



Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Departamento de Física

Estudo teórico dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi no transporte eletrônico em super-redes magnéticas de grafeno.

Ícaro Samir Feijão Bezerra

Recife-PE, Fevereiro de 2020



Ícaro Samir Feijão Bezerra

**Estudo teórico dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi no transporte eletrônico em super-redes magnéticas de grafeno.**

**Dissertação de Mestrado** apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada da UFRPE, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Mestre em Física Aplicada.

Universidade Federal Rural de Pernambuco - UFRPE

Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Orientador: Jonas Romero Fonseca de Lima

Recife-PE

Fevereiro de 2020

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal Rural de Pernambuco  
Sistema Integrado de Bibliotecas  
Gerada automaticamente, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

B574e

Feijão Bezerra, Icaro Samir

Estudo teórico dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi no transporte eletrônico em super-redes magnéticas de grafeno. / Icaro Samir Feijão Bezerra. - 2020.  
61 f.

Orientador: Jonas Romero Fonseca de Lima.  
Inclui referências.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, 2020.

1. Grafeno. 2. Velocidade de Fermi. 3. Transporte eletrônico. 4. Sistemas de baixa dimensionalidade. 5. Física. I. Lima, Jonas Romero Fonseca de, orient. II. Título

CDD 621

---

Ícaro Samir Feijão Bezerra

**Estudo teórico dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi no transporte eletrônico em super-redes magnéticas de grafeno.**

**Dissertação de Mestrado** apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada da UFRPE, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de Mestre em Física Aplicada.

---

**Jonas Romero Fonseca de Lima**  
Orientador

---

**Anderson Luiz da Rocha e Barbosa**  
DF-UFRPE

---

**Cristiano Costa Bastos**  
DQ-UFRPE

Recife-PE  
Fevereiro de 2020



*A minha família por sempre estarem comigo em todos os momentos.*





# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a minha família que foi a minha base para chegar até aqui. Em especial, a minha esposa, Daniella, que me apoiou durante toda essa jornada que foi o mestrado.

Agradeço ao meu orientador, Jonas Romero, que me acompanhou desde a Iniciação Científica e pela sua paciência e ajuda nesse período.

Aos meus amigos, Rhimon, Vinícius e Josafary por grandes momentos sentados na calçada em frente ao departamento que servia de grandes momentos de reflexão.

Aos professor do Departamento de Física por todo ensino que foi dado durante esses anos.

E finalmente, à CAPES pelo apoio financeiro para realização deste trabalho de pesquisa.



# Resumo

Com o aparecimento do grafeno, conhecido com o primeiro material totalmente bidimensional, foi proporcionado a área de Física da Matéria Condensada trabalhar verdadeiramente com propriedade de matérias bidimensionais e observar grandes aplicabilidades.

O grafeno gerou um grande interesse dos Físicos por suas propriedades intrigantes, como a capacidade de simular física de altas energias devido aos elétrons poderem ser descritos pela equação de Dirac sem massa e possuir uma dispersão linear, além de prometer uma revolução na eletrônica de alta velocidade.

Neste trabalho apresentamos um estudo sistemático sobre as estruturas eletrônicas do Grafeno. Efeitos da aplicação de um campo magnético não homogêneo foram investigados através da método de matrizes de transferência. Foi utilizado também um modelo efetivo para descrever a modulação da velocidade de Fermi com a posição. Verificamos que as estruturas magnéticas, conhecidas como barreiras magnéticas, são de grande utilidade para o transporte eletrônico, pois podemos controlar o transporte alterando parâmetros que são facilmente medidos, como energia, número de barreiras magnéticas e a velocidade de Fermi.

**Palavras-chaves:** grafeno, velocidade de Fermi, barreiras magnéticas.



# Abstract

With the appearance of graphene, known as the first fully two-dimensional material, the area of Condensed Matter Physics was allowed to work truly with ownership of two-dimensional materials and observe great applicability.

Graphene generated a great interest in physicists for its intriguing properties, as the ability to simulate high energy physics due to electrons being described by Dirac equation without mass and having a linear dispersion.

In this work we present a systematic study on the electronic structures of Graphene. Effects of applying a non-homogeneous magnetic field were investigated using the method transfer matrices. An effective model was also used to describe the modulation Fermi's speed with the position. We found that the magnetic structures, known as magnetic barriers, are of great use for electronic transport, as we can control transport changing parameters that are easily measured, such as energy, number of magnetic barriers and Fermi's velocity.

**Keywords:** latex. abntex. text editoration.



# Lista de ilustrações

Figura 1 – Configurações eletrônicas do carbono: (a)estado fundamental; (b)estado excitado; (c)hibridização $sp^3$ ; (d)hibridização $sp^2$ ; (e)hibridização $sp$ . . . . .	6
Figura 2 – Diamante, grafite, fulerenos, nanotubo e grafeno - Retirado de Química Inorgânica - Miessler, Fischer, Tarr (1) . . . . .	7
Figura 3 – Cores diferentes nesta micrografia óptica de 300 microns revelam a presença de flocos de grafite com espessuras diferentes esfregados de grafite em massa na superfície de um wafer de silício oxidado. Os aviões atômicos individuais estão escondidos nos escombros, mas ainda podem ser encontrados ao se aproximar e procurar por flocos que mostrem o contraste mais fraco. A microscopia de força é usada posteriormente para medir a espessura dos cristalitos identificados. (b) Um único cristal de grafeno com um átomo de espessura está pendurado livremente em um andaime de fios de ouro, visto com um microscópio eletrônico de transmissão - Retirado de Physics Today 60, 8, 35 (2007). . . . .	9
Figura 4 – (a)A base dos vetores $a_1$ e $a_2$ numa rede hexagonal de grafeno. (b)A rede recíproca correspondente a rede de Bravais tem os vetores $b_1$ e $b_2$ associados. A célula unitária é apresentada de forma hachurada em (a) e (b). Os pontos $\Gamma$ , $K$ , $K'$ e $M$ , são os pontos de alta simetria indicados em (b) . . . . .	9
Figura 5 – Primeiros vizinhos a uma distância $R_1$ do átomo central do tipo A localizados numa sub-rede B e segundos vizinhos a uma distância $R_2$ em uma sub-rede A. . . . .	13
Figura 6 – Órbitas que permitem a realização do transporte de elétrons e o termo de <i>hopping</i> . . . . .	14
Figura 7 – Representação do pseudo spin . . . . .	15
Figura 8 – Estrutura de bandas do grafeno mostrando as bandas de condução ( $\pi^*$ ) e bandas de valência ( $\pi$ ). . . . .	16
Figura 9 – Estrutura da banda de energia do grafeno. A banda de valência (banda inferior) e a banda de condução (banda superior) tocam em seis pontos, onde o nível de Fermi está localizado. Nos arredores desses pontos, a relação de dispersão de energia é linear. Adaptada de Allain, 2011 (referência[]) . . . . .	17
Figura 10 – Barreira Unidimensional com largura $W$ e altura $V$ . . . . .	20
Figura 11 – Representação dos limites dos ângulos de incidência $\phi_1$ e transmissão $\phi_{12}$ sobre uma barreira magnética. . . . .	28

Figura 12 – Representação dos potenciais utilizados: a) Em preto temos o potencial vetor criado pelas barreiras magnéticas; b) Em vermelho temos o potencial vetor criado pelas barreiras e poços magnéticos. . . . .	28
Figura 13 – Representação do coeficiente de transmissão em barreiras magnéticas através de gráficos polares com a variação da velocidade de Fermi. Os gráficos polares representam, respectivamente, N=1, N=3 e N=5 barreiras magnéticas com E=3.2. . . . .	31
Figura 14 – Representação do coeficiente de transmissão em barreiras magnéticas através de gráficos polares com a variação da velocidade de Fermi. Os gráficos polares representam, respectivamente, N=1, N=3 e N=5 barreiras com $v_F=1$ e $w_b = 0.5, w_b = 1.0, w_b = 2.0$ e $w_b = 4.0$ , respectivamente com E=1. . . . .	32
Figura 15 – Representação do coeficiente de transmissão em função da variação do ângulo e da $v_F$ nas regiões de barreiras. cada gráfico de densidade tem como valor para a $v_F$ nos poços $v_F = 0.5, v_F = 1.0, v_F = 2.0$ e $v_F = 3.0$ , respectivamente. . . . .	33
Figura 16 – Gráfico de densidade representando a transmissão em função do velocidade de Fermi e do ângulo de incidência , com partículas de energia E=1 para N=1, N=2, N=3 e N=8. . . . .	34
Figura 17 – Gráfico de densidade representando a transmissão em função do ângulo de incidência e da velocidade de Fermi, com partículas de energia E=3.2 com N=1, N=2, N=3 e N=6. . . . .	35
Figura 18 – Gráfico de densidade representando a transmissão em função do ângulo de incidência e da energia E com $v_F = 2$ nas barreiras e $v_F = 0.5$ nos poços, com partículas de energia E=3.2 com N=5, N=7, N=9 . . . . .	35
Figura 19 – Células magnéticas para $v_F=3$ com N=1, N=2, N=4, N=6. Dependência da transmissão com o ângulo de incidência e da energia E. . . . .	36
Figura 20 – Figura da esquerda representa o espectro para uma rede periódica com $w_0 = w_B = 1$ e $k_y = 0$ . A figura da direita representa o espectro para a mesma rede periódica com $K_x = 0$ . Onde $v_F = \zeta$ é alterado para as regiões de barreira e mantido $v_F = 1$ para as regiões de poço. . . . .	36



# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DO GRAFENO</b>	<b>5</b>
<b>2.1</b>	<b>Os átomos de carbono e seus alótropos</b>	<b>5</b>
2.1.1	O elemento	5
2.1.2	Os alótropos	6
<b>2.2</b>	<b>Grafeno</b>	<b>8</b>
2.2.1	Estrutura do grafeno	8
<b>2.3</b>	<b>Método da ligação forte (Tight-Binding)</b>	<b>10</b>
<b>2.4</b>	<b>Modelo Contínuo</b>	<b>17</b>
<b>3</b>	<b>TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SUPER-REDES DE GRAFENO E CRIAÇÃO DE BARREIRAS MAGNÉTICAS</b>	<b>19</b>
<b>3.1</b>	<b>Metodologia</b>	<b>19</b>
<b>3.2</b>	<b>Método da Matriz de Transferência para a equação de Dirac</b>	<b>22</b>
<b>3.3</b>	<b>Super-redes no grafeno</b>	<b>22</b>
<b>4</b>	<b>EFEITOS DA MODULAÇÃO DA VELOCIDADE DE FERMI EM SUPER-REDES DE GRAFENO COM CAMPO MAGNÉTICO APLI- CADO</b>	<b>25</b>
<b>4.1</b>	<b>Modelo</b>	<b>25</b>
<b>4.2</b>	<b>Múltiplas Barreiras Magnéticas</b>	<b>28</b>
<b>4.3</b>	<b>Barreiras e poços magnéticos</b>	<b>30</b>
<b>4.4</b>	<b>Resultados numéricos</b>	<b>30</b>
<b>4.5</b>	<b>Super-redes magnéticas</b>	<b>33</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>37</b>
<b>5.1</b>	<b>Conclusão</b>	<b>37</b>
	<b>Referências</b>	<b>39</b>



# Introdução

Constantemente surgem matérias que apresentam propriedades bem interessantes, muitas vezes extraordinárias, pois não se esperava que tais materiais se comportassem daquela forma em certo regime. Um dos materiais que gera grande interesse atualmente é o grafeno, que nada mais é que uma folha bidimensional de carbono formado por átomos organizados em estruturas hexagonais com ligações  $sp^2$ . Um modelo que vem sendo utilizado na física da matéria condensada para descrever o grafeno é o modelo contínuo do hamiltoniano efetivo de Dirac. A equação de Dirac teve origem na descrição de partículas relativísticas, mas o aparecimento de uma relação de dispersão linear nos dá a chance de descrever portadores de carga em certos materiais. Isso faz com que muitas ferramentas utilizadas na física de altas energias possam ser utilizadas na matéria condensada. Na equação de Dirac relativística aparece a velocidade da luz  $c$ , mas em sistemas da matéria condensada a velocidade  $c$  é trocada pela velocidade de Fermi.

Para a utilização do grafeno como dispositivo eletrônico é necessário a abertura de um gap, pois como sabemos ele possui um gap nulo em seu espectro de energia. Isso pode ser feito utilizando uma dopagem ou através do substrato. É bastante conhecido que as propriedades do grafeno são afetadas por seu substrato, por exemplo um substrato de nitreto de boro hexagonal (h-BN) leva ao aparecimento de um gap de 53 meV na estrutura eletrônica.

Outras propriedades importantes no grafeno são a velocidade de Fermi e a mobilidade eletrônica. Apesar do estudo do grafeno estar se tornando frequente, pouco é estudado sobre a variação da velocidade de Fermi com a posição em um substrato formado por uma heteroestrutura periódica compostas por materiais diferentes. Como a velocidade de Fermi e o termo de massa no hamiltoniano de Dirac dependem da posição, eles não comutam com o operador momento linear. Portanto, para termos um hamiltoniano hermitiano devemos considerar a permutação entre os operadores no primeiro termo do operador de Dirac efetivo. O trabalho desenvolvido é baseado no estudo do transporte eletrônico em super-redes de grafeno que possuem influência de campo magnético periódico analisando a influência da variação da velocidade de Fermi.

Essa dissertação esta organizada da seguinte forma:

- **Capítulo 1:** Será apresentado o carbono e suas características a fim de mostrar como se pode construir uma folha de grafeno. Serão apresentados também seus alótropos, que são conhecidos como variações da formação estrutural de um mesmo elemento químico simples. E finalmente mostraremos como a rede de grafeno é organizada de forma estrutural com a intenção de depois utilizarmos para calcular as bandas de

energia do grafeno.

- **Capítulo 2:** Nesse capítulo será apresentado ao leitor o método da ligação forte (*tight-binding*) que nos ajuda de forma simples a deduzir as bandas de energia através de uma sobreposição de orbitais atômicos. Assim, surgem os pontos de Dirac,  $K$  e  $K'$ , cuja relação de dispersão próxima a esses pontos se torna linear.
- **Capítulo 3** Como o intuito desse trabalho é estudar o transporte eletrônico, é necessário que utilizemos um método para tratar com as barreiras magnéticas. Esse método é o conhecido Método das Matrizes de Transferência, que possibilita trabalhar com diversas regiões de potenciais de forma prática e generalizada. Analisaremos também esse modelo aplicado em super-redes de grafeno, que serão de grande utilidade no capítulo 4.
- **Capítulo 4** Aqui será apresentado o modelo para barreiras magnéticas e os perfis de potenciais estudados. Os resultados numéricos obtidos para a análise de barreiras magnéticas, potenciais alternados e super-redes. Serão analisados casos em que ocorre a modulação da velocidade de Fermi.

# 1 Introdução

Desde a primeira obtenção experimental (2), o grafeno vem sendo considerado um material bastante promissor para a fabricação de componentes eletrônicos, e talvez até uma nova forma de trabalhar com a eletrônica, devido ao grande movimento de cargas (3) e um transporte balístico de longo alcance a temperatura ambiente (4) que superam as propriedades dos semicondutores convencionais. Além do mais, o grafeno tem a característica de a baixas energias se comportam como um férmion sem massa e permite também o acontecimento do tunelamento de Klein, evitando que os portadores de carga sejam imediatamente confinados por potenciais eletrostáticos (5), que limita o uso do grafeno nos componentes eletrônicos. Por essa razão, diferentes formas de confinar essas quasipartículas no grafeno foram propostas (6; 7; 8; 9; 10), que se destaca o uso de barreiras magnéticas (11; 12; 13; 14; 15; 16). Essas barreiras são produzidas através de um campo magnético não homogêneo que pode ser criado tiras ferromagnéticas. Com barreiras magnéticas é possível, entre outras coisas, criar estados ligados (17) e controlar as propriedades de transporte. (18).

Nos últimos anos muitos trabalhos tem investigado a influência da modulação da velocidade de Fermi na eletrônica e nas propriedades do transporte no grafeno(19; 20; 21; 22; 23; 24; 25; 26; 27). Um dos grandes resultados até o momento foi mostrar que existe uma possibilidade de modular as bandas de energias (28) e o fator Fano (29), além de criar guias eletrônicas (30; 31) e estados ligados no grafeno (32). Foi mostrado também que a modulação da velocidade de Fermi pode controlar os spins (33) e vales (34). A velocidade de Fermi pode ser modulada por dopagem (35), através do substrato (36), por tensão mecânica (37; 38), por campos elétricos (39) e também por placas metálicas colocadas próximas ao grafeno (30; 31), nas quais ocorre um acúmulo de cargas em diferentes regiões, induzindo a criação de regiões que conseguem tal efeito.

Nesse trabalho nos investigamos os efeitos da modulação da velocidade de Fermi nas barreiras magnéticas e em super-redes. Consideramos três casos: barreiras magnéticas, barreiras magnéticas e poços e uma super-rede periódica. Usamos o método das matrizes de transferência para obter os coeficientes de transmissão para os casos finitos e a relação de dispersão para o caso das super-redes periódicas.

Essa dissertação esta organizada da seguinte forma:

- **Capítulo 1:** Será apresentado o carbono e suas características a fim de mostrar como se pode construir uma folha de grafeno. Serão apresentados também seus alótropos, que são conhecidos como variações da formação estrutural de um mesmo elemento químico simples. E finalmente mostraremos como a rede de grafeno é organizada de

forma estrutural com a intenção de depois utilizarmos para calcular as bandas de energia do grafeno.

- **Capítulo 2:** Nesse capítulo será apresentado ao leitor o método da ligação forte (*tight-binding*) que nos ajuda de forma simples a deduzir as bandas de energia através de uma sobreposição de orbitais atômicos. Assim, surgem os pontos de Dirac,  $K$  e  $K'$ , cuja relação de dispersão próxima a esses pontos se torna linear.
- **Capítulo 3** Como o intuito desse trabalho é estudar o transporte eletrônico, é necessário que utilizemos um método para tratar com as barreiras magnéticas. Esse método é o conhecido Método das Matrizes de Transferência, que possibilita trabalhar com diversas regiões de potenciais de forma prática e generalizada. Analisaremos também esse modelo aplicado em super-redes de grafeno, que serão de grande utilidade no capítulo 4.
- **Capítulo 4** Aqui será apresentado o modelo para barreiras magnéticas e os perfis de potenciais estudados. Os resultados numéricos obtidos para a análise de barreiras magnéticas, potenciais alternados e super-redes. Serão analisados casos em que ocorre a modulação da velocidade de Fermi.

## 2 Propriedades Eletrônicas do Grafeno

O Grafeno é um material composto por uma monocamada de carbonos, arranjados em formato de favo de mel, ou seja, em uma rede do tipo hexagonal. Esse material tem grande importância pois possui diversas aplicações na nanoeletrônica, além de simular sistemas de altas energias. Isso ocorre porque o elétron pode ser descrito através da equação de Dirac como um férmion sem massa devido a sua relação de dispersão linear(3).

Este capítulo irá descrever as propriedades eletrônicas do grafeno, primeiramente, abordando o modelo *tight-binding(TB)* para, então, construir sua estrutura de banda. Em seguida será abordado o funcionamento do modelo contínuo no grafeno a fim de observar a linearidade da relação de dispersão e o que acontece com a massa do elétron em tal sistema.

### 2.1 Os átomos de carbono e seus alótropos

#### 2.1.1 O elemento

O carbono é um dos elementos químicos mais abundantes na natureza. Ele possui grande capacidade de formar compostos químicos com outros elementos, formando, assim, substâncias orgânicas e inorgânicas.

O carbono pertence ao grupo 4A da tabela periódica com número atômico  $Z = 6$  e possui quatro elétrons na camada de valência, podendo formar de tal maneira ligações covalentes se estiver em seu estado de menor energia. Sua configuração eletrônica é  $1s^2, 2s^2 2p^2$  no estado fundamental. Existem quatro elétrons nos orbitais  $2s$  e  $2p$  com duas configurações possíveis, mostradas na Figura 1. Como os orbitais  $2p(2p_x, 2p_y, 2p_z)$  são aproximadamente 4 eV mais altos em energia do que o orbital  $2s$ , é energeticamente favorável colocar 2 elétrons no orbital  $2s$  e apenas 2 deles nos orbitais  $2p$ . Em algumas situações nas quais surgem campos elétricos ou outra forma de fornecer energia para os elétrons que estão no orbital  $2s$ , os elétrons podem se redistribuir entre os orbitais  $2p$  formando então um novo estado que será chamado de estado excitado. Assim, forma-se um novo orbital chamado de  $sp^x$ , que é composto pela hibridização dos orbitais  $2s$  e  $2p$ , onde  $x$  vai depender da quantidade de orbitais  $p$  que são utilizados.

Um fato importante a ser ressaltado é que o orbital de maior relevância no transporte eletrônico é o orbital  $\pi$  por apresentar os níveis mais baixos de energia, ou seja, apresentar elétrons com maior mobilidade eletrônica.

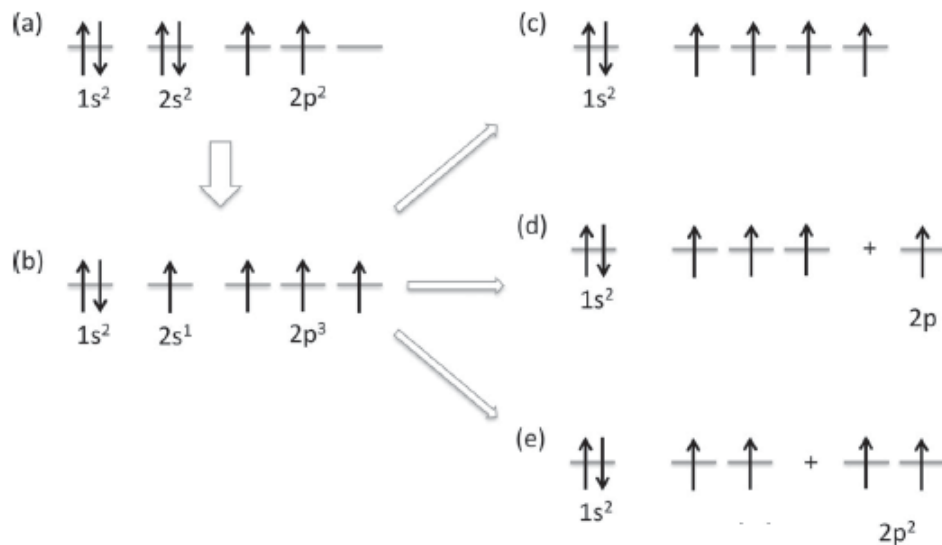


Figura 1 – Configurações eletrônicas do carbono: (a)estado fundamental; (b)estado excitado; (c)hibridização  $sp^3$ ; (d)hibridização  $sp^2$ ; (e)hibridização  $sp$ .

### 2.1.2 Os alótropos

O carbono consegue formar diferentes estruturas de acordo com o processo de produção, sendo artificial ou natural. Essas várias formas diferentes são chamadas de alótropos, que são estruturas químicas compostas pelos mesmos átomos, mas com geometrias diferentes, formando então substâncias químicas diferentes.

O carbono era encontrado principalmente em duas formas, o grafite e o diamante. o diamante possui uma estrutura bem cristalina e rígida. Tal rigidez está relacionada, principalmente, ao tipo de ligação que é formada entre seus átomos de carbono e possui uma grande utilidade, que é medir a dureza<sup>1</sup> de outros matérias.

Outro alótropo do carbono bastante conhecido é o grafite. Esse é formado por ligações covalentes de um átomo de carbono com outros três átomos, construindo uma geometria trigonal. Essas ligações formam uma hibridização do tipo  $sp^2$ , permitindo uma boa condução eletrônica. A temperaturas na faixa de 2000°C e uma pressão de 5GPa, o grafite pode ser transformado em diamante.

Outros alótropos do carbono têm sido sintetizados ultimamente, como o fulereno, que foi descoberto em 1985 e em 1996 deu o Prêmio Nobel em Química aos pesquisadores Robert F. Curl Jr., Sir Harold W. Kroto e Richard E. Smalley. Existem diferentes formas de fulereno, tais como o  $C_{60}$ ,  $C_{70}$  e o  $C_{20}$ , que estão apresentados na Figura 2. O primeiro fulereno obtido foi o  $C_{60}$ , que consiste de anéis de carbono de cinco e seis elementos fundidos.

<sup>1</sup> Dureza é a propriedade característica do material riscar outras matérias. Portanto se o material 1 risca o material 2, o material 1 possui uma maior dureza.



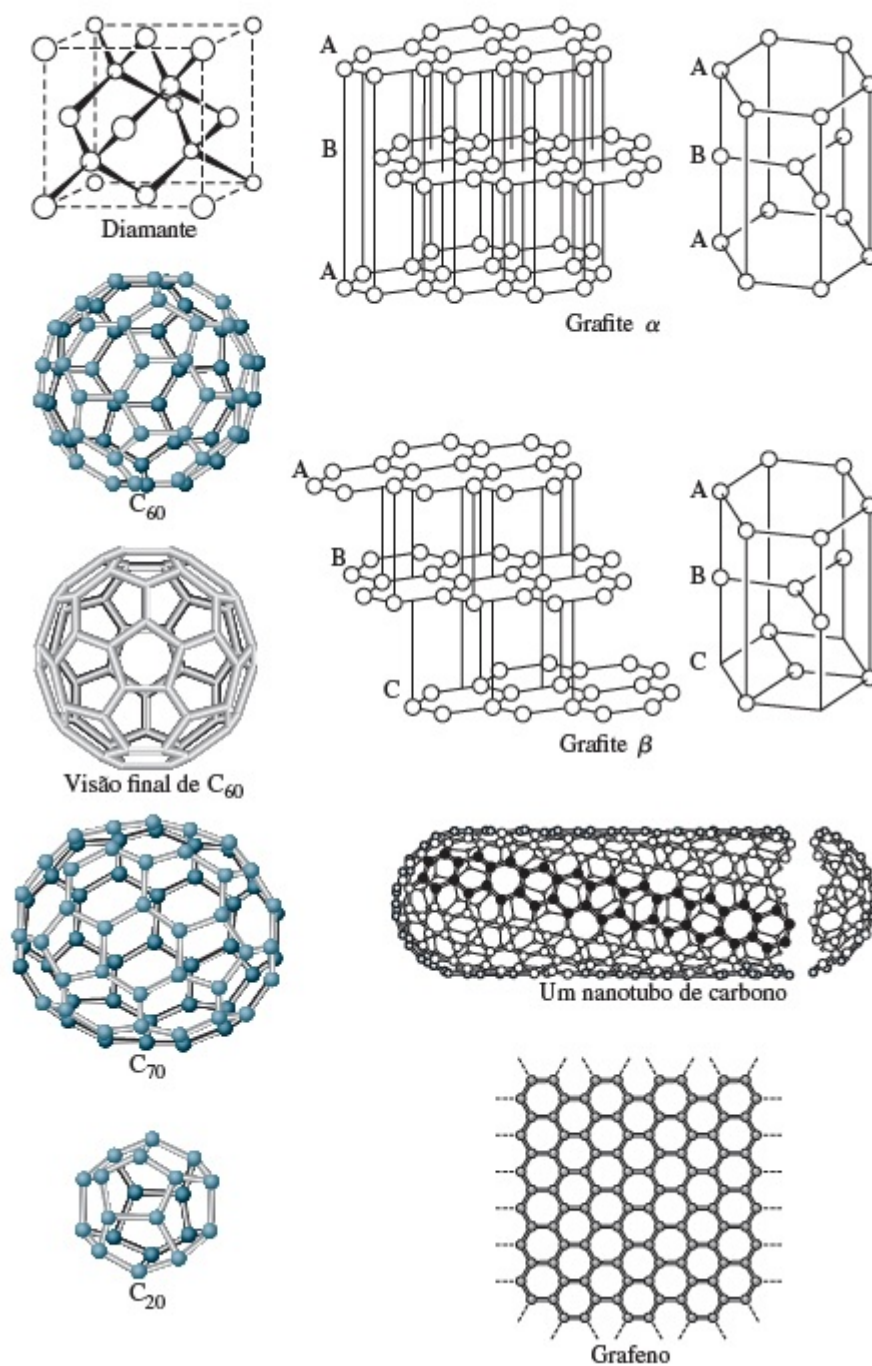


Figura 2 – Diamante, grafite, fulerenos, nanotubo e grafeno - Retirado de Química Inorgânica - Miessler, Fischer, Tarr (1)

Cada hexágono formado é contornado por pentágonos, formando uma estrutura de bola de futebol. Outro alótropo do carbono são os nanotubos e o grafeno, o qual será apresentada uma breve introdução e explanação acerca das suas surpreendentes características.

## 2.2 Grafeno

O grafite é composto de várias camadas de átomos de carbono. Uma camada única e isolada é chamada grafeno e seus átomos estão arrançados formando uma rede do tipo "favo de mel", como representado na Figura 3. Preparado, primeiramente, em 2004(3), o grafeno tem sido foco de pesquisas consideráveis, tanto para estudar suas propriedades quanto para desenvolver formas eficazes para preparar folhas de grafeno.

Grafeno é notavelmente resistente à fratura e deformação, tem uma alta condutividade térmica e uma banda de condução que toca sua banda de valência. A adição de grupos funcionais influencia as propriedades elétricas de grafeno. Esse foi preparado tanto mecanicamente, descascando camadas de grafite, quanto por técnicas mais especializadas, incluindo a deposição de vapor químico em substratos metálicos, a redução química de óxido de grafite (um produto da oxidação do grafite que contém grupos OH e pontes de oxigênio) e por sonicação<sup>2</sup> de suspensões coloidais de óxido de grafite. Adicionalmente ao grafeno de camada única, amostras com duas (bicamada de grafeno) ou mais camadas têm sido estudadas.

### 2.2.1 Estrutura do grafeno

O grafeno representa uma estrutura essencialmente bidimensional com uma espessura de aproximadamente 340pm. Sua superfície em favo de mel foi fotografada usando microscopia de transmissão de varredura (STM, do inglês scanning transmission microscopy) e também pode ser visualizada opticamente, com o nível de contraste indicando quantas camadas estão presentes. O grafeno com sua estrutura de favo de mel está representado na Figura 4. As bolas representam os átomos de carbono e os traços as ligações  $\sigma$  entre os átomos. A ligação carbono-carbono tem comprimento aproximado de 1,42Å. A rede do grafeno pode ser caracterizada como uma rede de Bravais com base de dois átomos, indicados por A e B na figura4.

Os vetores primitivos são definidos por

$$a_1 = \left( \frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{a}{2} \right), a_2 = \left( \frac{a\sqrt{3}}{2}, \frac{-a}{2} \right) \quad (2.1)$$

<sup>2</sup> Sonicação é o procedimento que utiliza a energia das ondas sonoras, mais comumente o ultra-som, aplicado sobre determinados sistemas químicos.

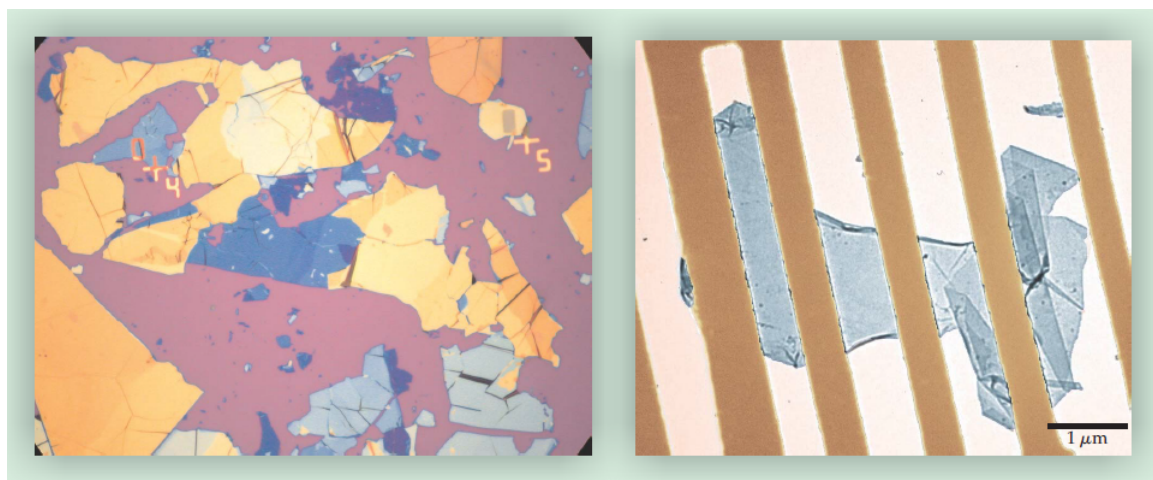


Figura 3 – Cores diferentes nesta micrografia óptica de 300 microns revelam a presença de flocos de grafite com espessuras diferentes esfregados de grafite em massa na superfície de um wafer de silício oxidado. Os aviões atômicos individuais estão escondidos nos escombros, mas ainda podem ser encontrados ao se aproximar e procurar por flocos que mostrem o contraste mais fraco. A microscopia de força é usada posteriormente para medir a espessura dos cristalitos identificados. (b) Um único cristal de grafeno com um átomo de espessura está pendurado livremente em um andaime de fios de ouro, visto com um microscópio eletrônico de transmissão - Retirado de *Physics Today* 60, 8, 35 (2007).

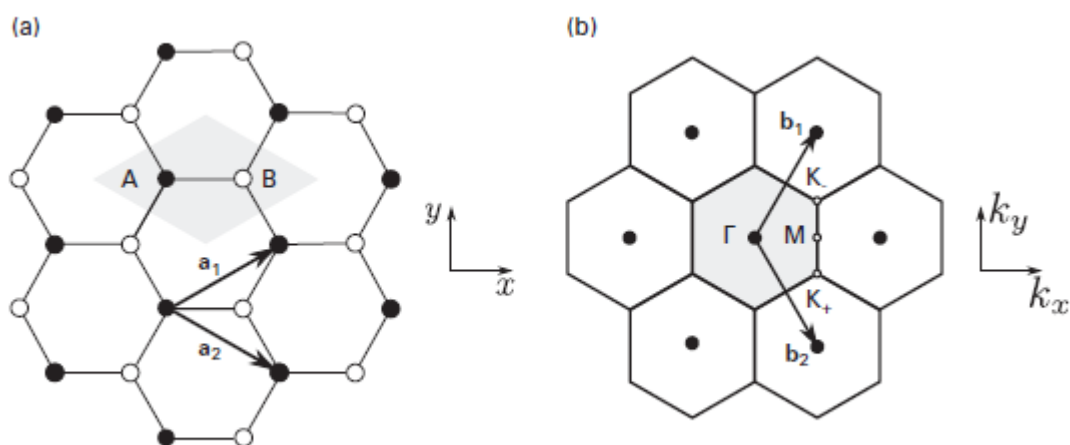


Figura 4 – (a) A base dos vetores  $a_1$  e  $a_2$  numa rede hexagonal de grafeno. (b) A rede recíproca correspondente a rede de Bravais tem os vetores  $b_1$  e  $b_2$  associados. A célula unitária é apresentada de forma hachurada em (a) e (b). Os pontos  $\Gamma$ ,  $K$ ,  $K'$  e  $M$ , são os pontos de alta simetria indicados em (b)

com  $|a_1| = |a_2| = a$ . Na rede em favo de mel, os átomos de carbono são orientados tendo como base esses vetores primitivos que, formando uma combinação linear deles, descrevem os átomos da rede A e os átomos da rede B como mostrado na figura 4. Esses vetores são descritos por

$$R_1 = \left( \frac{a}{\sqrt{3}}, \frac{a}{2} \right), R_2 = -a_2 + R_1 = \left( -\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2} \right), R_3 = -a_1 + R_1 = \left( -\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2} \right), \quad (2.2)$$

onde  $|R_1| = |R_2| = |R_3| = a$ . A rede recíproca do grafeno mostrado na figura 4 é também uma rede hexagonal, rotacionada em  $90^\circ$  com respeito à rede principal. Os vetores da rede recíproca são

$$b_1 = \left( \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{a} \right), b_2 = \left( \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, -\frac{2\pi}{a} \right) \quad (2.3)$$

onde  $|b_1| = |b_2| = 4\pi/a\sqrt{3}$ . A zona de Brillouin está representada na figura como o hexágono hachurado com centro  $\Gamma$  com lados de comprimento  $b_{BZ} = |b_1|/\sqrt{3} = 4\pi/3a$ . Existem três pontos os quais possuem um grande simetria na zona de Brillouin que servem para entender a relação de dispersão do grafeno nesses pontos. O ponto  $\Gamma$ , ponto  $M$  e os pontos  $K$  e  $K'$ , os vetores que descrevem esse sistema são

$$\Gamma M = \left( \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, 0 \right), \Gamma K = \left( \frac{2\pi}{a\sqrt{3}}, \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (2.4)$$

As soluções para as bandas de energia dos sólidos são encontradas na zona de Brillouin por isso a importância de identificar tais pontos.

## 2.3 Método da ligação forte (Tight-Binding)

O modelo *tight-binding* é uma abordagem usada para calcular a estrutura da banda eletrônica ao longo da zona de Brillouin usando um conjunto aproximado de funções de onda com base em uma superposição de funções de onda para átomos isolados localizados em cada local atômico (40),(41). O método está intimamente relacionado à combinação linear de orbitais atômicos (LCAO).

O grafeno é composto por átomos de carbono dispostos em uma estrutura hexagonal com cada átomo de carbono ligado covalentemente a outros três átomos de carbono, possuindo uma hibridização do tipo  $sp^2$ . Os orbitais de elétrons do núcleo não se sobrepõem muito aos orbitais dos átomos adjacentes e não influenciam na condução eletrônica, diferentemente dos orbitais que fazem ligação do tipo  $\pi$ , que são responsáveis pela condução eletrônica.

Devido à simetria translacional da célula unitária ao longo das direções dos vetores da rede, qualquer função de onda satisfaz o teorema de Bloch (42). Essa condição pode ser escrita como

$$T_{a_i} \Psi = e^{ik \cdot a_i} \Psi, i = 1, 2, 3 \quad (2.5)$$

sendo T o operador de translação sob o vetor rede  $a_i$ , e  $k$  o vetor de onda de Bloch. Definindo a função de onda como uma combinação linear dos orbitais atômicos. Assim,  $\Psi(k, r)$  é a função de onda a qual é construída através das funções de ondas atômicas  $\Phi(r - R_j)$ , onde j representa a região observada, ou seja, a posição de um átomo específico.

$$\psi_{n,k}(k, r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R \phi_j(r - R_j) e^{ik \cdot r}, j = 1, \dots, n \quad (2.6)$$

onde N é o número de células unitárias cuja ordem é de  $10^{24}$ . A vantagem de utilizar as funções de onda atômicas nas funções de Bloch são as seguintes: (1) o número de funções base, pode ser pouco comparados ao número de ondas planas, e (2) podemos facilmente obter fórmulas para muitas propriedades físicas utilizando esse método. É facilmente comprovado que essa função obedece à condição de Bloch, pois

$$\begin{aligned} \psi_{n,k}(k, r + a) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_R \phi_j(r + a - R_j) e^{ik \cdot R_j} \\ &= e^{ik \cdot a} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_j - a} \Phi(r + (a - R_j)) e^{ik \cdot R_j - a} \\ &= e^{ik \cdot a} \Phi_j(k, r) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Sendo as autofunções definidas por uma combinação linear de funções de Bloch

$$\psi_j = \sum_{j'=1}^n C_{jj'}(k) \Phi_{j'}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.8)$$

pode-se definir os autovalores agora que temos como autofunções a combinação linear das funções de onda atômicas de Bloch.

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\langle \psi_j | H | \psi_j \rangle}{\langle \psi_j | \psi_j \rangle} \quad (2.9)$$

Substituindo 2.8 em 2.9, é obtido o seguinte autolvalor com respeito às funções de Bloch:

$$E_j(\vec{k}) = \frac{\sum_{jj'}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle}{\sum_{jj'}^n C_{ij}^* C_{ij'} \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle} = \frac{\sum_{jj'}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}}{\sum_{jj'}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij}^* C_{ij'}} \quad (2.10)$$

onde as integrais sobre as funções de Bloch são chamadas matriz integral de transferência e matriz de sobreposição (*overlap*), respectivamente, as quais definidas por

$$H_{jj'} = \langle \Phi_j | H | \Phi_{j'} \rangle, S_{jj'} = \langle \Phi_j | \Phi_{j'} \rangle, j, j' = 1, \dots, n \quad (2.11)$$

Os coeficientes  $C_{jj'}$  são otimizados se fixado  $n \times n$  matrizes  $H_{jj'}$  e  $S_{jj'}$  em 2.11. Dessa forma,  $E_i(\vec{k})$  é mínimo se

$$\frac{\partial E_i(\vec{k})}{\partial C_{ij}^*} = 0 \quad (2.12)$$

obtém-se a equação secular

$$\sum_{j'=1}^n H_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} - E_i(\vec{k}) \sum_{j'=1}^n S_{jj'}(\vec{k}) C_{ij'} = 0 \quad (2.13)$$

Definindo um vetor coluna,

$$C_i = \begin{pmatrix} C_{i1} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{iN} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

A equação 2.13 pode ser expressada como

$$HC_i - E_i(\vec{k})S(\vec{k})C_i = 0 \quad (2.15)$$

essa equação é a equação secular do sistema.

$$\det[H - ES] = 0 \quad (2.16)$$

No grafeno, como já citado, o transporte eletrônica se dá devido aos orbitais  $\pi$ , que estão posicionados perpendicularmente ao plano que define a rede. Portanto, o cálculo é reduzido a diagonalizar as matrizes  $2 \times 2$  das subredes A e B seguintes

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

No modelo *tight-binding* são consideradas algumas premissas que facilitam a obtenção das bandas de energia no grafeno, sendo elas:

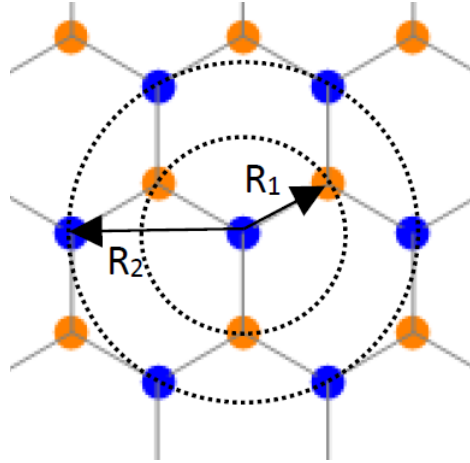


Figura 5 – Primeiros vizinhos a uma distância  $R_1$  do átomo central do tipo A localizados numa sub-rede B e segundos vizinhos a uma distância  $R_2$  em uma sub-rede A.

1. **Nearest neighbor tight-binding (NNTB):** A função de onda de um elétron em qualquer célula unitária primitiva se sobrepõe apenas às funções de onda de seus vizinhos mais próximos. Os vizinhos mais próximos de um átomo do tipo A na rede de grafeno são três átomos equivalentes do tipo B, como apresentado na figura 5. O modelo NNTB estipula que a função de onda  $p_z$  de um átomo do tipo A se sobrepõe às funções de onda  $p_z$  de seus três vizinhos mais próximos e que não haja sobreposição das funções de ondas de átomos mais distantes. Ou seja, as funções de onda do átomo do tipo A se sobrepõe somente com as funções de onda dos átomos localizados a uma distância  $R_1$ , que é onde se localizam os átomos do tipo B, como se pode ver na figura 5.
2. **Simetria elétron-buraco:** Pode-se ver que próximo a energia de Fermi ( $E = 0$  em  $K$  e  $K'$ ) as bandas de condução  $\pi^*$  e as bandas de valência são bastante semelhantes, ao ponto de parecerem espelhadas no eixo  $z$ . Como os elétrons são cargas que se movem somente nas bandas  $\pi^*$  e os buracos, que, na verdade, são a ausência de elétrons, são cargas que se movem nas bandas  $\pi$ . Como pode-se ver na figura 5, a simetria não ocorre para quaisquer valores, mas para pequenas regiões próximas aos pontos  $K$  e  $K'$ , ou seja, próximos aos pontos onde a energia de Fermi é nula, região conhecida como pontos de Dirac.

Os elementos  $H_{AA}$  da matriz  $H$ , são obtidos pela seguinte equação:

$$H_{AA} = \langle \Phi_A | H | \Phi_A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{R_A=R_{A'}}^N \langle \phi(\vec{r} - \vec{R}_{A'}) | H | \phi(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle = \epsilon_{2p} \quad (2.18)$$

Para elementos fora da diagonal e considerando apenas os primeiros vizinhos, que são visualizados na figura 5 com vetor posição  $\vec{R}_1$ , segundo a aproximação NNTB, obtém-se:

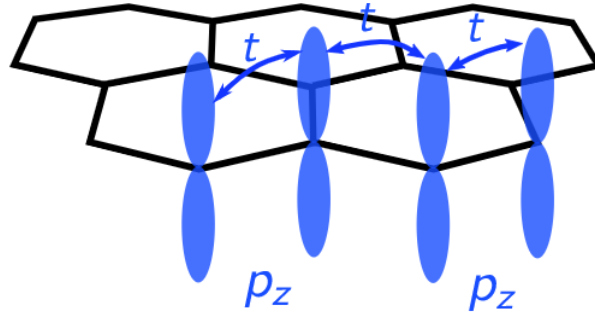


Figura 6 – Órbitas que permitem a realização do transporte de elétrons e o termo de *hopping*.

$$\begin{aligned}
 H_{AB} &= \langle \Phi_A | H | \Phi_B \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{R_A, R_B} \langle \phi(\vec{r} - \vec{R}_A) | H | \phi(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \\
 &= [e^{i\vec{k} \cdot \delta_1} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_2} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_3}] \langle \phi(\vec{r} - \vec{R}_A) | H | \phi(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \\
 &= \left[ e^{ik_y a / \sqrt{3}} + 2e^{ik_y a / \sqrt{3}} \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \right] t = -g(\vec{k})t \quad (2.19)
 \end{aligned}$$

onde é definido

$$g(\vec{k}) = \left[ e^{ik_y a / \sqrt{3}} + 2e^{ik_y a / \sqrt{3}} \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \right] \quad (2.20)$$

Substituído os valores obtidos em 2.18 e 2.19 nos elementos da matriz  $H$  2.17, resulta em

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & -g(\vec{k})t \\ -g^*(\vec{k})t & \epsilon_{2p} \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

onde  $t$  é o parâmetro de *hopping* (Figura 6) entre os primeiros vizinhos de um átomo de carbono.

Elementos na diagonal da matriz de *overlap*  $S_{AA} = S_{BB} = 1$ , que podem ser representados graficamente por

Dessa forma, quando a matriz de transferência é calculada e a matriz de *overlap* é escolhida como a matriz unitária, então diz que se utilizou a extrapolação de Slater-Koster.

Os elementos fora da diagonal da matriz de *overlap* são calculados da seguinte forma:



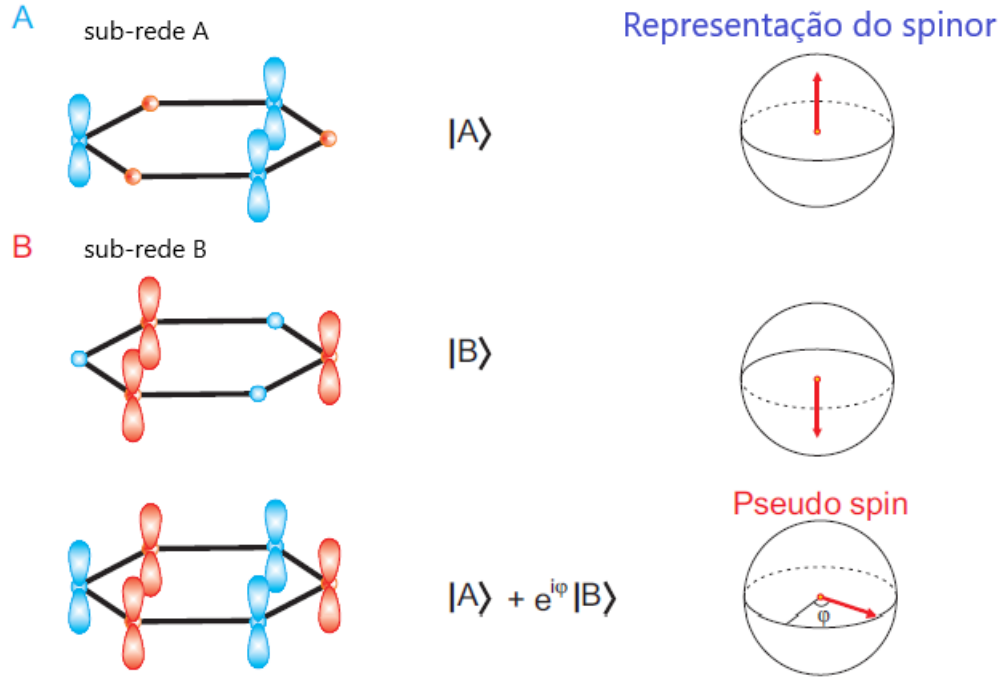


Figura 7 – Representação do pseudo spin

$$\begin{aligned}
 S_{AB} &= \langle \Phi_A | H | \Phi_B \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{R_A, R_B} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_A - \vec{R}_{A'})} \langle \phi(\vec{r} - \vec{R}_A) | \phi(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \\
 &= g(\vec{k})s
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

Novamente substituindo os valores obtidos em 2.22 e  $S_{AA} = S_{BB} = 1$  nos elementos da matriz  $S$  em 2.17, obtém-se

$$S = \begin{pmatrix} 1 & g(\vec{k})s \\ g^*(\vec{k})s & 1 \end{pmatrix} \tag{2.23}$$

2.21 e 2.23 em 2.16,

$$\det[H - ES] = \begin{vmatrix} \epsilon_{2p} - E & (sE - t)g(\vec{k}) \\ (sE - t)g^*(\vec{k}) & \epsilon_{2p} - E \end{vmatrix} = 0 \tag{2.24}$$

Resolvendo a equação 2.23, os autovalores  $E(\vec{k})$  são obtidos em função de  $\omega(\vec{k})$ ,  $k_x$  e  $k_y$

$$E_{\pm} = \frac{\epsilon_{2p} \pm t\omega(\vec{k})}{1 \pm s\omega(\vec{k})} \tag{2.25}$$

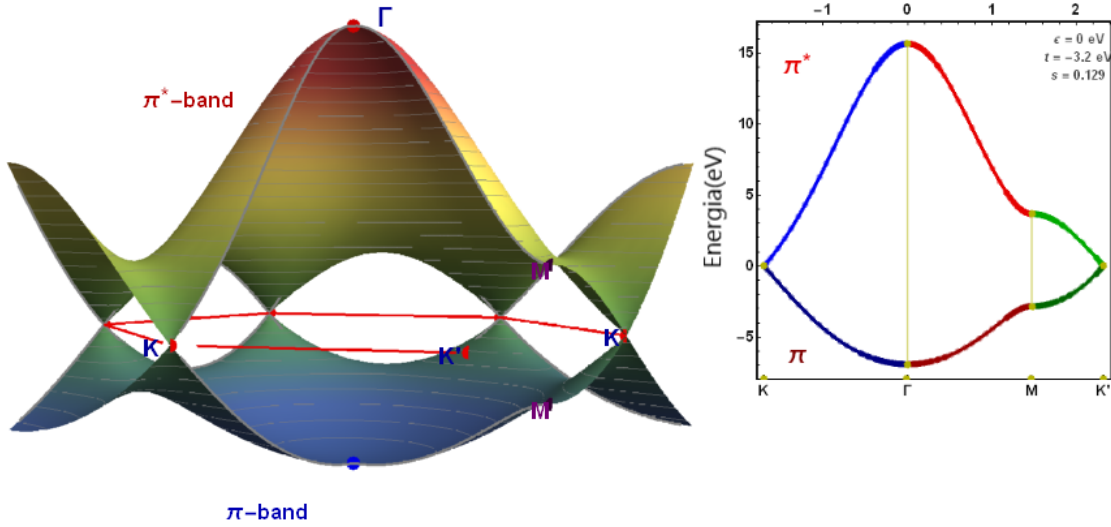


Figura 8 – Estrutura de bandas do grafeno mostrando as bandas de condução ( $\pi^*$ ) e bandas de valência ( $\pi$ ).

Os valores positivos e negativos da energia obtida na equação 2.24 definem as bandas de condução  $\pi^*$  e bandas de valência  $\pi$ , respectivamente.

$$\omega(\vec{k}) = \sqrt{|g(\vec{k})|^2} = \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \quad (2.26)$$

Devido à simetria elétron-buraco o termo  $S_{AB} = 0$ . Isto é observado através da equação 2.25 que é suficiente para gerar "cones espelhada", a fim de criar as bandas de valência e condução necessárias para o estudo do problema. Assim o termo calculado  $S_{AB} = g(\vec{k})s$  só pode ser zero se  $s = 0$ , implicando que o denominador da equação 2.24 seja igual a 1. Assim,

$$E_{\pm} = \epsilon_{2p} \pm t\omega(\vec{k}) \quad (2.27)$$

Na figura 9 vê-se a estrutura de bandas gerada pelo modelo *tight-binding* onde apresenta a relação de dispersão de energia. Nos pontos próximos a  $\epsilon_{2p} = 0$ , é tomado o nível de Fermi e pode se observar o toque da banda de condução com a banda de valência, apresentando uma região com *gap* nulo que dá a característica semicondutora do grafeno. Esses pontos, nos quais o *gap* é nulo, que são os pontos  $K$  e  $K'$  chamam-se de pontos de Dirac.

## 2.4 Modelo Contínuo

Com a possibilidade de analisar os pontos  $K$  e  $K'$  mais de perto (9) e tomando o limite para baixas energias, é verificado que a dependência da energia com o vetor de onda é de uma forma linear, análogo a partículas relativísticas. Como nesses pontos são analisados os portadores de carga, ou seja, os elétrons e buracos, pode-se dizer que tais portadores de carga são férmions descritos pela equação de Dirac sem massa. Devido a essa aproximação, o sistema perde um pouco de suas características locais e passa a ser analisado de forma total, isto é, passa de um modelo discreto para um modelo contínuo. Isso pode ser verificado através de uma expansão em série de Taylor da função  $g(\vec{k})$ , em torno dos pontos  $\vec{K}$  e  $\vec{K}'$ . Portanto,

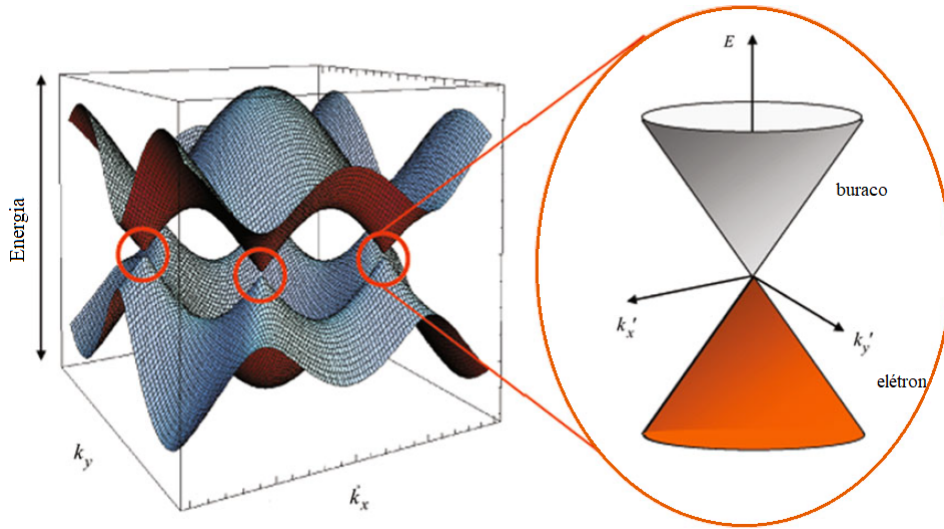


Figura 9 – Estrutura da banda de energia do grafeno. A banda de valência (banda inferior) e a banda de condução (banda superior) tocam em seis pontos, onde o nível de Fermi está localizado. Nos arredores desses pontos, a relação de dispersão de energia é linear. Adaptada de Allain, 2011 (referência[])

$$g(\vec{q}) = g(\vec{K}) + \vec{q} \cdot \nabla g(\vec{k}), \quad (2.28)$$

onde o vetor  $\vec{q} = (q_x, q_y) = (k - k_0)$  corresponde a um pequeno deslocamento no vetor de onda  $\vec{k}$  em torno do ponto  $\vec{K}$ ,  $K = (2\pi/a\sqrt{3}, 2\pi/3a)$ , e  $g(\vec{K}) = 0$ . Usando a equação 2.20, e considerando apenas os termos de primeira ordem. De forma análoga, o resultado para  $\vec{K}'$  será equivalente.

Assim, a primeira aproximação ficará

$$g(\vec{K} + \vec{q}) = \sum_{\delta_i} e^{i(\vec{K} + \vec{q}) \cdot \delta_i} \approx \sum_{\delta_i} e^{i\vec{K} \cdot \delta_i} + i \sum_{\delta_i} (\vec{q} \cdot \delta_i) e^{i\vec{K} \cdot \delta_i} \quad (2.29)$$

onde o segundo termo

$$i \sum_{\delta_i} (\vec{q} \cdot \delta_i) e^{i\vec{K} \cdot \delta_i} = \frac{3}{2} a t e^{i\pi/3} (q_y - i q_x) \approx \frac{3}{2} a t \vec{q} \quad (2.30)$$

Substituindo 2.30 em 2.27, é obtido

$$E_{\vec{K}+\vec{q}} = \pm \frac{3}{2} a t \vec{q} = \pm v_F \quad (2.31)$$

que é a energia de dispersão dos elétrons no grafeno em torno dos pontos  $\vec{K}$  e  $\vec{K}'$ . Como apresentado na equação 2.31, a relação de dispersão do férmion de Dirac é linear. Devido a isso, em baixas energias, a descrição do problema se reduz aos seis pontos da zona de Brillouin a dois cones de Dirac. Na equação 2.31,  $v_F$  representa a velocidade de Fermi, cujo valor é aproximadamente 300 vezes menor que a velocidade da luz. Esse valor é obtido tendo como  $t = 2,97 eV$ ,  $\hbar = 6,58 \cdot 10^{-16} eV \cdot s$  e  $a = 1,42 \text{Å}$ . A mesma equação serve para provar que os elétrons no grafeno se comportam como partículas sem massa.

## 3 Transporte Eletrônico em super-redes de grafeno e criação de barreiras magnéticas

### 3.1 Metodologia

Neste capítulo, estamos interessados em desenvolver um algoritmo geral para o cálculo da transmissão de elétrons no grafeno através de campos elétricos e magnéticos não homogêneos. Consideramos apenas os campos magnéticos perpendiculares ao plano da folha de grafeno. Nós também nos restringimos ao problema bidimensional, que implica que os campos são invariantes na direção  $y$  e a partícula é incidente no campo em um ângulo arbitrário.

Uma importante técnica utilizada para estudar o transporte eletrônico na Física da Matéria Condensada é o método das matrizes de transferência(43),(44). Sua grande aplicabilidade se dá, principalmente, pela facilidade de encontrar propriedades úteis para o estudo de potenciais mais variados possíveis apenas realizando a multiplicação de matrizes  $2 \times 2$ . Devido a essa característica, é bem simples implementar códigos computacionais para resolver esse tipo de problema. Esse método já foi utilizado para trabalhar os problemas de espalhamento para a equação de Schrödinger(45; 46) e também para resolver equações diferenciais ordinárias lineares e homogêneas(47).

Mostraremos também que a função parabólica cilíndrica(função de Weber) que tem sido usada comumente na literatura como parte da solução da equação de Dirac na região com campo magnético pode causar dificuldades numéricas significantes para baixos campos magnéticos e para altas energias das partículas incidentes, e usaremos uma expansão em série para resolver a equação diferencial a fim de evitar esse problema.

Assim, fornecemos uma estrutura uniforme, embora este método de expansão em série amplia a aplicabilidade do método da matriz de transferência para uma grande variedade de energias incidentes e campos magnéticos. Também discutiremos um método alternativo baseado na aproximação Weber por sua forma assintótica. Este método é aplicável apenas dentro de um regime assintótico, enquanto o método em série é aplicável a toda a gama de campos magnéticos e energias. Mostraremos que o método fornece resultados precisos neste alcance também.

No caso especial, quando o comprimento médio através do qual o potencial vetorial varia é menor que o comprimento magnético típico  $\ell_B = \sqrt{\hbar c / e B_0}$ , a barreira magnética pode ser aproximado por uma função delta. Soluções analíticas para barreiras magnéticas modeladas como uma série de funções delta são bem conhecidas. O método da matriz de

transferência é mais geral e pode ser usado mesmo quando essa condição não se mantém.

A resolução da equação de Schrodinger ou Dirac inclui dois tipos diferentes de problemas: o problema de autovalor e o problema de espalhamento. O problema do autovalor envolve encontrar os autovalores de energia do Hamiltoniano e é usado para encontrar os valores dos níveis permitidos de energia dos estados ligados. O problema de espalhamento, que é o que abordamos neste papel, envolve o cálculo dos coeficientes de transmissão e reflexão, formalmente definida como a razão do fluxo de partículas transmitidas ou refletidas de um potencial configuração para o fluxo que é incidente nele. Isso leva a uma equação diferencial homogênea de segunda ordem, que em uma dimensão é dada por:

$$\psi''(x) + k^2(x)\psi(x) = 0 \quad (3.1)$$

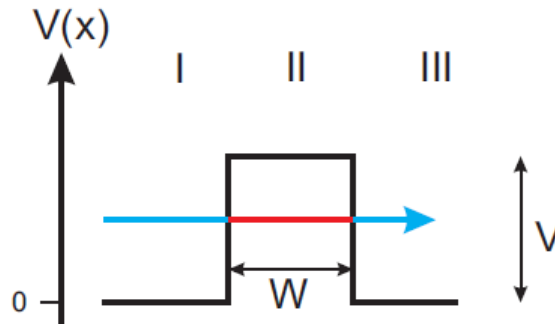


Figura 10 – Barreira Unidimensional com largura  $W$  e altura  $V$ .

Para a construção da matriz de transferência necessita-se dos termos de amplitude das ondas em cada região, sendo  $A$  e  $B$ ,  $C$  e  $D$  e  $E$  e  $F$  para a região I, II e III, respectivamente. Cada região com potencial terá sua constante de proporcionalidade que representará como se dará a transmissão naquele sítio. Na região I, II e III os coeficientes serão  $\Omega^I$ ,  $\Omega^{II}$  e  $\Omega^{III}$ , respectivamente. Lembrando que para ser respeitada a condição de continuidade das funções de onda desses sistemas físicos, é sugerido que cada matriz com seus elementos de amplitude de onda e seus coeficientes de transmissão sejam definidos como funções de onda que tem como limite a interface da barreira. Assim, cada região possui sua função de onda característica

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \Omega_I \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \\
\psi(x) &= \Omega_{II} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \\
\psi(x) &= \Omega_{III} \begin{pmatrix} E \\ F = 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.2}$$

onde,

$$\Omega = \begin{pmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} \\ \omega_{21} & \omega_{22} \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

Com a função de onda deve ser contínua em  $x = 0$  e  $x = W$ , então

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \Omega_I^{-1}(0)\Omega_{II}(0) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} &= \Omega_{II}^{-1}(W)\Omega_{III}(W) \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.4}$$

(3.5)

Substituindo 3.5 em 3.4 é obtido

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.6}$$

onde

$$T = \Omega_I^{-1}(0)\Omega_{II}(0)\Omega_{II}^{-1}(W)\Omega_{III}(W) \tag{3.7}$$

Na construção da matriz de transferência  $T$  pode-se ver que ela depende de duas interfaces, e para cada uma delas existem duas matrizes que são multiplicadas representando a região proveniente da onda  $\Omega_I^{-1}(0)\Omega_{II}(0)$  e a região na qual a onda continua se propagando  $\Omega_{II}^{-1}(W)\Omega_{III}(W)$ . Resumindo, para cada barreiras existem quatro matrizes a serem multiplicadas, uma par de matrizes determinando a primeira interface e o segundo par determinando a segunda interface da barreira.

Com um pouco de matemática e analisando as correntes de probabilidade em cada região para a situação especificada, seja  $E > V$  ou  $0 < E < V$ , é obtida a seguinte relação o coeficiente de transmissão.

$$\tau = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{T_{11}} \quad (3.8)$$

A matriz de transferência  $T$  pode ser generalizada para qualquer que seja o número de barreiras da seguinte forma

$$T_n = \Omega_I^{-1}(x_n)\Omega_{II}(x_n)\Omega_{II}^{-1}(x_n + W)\Omega_{III}(x_n + W) \quad (3.9)$$

onde  $L_B$  é o comprimento da barreira. Vale ressaltar que no caso apresentado na figura 10  $\Omega_I = \Omega_{III}$ .

## 3.2 Método da Matriz de Transferência para a equação de Dirac

Em duas dimensões, o spin 1/2 no grafeno é descrito pela equação de Dirac sem massa,

$$v_F \sigma \cdot (\vec{p} + \vec{V}) \phi(x) = E \phi(x) \quad (3.10)$$

onde  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  são as chamadas matrizes de Pauli,  $v_F$  é a velocidade de Fermi e  $\vec{V}$  é um potencial vetorial qualquer.

Nesse caso, as amplitudes das soluções dessa equação é que servirão como parâmetros para calcular a matriz de transferência. O formalismo é o mesmo utilizado no tópico anterior.

## 3.3 Super-redes no grafeno

Considerando agora super-redes (SR) unidimensionais que são estruturas periódicas consistindo de  $N$  células idênticas de comprimento  $L$ . Cada célula consiste de uma barreira retangular, e/ou um poço, nos quais seus comprimentos são respectivamente  $a$  e  $b$ .

Inicialmente é considerado férmions sem massa se movendo em sistemas unidimensionais. A função de onda no grafeno será descrito por um spinor da seguinte forma:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_I \\ \psi_{II} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Resolvendo a equação 3.10 é obtido duas soluções independentes  $\phi_a$  e  $\phi_b$  em cada célula. A solução na  $n$ th célula é escrita como  $\psi(x) = \psi[x + (n - 1)l]$  uma combinação linear de dessas duas,



$$\psi(x) = a_n \begin{pmatrix} \phi_{a,u}(x) \\ \phi_{b,l}(x) \end{pmatrix} + b_n \begin{pmatrix} \phi_{b,u}(x) \\ \phi_{a,l}(x) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Como já visto, é melhor definir a matriz de transferência para facilitar os cálculos

$$\Omega(x) = \begin{pmatrix} \phi_{b,u}(x) & \phi_{b,u}(x) \\ \phi_{b,u}(x) & \phi_{b,u}(x) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Observando a continuidade das funções de ondas, são obtidas as seguintes relações

$$\begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{pmatrix} = \Omega(x_{x_n})_V^{-1} \Omega(x_n)_0 \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

A outra interface da barreira será definida segundo a condição de continuidade pela seguinte equação

$$\begin{pmatrix} a_{n+2} \\ b_{n+2} \end{pmatrix} = \Omega(x_{x_n} + L)_V^{-1} \Omega(x_n + L)_0 \begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

assim,

$$\begin{pmatrix} a_{n+2} \\ b_{n+2} \end{pmatrix} = \Omega(x_{x_n})_V^{-1} \Omega(x_n)_0 \Omega(x_{x_n} + L)_0^{-1} \Omega(x_n + L)_V \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

$$\begin{pmatrix} a_{n+2} \\ b_{n+2} \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

onde  $T_n = \Omega(x_{x_n})_V^{-1} \Omega(x_n)_0 \Omega(x_{x_n} + L)_0^{-1} \Omega(x_n + L)_V$

Assumindo uma condição periódica

$$\psi(x + L) = \psi(x) \quad (3.18)$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} a_{N+n} \\ b_{N+n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

fica claro que o termo  $T^N$ , que é a matriz de transferência sob todas as regiões, é igual a 1. Isso demonstra que todos os autovalores de  $T$  são  $e^{2\pi in/N}$ , com  $n$  sendo um inteiro, e o determinante é igual a 1. A relação de dispersão é dado pelo traço de  $T$  como

$$2\cos(k_x l) = \text{Tr}(T) \quad (3.20)$$

onde  $k_x = 2\pi n/L$  é o vetor de onda de Bloch.

# 4 Efeitos da modulação da velocidade de Fermi em super-redes de grafeno com campo magnético aplicado

## 4.1 Modelo

Como vemos nos capítulos anteriores, os elétrons no grafeno se comportam como férmions sem massa e são descritos pela equação de Dirac. Se partículas são descritas pela equação de Dirac, a informação do material esta contida na  $v_F(x)$  e na massa. Podemos então imaginar heteroestruturas cuja a velocidade de Fermi e a massa podem variar com a posição. Em sistemas nos quais a  $v_F(x)$  varia de acordo com a posição, é necessário definir o Hamiltoniano, que descreverá a dinâmica de tal sistema. Uma forma bem conhecida de variar a  $v_F(x)$  é depositando um substrato sobre o grafeno. Desejamos também adicionar um campo magnético  $B(x)$  perpendicular ao plano na monocamada de grafeno. Assim, a equação efetiva para tal sistema será

$$\sqrt{v_F(x)}\vec{\sigma} \cdot \left( \vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A} \right) \sqrt{v_F(x)}\Psi(x, y) = E\Psi(x, y), \quad (4.1)$$

onde  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  são as matrizes de Pauli,  $\vec{A}$  é o potencial vetor e  $\Psi(x, y)$  é o spinor de duas componentes que representam as duas sub-redes do grafeno.

A equação (4.1) foi modificada em relação à forma usual para o Hamiltoniano se tornar hermitiano, ou seja, um observável físico, que é uma consequência da  $v_F(x)$  dependente da posição(48). É válido lembrar que nessa equação desprezamos o efeito da interação spin-órbita.

No gauge de Landau, nós temos que  $\vec{A} = (0, A(x), 0)$ . A função de onda é um invariante por translação na direção  $y$ , que nos permite escrever  $\Psi(x, y) = \psi(x)e^{ik_y y}$ . Também definimos  $\phi(x) = \sqrt{v_F(x)}\psi(x)$ . Então, a nova equação (4.1) será

$$[-i\partial_x\sigma_x + (k_y + A(x))\sigma_y]\phi(x) = \frac{E}{v_F(x)\hbar}\phi(x). \quad (4.2)$$

Para facilitar as contas, utilizamos um sistema sem dimensão, sendo todas as variáveis expressas em unidades de  $B_0$ , que é a magnitude do campo, e  $\ell_B = \sqrt{\hbar c/eB_0}$  é definido como o comprimento magnético. Assim,  $A(x)$  será escrito em termos de  $B_0\ell_B$ ,  $x$

em unidades de  $\ell_B$ ,  $k_y$  em unidades de  $\ell_B^{-1}$  e  $E$  em unidades de  $\hbar v_F/\ell_B$ . Como esse sistema é adimensional, a velocidade de Fermi será incluída no problema através da energia.

Dessa forma, já estamos prontos para resolver a equação 4.2 a fim de encontrar suas soluções e construir a matriz de transferência para esse problema, com objetivo de entender os efeitos da modulação da  $v_F(x)$  e a aplicação do campo magnético na monocamada de grafeno. A equação nos dará duas equações acopladas da seguinte forma

$$-i[\partial_x + (k_y + A_y)]\phi_B = E\phi_A \quad (4.3)$$

e

$$-i[\partial_x - (k_y + A_y)]\phi_A = E\phi_B. \quad (4.4)$$

Desacoplando as duas equações para  $\phi_A$ , obtemos primeiramente

$$\partial_x^2 \phi_A + k_x^2(x)\phi_A = 0, \quad (4.5)$$

onde  $k_x(x) = \sqrt{E^2 - \partial_x A_y - (k_y + A_y)^2}$ . A solução da equação dependerá da forma de  $A_y$ . Para obter  $\phi_B$ , substituiremos  $\phi_A$  na equação (4.4).

Serão considerados três formas para  $A_y$ : barreiras magnéticas; barreiras e poços magnéticos; e uma super-rede periódica.

É importante definirmos o fluxo magnético já que estamos tratando de regiões que variam com seu comprimento. Portanto,

$$\Theta = \begin{cases} Nl_b, \text{ Caso1} \\ N(l_B - l_{-B}), \text{ Caso2.} \end{cases} \quad (4.6)$$

onde  $\Theta$  é o fluxo magnético. O caso 1 é definido como a situação na qual são analisadas apenas barreiras magnéticas. O caso 2 é a situação que possui barreiras e poços magnéticos.

A seguinte solução é obtida resolvendo as equações 4.3 e 4.4.

Primeiramente, ao analisarmos fora da região onde possui o campo magnético, vemos que a solução da equação 4.2 é

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_x^i x} + e^{-ik_x^i x} \\ \frac{(k_x^i + ik_y)}{E} e^{ik_x^i x} + \frac{R(-k_x^i + ik_y)}{E} e^{-ik_x^i x} \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Em seguida, para a região após a barreira, onde também não possui campo magnético, a solução é

$$\psi(x) = T \sqrt{\frac{k_x^i}{k_x^f}} \left( \begin{array}{c} e^{ik_x^f x} \\ \frac{(k_x^f + i(k_y + \Theta))}{E} e^{ik_x^f x} \end{array} \right) \quad (4.8)$$

Esse tipo de problema nos entrega algo interessante quanto à transmissão para certos ângulos de incidência. Considerando primeiramente a região com campo magnético nulo, temos

$$k_{ix} = E \cos \phi, k_{iy} = E \sin \phi \quad (4.9)$$

em seguida, para a região com campo magnético diferente de zero

$$k_{fx} = E \cos \phi_f, k_{fy} = E \sin \phi_f - \Theta \quad (4.10)$$

Devido à condição de conservação do momento  $k_y$ ,  $k_{iy} = k_{fy}$ , temos que

$$\begin{aligned} E \sin \phi &= E \sin \phi_f - \Theta, \\ \left| \sin \phi_i + \frac{\Theta}{E} \right| &\leq 1 \end{aligned} \quad (4.11)$$

Essa equação mostra que só pode existir transmissão para ângulos de incidência específicos e dependem diretamente do fluxo  $\Theta$  e inversamente da energia. A equação 4.11 nos mostra também que, sob a condição de

$$\frac{\Theta}{E} = 2, \quad (4.12)$$

ocorrerá reflexão total para qualquer ângulo que seja, pois como sabemos, o maior valor do  $\sin \phi$  é 1. Caso isso ocorra, o termo  $\Theta/E$  tem que ser zero, isto é,  $E \rightarrow \infty$  ou  $\Theta$  tem que ser zero. No caso de não acontecer estas situações,  $\sin \phi$  tem que ser sempre um número cuja soma com  $\Theta/E$  dê no máximo 1 ou no mínimo -1.

Isso nos mostra um dos principais resultados: diferentemente de barreiras eletrostáticas, barreiras magnéticas podem ser utilizadas para confinar quasipartículas no grafeno.

O ângulo de incidência terá uma relação com o ângulo de transmissão como apresentado na figura 11 seguindo a equação 4.11

Agora com o objetivo de resolver a equação 4.5 vamos definir os perfis de potencias adotados nesse trabalho.

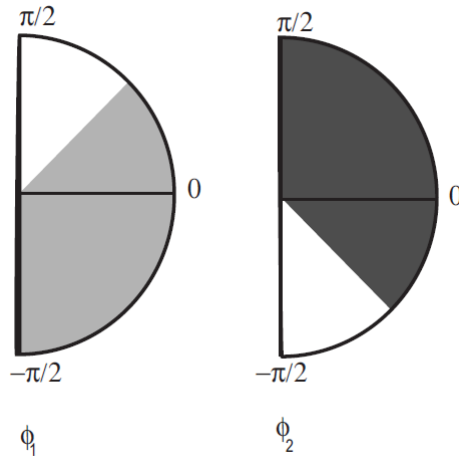


Figura 11 – Representação dos limites dos ângulos de incidência  $\phi_1$  e transmissão  $\phi_{12}$  sobre uma barreira magnética.

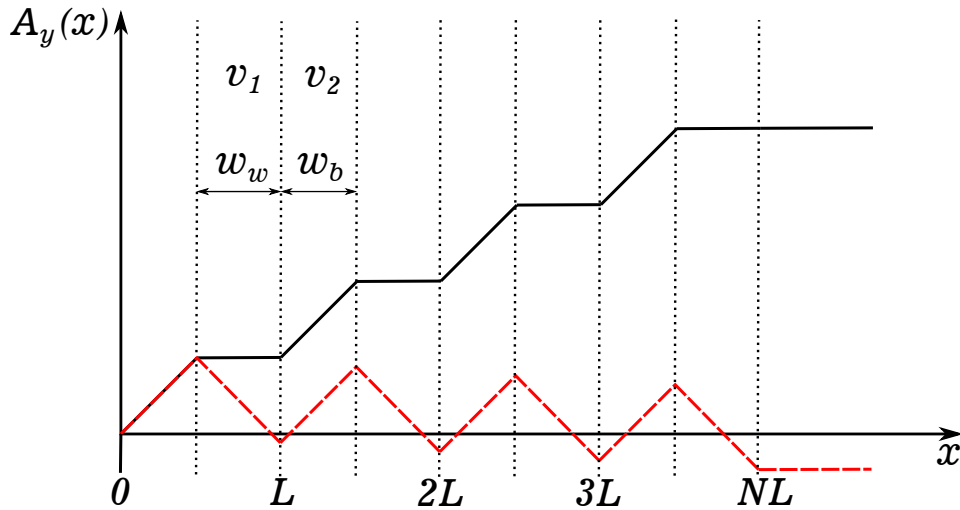


Figura 12 – Representação dos potenciais utilizados: a) Em preto temos o potencial vetor criado pelas barreiras magnéticas; b) Em vermelho temos o potencial vetor criado pelas barreiras e poços magnéticos.

## 4.2 Múltiplas Barreiras Magnéticas

Com a finalidade de estudar barreiras magnéticas, há a necessidade de definir como os potenciais  $A(x)$  serão construídos (Figura 12), já que dependem da posição. O padrão estabelecido para as barrerias seguem as leis de recorrência seguintes:

$$A_y(x) = \begin{cases} 0, & x \in [-\infty, 0] \\ B_0(x - nw_b), & x \in [nL, nL + w_b] \\ B_0(n + 1)w_b, & x \in [nL + w_b, (n + 1)L] \\ Nw_bB_0, & x \in [NL, \infty] \end{cases} \quad (4.13)$$

onde  $n = 0, \dots, N - 1$  e  $L = w_b + w_w$ , sendo  $w_b$  o comprimento da barreira de potencial.

De acordo com as soluções da equação 4.2 para a região com  $B_z = 0$ , nós temos

$$\phi(x) = A \left( \frac{1}{\frac{k_x + i(k_y + A_y)}{E}} \right) e^{ik_x x} + B \left( \frac{1}{\frac{-k_x + i(k_y + A_y)}{E}} \right) e^{-k_x x}. \quad (4.14)$$

Essa solução pode ser escrita como

$$\phi(x) = \Omega_0 \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

onde

$$\Omega_0 = \begin{pmatrix} e^{ik_x x} & e^{-ik_x x} \\ \frac{k_x + i(k_y + A_y)}{E} e^{ik_x x} & \frac{-k_x + i(k_y + A_y)}{E} e^{-ik_x x} \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Para as regiões com  $B_z \neq 0$ , temos

$$\phi(x) = \Omega_B \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

onde

$$\Omega_B = \begin{pmatrix} D_p(q) & D_p(-q) \\ \frac{i\sqrt{2B_0}}{E} D_{p+1}(q) & -\frac{i\sqrt{2B_0}}{E} D_{p+1}(-q) \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

onde  $q = \sqrt{2/B_0}(k_y + A_y(x))$ ,  $p = (E)^2/(2B_0) - 1$  e  $D_p(q)$  são chamadas de funções de Weber ou funções cilíndricas parabólicas.

$$\Omega_B = \begin{pmatrix} D_p(q) & D_p(-q) \\ \frac{i\sqrt{2}}{E} D_{p+1}(q) & -\frac{i\sqrt{2}}{E} D_{p+1}(-q) \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

Utilizando as condições de continuidade e o método da matriz de transferência, obtemos

$$T_n = \Omega_O^{-1}(x_n) \Omega_B(x_n) \Omega_B^{-1}(x_n + L_B) \Omega_O(x_n + L_B) \quad (4.20)$$

Vale ressaltar que a função de onda do problema é  $\psi(x)$ , e não  $\phi(x)$ . No entanto, se estivermos considerando a velocidade de Fermi de entrada a mesma de saída, então a matriz  $T_n$  é a mesma obtida para  $\phi$  e para  $\psi$ .

## 4.3 Barreiras e poços magnéticos

Na análise de barreiras e poços magnéticos, o perfil para o potencial vetor será

$$A_y(x) = \begin{cases} 0, & x \in [-\infty, 0] \\ B_0 n(w_b - w_{-b}) + (x - nw_b), & x \in [nL, nL + w_b] \\ B_0(2w_b - x + nw_b), & x \in [nL + w_b, (n+1)L] \\ NB_0(w_b - w_{-b}), & x \in [NL, \infty] \end{cases} \quad (4.21)$$

Nesse caso, surge a necessidade de criar uma matriz para as regiões de poços, que é dada por

$$\Omega_{-B} = \begin{pmatrix} D_{p+1}(-q) & D_{p+1}(q) \\ \frac{-i\sqrt{2}}{E} D_{p+1}(-q) & \frac{i\sqrt{2}}{E} D_{p+1}(q) \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

Após a manipulação algébrica com a solução e as condições de contorno semelhantes ao perfil de barreiras magnéticas, temos

$$T_n = \Omega_O^{-1}(x_0) \Omega_B(x_0) T_0 T_1 \dots T_{N-2} T_{N-1} \Omega_B^{-1}(x_n) \Omega_O(x_n) \quad (4.23)$$

Seguindo o mesmo princípio para encontrar numericamente o valor da transmissão estudamos diversos casos que se seguem a fim de analisar o transporte eletrônico.

## 4.4 Resultados numéricos

### Múltiplas Barreiras Magnéticas

Inicialmente, discutiremos os resultados numéricos para a probabilidade de transmissão em barreiras magnéticas com a variações na velocidade de Fermi. Essa análise tem como objetivo principal entender o funcionamento das barreiras magnéticas e quais condições podemos confinar quasipartículas no grafeno. Veremos também a vantagem da modulação da velocidade de Fermi com a posição em sistemas desse tipo.

De acordo com a figura 13 vemos que devido ao aumento do número de barreiras magnéticas a transmissão tende a diminuir seu ângulo cada vez mais. Para a situação a qual temos a velocidade de Fermi  $v_F = 1$ , linha verde, fica claro que a transmissão é máxima para qualquer ângulo. Se o número de barreiras do sistema aumenta, também vemos uma oscilação na transmissão, e esse fator é intensificado com o aumento da velocidade de Fermi. Se diminuirmos a mesma, vemos que existe a possibilidade de não ocorrer transmissão, que seria o caso para  $N=5$  e  $v_F = 3$ .

A figura 14 mostra a dependência angular da transmissão para  $N=1$ ,  $N=3$  e  $N=5$  barreiras com  $v_F = 1$  e diferentes larguras  $w_b$ . Como podemos ver a diminuição da largura



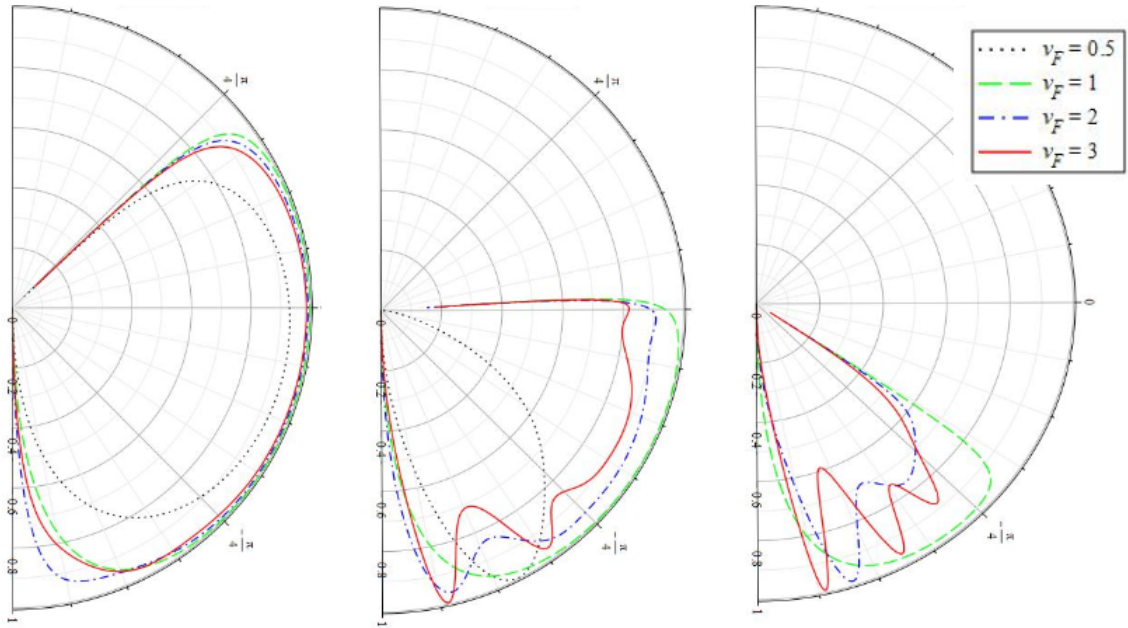


Figura 13 – Representação do coeficiente de transmissão em barreiras magnéticas através de gráficos polares com a variação da velocidade de Fermi. Os gráficos polares representam, respectivamente,  $N=1$ ,  $N=3$  e  $N=5$  barreiras magnéticas com  $E=3.2$ .

da barreira faz com que os ângulos de transmissão também diminuam. o que aparenta esta acontecendo é que o comprimento da barreira ser menor implica em uma perturbação, ou impureza local do sistema, fazendo assim com que a transmissão diminua com a diminuição da largura das barreiras magnéticas. Isso é até sugerido melhor quando as impurezas locais surgem com maior frequência, como no caso de  $N = 5$ , onde temos o menor ângulo, e menor transmissão possível.

### Poços e Barreiras Magnéticas Alternadas

De acordo com a figura 15 podemos ver que os valores da velocidade de Fermi na barreira e nos poços fazem diferença na transmissão e nos ângulos para melhor transmissão. A figura 15 mostra uma situação na qual foi fixada a  $v_F=2.0$  para a barreira e variada para os poços com os seguintes valores:  $v_F = 0.5$ ,  $v_F = 1.0$ ,  $v_F = 2.0$  e  $v_F = 3.0$ .

Fica fácil ver através das figuras que existe uma combinação de  $v_F$  para os poços magnéticos que combinados as barreiras magnéticas faz com que o ângulo seja o máximo possível para a transmissão. É como se a medida que aumentasse a velocidade de Fermi as oscilações da parte de cima do gráfico vão sendo sincronizadas com as oscilações da parte de baixo. Então, dependendo do objetivo, podemos escolher  $v_F$  que tenham transmissão máxima ou confinamento dos quasipartículas para certos ângulos.

A figura 16 apresenta como a transmissão ocorrerá para certos valores de  $v_F$  com e ângulos de incidência com  $E=1$ .

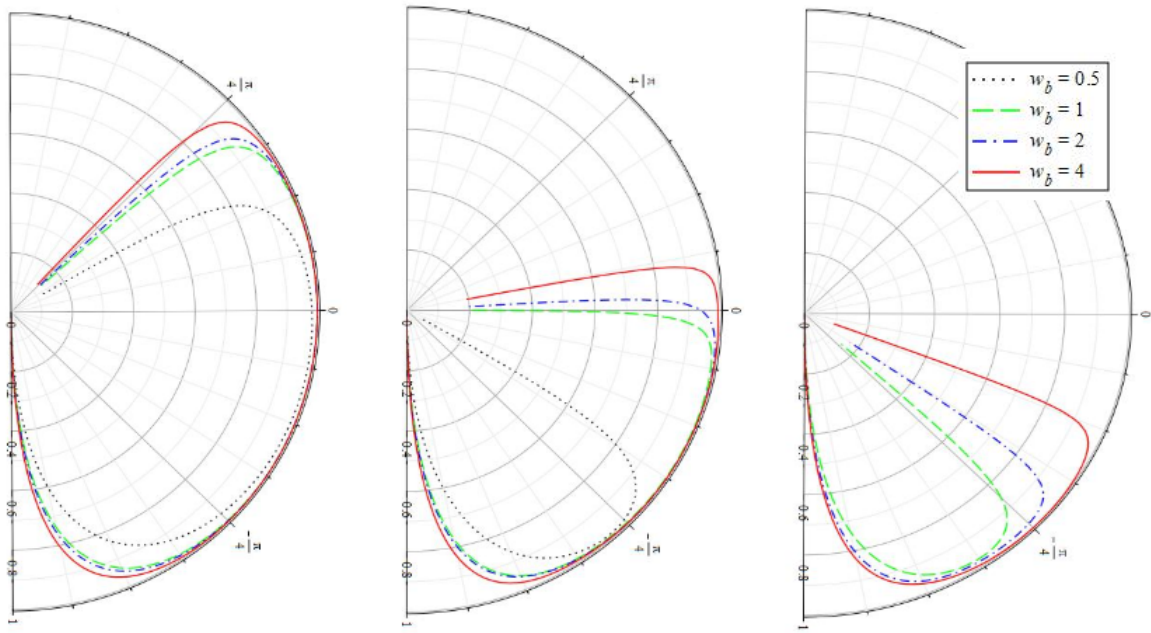


Figura 14 – Representação do coeficiente de transmissão em barreiras magnéticas através de gráficos polares com a variação da velocidade de Fermi. Os gráficos polares representam, respectivamente,  $N=1$ ,  $N=3$  e  $N=5$  barreiras com  $v_F=1$  e  $w_b = 0.5$ ,  $w_b = 1.0$ ,  $w_b = 2.0$  e  $w_b = 4.0$ , respectivamente com  $E=1$ .

Vemos que com o aumento do número de células o sistema se torna cada vez menos transmissor. Para  $N=1$  a transmissão ocorre para uma grande variedade de ângulos, mas dependendo da velocidade de Fermi, esse ângulo pode variar para esquerda ou direita, como representado na figura 16.

A figura 17 apresenta como a transmissão ocorrerá para certos valores de  $v_F$  com e ângulos de incidência com  $E=3.2$ .

Podemos ver que o aumento do número de barreiras faz com que surjam canais de transmissão para cada velocidade de Fermi. Nesse caso foi estabelecido como  $v_F = 2.0$  para os poços magnéticos.

Caso o número de células seja pequeno, existe uma grande quantidade de ângulos disponíveis para transmissão. A medida que aumentamos essa quantidade de barreiras a transmissão para as velocidades de Fermi nas barreiras tornam o sistema mais seletivo.

Como era de se esperar, a figura 17 apresenta que para uma energia maior temos uma transmissão maior. Podemos concluir isso através da comparação com a figura 16.

Na figura 18 surgem alguns gaps de energia, mas aqui o fato de a quantidade de barreiras aumentar faz com que esses gaps diminuam. Além de termos para certos ângulos pequenos gaps, por exemplo para  $N = 7$  vemos que na região onde a energia varia de  $E = 3$  a  $E = 4.5$  aproximadamente, temos 5 gaps de energia para o ângulo de incidência de  $-1,5$ .

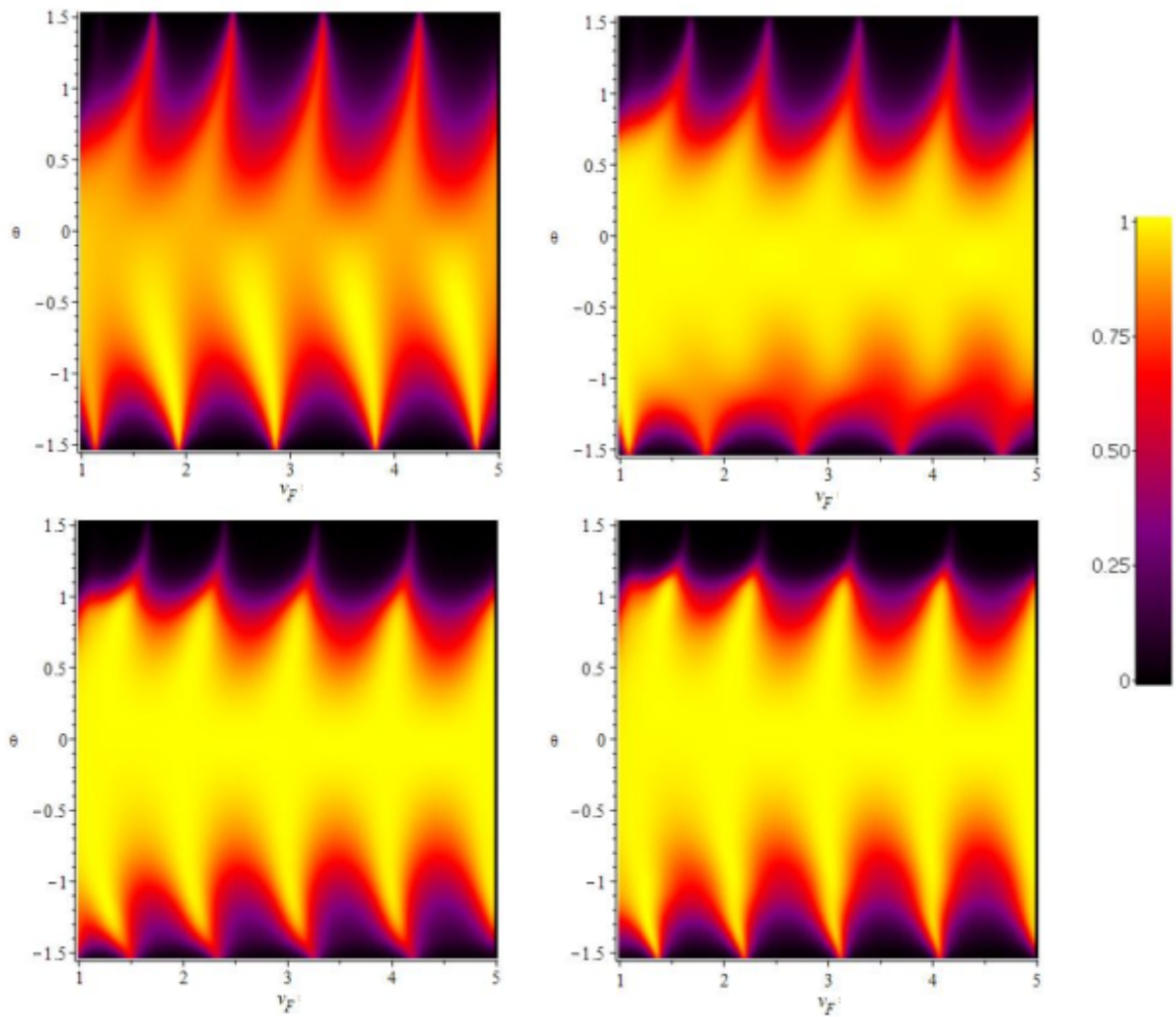


Figura 15 – Representação do coeficiente de transmissão em função da variação do ângulo e da  $\nu_F$  nas regiões de barreiras. cada gráfico de densidade tem como valor para a  $\nu_F$  nos poços  $\nu_F = 0.5$ ,  $\nu_F = 1.0$ ,  $\nu_F = 2.0$  e  $\nu_F = 3.0$ , respectivamente.

Na figura 19 temos a transmissão em função da energia  $E$  e do ângulo. As células são descritas com  $N=2$ ,  $N=4$  e  $N=6$ . Para uma  $\nu_F = 3$  temos uma oscilação na transmissão bem intensa, como já vimos, mas esse resultado destaca casos em que existe total confinamento.

## 4.5 Super-redes magnéticas

Utilizando o formalismo desenvolvido na seção 3.3 obtivemos

$$2\cos(K_x l) = \text{Tr}(T) \quad (4.24)$$

Fixando o valor de  $k_y$  na equação 4.24, temos a energia em função do momento de Bloch  $K_x$ . Note que  $K_x$  mostrar a periodicidade da estrutura. Isso pode ser confundido com

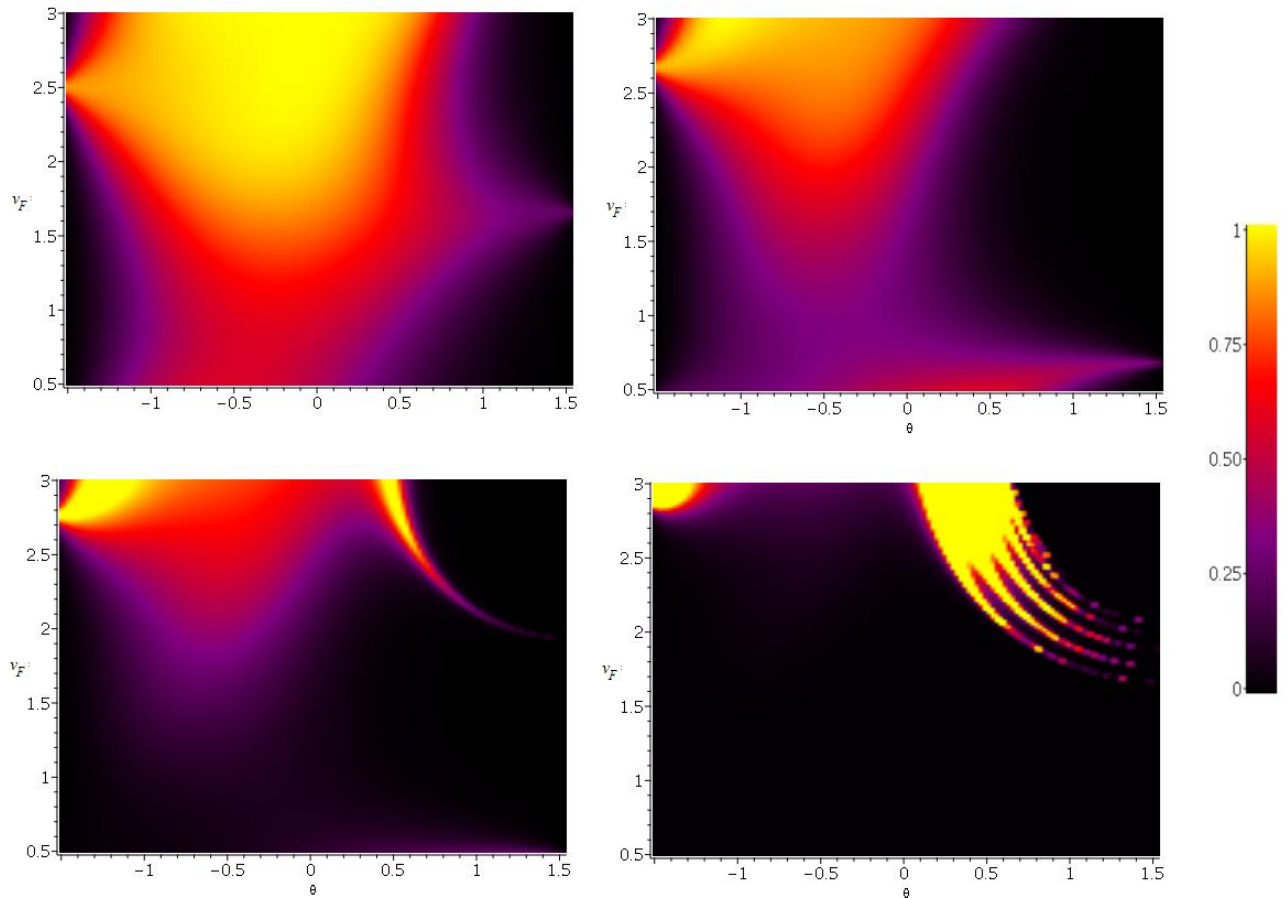


Figura 16 – Gráfico de densidade representando a transmissão em função do velocidade de Fermi e do ângulo de incidência  $\theta$ , com partículas de energia  $E=1$  para  $N=1$ ,  $N=2$ ,  $N=3$  e  $N=8$ .

a componente x do momento  $k_x$ . Vemos na figura 20 que para as regiões próximas aos pontos  $K_x = 0$  não existe gap. O único efeito que a a modulação da velocidade de Fermi, representada no gráfico como  $\zeta$ , é que o cone que representa a banda de energia tende a ficar mais aberto. Para  $\zeta = 0.5$  temos um cone mais estreito do que para  $\zeta = 1$ .

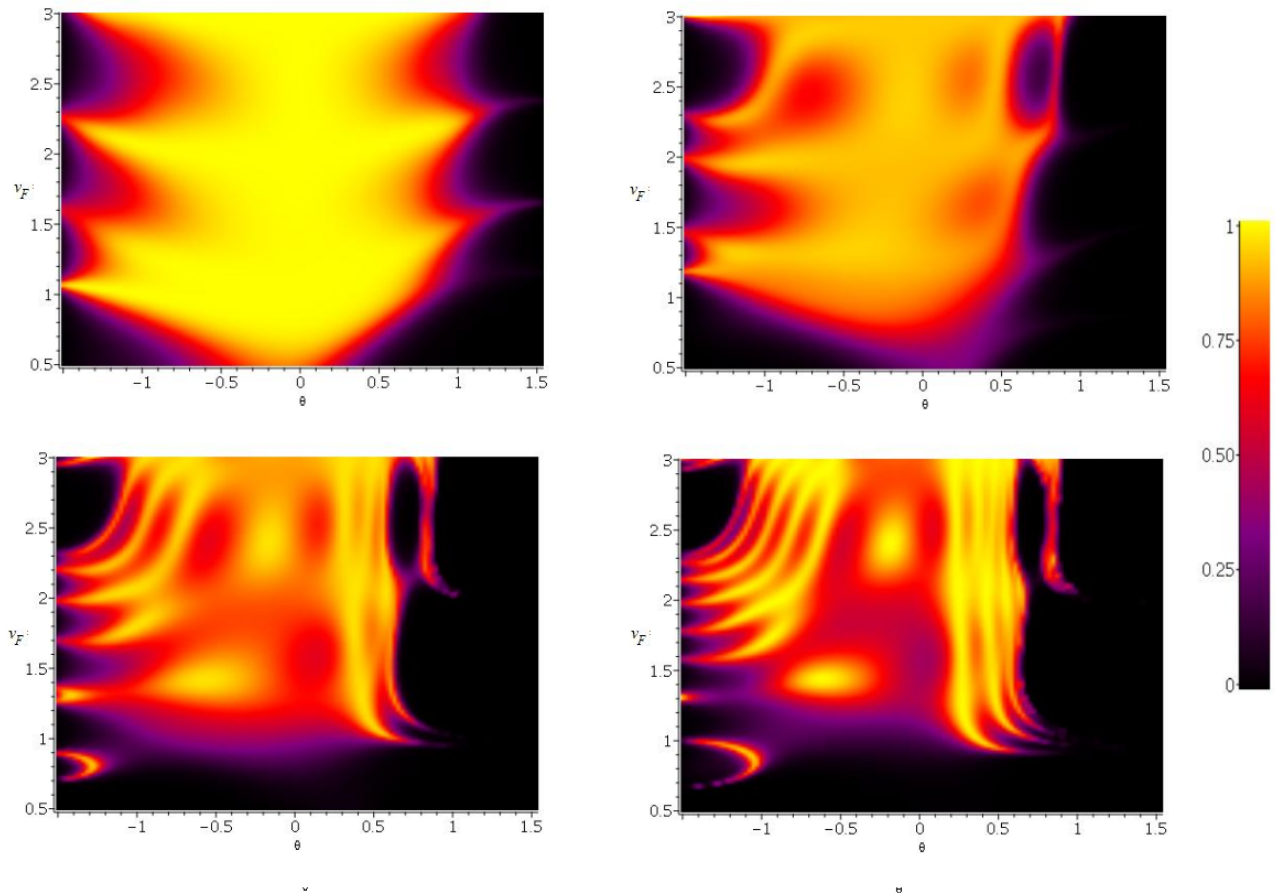


Figura 17 – Gráfico de densidade representando a transmissão em função do ângulo de incidência e da velocidade de Fermi, com partículas de energia  $E=3.2$  com  $N=1$ ,  $N=2$ ,  $N=3$  e  $N=6$ .

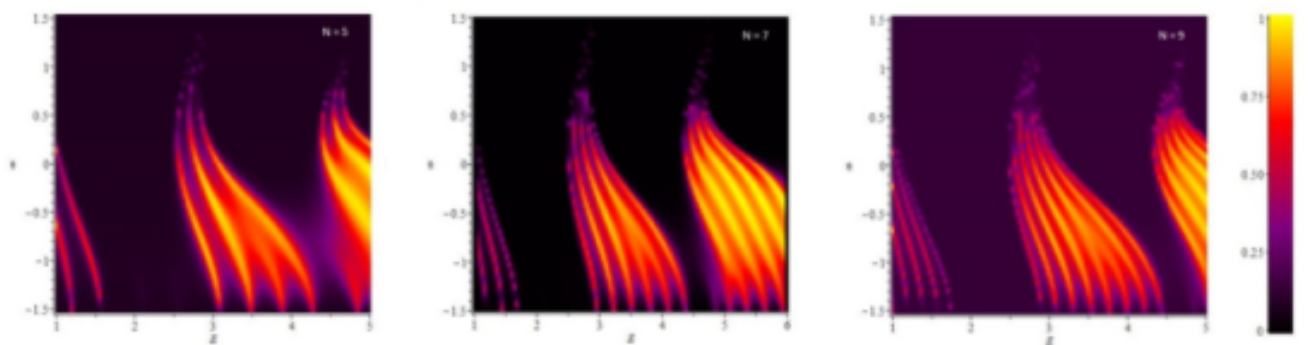


Figura 18 – Gráfico de densidade representando a transmissão em função do ângulo de incidência e da energia  $E$  com  $v_F = 2$  nas barreiras e  $v_F = 0.5$  nos poços, com partículas de energia  $E=3.2$  com  $N=5$ ,  $N=7$ ,  $N=9$ .

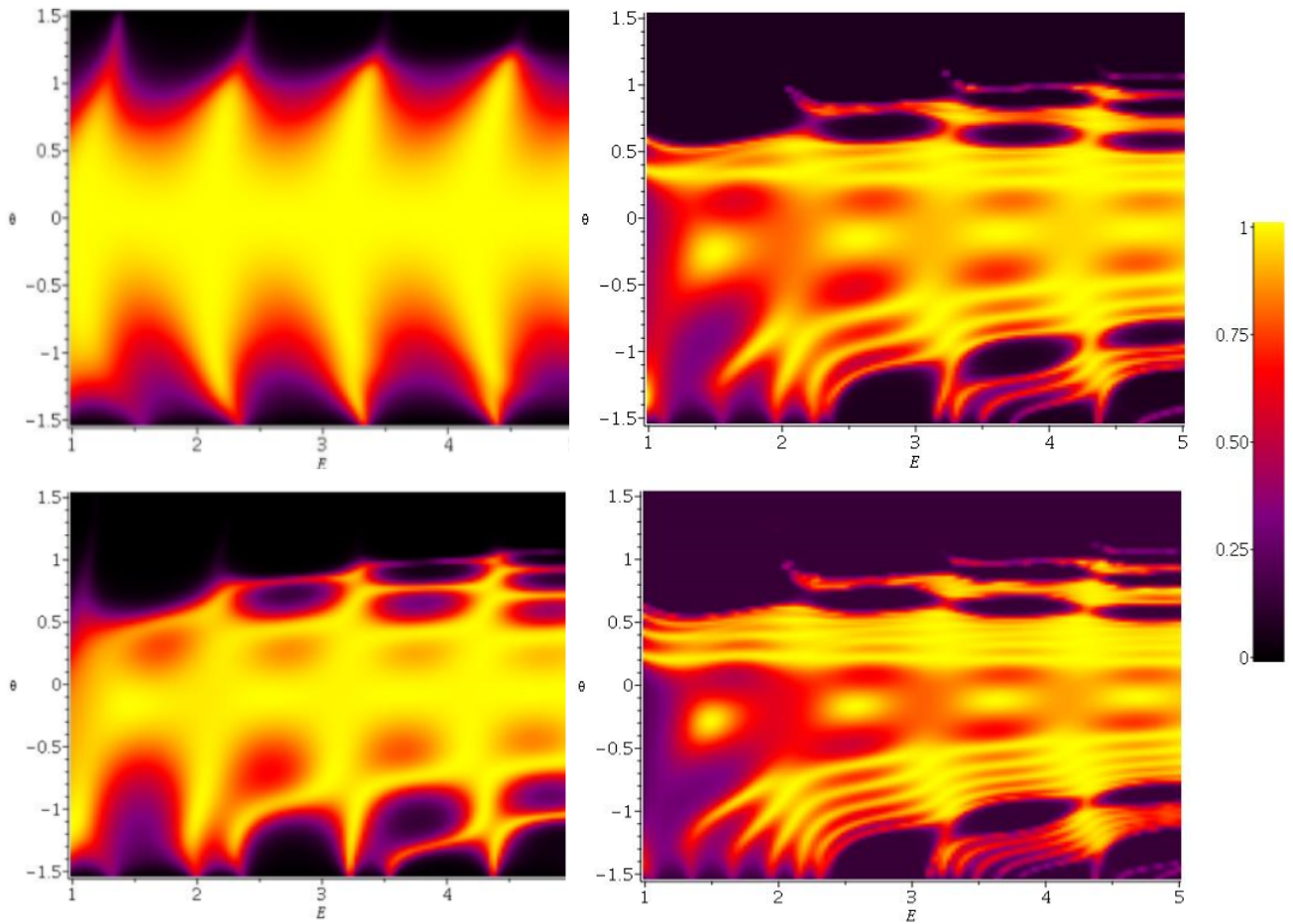


Figura 19 – Células magnéticas para  $v_F=3$  com  $N=1$ ,  $N=2$ ,  $N=4$ ,  $N=6$ . Dependência da transmissão com o ângulo de incidência e da energia  $E$ .

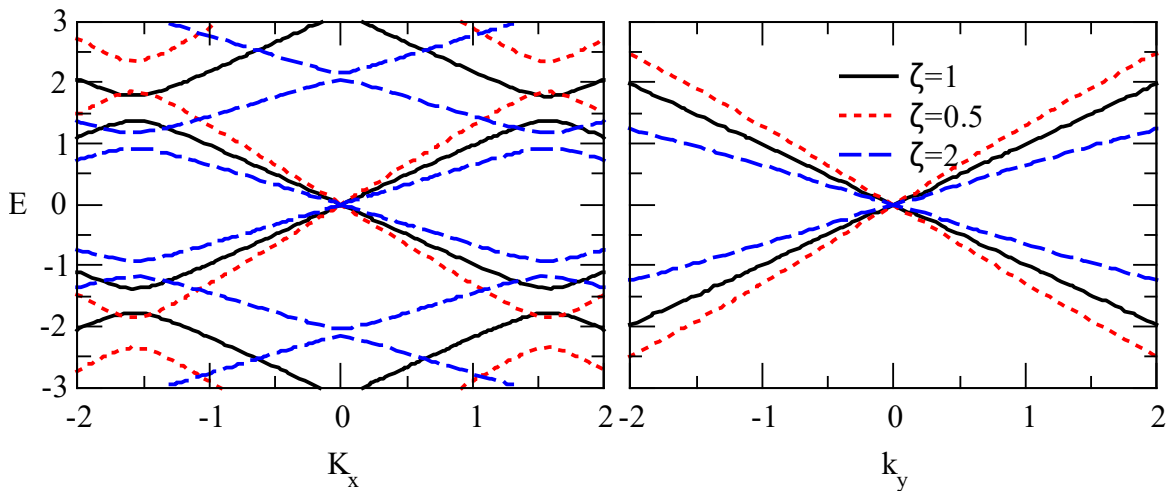


Figura 20 – Figura da esquerda representa o espectro para uma rede periódica com  $w_0 = w_B = 1$  e  $k_y = 0$ . A figura da direita representa o espectro para a mesma rede periódica com  $K_x = 0$ . Onde  $v_F = \zeta$  é alterado para as regiões de barreira e mantido  $v_F = 1$  para as regiões de poço.

## 5 Conclusão

### 5.1 Conclusão

Nessa dissertação estudamos super-redes magnéticas no grafeno com modulação da velocidade de Fermi, com o objetivo de analisar e controlar o transporte eletrônico no grafeno.

A baixas energias o grafeno possui uma relação de dispersão linear, demonstrando que os elétrons se comportam como partículas fermiônicas sem massa. Essa característica gera grande interesse na investigação de suas propriedades. Assim, buscamos entender como funciona o transporte na presença de um campo magnético não homogêneo, ou seja, criando super-redes magnéticas.

Estudamos os efeitos da aplicação de um campo magnético no grafeno e sua influência no transporte eletrônico através do método de matrizes de transferência. Foi observado que existe uma limitação dos ângulos de incidência que dependem da energia da partícula e do fluxo magnético para que haja transmissão. Verificamos, então, que as barreiras magnéticas servem para confinar elétrons e ao mesmo tempo criar canais de transmissão, ou seja, ângulos bem definidos de incidência no sistema bidimensional nos quais ocorrerá altos valores para transmissão.

Analisando os resultados numéricos, vimos que o aumento do número de barreiras magnéticas no sistema influenciava diretamente no coeficiente de transmissão. Cada vez que aumentava o número de barreiras, para que houvesse transmissão, o ângulo iria diminuindo cada vez mais. Vimos também para esses casos que o aumento da velocidade de Fermi fazia com que o sistema oscilasse o valor do coeficiente de transmissão criando ângulos bem definidos de transmissão máxima.

Analisamos também o caso da variação do comprimento da barreira magnética,  $w_b$ . Vimos que com o aumento do número de barreiras o ângulo de transmissão vai diminuindo, independente do tamanho da barreira. Mas como a diminuição do número de barreiras, esse efeito é intensificado, fazendo com que tenha um efeito semelhante a impurezas locais que interferem na transmissão, existindo assim barreiras, que dependendo da sua largura, serão impurezas, atrapalhando a transmissão no sistema, e barreiras devido ao seu longo comprimento terão a função de reverter o efeito causado pelo aumento do número de barreiras, tornando assim o oposto das impurezas, ou talvez, regiões de maior condutividade.

Verificamos também que a modulação da velocidade de Fermi é útil para maximizar a transmissão de acordo com os ângulos de incidência. Ou seja, ajustando os valores

de  $v_F$  nas barreiras magnéticas podemos ter um ângulo maior de incidência favorável a transmissão. Isso se dá devido a  $v_F$  estar relacionado a energia  $E$  das partículas que são postas no sistema. Ocorre uma contribuição direta na fase da onda de forma que pode se alterar os pontos de interferência. Em alguns pontos surgem interferências construtivas ou destrutivas, contribuindo ou não para uma transmissão.

Foi verificado também que variando a energia das partículas, a transmissão se torna maior, como era esperado. Mas algo diferente é a capacidade de selecionar ângulos de transmissão bem definidos, impulsionando o efeito do número de barreiras magnéticas. Em super-redes a modulação da velocidade de Fermi causou um afinamento, a mediada que  $v_F$  diminuía, do cone de Dirac, e uma abertura no ângulo do cone de Dirac quando  $v_F$  aumentava.

Finalmente podemos ver que as barreiras magnéticas tem a capacidade de controlar o transporte de elétrons e com a ajuda da modulação da velocidade de Fermi esses efeitos podem ser acentuados, criando regiões com características condutoras ou isolantes. Nossas perspectivas em relação ao transporte eletrônico no grafeno é que está cada vez mais próximo de termos controle total sobre esse material tão incrível que trará grande benefícios devido a sua leveza, resistência e mobilidade eletrônica. E como visto nesse trabalho, uma grande contribuição para o controle eletrônico no grafeno é a utilização de campos magnéticos de baixa intensidade.



# Referências

- [1] G. Miessler, D. Tarr, and P. Fischer, *Química Inorgânica*. PEARSON BRASIL, 2014.
- [2] 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.
- [3] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “The electronic properties of graphene,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, pp. 109–162, Jan 2009.
- [4] C. Berger, Z. Song, X. Li, X. Wu, N. Brown, C. Naud, D. Mayou, T. Li, J. Hass, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer, “Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene,” *Science*, vol. 312, no. 5777, pp. 1191–1196, 2006.
- [5] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene,” *Nat Phys*, vol. 2, p. 620, 2006.
- [6] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, “Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene,” *Nat Mater*, vol. 6, p. 770, Oct 2007.
- [7] T. B. Martins, R. H. Miwa, A. J. R. da Silva, and A. Fazzio, “Electronic and transport properties of boron-doped graphene nanoribbons,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 196803, May 2007.
- [8] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly, and J. van den Brink, “Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: *Ab initio* density functional calculations,” *Phys. Rev. B*, vol. 76, p. 073103, Aug 2007.
- [9] R. Lv and M. Terrones, “Towards new graphene materials: Doped graphene sheets and nanoribbons,” *Materials Letters*, vol. 78, no. 0, pp. 209 – 218, 2012. 30th Anniversary Special Issue.
- [10] J. Gebhardt, R. J. Koch, W. Zhao, O. Höfert, K. Gotterbarm, S. Mammadov, C. Papp, A. Görling, H.-P. Steinrück, and T. Seyller, “Growth and electronic structure of boron-doped graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, p. 155437, Apr 2013.
- [11] A. De Martino, L. Dell’Anna, and R. Egger, “Magnetic confinement of massless dirac fermions in graphene,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 066802, Feb 2007.

- 
- [12] H. Xu, T. Heinzl, M. Ewaldsson, and I. V. Zozoulenko, “Magnetic barriers in graphene nanoribbons: Theoretical study of transport properties,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 245401, Jun 2008.
- [13] A. D. Martino, L. Dell’Anna, and R. Egger, “Magnetic barriers and confinement of dirac–weyl quasiparticles in graphene,” *Solid State Communications*, vol. 144, no. 12, pp. 547 – 550, 2007. Fundamental phenomena in low-dimensional electron systems.
- [14] N. Myoung and G. Ihm, “Tunneling of dirac fermions through magnetic barriers in graphene,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 42, no. 1, pp. 70 – 72, 2009.
- [15] E. Milpas, M. Torres, and G. Murguía, “Magnetic field barriers in graphene: an analytically solvable model,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 23, p. 245304, jun 2011.
- [16] D.-N. Le, V.-H. Le, and P. Roy, “Conditional electron confinement in graphene via smooth magnetic fields,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 96, pp. 17 – 22, 2018.
- [17] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, A. Matulis, and F. M. Peeters, “Direction-dependent tunneling through nanostructured magnetic barriers in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 235443, Jun 2008.
- [18] L. Dell’Anna and A. De Martino, “Multiple magnetic barriers in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 79, p. 045420, Jan 2009.
- [19] J. R. F. Lima and F. Moraes, “Indirect band gap in graphene from modulation of the fermi velocity,” *Solid State Communications*, vol. 201, pp. 82 – 87, 2015.
- [20] P. M. Krstajić and P. Vasilopoulos, “Ballistic transport through graphene nanostructures of velocity and potential barriers,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 23, p. 135302, mar 2011.
- [21] J. R. F. Lima, “Electronic structure of a graphene superlattice with a modulated fermi velocity,” *Physics Letters A*, vol. 379, no. 20, pp. 1372 – 1376, 2015.
- [22] H. Cheraghchi and F. Adinehvand, “Control over band structure and tunneling in bilayer graphene induced by velocity engineering,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 26, p. 015302, nov 2013.
- [23] J. R. F. Lima, “Engineering the electronic structure of graphene superlattices via fermi velocity modulation,” *The European Physical Journal B*, vol. 90, p. 5, Jan 2017.

- 
- [24] A. Esmailpour, H. Meshkin, and R. Asgari, “Conductance of graphene superlattices with correlated disorder in velocity profiles,” *Solid State Communications*, vol. 152, no. 20, pp. 1896 – 1901, 2012.
- [25] J. R. F. Lima, L. F. C. Pereira, and C. G. Bezerra, “Controlling resonant tunneling in graphene via fermi velocity engineering,” *Journal of Applied Physics*, vol. 119, no. 24, p. 244301, 2016.
- [26] T. Araújo and J. R. F. Lima, “Periodic to quasi-periodic graphene superlattice transition by fermi velocity modulation,” *Physics Letters A*, vol. 381, no. 37, pp. 3228 – 3235, 2017.
- [27] A. Nascimento, R. Lima, M. Lyra, and J. Lima, “Electronic transport on graphene armchair-edge nanoribbons with fermi velocity and potential barriers,” *Physics Letters A*, vol. 383, no. 20, pp. 2416 – 2423, 2019.
- [28] J. R. F. Lima, “Controlling the energy gap of graphene by fermi velocity engineering,” *Physics Letters A*, vol. 379, no. 3, pp. 179 – 182, 2015.
- [29] J. R. F. Lima, A. L. Barbosa, C. Bezerra, and L. F. C. Pereira, “Tuning the fano factor of graphene via fermi velocity modulation,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 97, pp. 105 – 110, 2018.
- [30] A. Raoux, M. Polini, R. Asgari, A. R. Hamilton, R. Fazio, and A. H. MacDonald, “Velocity-modulation control of electron-wave propagation in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 073407, Feb 2010.
- [31] J.-H. Yuan, Z. Cheng, Q.-J. Zeng, J.-P. Zhang, and J.-J. Zhang, “Velocity-controlled guiding of electron in graphene: Analogy of optical waveguides,” *Journal of Applied Physics*, vol. 110, no. 10, p. 103706, 2011.
- [32] P. Ghosh and P. Roy, “Bound states in graphene via fermi velocity modulation,” *The European Physical Journal Plus*, vol. 132, no. 1, p. 32, 2017.
- [33] F. Sattari and S. Mirershadi, “Spin-dependent conductance and shot noise in graphene based periodic velocity barrier,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 111, pp. 438 – 445, 2017.
- [34] A. Lins and J. R. F. Lima, “Perfect valley filter controlled by fermi velocity modulation in graphene,” *Carbon*, vol. 160, pp. 353 – 360, 2020.
- [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.

- [36] C. Hwang, D. A. Siegel, S.-K. Mo, W. Regan, A. Ismach, Y. Zhang, A. Zettl, and A. Lanzara, “Fermi velocity engineering in graphene by substrate modification,” *Sci. Rep.*, vol. 2, p. 590, Aug 2012.
- [37] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, “Transport properties of graphene across strain-induced nonuniform velocity profiles,” *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 195404, Nov 2011.
- [38] W.-J. Jang, H. Kim, Y.-R. Shin, M. Wang, S. K. Jang, M. Kim, S. Lee, S.-W. Kim, Y. J. Song, and S.-J. Kahng, “Observation of spatially-varying fermi velocity in strained-graphene directly grown on hexagonal boron nitride,” *Carbon*, vol. 74, pp. 139 – 145, 2014.
- [39] A. Díaz-Fernández, L. Chico, J. W. González, and F. Domínguez-Adame, “Tuning the Fermi velocity in Dirac materials with an electric field,” *Scientific Reports*, vol. 7, p. 8058, dec 2017.
- [40] *INTRODUCTION TO SOLID STATE PHYSICS, 7TH ED.* Wiley India Pvt. Limited, 2007.
- [41] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics*. HRW international editions, Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [42] D. G. S. and S. Riichiro, *Physical Properties Of Carbon Nanotubes*. World Scientific Publishing Company, 1998.
- [43] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, A. Matulis, and F. M. Peeters, “Direction-dependent tunneling through nanostructured magnetic barriers in graphene,” *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 235443, Jun 2008.
- [44] B. H. J. McKellar and G. J. Stephenson, “Relativistic quarks in one-dimensional periodic structures,” *Phys. Rev. C*, vol. 35, pp. 2262–2271, Jun 1987.
- [45] P. Boonserm, “Rigorous bounds on Transmission, Reflection, and Bogoliubov coefficients,” other thesis, 6 2009.
- [46] P. Boonserm and M. Visser, “One dimensional scattering problems: A pedagogical presentation of the relationship between reflection and transmission amplitudes,” *Thai Journal of Mathematics Special Issue (Annual Meeting in Mathematics)*, pp. 83–97, 01 2010.
- [47] S. Khorasani and A. Adibi, “New matrix method for analytical solution of linear ordinary differential equations,” *Electronic Journal of Differential Equations*, vol. 79, 01 2003.

- 
- [48] N. M. R. Peres, “Scattering in one-dimensional heterostructures described by the dirac equation,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 21, p. 095501, jan 2009.