabalho científico: elaboração de trabalhos na graduação**. São Paulo: Atlas, 2010.
- [23] DE FIGUEIREDO, B. Q. et al. Uso do grafeno e nióbio na prática médica: uma revisão narrativa de literatura. **Research, Society and Development**, v. 11, n. 1, jan. 2022. DOI: 10.33448/rsd-v11i1.25526. Disponível em: https://www.researchgate.net/publication/357984500_Uso_do_grafeno_e_niobio_na_pratica_medica_uma_revisao_narrativa_de_literatura. Acesso em: 01 out. 2024.
- [24] SOUZA, D. M.; SANTOS, L. T. S. **Grafeno: Propriedades e Aplicações**. 2019. Trabalho de Conclusão de Curso (Engenharia Mecânica) Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade de Taubaté, Taubaté, 2019. Disponível em: <http://repositorio.unitau.br/jspui/>. Acesso em: 29 set. 2024.