



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

**Estudo dos efeitos da modulação da
velocidade de Fermi na polarização dos
vales no Grafeno**

Alexandre Rodrigo da Silva Lins

Dissertação de Mestrado

Recife

30 de Julho de 2018

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Alexandre Rodrigo da Silva Lins

**Estudo dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi na
polarização dos vales no Grafeno**

*Trabalho apresentado ao Programa de PÓS-GRADUAÇÃO
EM FÍSICA APLICADA do DEPARTAMENTO DE FÍSICA
da UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAM-
BUCO como requisito parcial para obtenção do grau de
Mestre em FÍSICA APLICADA.*

Orientador: *Prof. Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima*

Recife

30 de Julho de 2018

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema Integrado de Bibliotecas da UFRPE
Biblioteca Central, Recife-PE, Brasil

L759e Lins, Alexandre Rodrigo da Silva.
Estudo dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi na polarização dos Vales no Grafeno / Alexandre Rodrigo da Silva Lins. Recife, 2018.
69 f.: il.

Orientador(a): Jonas Romero Fonseca de Lima.
Dissertação (Mestrado) Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, BR-PE, 2018.
Inclui referências.

1. Super-rede magnética 2. Velocidade de Fermi 3. Vale no Grafeno 4. Valetrônica I. Lima, Jonas Romero Fonseca de, orient. II. Título

CDD 621

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

Estudo dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi na polarização dos vales no
Grafeno

Alexandre Rodrigo da Silva Lins

Dissertação julgada adequada para obtenção
do título de mestre em Física, defendida e
aprovada por unanimidade em 30 de Julho
de 2018 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima

UFRPE

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Márcio de Moura Cunha

UFPE

Profa. Dra. Sara Cristina Pinto Rodrigues

UFRPE

A minha mãe uma mulher destemida e batalhadora, que sempre fez de tudo para me ajudar e apoiar em quaisquer circunstâncias.

Agradecimentos

- Quero , em primeiro lugar, agradecer Deus por ser essencial em minha vida e por iluminar meu caminho durante esta caminhada.
- Também quero agradecer a todos meus familiares por torcerem pela minha evolução profissional e principalmente a minha mãe e meu padrasto por toda dedicação e apoio que me fizeram chegar até aqui.
- Agradeço ao meu orientador, professor Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima pela disponibilidade, e principalmente pela paciência durante todo o processo de desenvolvimento do pesquisa.
- Aos meus amigos Jefferson e Gizele que estiveram comigo durante toda a minha jornada acadêmica, sempre me incentivando para superar as barreiras e continuar.
- A todos os professores que passaram pela minha formação, aos amigos do mestrado pela troca de conhecimento durante esse período e aos amigos José Marcione, Antonio Ariclesio, Ivis Andrei, Ayron Andrey e José Filipe por por fazerem parte dos momentos de descontração.
- Ao programa de pós-graduação em física aplicada e a CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pela concessão da bolsa durante todo o período de realização deste mestrado.

*Não vou dizer que é fácil e que nunca deu vontade de desistir, mas vale
muito mais a pena continuar.*

—CAIO FERNANDO ABREU

Resumo

Neste trabalho iremos explorar as propriedades dos vales no grafeno, visto que no grafeno encontra-se dois pseudospins, um pseudospin da subrede, o outro pseudospin esta relacionado com o grau de liberdade dos pontos de Dirac e é chamada de pseudospin de vale. Como esses vales se encontram nos pontos de Dirac localizado entre as bandas de condução e valência, o estudo desses vales se tornou um alvo para pesquisas. Assim como a spintrônica usa o spin do elétron, o uso dos vales como um meio de transporte de informações deu origem a um novo ramo da tecnologia, a valetrônica. Nós investigamos como a modulação da velocidade de Fermi pode interferir na transmissão e polarização dos vales em um sistema caracterizado por um substrato que tem o papel de abrir gap de energia na monocamada de grafeno que se encontra em cima do mesmo, com placas metálicas postas acima da camada de grafeno para que a velocidade de Fermi fosse modulada e um campo magnético externo junto com um potencial eletrostático, fazendo com que tenhamos um hamiltoniano de Dirac dependente de um potencial vetor, potencial eletrostático e gap de energia. Nós usamos a equação de Dirac obtida para estudarmos a probabilidade de transmissão dos portadores, analisando a possibilidade de ajustar a polarização nos vales com a modulação da velocidade de Fermi através de uma parametrização com a energia tendo em vista que a energia muda consideravelmente com a velocidade de Fermi, com isso mostramos que o sistema é capaz de confinar elétrons confirmando alguns resultados de pesquisas teóricas realizadas com barreiras magnéticas, contrapondo o tunelamento de Klein. Nosso principal resultado foi mostrar que a modulação da velocidade de Fermi pode controlar a polarização do vale, sendo possível criar filtros de vale no grafeno.

Palavras-chave: Super-rede magnética, velocidade de Fermi, vale no grafeno, valetrônica.

Abstract

In this dissertation we will explore the properties of the valleys in graphene, since in graphene there are two pseudospins, one related to the sublattice and other related to the degree of freedom of the Dirac points and is called the pseudospin of the valley. As these valleys lie in the Dirac points located between the conduction and valence bands, the study of these valleys became a target for research. As the spintronics that uses the spin of the electron, the use of the transport information gave rise to a new area of technology, the valleytronics. We the influence of a Fermi velocity modulation in the transmission and polarization of the valleys in a system characterized by a substrate which has the function of opening energy gap in the graphene monolayer that is on top of it, with metal plates juxtaposed in the graphene layer so that the Fermi velocity was modulated, an external magnetic field and an electrostatic potential, obtaining a Dirac Hamiltonian dependent on a potential vector, electrostatic potential and energy gap. We used the Dirac equation obtained to study the transmittance of the carriers, analyzing the possibility of adjusting the polarization in the valleys with the Fermi velocity modulation through a parameterization with the energy considering that the energy changes considerably with the Fermi velocity, with this we show that the system is able to confine electrons confirming some results of theoretical researches carried out with magnetic barriers, opposing the Klein tunneling. Our main result was to show that the Fermi velocity modulation can control the polarization of the valley, and it is possible to create valley filters in graphene.

Keywords: Magnetic superlattice, Fermi velocity, valley in graphene, valleytronic.

Sumário

1	Introdução	1
2	Conceitos teóricos do Grafeno	4
2.1	Introdução	4
2.2	Nanoestruturas De Carbono	4
2.3	Obtenção do Grafeno e Suas Propriedades Estruturais	7
2.4	Modelo De Ligação Forte(Tinght-Binding) no Grafeno	11
2.5	Equação de Dirac	14
2.6	A Equação De Dirac Para o Grafeno	18
2.7	Conclusão	20
3	Super-redes de Grafeno	21
3.1	Introdução	21
3.2	Super-Redes	21
3.3	Super-Redes de Grafeno Com Barreiras de Potenciais Eletrostáticos	24
3.4	Super-Redes de Grafeno Com Barreiras de Velocidade de Fermi	25
3.5	Características das Super-Redes de Grafeno Magnética	27
3.6	Vale do Grafeno	30
3.7	Conclusão	32
4	Resultados	33
4.1	Introdução	33
4.2	Modelo Analítico	33
4.2.1	Estrutura da Barreira	35

4.2.2	Soluções da equação de Dirac para as regiões da barreira	36
4.2.3	Método da Matriz Transferência Para Uma Monocamada de Grafeno	39
4.2.4	Probabilidade de Transmissão Para Uma Barreira Eletro-Magnética	41
4.3	Resultados Numéricos: Análises e Discussões	42
4.4	Conclusão	48
5	Considerações Finais	49

Lista de Figuras

- 2.1 (a) Distribuição eletrônica do carbono no estado fundamental. (b) Distribuição eletrônica do carbono excitado ou ativado. 5
- 2.2 (a) Distribuição de densidade de elétrons de um orbital 1s. (b) Distribuição de densidade de elétrons de um orbital 2p e a representações do contorno para os três orbitais p, ao longo do eixo em que o orbital se encontra. 6
- 2.3 -Estado de hibridização de alguns nanomateriais de carbono, extraída da referência [1]. 6
- 2.4 (a) Ligações σ e π entre orbitais p. (b) Molécula com orbital hibridizado em sp^2 , com uma ligação σ e uma ligação π entre carbonos. 7
- 2.5 Exemplos dos filmes de grafeno preparados por Gein e Novoselov.(A) Fotografia em iluminação ambiente de um floco de grafeno multicamadas relativamente grande espessura aproximadamente 3 nm em cima de um substrato de SiO₂.(B) Imagem AFM (*Atomic Force Microscopy*) de $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ de área do floco próximo a borda. Cores: marrom escuro é a Superfície de SiO₂;laranja corresponde a 3 nm de altura acima da superfície do SiO₂.(C) Imagem AFM de camada única de grafeno. Cores: marrom escuro é a superfície de SiO₂, castanho-vermelho(área central)-altura de 0.8 nm, amarelo-marrom (inferior esquerdo) - 1.2 nm e laranja(canto superior esquerdo)- 2.5 nm. (D) Micrografia SEM(*scanning electron microscope*) de um dos dispositivos experimentais preparados a partir de grafeno de poucas camadas, e (E) visão esquemática do dispositivo experimental. 8

- 2.6 (a) Rede de Bravais em 2D. Os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 geram toda a rede. Como exemplo podemos definir os pontos $\mathbf{A} = \mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2$ e $\mathbf{B} = \mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2$, (b) Rede que não é de Bravais em 2D. É preciso definir uma base. 9
- 2.7 (a) Representação da estrutura planar e hexagonal do grafeno com os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 e δ_i , $i = 1, 2, 3$ são os vetores vizinhos mais próximos. (b) Primeira Zona de Brillouin com os pontos de Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' . 10
- 2.8 (a) Dispersão eletrônica na estrutura do grafeno. Esquerda: espectro de energia em unidades de t para valores finitos de t e t' , com $t = 2.7eV$ e $t' = -0.2t$. Direita: ampliação das bandas de energia próximas a um dos pontos de Dirac, retirado da referência [2]. (b) Corte da representação da Figura(a), o traço pontilhado representa a banda na forma usual Equação(2.8), enquanto o traço cheio mostra a aproximação linear dada pela Equação(2.9). 13
- 3.1 Perfis dos potenciais aplicados em monocamada de grafeno. (a) periódicos e (b) aleatórios. 22
- 3.2 Ilustração esquemática das estruturas quasi-periódicas: (a) Fibonacci, (b) Thue-Morse e (c) Período duplo. 23
- 3.3 O nível de Fermi (linhas pontilhadas) está na faixa de condução fora da barreira e na faixa de valência dentro dela. O preenchimento azul indica estados ocupados e K é a amplitude da onda transmitida e refletida representadas pelo tamanho da esfera. (a) Temos o tunelamento em Grafeno. (b) Tunelamento em semicondutores convencionais, podemos observar que a amplitude da função de onda dos elétrons (em vermelho) decai exponencialmente em semicondutores. 25
- 3.4 Esquema de uma super-rede formada por barreiras de velocidade de Fermi com largura D e uma variação de velocidade nas regiões da barreira e fora da barreira. 26
- 3.5 Super-rede magnética periódica $a = b$, com barreiras magnéticas originadas por metais ferromagnéticos (FM). 28

- 3.6 Dependência angular da probabilidade de transmissão com energia fixa em 1, através de $N = 1, 2, 3, 10$ barreiras de largura $d_B = 1/N$, mantendo constante o fluxo magnético $\Phi = 1$ e espaçamento entre barreiras de $d_0 = 10$ [3]. 29
- 3.7 (a) Esquema do dispositivo da bicamada de grafeno com duplo *gate*. O *gate* superior é um filme de ouro, e o *gate* inferior é um substrato de silício dopado. Duas camadas de h-BN e um filme de SiO_2 são usados como isolantes. Usando esses gates, a densidade de portadores e o campo elétrico perpendicular são variados independentemente. A parte ampliada é a estrutura de rede da bicamada de grafeno. Na presença de um campo elétrico perpendicular, surge uma diferença de energia entre a camada superior e inferior. Portanto, a simetria de inversão espacial é quebrada neste sistema, e tanto a curvatura de Berry como um gap de energia surgem. (b) O campo elétrico que conduz a corrente de carga no circuito do lado esquerdo no vale \mathbf{K}' gera uma corrente de vale na direção transversal por meio do efeito Hall de vale (VHE). Esta corrente de vale na direção do vale \mathbf{K} é convertida em um campo elétrico ou tensão não local por meio do efeito Hall de vale inverso (IVHE), onde é detectado a corrente de vale. 31
- 4.1 (a) Esquema que mostra uma monocamada de grafeno em substrato, onde a velocidade dos elétrons é modulada por um potencial induzido pelas placas metálicas, com um campo magnético aplicado na região sem as placas metálicas (b) Em linhas contínuas na cor preta está representado a barreira de potencial escalar $V(x)$ de largura L e em linhas tracejadas na cor vermelha o potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{x})$. 36
- 4.2 Essa imagem descreve três casos distintos, onde a energia de incidência dos portadores na barreira é fixada em 7 e o campo magnético é variado. Nos gráficos superiores $\zeta = 1, 1.6, 2.8$ e no caso inferior $k_y = 0$. Em todos os gráficos os vales \mathbf{K} e \mathbf{K}' são representados pela cor azul e vermelho, respectivamente. 45

- 4.3 Essa imagem descreve três casos com energia de incidência dos portadores na barreira distintas com campo magnético fixado em 3. 46
- 4.4 Gráficos que representam a transmissão de acordo com a barra de cores que varia de 0 (preto) a 100% (amarelo), em função da energia e do ângulo de incidência, com $B = 2$ (campo magnético) e $U = 15$ (potencial eletrostático).
– τ e τ são os vales. 47

CAPÍTULO 1

Introdução

Na década de 70, os físicos empenhados em reforçar a reputação intelectual da física do estado sólido que já era muito forte na parte tecnológica, criaram o termo física da matéria condensada, onde o conhecimento científico básico foi introduzido nos estudos do estado sólido com a finalidade de aperfeiçoar essa área de grande importância tecnológica[4]. Em geral, a física da matéria condensada é a área que se preocupa com o estudo das propriedades das fases condensadas da matéria, dentre os exemplos das fases condensadas mais comuns, estão os sólidos e os líquidos. Essa área tem um papel importantíssimo na nanociência trazendo conceitos e técnicas do estado sólido para o desenvolvimento de estudos em sistemas de fluidos.

A nanotecnologia, resultado da nanociência é uma área de extrema importância na atualidade, onde cientistas e engenheiros de todo o mundo observaram que a diminuição das dimensões dos dispositivos eletrônicos aumenta o seu desempenho, como a rapidez de transferência de dados, a diminuição no consumo de energia elétrica, entre outros melhoramentos. A busca por materiais muito pequenos chegou a caracterização dos materiais bidimensionais (2D). Com isso, pesquisadores estão analisando as propriedades eletrônicas do grafeno, um alótropo do carbono considerado bidimensional, onde é estudado teoricamente desde a década de 40[5], mas só em 2004 foi produzido experimentalmente por Konstantin Novoselov e Andre Geim, ambos pesquisadores da Universidade de Manchester, na Inglaterra[6], acarretando no prêmio Nobel de Física de 2010. No entanto, o maior desafio das empresas e desenvolvedores que apostam na tecnologia do grafeno é tornar a produção do material viável comercialmente e em larga escala.

O estudo das propriedades eletrônicas das super-redes de grafeno têm atraído vários interesses nos últimos anos, uma vez que é possível controlar as propriedades eletrônicas do grafeno nesses sistemas. As estruturas das super-redes de grafeno podem ser geradas, por exemplo,

por barreiras magnéticas[7, 8, 3], potenciais eletrostáticos, uma combinação de ambos[9, 10], por tensão ou por barreiras de velocidade de Fermi[11]. Uma equação de Dirac efetiva pode ser utilizada para a descrição dos portadores de carga no grafeno, onde esses portadores de carga do grafeno são tratados como partículas relativísticas sem massa[12]. No grafeno ou em outros cristais, pode se estudar as características eletrônicas que são baseadas no controle do fluxo de elétrons (corrente elétrica) e, em alguns casos, há a possibilidade de estudar elementos da spintrônica que, por sua vez, usa correntes ou tensões para controlar o spin do elétron, fazendo-o apontar num ou noutro sentido, um efeito de magnetização[13]. A presente pesquisa é focada em modificar a estrutura do grafeno inserindo barreiras magnéticas, potencial eletrostático, barreiras de velocidade de Fermi e *gap* de energia ao longo da estrutura, proporcionando explorar o comportamento de algumas propriedades físicas nos vales, que são os pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' formados pelas bandas de condução e valência na primeira zona de Brillouin na rede recíproca do grafeno[2]. As modificações realizadas na estrutura afetarão as características eletrônicas do grafeno, fazendo com que a degenerescência existente nos pontos de Dirac sejam quebradas, dando origem ao campo de estudo chamado valetrônica.

Assim como a filtragem dos spins dos elétrons, que tem como consequência uma corrente polarizada pela direção dos spins, a filtragem dos elétrons nos vales do grafeno estará sendo estudada nesse trabalho, bem como as condições necessárias para polarização do vale.

Alguns estudos teóricos focam no efeito de filtragem do vale onde o coeficiente de transmissão dependem do vale e, em geral, elétrons de diferentes vales se propagam ao longo de diferentes caminhos. Essa possibilidade de manipular o índice de vale com a filtragem dos elétrons pelos vales no grafeno, é um dos obstáculos estudados nesse trabalho para a viabilização da valetrônica. Sabendo que alguns filtros de vale são propostos experimentalmente[14] e teoricamente[9, 15], iremos estudar como a velocidade de Fermi em uma super-rede magnética somada com algumas constantes, influenciam nas propriedades eletrônicas em cada vale, como confinamento de elétrons, estudo da probabilidade de transmissão e analisar a degenerescência nos pontos de Dirac.

A dissertação está dividido em cinco capítulos. No primeiro faz-se a contextualização e

apresentação da investigação e explica-se a importância e as limitações da mesma. O segundo capítulo está dividido em sete seções, onde faz-se uma revisão de literatura sobre conceitos teóricos do átomo de carbono incluindo uma revisão da equação de Dirac mostrando como ela pode ser usada de forma efetiva para descrever portadores de carga no grafeno, para assim fundamentar este trabalho do ponto de vista teórico. No terceiro capítulo justifica a escolha do tipo da super-rede adotada no trabalho, através de revisões bibliográficas que compara alguns tipos de super-redes. No quarto capítulo faz-se a apresentação dos resultados obtidos nesta pesquisa e discutem-se os mesmos com base na literatura revista. No quinto e último capítulo apresentam-se as considerações finais que inclui as conclusões da pesquisa, apresentam-se ainda algumas sugestões para futuras aplicações dos resultados obtidos.

Conceitos teóricos do Grafeno

2.1 Introdução

O carbono é um elemento com propriedades bem versáteis, ele tem a capacidade de fazer quatro ligações com outros átomos podendo formar cadeias carbônicas, elas podem ser classificadas de acordo com seu tamanho, formato, ligações com hidrogênio ou outros átomos, etc. E o grafeno é uma das formas cristalinas que o carbono pode aparecer.

Nesse capítulo iremos estudar algumas propriedades do átomo de carbono, que é a "matéria-prima" para a formação do grafeno. A obtenção, as propriedades estruturais do grafeno, assim como, a equação de Dirac relativística descrita para portadores de carga no grafeno serão o foco.

2.2 Nanoestruturas De Carbono

Nanoestruturas de carbono já mostraram uma gama de propriedades físicas e químicas que os tornam atraentes para a síntese de novos materiais, por terem características únicas. Muitos desenvolvimentos tecnológicos dependem de novos materiais e da capacidade de interpretar suas propriedades. Esses pré-requisitos fizeram do carbono um material muito estudado pela comunidade acadêmica com intuito de aplicá-lo em dispositivos eletrônicos. Em 1858, os pesquisadores Kekulé e Couper fundamentaram, de forma independente, a teoria estrutural do carbono[16]. Eles apresentam algumas características e importância desse átomo, como a sua flexibilidade de ligações entre si e com outros elementos formando cadeias. Eles também mostraram a possibilidade de formação de um elevado número de estruturas baseadas em carbono

muito maior que outras estruturas que tem como base outros elementos químicos. Dependendo das condições de formação, pode apresentar-se em diversas formas alotrópicas: grafite, grafeno, diamante, fulerenos, nanotubos de carbono entre outras.

Como iremos ver adiante, o carbono pode ser tetravalente quando realiza quatro ligações covalentes simples adquirindo sua estabilidade química, pois as ligações covalentes são realizadas em orbitais semi-preenchidos. O problema é que a distribuição do carbono em sua configuração fundamental é $1s^2 2s^2 2p^2$. Portanto, o carbono deveria realizar apenas duas ligações, como podemos observar na Figura 2.1(a), que há apenas dois orbitais semi-preenchidos. Para que o carbono passe a realizar quatro ligações covalentes é preciso que os orbitais atômicos do átomo se misturem para formar novos orbitais chamados orbitais híbridos [17]. Esse processo é realizado por uma excitação do átomo, logo, o carbono equilibra os quatro orbitais esquematizado na Figura 2.1(b). O processo de misturar os orbitais dando origem a orbitais de energia intermediária é chamado de hibridização.

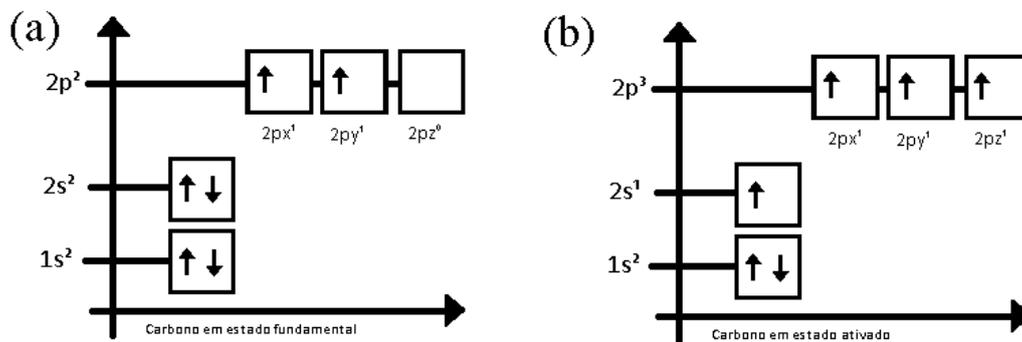


Figura 2.1: (a) Distribuição eletrônica do carbono no estado fundamental. (b) Distribuição eletrônica do carbono excitado ou ativado.

Através do estudo dos orbitais quânticos, é possível verificar que cada orbital tem sua energia e geometria características. No caso do orbital s notamos que a densidade eletrônica para o orbital é esfericamente simétrico, Figura 2.2(a), ou seja, a densidade eletrônica a uma determinada distância do núcleo é a mesma. Já a densidade eletrônica do orbital p não é distribuída esfericamente como em um orbital s . Em vez disso, a densidade é concentrada em duas regiões

de cada lado do núcleo, separadas por um nó no núcleo. Dizemos que esse orbital tem um formato de halteres, e a distribuição da densidade eletrônica para o orbital p é dividida em três orbitais o p_x , p_y e o p_z que estão relacionados as suas orientações no espaço, como mostra a Figura 2.2(b).

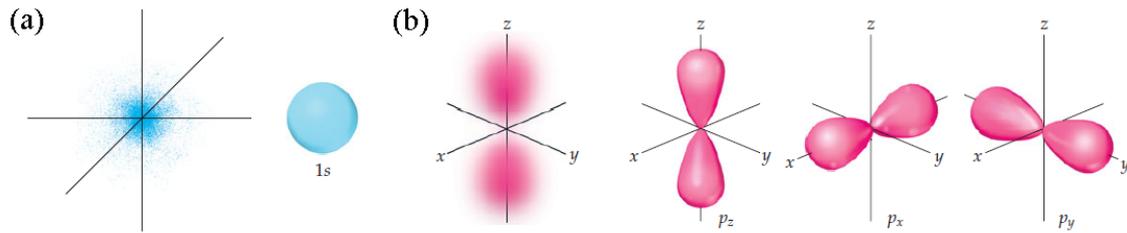


Figura 2.2: (a) Distribuição de densidade de elétrons de um orbital $1s$. (b) Distribuição de densidade de elétrons de um orbital $2p$ e a representações do contorno para os três orbitais p , ao longo do eixo em que o orbital se encontra.

Sabendo que existe um pequeno *gap* de energia entre os orbitais $2s$ e $2p$ o elétron que está no orbital $2s$ pode receber energia e ser promovido ao orbital $2p$, fazendo com que o carbono possa realizar quatro ligações covalentes e em relação a hibridização permite que o carbono se hibride em sp , sp^2 e sp^3 levando a diversas estruturas moleculares.

O estado de hibridização de alguns nanomateriais de carbono típicos estão esquematizado na Figura 2.3.

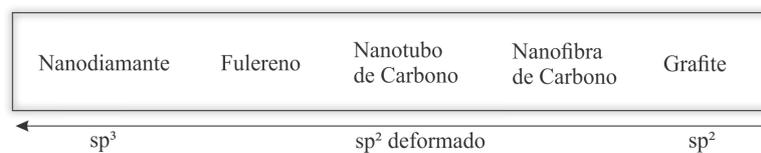


Figura 2.3: -Estado de hibridização de alguns nanomateriais de carbono, extraída da referência [1].

A hibridização sp dá origem a estruturas de cadeia, a sp^2 dá origem a estruturas trigonais planas, que ao se hibridizar deixa um orbital p de fora chamado de orbital p puro, possibilitando duas ligações simples e uma dupla. Uma molécula com dois átomos de carbono hibridizada em sp^2 poderá realizar uma ligação σ entre carbonos, onde ocorre uma penetração dos orbitais

chamada de região de sobreposição e também uma ligação π entre os carbonos, demonstradas na molécula da Figura 2.4(b), que é realizada entre a interação lateral entre os orbitais que estão orientados na direção z do plano xy. Moléculas com dois átomos carbonos hibridizadas em sp^3 são classificadas como estruturas tetraédricas possibilitando quatro ligações σ [1]. As ligações σ são mais fortes do que as ligações π , justamente pela forma que essas ligações são realizadas. Na π há apenas uma interação lateral dos orbitais diferente da ligação σ onde os orbitais se ligam frontalmente, essas ligações estão representadas na Figura 2.4(a).

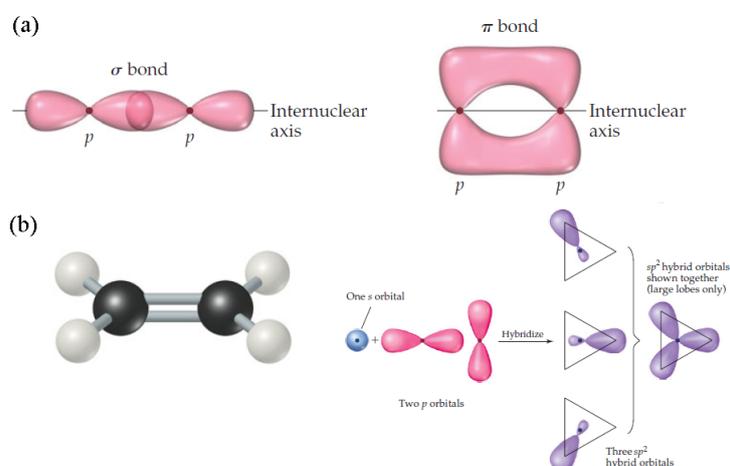


Figura 2.4: (a) Ligações σ e π entre orbitais p . (b) Molécula com orbital hibridizado em sp^2 , com uma ligação σ e uma ligação π entre carbonos.

2.3 Obtenção do Grafeno e Suas Propriedades Estruturais

O grafite é feito de pilhas de camadas de grafeno, um alótropo do carbono que é considerado bidimensional, as camadas são mantidas juntas pelas forças de atração de Van der Waals, ele é estudado desde a década de 40[5]. Apesar do grafeno ser a base para todos os alótropos do carbono com hibridização sp^2 já citado anteriormente apenas 440 anos depois da invenção do lápis o grafeno foi isolado[2]. Em 2004, o grupo de pesquisa do professor Novoselov[6] conseguiu obter em laboratório o grafeno, nome dado a uma monocamada plana de átomos de carbono

ligados entre si, com hibridização em sp^2 , formando uma rede bidimensional (2D), ideal para estudar as propriedades físico-químicas de diversos materiais nanoestruturados alótropos do carbono, lembrando a estrutura de favo de mel (*honeycomb lattice*).

Sabendo que o grafite por si só, consiste no empilhamento de muitas camadas de grafeno, a obtenção dos filmes de grafeno por Novoselov foi realizada por esfoliação mecânica (*repeated peeling*) de pequenas placas de grafite pirolítico, esse tipo de grafite foi escolhido por apresentar poucas irregularidades ou defeitos no ordenamento das suas camadas, características que o grafite comum não possui. A detecção foi através de um efeito óptico criado em cima de um substrato de SiO_2 que permite sua observação com um microscópio óptico comum, concluindo que sua produção seria mais fácil do que sua visualização[6].

A Figura 2.5 foi retirada do artigo em que Geim e Novoselov[6] que conseguiram isolar o grafeno e estudar suas propriedades, acarretando no prêmio Nobel de Física de 2010.

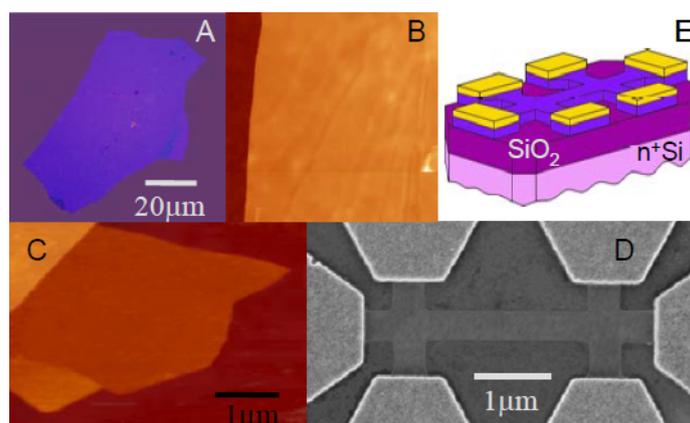


Figura 2.5: Exemplos dos filmes de grafeno preparados por Geim e Novoselov.(A) Fotografia em iluminação ambiente de um floco de grafeno multicamadas relativamente grande espessura aproximadamente 3 nm em cima de um substrato de SiO_2 .(B) Imagem AFM (*Atomic Force Microscopy*) de $2 \times 2 \mu m^2$ de área do floco próximo a borda. Cores: marrom escuro é a Superfície de SiO_2 ;laranja corresponde a 3 nm de altura acima da superfície do SiO_2 .(C) Imagem AFM de camada única de grafeno. Cores: marrom escuro é a superfície de SiO_2 , castanho-vermelho(área central)-altura de 0.8 nm, amarelo-marrom (inferior esquerdo) - 1.2 nm e laranja(canto superior esquerdo)- 2.5 nm. (D) Micrografia SEM(*scanning electron microscope*) de um dos dispositivos experimentais preparados a partir de grafeno de poucas camadas, e (E) visão esquemática do dispositivo experimental.

Devido a flexibilidade estrutural do grafeno com hibridização sp^2 entre um orbital s e dois

orbitais p , leva a uma estrutura trigonal plana com quatro ligações σ no plano, os orbitais p_z são perpendiculares ao plano da folha, formam ligações covalentes π . A banda σ é responsável pela robustez da estrutura de rede em todos os alótropos, por ter uma ligação forte. Devido ao princípio de exclusão de Pauli, a banda com mais alto nível de energia é preenchida pelos elétrons de valência formando uma banda de valência. O orbital p_z não afetado é perpendicular a estrutura planar fazendo uma ligação covalente mais fraca com átomos de carbono vizinhos, levando à formação de uma banda π [2].

Para descrevermos a estrutura básica do grafeno, alguns conceitos serão abordados e definidos com o auxílio do livro Física do Estado Sólido de Ashcroft e Mermin [18].

Uma rede de Bravais é um arranjo infinito e ordenado de pontos discretos com tal forma e orientação que parece exatamente o mesmo quando visto de qualquer ponto do arranjo [18]. A estrutura do Grafeno não pode ser descrita como uma rede de Bravais 2D comum, pois não há dois vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 capazes de gerar toda a rede como na Figura 2.6(a). Na figura 2.6(b), os pontos **A** e **B** não são equivalentes, pois o cristal visto de **A** não tem a mesma forma que quando visto de **B**. É necessário definir uma base como será visto na figura 2.7.

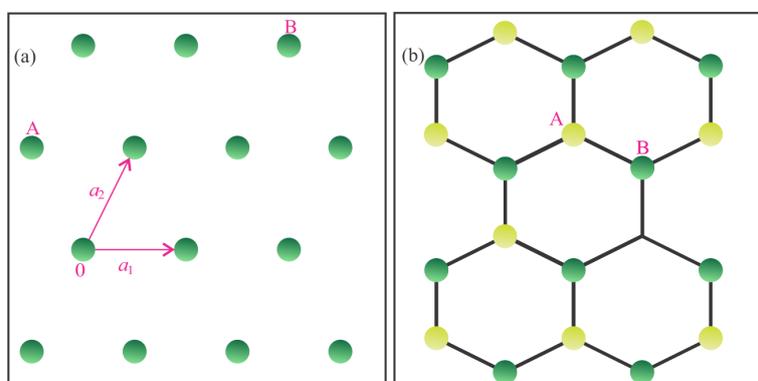


Figura 2.6: (a) Rede de Bravais em 2D. Os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 geram toda a rede. Como exemplo podemos definir os pontos $\mathbf{A} = \mathbf{a}_1 + 2\mathbf{a}_2$ e $\mathbf{B} = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$, (b) Rede que não é de Bravais em 2D. É preciso definir uma base.

Os vetores dos átomos da base, ou vetores de rede \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 podem ser escritos em coordenadas cartesianas, onde a distância entre carbonos $a \approx 1.42\text{\AA}$,

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}) \quad \text{e} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}).$$

A partir dos vetores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 da rede recíproca do grafeno, os pontos que compõem a rede recíproca são constituídos por todas as combinações lineares de uma base vetorial no espaço recíproco Figura 2.7(b), podemos notar que a rede recíproca trata-se de uma rede hexagonal, utilizando o método usual, traçando retas entre um ponto de referência da rede recíproca e todos os demais, e posteriormente, retas perpendiculares a essas primeiras no ponto médio das retas que ligam o ponto de referência aos demais pontos da rede recíproca obtemos a primeira Zona de Brillouin do grafeno Figura 2.7(b).

A partir da definição para calcular os vetores da rede recíproca [18], obtemos

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}) \quad \text{e} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}).$$

Na Figura 2.7(b) estão representados dois pontos importantes da primeira zona de Brillouin \mathbf{K} e \mathbf{K}' . Estes pontos são chamados de pontos de Dirac, e são importantes por terem características intrínsecas da estrutura do grafeno. Suas posições no espaço dos momentos são:

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

Os pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' não coincidem quando sujeitos a alguma transformação de simetria, portanto são classificados como pontos não equivalentes da Zona de Brillouin. Os três vetores que conectam os três primeiros vizinhos de um átomo da sub-rede A são dados por[2]:

$$\boldsymbol{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \boldsymbol{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\delta}_3 = -a(1, 0).$$

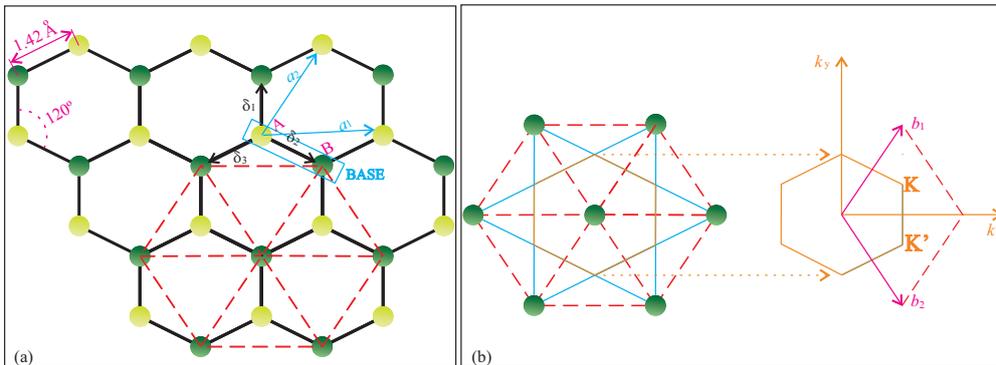


Figura 2.7: (a) Representação da estrutura planar e hexagonal do grafeno com os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 e $\boldsymbol{\delta}_i$, $i = 1, 2, 3$ são os vetores vizinhos mais próximos. (b) Primeira Zona de Brillouin com os pontos de Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' .

2.4 Modelo De Ligação Forte(Tight-Binding) no Grafeno

Conhecida toda estrutura geométrica do grafeno, tanto no espaço real quanto no espaço recíproco Figura 2.7, podemos fazer um estudo eletrônico nos orbitais p_z no grafeno. Sabe-se que as bandas formadas pelos orbitais que formam ligações π são as responsáveis pelas propriedades desse cristal. Dessa forma, no cálculo de ligação forte das bandas de energia do grafeno, usam-se como base as funções de Bloch construídas a partir desses orbitais atômicos. Considerando a probabilidade de salto de um elétron entre os primeiros vizinhos uma boa aproximação, o hamiltoniano desse modelo é dado por [2]:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\eta,i}^\dagger b_{\eta,j} + b_{\eta,j}^\dagger a_{\eta,i}), \quad (2.1)$$

onde $a_{\eta,i}$ e $a_{\eta,i}^\dagger$ são respectivamente operadores fermiônicos de aniquilação e criação de elétrons de spin verdadeiro $\eta = \uparrow, \downarrow$ no i -ésimo átomo sub-rede A, $b_{\eta,j}$ e $b_{\eta,j}^\dagger$ são respectivamente operadores fermiônicos de aniquilação e criação de elétrons na sub-rede B, $\langle ij \rangle$ denota a soma sobre os primeiros vizinhos, as posições correspondem ao índice i, j para o espaço de momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, já que estamos em duas dimensões espaciais. Podemos notar que os três primeiros vizinhos de um átomo da sub-rede A são três átomos da sub-rede B e vice-versa, o parâmetro de salto entre primeiros vizinhos tem $t \approx 2,8 eV$.

Para diagonalizar o hamiltoniano acima (2.1), podemos decompor os operadores em termos de componentes de Fourier, conforme a transformação discreta de Fourier, dada por [19]

$$\hat{a}_{\eta,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_{k\eta} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}, \quad (2.2)$$

$$\hat{a}_{\eta,i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_{k\eta}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}, \quad (2.3)$$

$$\hat{b}_{\eta,i} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{b}_{k\eta} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (2.4)$$

$$\hat{b}_{\eta,i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{b}_{k\eta}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}, \quad (2.5)$$

onde \mathbf{k} é o vetor de onda no espaço recíproco, enquanto \mathbf{r}_i é o vetor posição do i -ésimo átomo na sub-rede correspondente. Note que existem N átomos em cada sub-rede e a transformação leva os operadores de criação e aniquilação do espaço real. Todos os pontos da rede gerados pelos somatórios são consequência de translações da rede primitiva.

Podemos notar na Figura 2.8, que o espectro das bandas de energia do grafeno é simétrico no ponto em que a energia é zero. Utilizando o Hamiltoniano(2.1) deduzimos a equação geral para as energias das bandas [2]

$$E_{\pm}(k) = \pm t \sqrt{3 + f(k)} \quad (2.6)$$

A função $f(k) = \sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\delta}_n}$ é definida no modelo de ligação forte (*Tight-Binding*) através da interação com os primeiros vizinhos, com coordenadas $\boldsymbol{\delta}_n$ definidos na seção 1.2. Fazendo algumas manipulações na função:

$$f(k) = 2 \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1) + 2 \cos(\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2) + 2 \cos(\mathbf{K} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))$$

fazendo as seguintes substituições

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_1 = \frac{3a}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}a}{2}k_y, \quad \mathbf{K} \cdot \mathbf{a}_2 = \frac{3a}{2}k_x - \frac{\sqrt{3}a}{2}k_y \quad \text{e} \quad \mathbf{K} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) = \sqrt{3}ak_y.$$

Encontramos explicitamente a função,

$$f(k) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right). \quad (2.7)$$

Como resultado desses cálculos, obtém-se a seguinte expressão para a relação de dispersão das bandas de energia formadas pelos orbitais π , representado pela Figura 2.8(a)

$$E_{\pm}(k) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)}. \quad (2.8)$$

Para energias em torno da energia de Fermi e para vetores de onda \mathbf{k} em torno dos pontos \mathbf{K} ou \mathbf{K}' , podemos expandir a equação (2.6) obtendo a seguinte expressão aproximada para a dispersão de energia do grafeno em torno dos pontos \mathbf{K} ou \mathbf{K}' [2]:

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) \approx_{\pm} v_f |\mathbf{q}|, \quad (2.9)$$

sabendo que o vetor de onda é $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$, e com momento \mathbf{q} medido a partir dos pontos \mathbf{K} ou \mathbf{K}' nota-se que $|\mathbf{q}| \ll |\mathbf{K}|$, pois estamos querendo os pontos mais próximos desses pontos. A velocidade de Fermi é dada por $v_F = 3ta/2$, com um valor $v_F \approx 1 \times 10^6$ m/s, obtido pela primeira vez por Wallace em 1947 [20]. Uma das principais diferenças da relação de dispersão da Equação (2.9) é que temos uma relação linear da energia com o momento e nos casos usuais da Equação (2.8) ela é parabólica como podemos ver na Figura 2.8(b), pois temos uma relação quadrática entre energia e momento dada por $E(\mathbf{q}) = q^2/2m$, onde m é a massa do elétron ou pósitron, levando a velocidade de Fermi à $v_F = q/m = \sqrt{2E/m}$, podemos observar que a velocidade de Fermi muda consideravelmente com a energia.

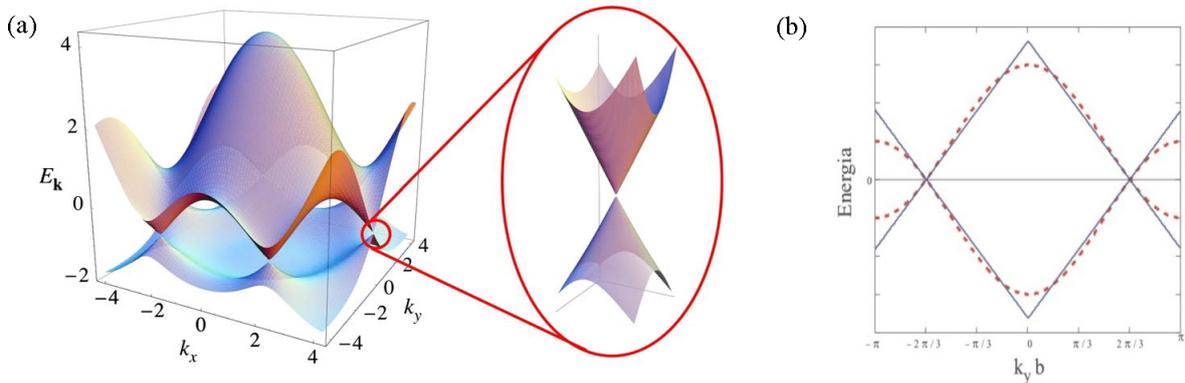


Figura 2.8: (a) Dispersão eletrônica na estrutura do grafeno. Esquerda: espectro de energia em unidades de t para valores finitos de t e t' , com $t = 2.7eV$ e $t' = -0.2t$. Direita: ampliação das bandas de energia próximas a um dos pontos de Dirac, retirado da refer encia [2]. (b) Corte da representação da Figura(a), o traço pontilhado representa a banda na forma usual Equação(2.8), enquanto o traço cheio mostra a aproximação linear dada pela Equação(2.9).

2.5 Equação de Dirac

A construção de uma equação de onda relativística que seja linear e não quadrática no tempo, foi proposta em 1928 por Dirac [12], obtendo um tratamento igual para tempo e espaço, no entanto Klein e Gordon já tinham proposto uma equação para descrever elétrons relativísticos, mas surgiram algumas dificuldades de interpretação da equação [21, 22], como por exemplo densidades de probabilidade negativas, que é uma consequência direta no aparecimento de uma equação diferencial de segunda ordem no tempo, mesmo com essas características a equação parece ser satisfatória no que diz respeito a emissão e absorção de radiação ou as questões referentes a posição do elétron, mas não referente ao seu momento angular ou qualquer outra variável dinâmica.

Dirac buscou uma equação de onda relativística covariante, ou seja, permite estender o cálculo diferencial em n dimensões, no formato da equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (2.10)$$

com uma preocupação em definir uma densidade de probabilidade positiva, visto que a equação de Klein-Gordon produziu uma densidade de probabilidade negativa. Na época não se tinha uma interpretação física para a densidade de carga e não fazia muito sentido, porque mésons π^+ e π^- como partículas de spin-0 carregadas ainda não tinham sido descobertas.

Do mesmo modo que a Equação 2.10 é linear na derivada em relação ao tempo, terá que ser criado um Hamiltoniano que também seja linear nas derivadas espaciais, nesta dissertação vamos seguir a sequência feita por Greiner[23] para obter a equação de Dirac, logo a Equação 2.10 ficará com a seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{\hbar c}{i} \left(\hat{\alpha}_1 \frac{\partial}{\partial x^1} + \hat{\alpha}_2 \frac{\partial}{\partial x^2} + \hat{\alpha}_3 \frac{\partial}{\partial x^3} \right) + \hat{\beta} m_0 c^2 \right] \psi, \quad (2.11)$$

onde os coeficientes $\hat{\alpha}$ não podem ser simples números, caso contrário seriam invariantes em relação a simples rotações espaciais, então foi suposto que $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ seriam matrizes $N \times N$ e

deveriam ser matrizes hermitianas para que \hat{H} também seja hermitiano. Então ψ não pode ser um escalar, mas sim um vetor coluna

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1(x,t) \\ \psi_2(x,t) \\ \vdots \\ \psi_N(x,t) \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Considerando a mecânica quântica não-relativística, percebemos que para levar em conta o spin, é necessário adicionar o termo de Pauli $\boldsymbol{\sigma}$, levando em consideração a interação do momento magnético de spin com o campo magnético.

Lembrando que a relação não relativista entre a energia e o momento de uma partícula livre, a qual só tem energia cinética é:

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (2.13)$$

que é determinada através da relação de De Broglie, entre o vector de onda e o momento. Consideramos as seguintes relações diferenciais

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = i\hbar c \frac{\partial}{\partial x_0} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{p} = -i\hbar \nabla. \quad (2.15)$$

Como estamos interessados em uma equação de onda relativística para partículas de spin 1/2, para prosseguir iremos introduzir a relação entre a energia e o momento para uma partícula livre relativística

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4. \quad (2.16)$$

Apenas a adição do termo de Pauli $\boldsymbol{\sigma}$ se torna bastante artificial, principalmente se considerarmos que as interações eletromagnéticas são geradas pela substituição $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c}$. Para partículas de spin 1/2, uma forma mais natural de obtermos este termo é reescrevendo o opera-

dor de energia cinética 2.13 na ausência de campo eletromagnético

$$H_{\text{cin}} = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2m} \quad (2.17)$$

isso só é possível, porque está de acordo com a identidade

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}),$$

onde \mathbf{a} e \mathbf{b} são operadores. Da mesma forma que adicionamos o termo de Pauli, na teoria não relativística, iremos fazer o mesmo na Equação 2.16

$$\begin{aligned} E^2 &= \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \\ \frac{E^2}{c^2} - \mathbf{p}^2 &= m^2 c^2 \\ \left(\frac{E}{c} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right) \left(\frac{E}{c} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \right) &= m^2 c^2 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Substituindo as Equações 2.14 e 2.15 na Equação 2.18, podemos escrever a equação de segunda ordem para uma partícula livre relativística

$$\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} + \boldsymbol{\sigma} \cdot i\hbar \nabla \right) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} - \boldsymbol{\sigma} \cdot i\hbar \nabla \right) \right] \phi = (mc)^2 \phi. \quad (2.19)$$

Para obtermos uma equação só com derivadas primeiras, precisamos apenas de um vetor que relaciona a energia e o momento, ou seja, precisamos transformar um sistema de equações diferenciais 2.19 para uma equação matricial

$$(\boldsymbol{\gamma}^0 E - \boldsymbol{\gamma} \mathbf{p}) \psi = mc \psi, \quad (2.20)$$

$$\boldsymbol{\gamma} = \boldsymbol{\gamma}^1, \boldsymbol{\gamma}^2, \boldsymbol{\gamma}^3,$$

onde ψ , $\boldsymbol{\gamma}^0$ e $\boldsymbol{\gamma}$ são matrizes.

As matrizes de Dirac $\boldsymbol{\gamma}^0$ e $\boldsymbol{\gamma}$ são matrizes 4×4 dadas por:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \text{ e } \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -i\boldsymbol{\sigma}^i \\ i\boldsymbol{\sigma}^i & 0 \end{pmatrix}.$$

Onde o 0 representa uma matriz 2×2 de zeros, o I representa a matriz identidade 2×2 e o $\boldsymbol{\sigma}^i$, com $i=1,2,3$ são as matrizes de Pauli dadas por:

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

as matrizes de Dirac obedecem à relação de anticomutatividade

$$\gamma_\mu, \gamma_\nu = \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu},$$

e também são hermitianas

$$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu.$$

Como as matrizes gama se escrevem em termos de matrizes 2×2 é conveniente agrupar as quatro componentes da matriz $\boldsymbol{\psi}$ 4×1 em duas funções de onda cada uma com duas componentes 2×1 , dado por $\boldsymbol{\psi}_R$ e $\boldsymbol{\psi}_L$. Cada uma destas sub-matrizes continuam a ser função do \mathbf{p} . Introduzindo de forma direta as matrizes gama na Equação 2.20 obtemos

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & -E \\ -E & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}_R \\ \boldsymbol{\psi}_L \end{pmatrix} = mc \begin{pmatrix} \boldsymbol{\psi}_R \\ \boldsymbol{\psi}_L \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

os índices L e R origina-se das palavras *Left* e *Right* respectivamente e correspondem aos estados de helicidade. A helicidade é o valor do spin na direção do momento que pode ser mais um ou menos um. Logo, o estado R corresponde a ter o spin paralelo com o momento enquanto e o estado L corresponde ao caso em que são antiparalelos. Podemos separar a Equação 2.21 em duas equações de primeira ordem

$$\begin{aligned} (-E - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\boldsymbol{\psi}_L &= mc\boldsymbol{\psi}_R, \\ (-E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\boldsymbol{\psi}_R &= mc\boldsymbol{\psi}_L, \end{aligned} \quad (2.22)$$

assim, podemos escrever a equação de Dirac na forma

$$\left(\gamma_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} + \frac{mc}{\hbar} \right) \psi = 0, \quad (2.23)$$

podendo recuperar a equação inicial dada por 2.11, que foi originalmente proposta por Dirac.

A equação de Dirac pode ter uma solução exata, por exemplo no caso de um problema para uma partícula livre, admitindo soluções do tipo onda plana:

$$\psi = \omega \exp^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \quad (2.24)$$

Como no procedimento anterior utilizado para ψ em 2.21, ω é um spinor de quatro componentes independente de \mathbf{x} . É conveniente separar o spinor ω em dois spinores de duas componentes, exatamente como foi feito anteriormente. Ao realizar todo o procedimento recuperamos a relação entre a energia e o momento dada pela Equação 2.16, onde esta relação nos permite energias positivas e negativas

$$E = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

com isso, encontrando a equação relativista para o elétron, percebeu-se que a mesma equação também descreve outra partícula com o mesmo spin e a mesma massa, o pósitron. Explicando a existência destas soluções chamadas de energia negativa.

2.6 A Equação De Dirac Para o Grafeno

A relação de dispersão linear para a energia $E = \pm \hbar v_F \mathbf{q}$ é semelhante a dispersão de energia de partículas relativísticas $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ para $m = 0$, com a velocidade de Fermi v_F fazendo o papel da velocidade da luz c . Por isso, os portadores de carga no grafeno podem ser vistos como partículas relativísticas, sem massa. Além disso, devido à existência das duas sub-redes que são equivalentes e dois átomos por célula unitária, os portadores de carga no grafeno são

descritos por funções de onda de duas componentes, cada uma delas relacionada à contribuição de uma das sub-redes A e B, que são semelhantes aos índices de spin reais para cima e para baixo, portanto, é referido como pseudo-spin.

Como mencionado na seção acima, o ponto de encontro das bandas tem a energia igual a zero, portanto a função $f(k) = 0$, a física relevante em baixas energias se desenvolve nas proximidades dos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' . Nas proximidades de cada um desses pontos, as bandas formam um duplo cone, mostrado na imagem da direita na Figura 2.8, um cone voltado para cima e outro para baixo, tocando-se no ponto de energia nula por isso caracterizado como um semimetal de *gap* zero, representando as duas soluções de energia possíveis levando a uma teoria quântica relativística de férmions de Dirac sem massa [24]. Usando as transformações, Equações (2.2) e (2.4), escrevemos o campo como uma soma de dois termos, vindo da expansão da soma de Fourier em torno de \mathbf{K} e \mathbf{K}' . Isso produz uma aproximação para a representação do campo como uma soma de dois novos campos, escritos como[6]:

$$\begin{aligned} a_n &= e^{i\mathbf{k}\delta_n} a_{k,n} + e^{i\mathbf{k}'\delta_n} a_{k',n} \\ b_n &= e^{i\mathbf{k}\delta_n} b_{k,n} + e^{i\mathbf{k}'\delta_n} b_{k',n} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Uma vez que δ_n é a interação com os primeiros vizinhos, expandindo a função $f(k) = \sum_{n=1}^3 e^{i\mathbf{k}\delta_n}$ em Série de Taylor em torno dos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' , considerando o fato que $\sum_{\delta} e^{+\mathbf{K}\cdot\delta} = \sum_{\delta} e^{-\mathbf{K}'\cdot\delta} = 0$, o hamiltoniano (2.1) fica da seguinte forma:

$$\hat{H} = i\hbar v_f \int dx dy [\psi_{\mathbf{K}}^{\dagger}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) + \psi_{\mathbf{K}'}^{\dagger}(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \nabla \psi_{\mathbf{K}'}(\mathbf{r})], \quad (2.26)$$

onde $\boldsymbol{\sigma}^*$ é o complexo conjugado das matrizes de Pauli e podemos notar que $-i\hbar\nabla$ é o operador momento \mathbf{p} . No grafeno os elétrons entorno dos pontos \mathbf{K} 's de Dirac comportam-se efetivamente como férmions de Dirac sem massa, com a velocidade de Fermi fazendo o papel da velocidade da luz, como já foi mencionado, sendo possível empregar o mesmo formalismo usado por Dirac para partículas relativísticas.

A descrição dos portadores de carga por funções de onda com duas componentes é semelhante à usada para escrever funções de onda de spin. Um único portador (elétron ou buraco) próximo ao ponto K ou K' é descrito pela equação de Dirac efetiva

$$-i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi = E \psi \quad (2.27)$$

O hamiltoniano (2.26) é escrito como

$$H = -i\hbar v_F \tau_z \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla. \quad (2.28)$$

Dessa forma, diz-se que os portadores de carga no grafeno têm associado a eles um pseudospin, escritos pelas matrizes $\boldsymbol{\sigma}$. Onde, o pseudospin *up* está relacionado a contribuição em uma das sub-redes e o pseudospin *down* está relacionado a contribuição na outra sub-rede. O outro pseudospin está relacionado com o grau de liberdade dos pontos de Dirac e é chamado de pseudospin de vale τ_z , que mais adiante iremos estudar como um vale é capaz de separar espacialmente os elétrons e lacunas de outro vale, havendo uma polarização pelos vales.

2.7 Conclusão

Neste capítulo uma base teórica geral foi criada para que nos próximos capítulos a introdução de alguns conceitos sejam mais naturais. Estudamos o átomo de carbono, características de obtenção do grafeno e da sua estrutura. Estudamos a equação de Dirac de forma geral e mostramos como ela pode ser usada de forma efetiva para descrever portadores de carga no grafeno, visto que nos próximos capítulos será utilizada para o estudos de propriedades eletrônicas de super-redes de grafeno.

Super-redes de Grafeno

3.1 Introdução

Neste capítulo faremos uma breve análise estrutural das super-redes de grafeno, ou seja, estruturas formadas pela combinação de diferentes potenciais, como barreiras magnéticas, potenciais eletrostáticos, por uma combinação de barreiras magnéticas e elétricas ou também por tensão ou barreiras de velocidade de Fermi depositadas em camadas alternadas. Nos últimos anos as super-redes de grafeno têm atraído grande interesse de pesquisa, uma vez que é possível manipular as propriedades eletrônicas do grafeno nessas estruturas. Iremos ver que as super-redes podem ser classificadas como periódicas, quase periódicas ou aleatórias, cada uma com diferentes propriedades eletrônicas.

3.2 Super-Redes

As Super-redes são estruturas produzidas por justaposição de camadas que podem ser geradas, por exemplo, por barreiras magnéticas[7, 8, 3], potenciais eletrostáticos, por uma combinação de barreiras magnéticas e elétricas[9, 10] (que será o tipo utilizado nesse trabalho), ou também por tensão ou barreiras de velocidade de Fermi[11]. Essas super-redes são classificadas, basicamente, em três tipos: periódicas, quasi-periódicas e aleatórias[25, 26]. Visto que cada tipo tem características eletrônicas diferentes, se a super-rede se dá de forma periódica, o perfil dessa super-rede é demonstrada na Figura 3.1(a), em contraste a super-rede aleatória é demonstrada na Figura 3.1(b).

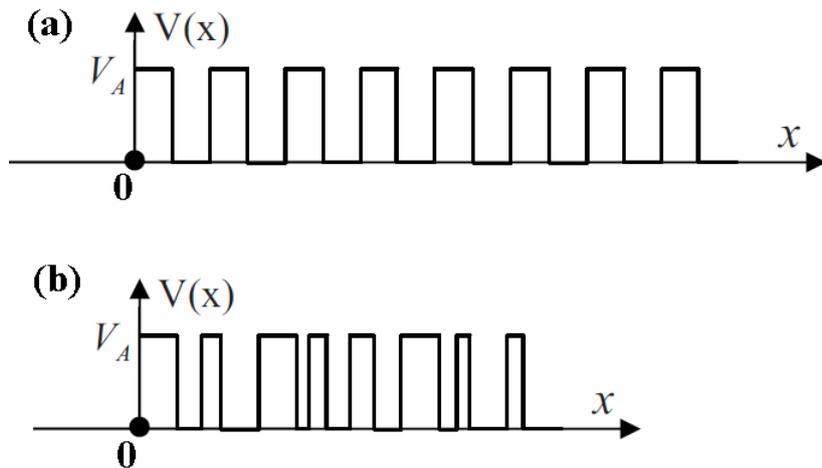


Figura 3.1: Perfis dos potenciais aplicados em monocamada de grafeno. (a) periódicos e (b) aleatórios.

Outro tipo são as super-redes quasi-periódicas, os exemplos que serão abordados são sequências geradas por substituições dos blocos A e B , por diferentes sequências, as características dessas sequências estão relacionadas as classificações das super-redes quasi-periódicas. As sequências mais usadas em trabalhos são caracterizadas como Fibonacci, Thue-Morse e período duplo. A Figura 3.2 exibe estas sequências. Iremos mostrar como podem ser formadas as sequências Fibonacci. Para mais detalhes dessas sequências consultar a referência[27].

Uma estrutura quasi-periódica construída segundo a sequência de Fibonacci, como mostra a Figura 3.2, pode ser obtida a partir de uma relação de substituição dos blocos, formando uma cadeia binária que pode ser crescida experimentalmente[27, 28] pela construção de dois blocos A e B , de maneira que o n -ésimo estágio da super-rede S_n é gerado pela substituição

$$A \rightarrow AB \text{ e } B \rightarrow A$$

Ultimamente vários estudos teóricos em super-redes estão sendo realizados uma vez que resultados experimentais com super-redes periódicas de grafeno[29] já foram obtidos, possibilitando controlar algumas propriedades eletrônicas e tornando o estudo das super-redes motivador para o avanço tecnológico com o uso do grafeno.

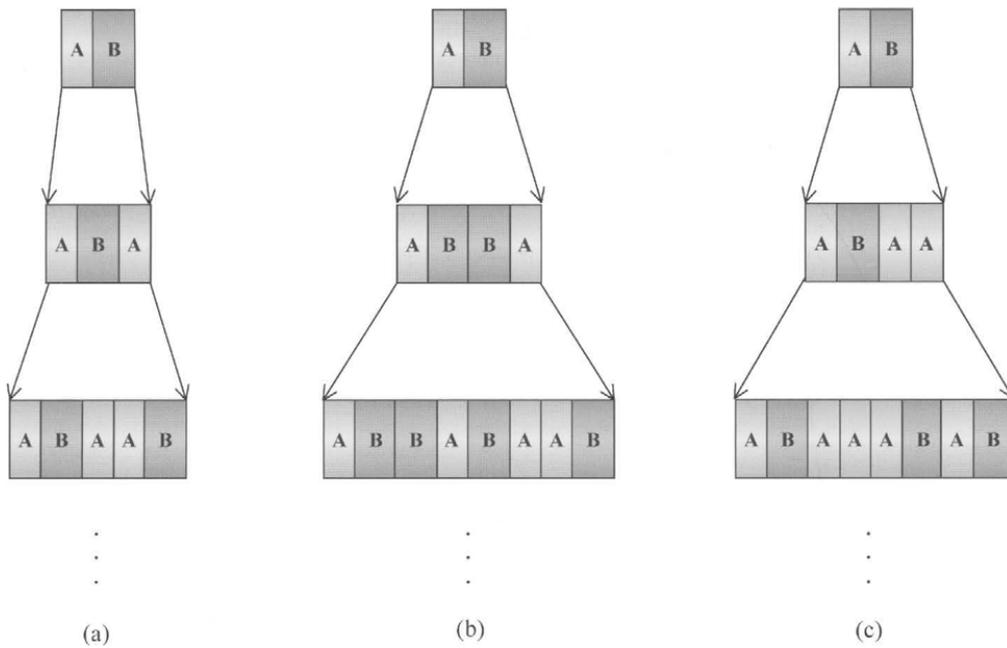


Figura 3.2: Ilustração esquemática das estruturas quasi-periódicas: (a) Fibonacci, (b) Thue-Morse e (c) Período duplo.

Lembrando que as super-redes são criadas experimentalmente, assim, temos o poder de muda-las da forma que for conveniente para a execução de um determinado estudo de interesse do pesquisador. Mudanças como diminuir ou aumentar a espessura da barreira de potencial, permitir ou não a interação entre elétrons de camadas vizinhas e variar o crescimento das camadas possibilitando mudanças na espessura. Para estudos teóricos é possível considerar uma super-rede infinita ou em casos mais reais finitas, entre outras mudanças. Vários efeitos quânticos podem ser estudados dependendo de como foi montada a super-rede. Podemos estudar e controlar as funções de onda que descrevem os elétrons nas barreiras, fenômenos de transporte através da estrutura, e também, como algumas propriedades ópticas são alteradas, dentre outros.

3.3 Super-Redes de Grafeno Com Barreiras de Potenciais Eletrostáticos

Uma breve abordagem sobre as principais características do tunelamento de Klein em grafeno será realizada nessa seção [30, 31], para que as super-redes de grafeno com barreiras de potenciais eletrostáticas sejam abordadas de forma mais clara. No grafeno, as propriedades eletrônicas próximo da superfície de Fermi são descritas por equações do tipo Dirac (2.27). Isto permite que estudos envolvendo férmions relativísticos possam ser simulados no grafeno, como por exemplo o Paradoxo de Klein que descreve o fenômeno de tunelamento de um elétron relativístico através de uma barreira de potencial de altura maior do que sua energia. No entanto, veremos que é possível prever comportamentos físicos, onde o elétron pode passar pela barreira de grande potencial se aproximando de uma transmissão perfeita em contraste com o tunelamento não relativístico convencional em que a equação de Schrödinger é válida, mostrando que a probabilidade de transmissão decai exponencialmente com o aumento da altura da barreira. Na Figura 3.3 podemos observar o exemplo mais simples de uma barreira de potencial utilizada no estudo do tunelamento de Klein, com um formato retangular.

Quando o caso abordado é considerado quase perfeito, onde a falta de simetria da barreira e o espalhamento entre vales é desconsiderada, não há reflexão de elétrons quando há uma incidência de elétrons na direção normal à barreira, com isso um elétron que é incidente na direção normal da barreira continua propagando-se com 100% de eficiência não havendo reflexão. Este fenômeno é outra manifestação da quiralidade dos elétrons de Dirac dentro de cada vale \mathbf{K} e \mathbf{K}' , impedindo a reflexão dos elétrons. A mudança de ângulos de incidência dos elétrons interferem diretamente nas probabilidades de transmissão e reflexão, ao longo do perfil da barreira de potencial [2, 30]. Assim podemos concluir de imediato que a incidência dos férmions de Dirac normalmente não resulta em confinamento por potenciais eletrostáticos.

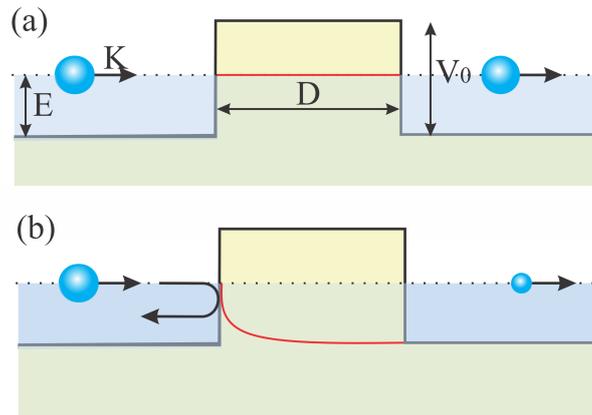


Figura 3.3: O nível de Fermi (linhas pontilhadas) está na faixa de condução fora da barreira e na faixa de valência dentro dela. O preenchimento azul indica estados ocupados e K é a amplitude da onda transmitida e refletida representadas pelo tamanho da esfera. (a) Temos o tunelamento em Grafeno. (b) Tunelamento em semicondutores convencionais, podemos observar que a amplitude da função de onda dos elétrons (em vermelho) decai exponencialmente em semicondutores.

Como já mencionado, elétrons e buracos na super-rede semicondutora são normalmente descritos por equações de Schrödinger não-relativísticas. Enquanto os elétrons e buracos na super-rede do grafeno exibem propriedades quirais, descritos por funções de onda de duas componentes, conhecidas como funções de onda do tipo spinor, que tem suas soluções descritas pela equação de Dirac. As super-redes formadas por potenciais eletrostáticos podem ser estudadas em uma ou mais camadas de grafeno. Os estudos podem ter como base dos seus cálculos o método de matriz de transferência, onde pode ser investigadas as propriedades de transmissividade, condutividade e fator de fano[31, 32], por exemplo, dos portadores de carga através das super-redes de grafeno.

3.4 Super-Redes de Grafeno Com Barreiras de Velocidade de Fermi

A estrutura de super-redes de grafeno com barreiras de velocidade de Fermi levou a realização de estudos teóricos, onde as propriedades eletrônicas dessas super-redes, como a probabilidade de transmissão e a condutância, foram o foco de algumas pesquisas[33, 34]. Uma

maneira de gerar barreiras de velocidades de Fermi é colocar planos metálicos aterrados sobre uma folha de grafeno, com isso barreiras de velocidade periódica serão induzidas, como mostra a Figura 3.4. Esses planos metálicos fazem com que a interação elétron-elétron seja mais fraca ou mais forte de acordo com a aproximação das placas com o grafeno, podendo reduzir ou aumentar a velocidade Fermi nas regiões que serão estudadas, gerando uma modulação dessa velocidade [11, 25]. Além da criação dessas barreiras, *gaps* podem ser abertos nas regiões relevantes da super-rede podendo ser modulado de acordo com o interesse. Além de modulações de velocidade de Fermi criadas em estruturas de grafeno por aterramentos de planos metálicos próximos ao grafeno, a velocidade de Fermi também pode variar no espaço por dopagem apropriada, devido a impurezas ou interação com o substrato, mas o poder de controle da velocidade é perdido, pois a velocidade é fixada para cada tipo de dopagem [35].

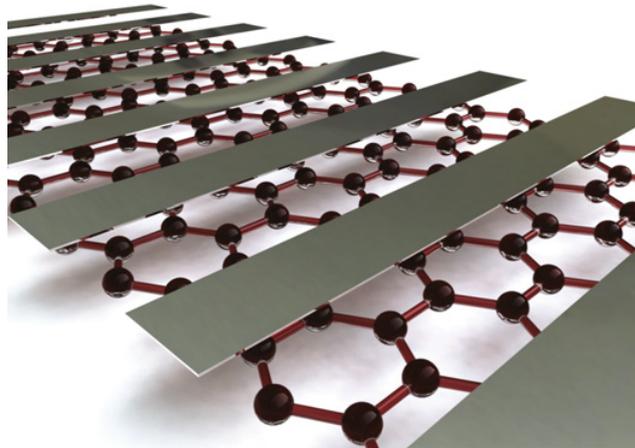


Figura 3.4: Esquema de uma super-rede formada por barreiras de velocidade de Fermi com largura D e uma variação de velocidade nas regiões da barreira e fora da barreira.

O caso estudado por Peres[36], onde o Hamiltoniano para uma quase-partícula sem massa descrita por uma equação efetiva de Dirac, com uma velocidade efetiva v_F , dado por

$$H = v_F \sigma_x \frac{\hbar}{i} \partial_x,$$

também é usado para descrever uma super-rede com a velocidade variando em diferentes regiões do material. Com isso, será considerado uma folha de grafeno na qual a velocidade do

elétron varia no espaço, exigindo um modelo que $v_F = v_F(x)$. A equação de Dirac nesse caso com a velocidade variando no espaço levaria o hamiltoniano a um operador não-hermitiano. Uma maneira de contornar esse problema é provar que o operador

$$H = \sqrt{v_F(x)} \sigma_x \frac{\hbar}{i} \partial_x \sqrt{v_F(x)},$$

é hermitiano e ao substituir $v_F(x) = v_F$ voltará ao hamiltoniano inicial. Portanto, é conveniente introduzir o spinor auxiliar $\Phi(x) = \sqrt{v_F} \Psi(x)$, satisfazendo a equação $H\Phi(x) = E\Phi(x)$.

De acordo com [33], mostraremos um exemplo de uma barreira de velocidade de Fermi que é considerado como base para o entendimento e o estudo das super-redes com barreiras de velocidade de Fermi de largura D , com as seguintes características:

$$v_F(x) = \begin{cases} v_{F1}, & x \in [-\infty, 0] \\ v_{F2}, & x \in [0, D] \\ v_{F1}, & x \in [D, \infty] \end{cases}$$

A partir de barreiras como essa são criadas super-redes finitas ou infinitas para o estudo de suas propriedades eletrônicas, sempre com o intuito de gerar os melhores resultados para que futuras aplicações no meio tecnológico possam melhorar os dispositivos eletrônicos, optoeletrônicos, entre outros.

Aplicando o modelo teórico ao problema de tunelamento através de barreira de velocidade observa-se uma probabilidade de transmissão igual a 1 para $\theta = 0$, independentemente dos valores dos outros parâmetros [33]. Assim como na seção anterior, no caso da barreira de potencial eletrostático, esse efeito é outra manifestação do paradoxo do tunelamento de Klein, desta vez através de uma barreira de velocidade.

3.5 Características das Super-Redes de Grafeno Magnética

Estruturas com barreiras magnéticas em monocamadas de grafeno são elaboradas em certos sistemas através da deposição de fitas ferromagnéticas na superfície de uma camada de grafeno,

onde as mesmas são separadas por uma região não-magnética, conforme mostra a Figura 3.5[7, 8, 3]. Considerando uma super-rede de grafeno magnética para aproximação de um elétron, em que dentro do gauge de Landau, o potencial vetor $\mathbf{A}(x)$ é um arranjo de funções degrau de Heaviside[3]. As excitações de baixa energia envolvendo potenciais vetores e potenciais escalares podem ser descritas através de uma equação de Dirac do tipo,

$$\left[v_F \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(x) \right) + U \sigma_0 \right] \psi = E \psi,$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ são as matrizes de Pauli e σ_0 é a matriz identidade 2×2 . A velocidade de Fermi no grafeno é v_F e o momento dos elétrons no plano (x, y) é $\mathbf{P} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$. U é o potencial elétrico e $\mathbf{A}(x)$ é o potencial vetor com a forma $\mathbf{A}(x) = [0, A_y(x), 0]$. A análise de uma estrutura semelhante a essa será feita com mais detalhes no próximo capítulo com o cálculo da transmissividade usando o método da matriz de transferência.

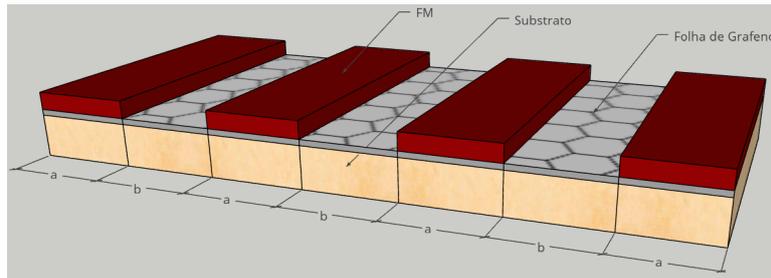


Figura 3.5: Super-rede magnética periódica $a = b$, com barreiras magnéticas originadas por metais ferromagnéticos (FM).

A influência das barreiras magnéticas em monocamadas de grafeno, levaram a resultados muito interessantes, como a dependência angular do coeficiente de transmissão com uma energia fixa para diferentes números de barreiras magnéticas[3], como podemos ver na Figura 3.6. Transformando o problema do grafeno com estruturas magnéticas em uma linha de pesquisa atraente para os pesquisadores, podendo estimular ainda mais o trabalho experimental relacionados a produção de novos dispositivos tecnológicos na área da física de sistemas de baixa dimensionalidade.

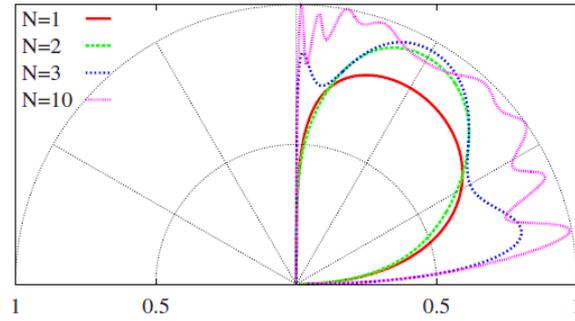


Figura 3.6: Dependência angular da probabilidade de transmissão com energia fixa em 1, através de $N = 1, 2, 3, 10$ barreiras de largura $d_B = 1/N$, mantendo constante o fluxo magnético $\Phi = 1$ e espaçamento entre barreiras de $d_0 = 10$ [3].

Observando a Figura 3.6, percebemos que para os ângulos menor ou igual a zero a probabilidade de transmissão é diferente de zero e quanto maior o número de barreiras maior a probabilidade de transmissão da partícula, proporcionando um resultado diferente dos já estudados, para super-redes com barreiras de características e materiais diferentes.

Algumas alternativas são estudadas para criar métodos para contornar o tunelamento de Klein. Um desses contornos é confinar férmions de Dirac no grafeno através de barreiras magnéticas. De Martino e seu grupo de pesquisa mostraram que para certos ângulos de incidência nenhuma transmissão é possível e curiosamente os ângulos com o maior índice de transmissão são os negativos, mostrando que não há uma simetria no alcance angular da probabilidade de transmissão. Para que esse efeito fosse visualizado, algumas implicações foram postas por eles, onde estão diretamente relacionadas ao comprimento magnético e ao estado de espalhamento que tem características de um elétron. Com os resultados obtidos concluíram que as barreiras magnéticas são capazes de confinar as quasipartículas de Dirac de forma diferente das barreiras de potenciais eletrostáticas[7].

Problemas de transporte de spin através de nanoestruturas magnéticas no grafeno foram estudados, mostrando que um campo não uniforme junto com uma divisão do spin no plano pode produzir um notável efeito de filtragem de spin dependente do vetor de onda, onde por exemplo em um determinado ângulo de incidência a transmissão para partículas de spin up praticamente desaparece, ou alterando as larguras das barreiras também pode ser controlado

esse filtro de spin [37]. O controle e manipulação de spins no grafeno pode levar a uma série de novas aplicações consequentemente novos dispositivos como memórias baseadas em spin ou chips de lógica de spin[38]. O grafeno é especialmente adequado para tais aplicações, uma vez que não apresenta um considerável acoplamento spin-órbita e está quase isento de momentos magnéticos nucleares.

3.6 Vale do Grafeno

Cargas negativas (elétrons), cargas positivas (buracos) e spins são números quânticos bem definidos em sólidos é a base de toda a tecnologia eletrônica atual. Enquanto a eletrônica baseia-se no estudo das cargas elétricas e a spintrônica é uma tecnologia que usa o grau de liberdade do spin, no qual o campo de aplicação da spintrônica foi ampliada pelo desenvolvimento de técnicas como a criação de um dispositivo que gera uma corrente de spin que é detectada por um efeito Hall de spin inverso [13]. Mas a incessante busca por componentes eletrônicos menores e mais rápidos fizeram com que grupos de pesquisa descobrissem que há um outro grau de liberdade em determinados cristais, incluindo o grafeno, que pode oferecer oportunidade de desenvolver aplicações eletrônicas não convencionais. O grau de liberdade do vale, que em cristais é mais específico no grafeno, pode ser controlado pela ocupação das suas bandas(valência, condução) de energia, que são energeticamente degeneradas no nível de Fermi, mas não equivalentes devido sua estrutura cristalina[2].

Com o avanço dos estudos relacionados aos vales, assim como a detecção da corrente de spin, correntes polarizadas pelo vale já foram geradas e detectadas através de um método desenvolvido por Yuya Shimazaki e seu grupo de pesquisa, utilizando-se de uma bicamada de grafeno [14].

O desenvolvimento desse dispositivo poderá ser a porta de entrada para a fabricação de componentes valetrônicos. O esquema para a criação e detecção é mostrado na Figura 3.7. Alguns estudos teóricos focam no efeito de filtragem do vale onde o coeficiente de transmissão

depende do vale e , em geral, elétrons de diferentes vales se propagam ao longo de diferentes caminhos. Essa possibilidade de manipular o índice de vale com a filtragem dos elétrons pelos vales no grafeno, é um dos obstáculos para a viabilização da valetrônica. Vários tipos de filtro de vale são propostos teoricamente por grupos de pesquisas, como por exemplo filtros baseado na dispersão de linhas de defeito encontradas no grafeno[39], estrutura de barreira dupla caracterizada por potenciais elétricos e potenciais vetores podem ser usadas para filtrar os vales [15], e trabalhos com um *gap* de Dirac constante necessitam tanto de uma barreira magnética como de um potencial elétrico para que uma polarização possa ser observada e ajustável por tensões nos *gates* [9].

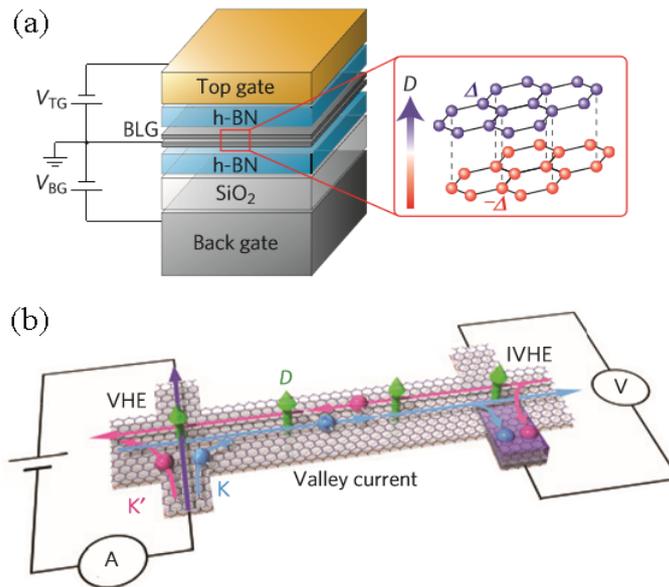


Figura 3.7: (a) Esquema do dispositivo da bicamada de grafeno com duplo *gate*. O *gate* superior é um filme de ouro, e o *gate* inferior é um substrato de silício dopado. Duas camadas de h-BN e um filme de SiO₂ são usados como isolantes. Usando esses *gates*, a densidade de portadores e o campo elétrico perpendicular são variados independentemente. A parte ampliada é a estrutura de rede da bicamada de grafeno. Na presença de um campo elétrico perpendicular, surge uma diferença de energia entre a camada superior e inferior. Portanto, a simetria de inversão espacial é quebrada neste sistema, e tanto a curvatura de Berry como um *gap* de energia surgem. (b) O campo elétrico que conduz a corrente de carga no circuito do lado esquerdo no vale \mathbf{K}' gera uma corrente de vale na direção transversal por meio do efeito Hall de vale (VHE). Esta corrente de vale na direção do vale \mathbf{K} é convertida em um campo elétrico ou tensão não local por meio do efeito Hall de vale inverso (IVHE), onde é detectado a corrente de vale.

3.7 Conclusão

A descrição do processo de montagem das super-redes de grafeno, feita nas seções anteriores, apresenta uma visão geral dos passos necessários para se conseguir um entendimento mais amplo das super-redes de grafeno e assim podermos de fato apresentar a proposta dessa pesquisa, visto que já existem alguns estudos que focam o filtro de vale, como mostrado na seção anterior, mas no nosso caso iremos mostrar outra possibilidade de ajustar esse filtro de vale em uma monocamada de grafeno, que é modulando a velocidade de Fermi. Uma discussão mais aprofundada será apresentada no próximo capítulo.

CAPÍTULO 4

Resultados

4.1 Introdução

O modelo estudado neste trabalho constitui-se em uma estrutura de simples barreira eletromagnética em monocamada de grafeno, onde demonstraremos o modelo analítico utilizado para a realização das análises numéricas do trabalho. Essas análises tem como foco mostrar as propriedades eletrônicas em uma estrutura de super-rede magnética somada com mais algumas constantes, tendo como principal campo de estudo o vale que descreve a energia permitidas dos elétrons pela simetria do cristal, no nosso caso o grafeno, estando localizados nos pontos de Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' . Com o objetivo de contribuir na construção de componentes valetrônicos, capazes de transmitir informações em correntes de vale puras, ou seja, uma corrente na qual os elétrons com o mesmo vale se propagam na mesma direção, levando a informação sem dissipar calor.

4.2 Modelo analítico para o cálculo da transmissão para uma barreira de potencial eletrostático com um potencial vetor criado por um campo magnético externo

Consideramos uma folha de grafeno no plano (x, y) , onde iremos focar nos elétrons próximos aos dos dois pontos de Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' que são descritos por duas equações do tipo-Dirac, onde um *gap* de energia Δ é criado na super-rede através do substrato mostrado na Figura 4.1. Os elétrons de Dirac estão sujeitos a um campo magnético local B perpendicular e um potencial

eletrostático U . O Hamiltoniano que descreve esses elétrons em um dos pontos de Dirac tem a seguinte forma:

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \left[\mathbf{P} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(x) \right] + \tau \Delta \sigma_z + U \sigma_0. \quad (4.1)$$

Usando a Equação(4.1), escrevemos a Equação de Dirac:

$$\left\{ v_f \boldsymbol{\sigma} \left[\mathbf{P} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(x) \right] + \tau \Delta \sigma_z + U \sigma_0 \right\} \Psi_{\pm} = E \Psi_{\pm}, \quad (4.2)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli e σ_0 é a matriz identidade, que atuam no espaço das sub-redes A e B, dado por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

os vales $\tau = \pm 1$ nos respectivos pontos \mathbf{K} e \mathbf{K}' são resolvidos pelos spinors $\Psi_+ = (\Psi_A, \Psi_B)^T$ e $\Psi_- = (\Psi'_A, -\Psi'_B)^T$, que estão relacionados aos vales. A velocidade de Fermi no grafeno nesse caso vale $v_F = 0.8 \times 10^6 \text{m/s}$, o momento dos elétrons no plano (x, y) é $\mathbf{P} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y)$ e o potencial vetor magnético $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ será representado pelo Gauge de Landau $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = (0, A_y, 0)$. Para simplificar e evitar futuros erros numéricos, daqui em diante todas as quantidades serão expressas em unidades adimensionais por meio da escala de comprimento $l_b = (\hbar/eB_0)^{1/2}$ e escala de energia $E = \hbar v_F/l_b$. Valores típicos dos campos magnéticos locais nas estruturas de barreira produzidos por faixas ferromagnéticas variam até 1T. Para o caso de um campo magnético $B_0 = 0.1 \text{T}$, obtemos $l_b = 81.1 \text{nm}$ e $E = 7.0 \text{meV}$ que definem as escalas de comprimento e energia.

Como há uma invariância translacional ao longo da direção y do momento, as soluções têm a forma de $\Psi(x, y) = \exp(ik_y y) \psi(x)$, reduzimos o problema para uma dimensão. Para darmos continuidade aos cálculos iremos considerar um modelo proposto por Peres[36] onde a velocidade de Fermi v_F passa a depender da posição $v_F(x)$ na Equação (4.2)

$$\left\{ -i\hbar \sqrt{v_F(x)} \sigma_x \partial_x \sqrt{v_F(x)} + \hbar v_F \sigma_y \left[k_y + \frac{e}{\hbar c} A_y(x) \right] + \tau \Delta \sigma_z + U \sigma_0 \right\} \Psi_{\pm} = E \Psi_{\pm}, \quad (4.3)$$

reescrevendo a equação fazendo a seguinte substituição

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{v_F(x)}} \Phi(x),$$

obtemos uma equação com a seguinte forma

$$\left\{ -i\hbar v_F(x) \sigma_x \partial_x v_F(x) + \hbar v_F \sigma_y \left[k_y + \frac{e}{\hbar c} A_y(x) \right] + \tau \Delta \sigma_z + U \sigma_0 \right\} \Phi_B(x) = E \Phi_B(x). \quad (4.4)$$

A partir de agora iremos seguir expressando as quantidades em unidades adimensionais como explicado anteriormente. Então, fazendo algumas manipulações matemáticas, escrevemos a equação de Dirac na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} U + \tau \Delta - E & -i\partial_x - i[k_y + A_y(x)] \\ -i\partial_x + i[k_y + A_y(x)] & U - \tau \Delta - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_A(x) \\ \Phi_B(x) \end{pmatrix} = 0. \quad (4.5)$$

4.2.1 Estrutura da Barreira

A barreira eletromagnética desse caso é descrita por duas funções degrau de Heaviside, dentro da faixa de $0 < x < L$.

$$B(r) = B_s \Theta(x) \Theta(L - x)$$

$$U(r) = U_s \Theta(x) \Theta(L - x)$$

O perfil magnético do potencial vetor consiste em uma barreira magnética de altura $B_s L$, onde L é a largura das regiões magnéticas conforme ilustrado na Figura 4.1, logo, o potencial vetor usado no problema para uma barreira é dado por:

$$A_y(x) = \begin{cases} -\frac{B_s L}{2}; & x \in [-\infty, 0] \\ B_s x - \frac{B_s L}{2}; & x \in [0, L] \\ \frac{B_s L}{2}; & x \in [L, \infty] \end{cases}.$$

Nesse trabalho, escolhemos uma barreira eletromagnética para a nossa investigação, com o intuito de tornar os cálculos mais simples. O Gauge de Landau foi adotado por ter uma característica de dar liberdade na escolha do potencial vetor para um dado campo magnético.

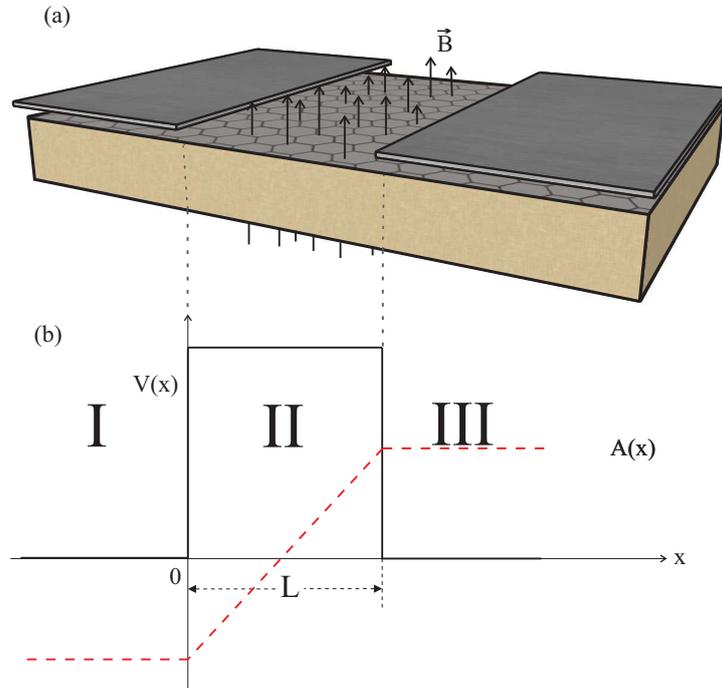


Figura 4.1: (a) Esquema que mostra uma monocamada de grafeno em substrato, onde a velocidade dos elétrons é modulada por um potencial induzido pelas placas metálicas, com um campo magnético aplicado na região sem as placas metálicas (b) Em linhas contínuas na cor preta está representado a barreira de potencial escalar $V(x)$ de largura L e em linhas tracejadas na cor vermelha o potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{x})$.

4.2.2 Soluções da equação de Dirac para as regiões da barreira

Através da equação de Dirac na forma matricial, obtemos duas equações acopladas

$$\{-i\partial_x - i[k_y + A_y(x)]\}\Phi_B(x) + (U + \tau\Delta)\Phi_A(x) = E\Phi_A(x) \quad (4.6)$$

e

$$\{-i\partial_x + i[k_y + A_y(x)]\}\Phi_A(x) + (U - \tau\Delta)\Phi_B(x) = E\Phi_B(x). \quad (4.7)$$

Isolando o spinor Φ_A e o Φ_B da equações acopladas, encontramos a seguinte equação diferencial que irá ser utilizada para determinar as soluções das funções de onda correspondente a cada região da barreira

$$\partial_x^2 \Phi_A + \Phi_A \{(U - E)^2 - (\tau\Delta)^2 - \partial_x A_y(x) + [k_y + A_y(x)]^2\} = 0 \quad (4.8)$$

$$\partial_x^2 \Phi_A + k_x \Phi_A = 0.$$

Solução para a região I

Como na região I se trata de uma partícula livre, a solução é dada por uma onda plana, logo a solução para a função de onda Φ_A na região I é

$$\Phi_A(x) = Ae^{ik_{x_I}x} + Be^{-ik_{x_I}x}, \quad (4.9)$$

com $k_{x_I} = \sqrt{(U - E)^2 - (\tau\Delta)^2 + \partial_x A_{y_I}(x) + [k_y + A_{y_I}(x)]^2}$. Substituindo a Equação(4.9) em (4.7) encontramos a solução para o spinor Φ_B

$$\Phi_B = A \left\{ \frac{k_{x_I} + i[k_y + A_{y_I}(x)]}{(E + \tau\Delta - U)} \right\} e^{ik_{x_I}x} + B \left\{ \frac{-k_{x_I} + i[k_y + A_{y_I}(x)]}{(E + \tau\Delta - U)} \right\} e^{-ik_{x_I}x}. \quad (4.10)$$

Após relacionar as componentes dos spinors Φ_A com Φ_B e lembrando que $A_{y_I}(x) = -B_s L/2$, escrevemos de forma compacta a solução da função de onda na região I

$$\Phi(x) = \Omega_I(x) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix},$$

onde:

$$\Omega_I(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_{xI}x} & e^{-ik_{xI}x} \\ \frac{k_{xI} + i\left(k_y - \frac{B_s L}{2}\right)}{(E + \tau\Delta - U)} e^{ik_{xI}x} & \frac{-k_{xI} + i\left(k_y - \frac{B_s L}{2}\right)}{(E + \tau\Delta - U)} e^{-ik_{xI}x} \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Solução para a região III

O mesmo método realizado na obtenção da solução na região I será realizado para a região III, visto que as duas são do tipo ondas planas.

$$\Phi_A(x) = F e^{ik_{xIII}x} + G e^{-ik_{xIII}x}, \quad (4.12)$$

com $k_{xIII} = \sqrt{(U - E)^2 - (\tau\Delta)^2 + \partial_x A_{yIII}(x) + [k_y + A_{yIII}(x)]^2}$. Substituindo a Equação(4.12) em (4.7) encontramos a solução para o spinor Φ_B

$$\Phi_B = F \left\{ \frac{k_{xIII} + i[k_y + A_{yIII}(x)]}{(E + \tau\Delta - U)} \right\} e^{ik_{xIII}x} + G \left\{ \frac{-k_{xIII} + i[k_y + A_{yIII}(x)]}{(E + \tau\Delta - U)} \right\} e^{-ik_{xIII}x}. \quad (4.13)$$

Após relacionar as componentes dos spinors Φ_A com Φ_B . Lembrando que $A_{yIII}(x) = B_s L/2$, escrevemos de forma compacta a solução da função de onda na região III

$$\Phi(x) = \Omega_{III}(x) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix},$$

onde

$$\Omega_{III}(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_{xIII}x} & e^{-ik_{xIII}x} \\ \frac{k_{xIII} + i\left(k_y + \frac{B_s L}{2}\right)}{(E + \tau\Delta - U)} e^{ik_{xIII}x} & \frac{-k_{xIII} + i\left(k_y + \frac{B_s L}{2}\right)}{(E + \tau\Delta - U)} e^{-ik_{xIII}x} \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Solução para a região II

A solução na região da barreira é escrita em termos de funções parabólicas cilíndricas que também podem ser chamadas de funções Weber. Essas funções são definidas por Whittaker

e Watson [40] como soluções para a equação diferencial de Weber. A solução tem a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} \Phi_A(x) \\ \Phi_B(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C D_p(q) + D D_p(-q) \\ V D_{p+1}(q) + T D_{p+1}(-q) \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Tendo em vista que a escala de energia é dependente da velocidade de Fermi, para fora da barreira chamaremos a velocidade de Fermi de v_{F1} e para a região da barreira de v_{F2} , logo a energia dentro da barreira terá uma dependência v_{F2}/v_{F1} que chamaremos de ζ . Do mesmo modo que fizemos para a região fora, iremos fazer para a região dentro da barreira, mas agora iremos substituir a Equação(4.15) em (4.5) para encontrar a relação entre as componentes spinor inferior e superior para a região dentro da barreira. Mantendo a metodologia das outras regiões escreveremos a solução de forma compacta para a região II

$$\Phi(x) = \Omega_b(x) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

onde

$$\Omega_b(x) = \begin{pmatrix} D_p(q) & D_p(-q) \\ i \frac{\sqrt{2B_s}}{U - \tau\Delta - E\zeta} D_{p+1}(q) & -i \frac{\sqrt{2B_s}}{U - \tau\Delta - E\zeta} D_{p+1}(-q) \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

com

$$p = \frac{[(E - U)^2 - (\tau\Delta)^2]}{2B_s} - 1, \quad q = \sqrt{\frac{2}{B_s}} \left(B_s x - \frac{B_s L}{2} - k_y \right). \quad (4.17)$$

4.2.3 Método da Matriz Transferência Para Uma Monocamada de Grafeno

Usaremos o método matriz de transferência para calcular a probabilidade de transmissão, utilizando a solução para cada região em termos dos spinors, podemos analisar a continuidade da função de onda nos pontos $x=0$ e $x=L$, com isso escrevemos a matriz transferência.

Retomando os cálculos usando $\Psi(x)$ fazendo a substituição $\Phi(x) = \sqrt{v_f}\Psi(x)$, escrevemos a solução em cada região:

$$\begin{aligned} \text{Região I} \quad \Psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{v_{F1}}}\Omega_I(x) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \\ \text{Região II} \quad \Psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{v_{F2}}}\Omega_{II}(x) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \\ \text{Região III} \quad \Psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{v_{F1}}}\Omega_{III}(x) \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Utilizando-se da continuidade nos pontos $x = 0$ e $x = L$ da barreira, a relação obtida em $x = 0$ é:

$$\frac{1}{\sqrt{v_{F1}}}\Omega_I(0) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{v_{F2}}}\Omega_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

Logo

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{v_{F1}}}{\sqrt{v_{F2}}}\Omega_I^{-1}(0)\Omega_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Sabendo que na região III temos apenas onda transmitida, concluímos que o termo G é igual a zero. Em $x = L$ escrevemos:

$$\frac{1}{\sqrt{v_{F2}}}\Omega_{II}(L) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{v_{F1}}}\Omega_{III}(L) \begin{pmatrix} F \\ G = 0 \end{pmatrix}$$

Logo

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{v_{F2}}}{\sqrt{v_{F1}}} \Omega_{II}^{-1}(L) \Omega_{III}(L) \begin{pmatrix} F \\ G=0 \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

Substituindo a Equação(4.19) em (4.18), obtemos a matriz transferência.

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \Omega_I^{-1}(0) \Omega_{II}(0) \Omega_{II}^{-1}(L) \Omega_{III}(L) \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Portanto a matriz transferência \hat{T} é dada por:

$$\hat{T} = \Omega_I^{-1}(0) \Omega_{II}(0) \Omega_{II}^{-1}(L) \Omega_{III}(L). \quad (4.21)$$

4.2.4 Probabilidade de Transmissão Para Uma Barreira Eletro-Magnética

Os coeficientes A e F, são respectivamente, a amplitude de onda incidente e amplitude de transmissão. A matriz de transferência é uma matriz 2 x 2, possuindo a seguinte estrutura:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

A probabilidade de transmissão é dada pela razão

$$\tau = \frac{|F|^2}{|A|^2}. \quad (4.23)$$

Determinando a constante F através das equações (4.20) e (4.22), obtemos:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix},$$

logo

$$F = \sqrt{\frac{k_{xIII}}{k_{xI}}} \frac{1}{t_{11}}, \quad (4.24)$$

o fator $\sqrt{k_{xIII}/k_{xI}}$ garante a normalização adequada da corrente de probabilidade. Considerando que a constante A na região I equivale a 100% da onda incidente na barreira, logo A é igual a 1. Substituindo a Equação(4.24) em (4.23), obtemos a probabilidade de transmissão:

$$\begin{aligned} \tau &= \left| \sqrt{\frac{k_{xIII}}{k_{xI}}} \frac{1}{t_{11}} \right|^2, \\ \tau &= \frac{k_{xIII}}{k_{xI}} \frac{1}{t_{11}^2}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

4.3 Resultados Numéricos: Análises e Discussões

Nessa seção iremos discutir os resultados numéricos obtidos das expressões analíticas para a probabilidade de transmissão dos portadores em uma barreira de potencial eletromagnética em monocamada de grafeno, utilizando o método matriz de transferência. De maneira sucinta, esta técnica consiste em relacionar os coeficientes das ondas que incidem nas interfaces da barreira com o coeficiente das ondas que são refletidas. O método de matriz de transferência é exemplificado didaticamente no problema 2.53 do livro de Mecânica Quântica de David J. Griffiths [41]. Considerando o nosso caso, onde os portadores de carga nessas estruturas são descritas como férmions sem massa representados pela equação de Dirac, algumas diferenças em relação a resultados obtidos por trabalhos que usam barreiras de potencial escalar serão colocadas nesta seção.

Antes de prosseguir e mostrar os gráficos dos resultados, podemos impor uma condição simples e geral para que a transmissão não desapareça em determinados ângulos de incidência. Com isso é conveniente parametrizar o momento nas regiões da esquerda e da direita da barreira, respectivamente, em termos dos ângulos de incidência e de saída, ϕ_i e ϕ_s ,

$$\begin{aligned} k_{x_i} &= E \cos \phi_i, & k_{y_i} &= E \sin \phi_i - \frac{B_s L}{2}, \\ k_{x_s} &= E \cos \phi_s, & k_{y_s} &= E \sin \phi_s + \frac{B_s L}{2}. \end{aligned}$$

O ângulo de saída ϕ_s é obtido através da conservação de k_y

$$\begin{aligned} k_{y_i} &= k_{y_s} \\ \sin \phi_i &= \sin \phi_s - \frac{\Phi}{E}, \end{aligned} \quad (4.26)$$

A quantidade $\Phi = B_s L$ é o fluxo magnético total através da estrutura por unidade de comprimento na direção y . Essa invariância mostrada na Equação(4.26) implica que a transmissão através da estrutura só é possível se

$$\left| \sin \phi_i + \frac{\Phi}{E} \right| \leq 1,$$

isso implica dizer que se a razão entre o fluxo magnético com a energia for maior que 1, não há transmissão. A transmissão também pode ser controlada através da energia ou do fluxo magnético de acordo com o ângulo de saída.

Como mencionado no início do capítulo simplificamos todas as quantidades utilizadas nos cálculos e foram expressas em unidades adimensionais por meio da escala de comprimento $l_b = (\hbar/eB_s)^{1/2}$ e escala de energia $E = \hbar v_F/l_b$, assim evitando erros numéricos. Mas, o objetivo da pesquisa era analisar como a modulação da velocidade de Fermi iria interferir no nosso sistema, então precisaríamos inserir valores nas velocidades de Fermi nos nossos cálculos. Observando a escala de energia percebemos que a energia tem uma dependência direta com a velocidade de Fermi, então pensamos em uma maneira de utilizar essa dependência para variar a velocidade de Fermi mesmo trabalhando com o problema sem dimensões. O método foi multiplicar um termo ζ que é igual a v_{F_2}/v_{F_1} no termo da energia que aparece na solução da função de onda da

região II(barreira), onde variando a velocidade de Fermi estaríamos aumentando ou diminuindo a energia, assim deixamos o problema adimensional e plotamos alguns gráficos que mostram a transmitância para alguns casos específicos.

Os gráficos superiores da Figura 4.2 mostram a transmissão através de uma barreira eletromagnética em função do vetor de onda transversal k_y . Esses gráficos mostram a transmissão para todos os ângulos de incidência. É representado nos gráficos inferiores a transmissão em função da variação da velocidade de Fermi para elétrons que incidem na barreira com uma energia constante de 7, para os vales \mathbf{K} e \mathbf{K}' . As linhas contínuas dos gráficos superiores são a reprodução dos resultados obtidos por Zhai e seu grupo de pesquisa[9] usando a velocidade de Fermi constante. As linhas tracejadas mostram o quanto a polarização da transmissão dos elétrons nos vales podem ser aperfeiçoadas de acordo com a modulação da velocidade de Fermi ζ . Como exemplo podemos observar o caso em que $\zeta = 1.6$, de acordo com o aumento do campo magnético os picos vão estreitando e a polarização nos vales que podemos distinguir pela cor vermelha e azul entorno de $k_y = 0$, vai se aproximando de uma polarização perfeita, onde a transmissão é 100% para um vale e zero para o outro.

Os gráficos inferiores da Figura 4.2 foram plotados com $k_y = 0$, visto que nesse ponto concentram-se os melhores resultados para a probabilidade de transmissão. Nesses gráficos temos uma melhor visualização da transmitância em função da modulação da energia de Fermi ζ . Os gráficos mostram que com o aumento do campo os picos da oscilação do vale \mathbf{K} tendem a coincidirem com as depressões da oscilação do vale \mathbf{K}' e vice-versa, também podemos observar que no intervalo $1,7 \leq \zeta \leq 2,7$, mesmo com o aumento do campo magnético a probabilidade de transmissão é zero para todos os casos, gerando filtros de vale perfeitos nas extremidades do intervalo que coincide exatamente nas regiões dos gráficos onde a velocidade de Fermi é modulada.

Na Figura 4.3 mostramos os efeitos da variação da energia na transmissividade com um campo magnético constante de valor 3. Como na análise anterior, os gráficos superiores mostra a transmissão através de uma barreira eletromagnética em função do vetor de onda transversal k_y e nos gráficos inferiores a transmissão em função da variação da velocidade de Fermi para

elétrons que incidem na barreira eletromagnética, para os vales \mathbf{K} e \mathbf{K}' também representados pelas cores azul e vermelho respectivamente.

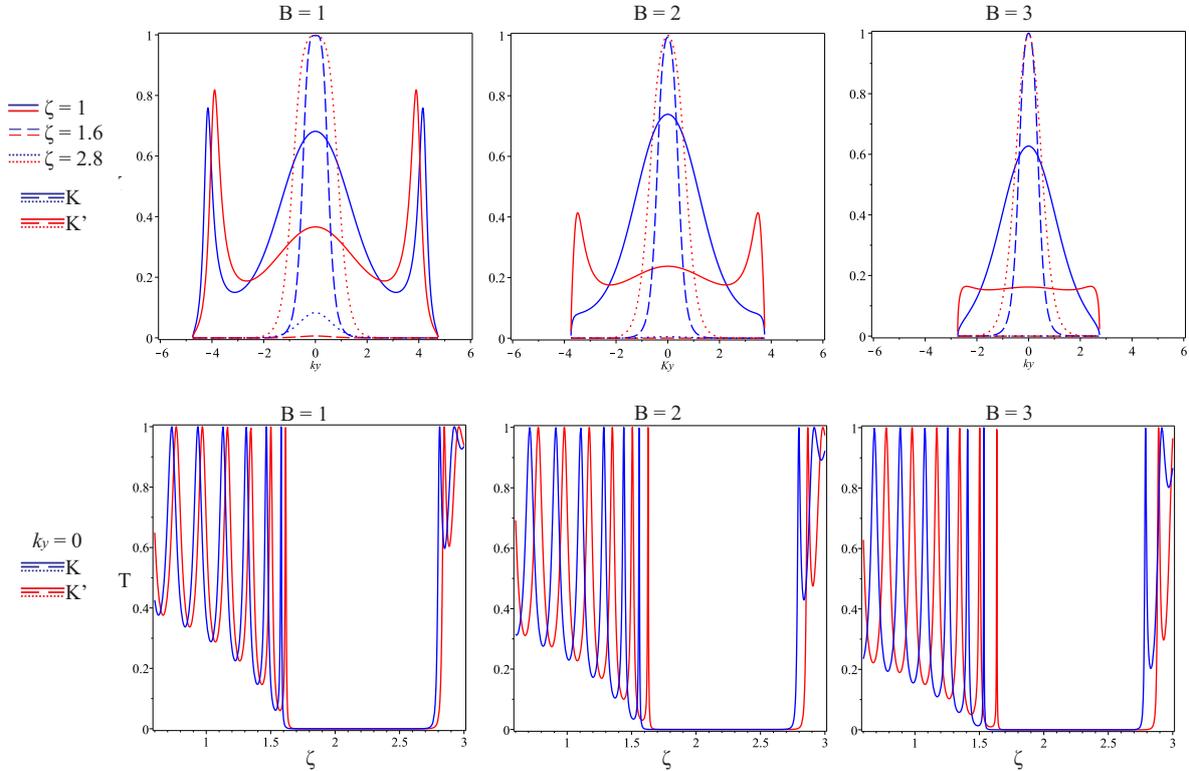


Figura 4.2: Essa imagem descreve três casos distintos, onde a energia de incidência dos portadores na barreira é fixada em 7 e o campo magnético é variado. Nos gráfico superiores $\zeta = 1, 1.6, 2.8$ e no caso inferior $k_y = 0$. Em todos os gráficos os vales \mathbf{K} e \mathbf{K}' são representados pela cor azul e vermelho, respectivamente.

Podemos observar nesses gráficos comportamentos diferentes do caso anterior, onde nos gráficos que as energias são $E = 15.5$ e $E = 19$ as linhas contínuas que representam a velocidade de Fermi constante desaparece e o intervalo da transmissão para a velocidade de Fermi variando aumenta nesses casos, comprovando a condição de conservação de k_y colocada na Equação (4.26), onde com o aumento da energia, o fluxo magnético Φ diminui e os ângulos de incidência aumenta, podemos observar também que é possível durante praticamente todo o intervalo colocar a transmissão nos dois vales pra ser igual a 1 ou caso contrário colocar os dois para ser igual a zero só com a modulação da velocidade de Fermi. Nos gráficos inferiores

observamos melhor a transmitância em função de ζ entorno de k_y , os pontos com transmitância zero para os dois vales dessa vez não é mais no mesmo intervalo diferenciado do caso anterior Figura 4.2, há geração de filtros de vales perfeitos e também intervalos em que a transmissão é 100% para os dois vales com a modulação da velocidade de Fermi.

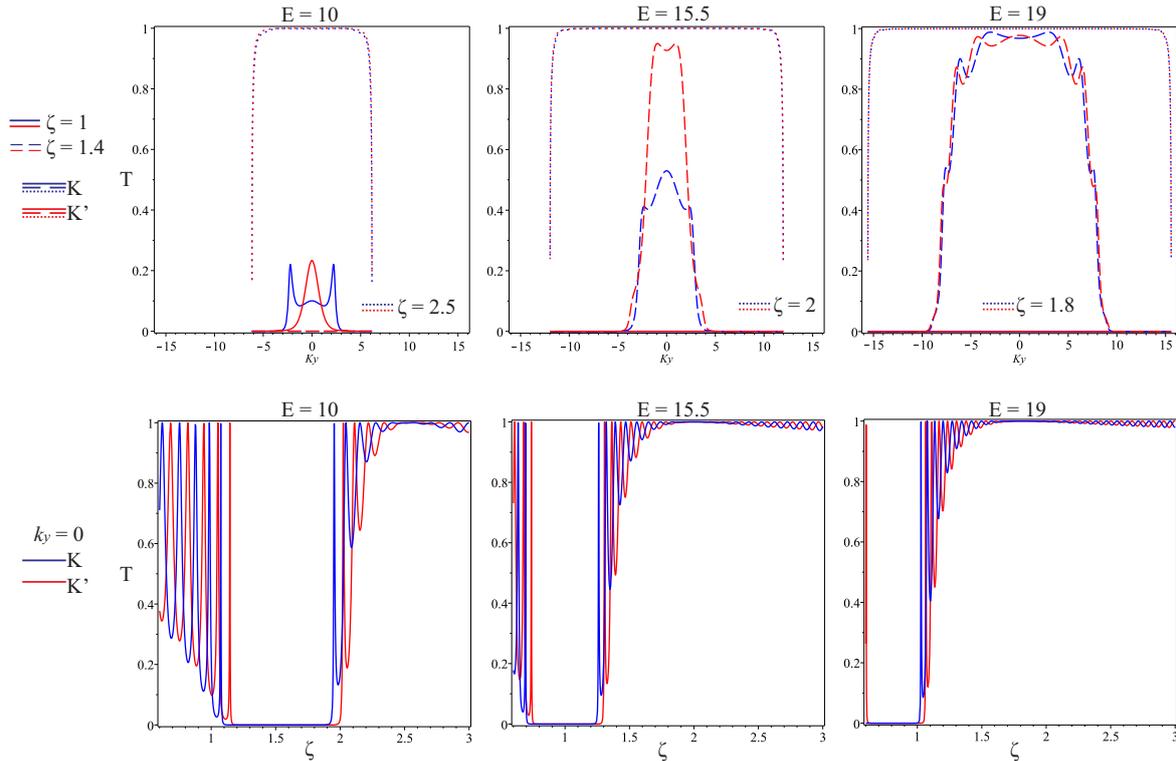


Figura 4.3: Essa imagem descreve três casos com energia de incidência dos portadores na barreira distintas com campo magnético fixado em 3.

Analisamos também a transmissão em função da energia e do ângulo de incidência como mostramos nos gráficos na Figura 4.4. Um fato interessante está relacionado ao ângulo de incidência dos elétrons. Ao se trabalhar com barreiras de potenciais eletrostáticos, se incidirmos elétrons na direção normal e mudarmos essa incidência para ângulos maiores ou menores os resultados das propriedades estudadas serão os mesmos, mas no caso com barreiras magnéticas isso não é verdade. O ângulo maior ou menor influencia no resultado, como mostra a Figura 4.4, observamos nos gráficos que a grande maioria dos ângulos de incidência são negativos.

Como vimos no capítulo anterior expandimos a equação de Dirac em torno de um dos

pontos de Dirac \mathbf{K} e \mathbf{K}' e resolvemos a equação para o ponto escolhido nas super-redes com barreiras de potenciais escalares não importa a escolha do ponto do ponto de Dirac o resultado será o mesmo, que na mecânica quântica chama-se de degenerescência, que é exatamente essa coincidência dos valores em cada vale.

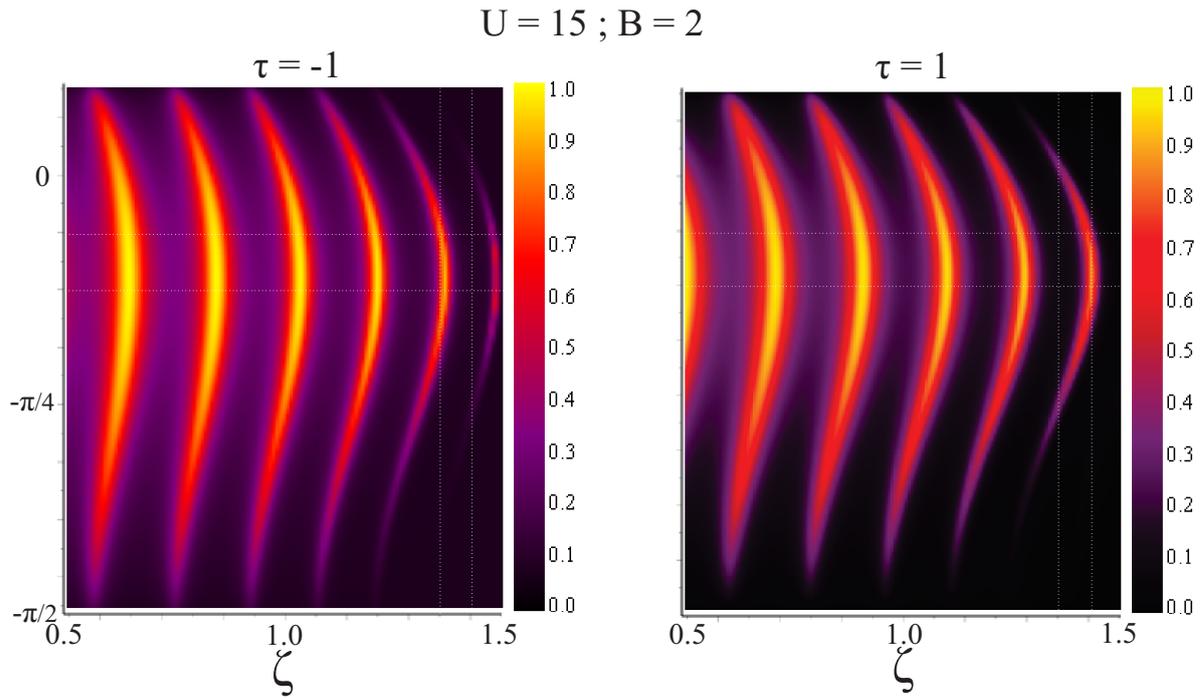


Figura 4.4: Gráficos que representam a transmissão de acordo com a barra de cores que varia de 0 (preto) a 100% (amarelo), em função da energia e do ângulo de incidência, com $B = 2$ (campo magnético) e $U = 15$ (potencial eletrostático). $-\tau$ e τ são os vales.

Ao realizar os mesmos cálculos para barreiras magnéticas somadas com *gap* e um potencial elétrico como mostra a Equação (4.5), conseguimos mostrar que há uma quebra de degenerescência do vale, pois ao resolver os cálculos do coeficiente de transmissão para os vales notamos que temos resultados diferentes, como mostra a Figura 4.4, os gráficos mostram que ao modificar a velocidade de Fermi podemos controlar a transmissão, observando o encontro das linhas pontilhas em branco no gráfico do vale $-\tau$, por exemplo, as linhas se cruzam em uma região preta onde a transmissão é igual a zero, realizando os mesmos cálculos para o vale τ e analisando o mesmo ponto a probabilidade de transmissão é 100%. Portanto, esses resultados

levam a criação de filtros de vale que tem implicações diretas com a valetrônica, que assim como na eletrônica que é baseada na corrente elétrica e a spintrônica que controla o spin do elétron, no grafeno e em outros materiais existe a valetrônica onde há um controle dos vales, por exemplo em um vale passa elétrons e em outro não, formando assim uma corrente de vales. A polarização pelos vales é obtida quando elétrons em um vale são separados espacialmente dos elétrons do outro vale. Isto é difícil devido os pontos de Dirac terem a mesma energia, com isso podemos mostrar a relevância desse trabalho.

4.4 Conclusão

Apresentamos um modelo teórico baseado no estudo de algumas propriedades no vale do grafeno, onde novos resultados foram obtidos ajudando no crescimento do campo de pesquisa relacionado a valetrônica e possivelmente com a exposição da ideia possa ajudar na construção de componentes valetrônicos para o melhoramento dos dispositivos tecnológicos, como por exemplo, aumentando a velocidade de leitura e escrita nos discos rígidos, ajudar no avanço das memórias de computadores, entre outras aplicações.

Considerações Finais

Neste trabalho apresentamos uma síntese das características estruturais e eletrônicas dos materiais que tem como base o átomo de carbono, focamos no grafeno que é um cristal formado só de carbono, onde mostramos a teoria de férmions de Dirac no grafeno, que foi detalhadamente discutida através do modelo de ligação forte (tight-binding), cuja solução próximo aos pontos de Dirac em uma rede hexagonal leva à uma descrição de férmions de Dirac sem massa.

Foi feito um resumo de como algumas super-redes de grafeno são formadas e expomos algumas características próprias de cada super-rede, em especial para estruturas de simples barreira magnética em monocamada de Grafeno, pois foi a estrutura utilizada na pesquisa, onde usamos o formalismo de Dirac auxiliado pela técnica da matriz de transferência e através deste método conseguimos alguns resultados satisfatórios. O desenvolvimento desse estudo possibilitou uma análise de como a modulação da velocidade de Fermi interfere nas propriedades eletrônicas dos vales do grafeno, que está localizado na primeira zona de Brillouin da rede recíproca do grafeno. Estudos analíticos seguidos de estudos numéricos conseguiram mostrar que a modulação da velocidade de Fermi juntamente com outros parâmetros, como por exemplo, campo magnético externo, gap de energia, potenciais eletrostáticos, podem interferir principalmente na degenerescência energética, probabilidade de transmissão e confinamento de elétrons, nos vales da monocamada de grafeno.

Com auxílio de gráficos fizemos uma análise dos resultados mais detalhada no capítulo 4. As super-redes magnéticas, mostraram ser uma estrutura que ajudará bastante no crescimento do campo de estudo da valetrônica, capazes de quebrar a degenerescência dos vales podendo ser criados filtros de vales perfeitos com a modulação da velocidade de Fermi através das placas metálicas postas na superfície da camada de grafeno. Mostramos também a eficiência na incidência de portadores de cargas, com ângulos abaixo da incidência normal com a barreira,

na probabilidade de transmissão, e a capacidade de que essas estruturas tem em confinar os portadores de carga, fazendo oposição com o tunelamento de Klein em barreiras eletrostáticas.

Nosso trabalho pode ajudar a inclusão do grafeno nas pesquisas relacionados a valetrônica e possivelmente no desenvolvimento tecnológico, que é o grande objetivo de alguns estudos do grafeno.

Referências Bibliográficas

- [1] R. Sengupta, M. Bhattacharya, S. Bandyopadhyay, and A. K. Bhowmick, “A review on the mechanical and electrical properties of graphite and modified graphite reinforced polymer composites,” *Progress in polymer science*, vol. 36, no. 5, pp. 638–670, 2011. xii, 6, 7
- [2] A. C. Neto, F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Reviews of modern physics*, vol. 81, no. 1, p. 109, 2009. xiii, 2, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 24, 30
- [3] L. Dell’Anna and A. De Martino, “Multiple magnetic barriers in graphene,” *Physical Review B*, vol. 79, no. 4, p. 045420, 2009. xiv, 2, 21, 28, 29
- [4] J. D. Martin, “What’s in a name change?,” *Physics in Perspective*, vol. 17, no. 1, pp. 3–32, 2015. 1
- [5] P. R. Wallace, “The band theory of graphite,” *Phys. Rev.*, vol. 71, pp. 622–634, May 1947. 1, 7
- [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, “Electric field effect in atomically thin carbon films,” *science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666–669, 2004. 1, 7, 8, 19
- [7] A. De Martino, L. Dell’Anna, and R. Egger, “Magnetic confinement of massless dirac fermions in graphene,” *Physical review letters*, vol. 98, no. 6, p. 066802, 2007. 2, 21, 28, 29

- [8] M. R. Masir, P. Vasilopoulos, and F. Peeters, “Tunneling, conductance, and wavevector filtering through magnetic barriers in bilayer graphene,” *Physical Review B*, vol. 79, no. 3, p. 035409, 2009. 2, 21, 28
- [9] F. Zhai and K. Chang, “Valley filtering in graphene with a dirac gap,” *Physical Review B*, vol. 85, no. 15, p. 155415, 2012. 2, 21, 31, 44
- [10] G. Maksimova, E. Azarova, A. Telezhnikov, and V. Burdov, “Graphene superlattice with periodically modulated dirac gap,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 20, p. 205422, 2012. 2, 21
- [11] J. R. Lima, “Electronic structure of a graphene superlattice with a modulated fermi velocity,” *Physics Letters A*, vol. 379, no. 20-21, pp. 1372–1376, 2015. 2, 21, 26
- [12] P. A. Dirac, “The quantum theory of the electron,” *Proc. R. Soc. Lond. A*, vol. 117, no. 778, pp. 610–624, 1928. 2, 14
- [13] T. Jungwirth, J. Wunderlich, and K. Olejník, “Spin hall effect devices,” *Nature materials*, vol. 11, no. 5, p. 382, 2012. 2, 30
- [14] Y. Shimazaki, M. Yamamoto, I. V. Borzenets, K. Watanabe, T. Taniguchi, and S. Tarucha, “Generation and detection of pure valley current by electrically induced berry curvature in bilayer graphene,” *Nature Physics*, vol. 11, no. 12, p. 1032, 2015. 2, 30
- [15] D. Moldovan, M. R. Masir, L. Covaci, and F. Peeters, “Resonant valley filtering of massive dirac electrons,” *Physical Review B*, vol. 86, no. 11, p. 115431, 2012. 2, 31
- [16] A. J. Roche, “Kekulé, butlerov, and the historiography of the theory of chemical structure,” *The British Journal for the History of Science*, vol. 14, no. 1, pp. 27–57, 1981. 4
- [17] T. L. Brown, *Chemistry: the central science*. Pearson Education, 2009. 5

- [18] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, “Solid state physics (saunders college, philadelphia, 1976),” *Google Scholar*, p. 461, 2010. 9, 10
- [19] C. Dartora, M. J. S. Jimenez, and F. Zanella, “Os fundamentos da física dos férmions de dirac sem massa em $(1+2)$ -d e o grafeno,” *Revista Brasileira de Ensino de Física*, vol. 37, no. 3, p. 3301, 2015. 11
- [20] P. R. Wallace, “The band theory of graphite,” *Physical Review*, vol. 71, no. 9, p. 622, 1947. 13
- [21] O. Klein, “Elektrodynamik und wellenmechanik vom standpunkt des korrespondenzprinzips,” *Zeitschrift für Physik A Hadrons and nuclei*, vol. 41, no. 6-7, pp. 407–442, 1927. 14
- [22] W. Gordon, “Der comptoneffekt nach der schrödingerschen theorie,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 40, no. 1-2, pp. 117–133, 1926. 14
- [23] W. Greiner *et al.*, *Relativistic quantum mechanics*, vol. 3. Springer, 1990. 14
- [24] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “The rise of graphene,” *Nature materials*, vol. 6, no. 3, p. 183, 2007. 19
- [25] T. Araújo and J. R. Lima, “Periodic to quasi-periodic graphene superlattice transition by fermi velocity modulation,” *Physics Letters A*, vol. 381, no. 37, pp. 3228–3235, 2017. 21, 26
- [26] A. Sasaki, “Disordered superlattices,” *Materials Science and Engineering: B*, vol. 35, no. 1, pp. 278 – 283, 1995. Proceedings of The First International Conference on Low Dimensional Structures and Devices. 21
- [27] E. L. Albuquerque and M. G. Cottam, *Polaritons in periodic and quasiperiodic structures*. Elsevier, 2004. 22

- [28] L. L. Chang and K. Ploog, *Molecular beam epitaxy and heterostructures*, vol. 87. Springer Science & Business Media, 2012. 22
- [29] T. Ma, C. Liang, L.-G. Wang, and H.-Q. Lin, “Electronic band gaps and transport in aperiodic graphene superlattices of thue-morse sequence,” *Applied Physics Letters*, vol. 100, no. 25, p. 252402, 2012. 22
- [30] M. Katsnelson, K. Novoselov, and A. Geim, “Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene,” *Nature physics*, vol. 2, no. 9, p. 620, 2006. 24
- [31] C. Bai and X. Zhang, “Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice,” *Physical Review B*, vol. 76, no. 7, p. 075430, 2007. 24, 25
- [32] X.-X. Guo, D. Liu, and Y.-X. Li, “Conductance and shot noise in graphene superlattice,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 24, p. 242101, 2011. 25
- [33] P. Krstajić and P. Vasilopoulos, “Ballistic transport through graphene nanostructures of velocity and potential barriers,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 23, no. 13, p. 135302, 2011. 25, 27
- [34] M. Sattari-Esfahlan and S. Shojaei, “Engineering of electronic transmission in novel graphene super lattice by the means of dirac gap and fermi velocity,” 2017. 25
- [35] C. Attacalite and A. Rubio, “Fermi velocity renormalization in doped graphene,” *physica status solidi (b)*, vol. 246, no. 11-12, pp. 2523–2526, 2009. 26
- [36] N. Peres, “Scattering in one-dimensional heterostructures described by the dirac equation,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 21, no. 9, p. 095501, 2009. 26, 34
- [37] L. Dell’Anna and A. De Martino, “Wave-vector-dependent spin filtering and spin transport through magnetic barriers in graphene,” *Physical Review B*, vol. 80, no. 15, p. 155416, 2009. 30

- [38] N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. Van Wees, “Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature,” *Nature*, vol. 448, no. 7153, p. 571, 2007. 30
- [39] D. Gunlycke and C. T. White, “Graphene valley filter using a line defect,” *Physical Review Letters*, vol. 106, no. 13, p. 136806, 2011. 31
- [40] E. T. Whittaker, *A Course of Modern Analysis: An Introduction to the General Theory of Infinite Series and of Analytic Functions, with an Account of the Principal Transcendental Functions*. University Press, 1902. 39
- [41] D. J. Griffiths and L. Freitas, *Mecânica quântica*. Pearson Prentice Hall, 2011. 42