



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-reitoria de Pesquisa e Pós-graduação
Departamento de Física

Programa de Pós-graduação em Física Aplicada

Voos de Lévy em fitas de grafeno

Diego Bruno da Fonseca

Dissertação de Mestrado

Recife - PE
7 de abril de 2024

Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-reitoria de Pesquisa e Pós-graduação
Departamento de Física

Diego Bruno da Fonseca

Voos de Lévy em fitas de grafeno

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa

Recife - PE
7 de abril de 2024

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

Voos de Lévy em fitas de grafeno

Diego Bruno da Fonseca

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 23/02/2024 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
UFRPE

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Ailton Fernandes de Macedo Junior
UFRPE

Prof. Dr. Joaquim Bonfim Santos Mendes
UFV

“Você deve aproveitar os pequenos desvios ao máximo. Porque é onde você vai encontrar as coisas mais importantes do que as que você quer.”

Yoshihiro Togashi

Dedico a todos que me ajudaram na minha jornada e também dedico a futuros alunos que esse texto possa ajuda-los.

Agradecimentos

Inicialmente, agradeço ao conjunto de eventos inimagináveis desde o início do universo até o atual momento, que coincidentemente me trouxe até aqui.

Agradeço a minha mãe, Lidia, que cuidou de mim, que me educou, que quando eu era criança, diversas vezes pegou na minha mão para que eu concluísse as minhas atividades escolares, foi e é uma referencia de honestidade, correteude e cuidado, por causa dela eu existo e sou como sou.

Agradeço a meu pai, Max(*in memorian*), por ter feito parte de minha criação, por todos os passeios divertidos, por ter sido trabalhador e apesar de tudo amparar nossa casa, foi um exemplo de compartilhamento e de criatividade, também por causa dele eu existo, a sua vitalidade existe em mim.

Agradeço a minha irmã, Camilla, ela foi o exemplo mais próximo a mim de conclusões de fases acadêmicas definitivamente e isso me incentivou a seguir, além disso, ela é uma companhia, uma amiga, é bom te-lá por perto, me divirto bastante com ela.

Agradeço a minha companheira, Joana, que vem trilhando a vida comigo, por sua atenção, por seu carinho, por me apoiar, por se divertir ao meu lado, incentivar o meu amadurecimento, pela sua presença na minha vida.

Agradeço a minhas avós, Berenice e Maria, por todo apoio dado.

Agradeço aos meus amigos Alex, Allan, Gabriel, João Vitor, Leon e Lucas, por serem amigos muito bons e pessoas impressionantes.

Agradeço aos amigos que fiz na graduação Luciano, Michel, Johnny, João, Sofia e a galera do PET-Física por compartilharem momentos comigo seja em aula, ou fora de aula.

Agradeço aos moradores do LaSCoU, José Dias, Marcos, Luis, Ikaro, Antonio, Nallyson, Ruan, Matheus, Pedro, Mario, Yago, Thiago, Rafa, Laíse e Laedson, graças a vocês e ao chefe da sala, durante o mestrado não faltou historias para contar.

Tenho um agradecimento especial a Vinícius, Fernando e Luan, que são pessoas que me motivam muito intensamente a me sair o melhor possível em provas, em apresentações, na escrita, são pessoas incríveis e são referencias pra mim como estudantes e pesquisadores.

Agradeço a Athenógenes Neto por sua assistência em questões burocráticas durante meu mestrado.

Agradeço aos professores do DF, especialmente aos professores Pedro Hugo, Ailton, Ramon, Aduino e Nathan por me darem uma base solida que contribuiu bastante na minha vida acadêmica e estudos. Um agradecimento ainda mais especial ao professor Anderson Barbosa por ter aceito me orientar desde a graduação na IC e ter me dado a possibilidade de participar de vários trabalhos, de continuar me incentivando a buscar mais oportunidades, sou imensamente grato e espero continuar colaborando e produzindo.

Aos membros da banca examinadora por aceitar julgar este trabalho e pelas contribuições enriquecedoras fornecidas.

Por fim, agradeço à Universidade Federal Rural de Pernambuco, ao Programa de Pós Graduação em Física Aplicada - PPGFA pelo suporte físico e a Fundação de Amparo a Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco - FACEPE pelo suporte financeiro.

Resumo

Um dos tópicos de pesquisa mais ativos em matéria condensada é o estudo do transporte eletrônico através de uma fita de grafeno submetida às barreiras eletrostáticas com diferentes distribuições. Em óptica, quando a luz é submetida a um dispositivo óptico contendo microesferas circulares de vidro com distribuição de Lévy, conhecido como vidro de Lévy óptico, a luz apresenta uma distribuição de lei de potência para os comprimentos dos passos, que resulta em um comportamento superdifusivo da transmissão da luz. Ao fazer uma analogia entre transmissão eletrônica e transmissão da luz, o grafeno oferece uma plataforma única, pois sua relação de dispersão linear coincide qualitativamente com a dos fótons. Desta forma, neste trabalho propomos um dispositivo eletrônico análogo ao vidro de Lévy óptico, o qual denominamos como vidro de Lévy eletrônico. Investigamos o transporte em fitas de grafeno sob a influência de aglomerados eletrostáticos circulares com diâmetros distribuídos de acordo com uma lei de potência. Utilizando cálculos numéricos, analisamos os efeitos desses aglomerados na transmissão de elétrons através do vidro de Lévy eletrônico. Mostramos que o vidro de Lévy eletrônico apresentam uma transição de transporte superdifusivo-para-difusivo à medida que a energia é variada. Além disso, indicamos que a mais provável causa da transição de transporte superdifusivo-para-difusivo é a quebra da simetria quiral. Em suma, propomos um dispositivo eletrônico que possibilita os elétrons realizarem voos de Lévy por meio da interação com aglomerados eletrostáticos em fitas de grafeno.

Palavras-chave: Voo de Lévy, Grafeno, Transporte eletrônico, Barreiras eletrostáticas.

Abstract

One of the most active research topics in condensed matter physics is the study of electronic transport through a graphene ribbon subjected to electrostatic barriers with different distributions. In optics, when light is subjected to an optical device containing circular glass microspheres with a Levy distribution, known as optical Lévy glass, the light exhibits a power-law distribution for step lengths, resulting in superdiffusive light transmission behavior. Graphene provides a unique platform by drawing an analogy between electronic and light transmission, as its linear dispersion relation qualitatively matches that of photons. Thus, in this work, we propose an electronic device analogous to optical Lévy glass, which we term electronic Lévy glass. We investigate transport in graphene ribbons under the influence of circular electrostatic clusters with diameters distributed according to a power-law. Using numerical calculations, we analyze the effects of these clusters on electron transmission through the electronic Lévy glass. We demonstrate that electronic Lévy glass exhibits a superdiffusive-to-diffusive transport transition as energy is varied. Furthermore, we suggest that the most likely cause of the superdiffusive-to-diffusive transport transition is the breaking of chiral symmetry. In summary, we propose an electronic device that allows electrons to undergo Lévy flights through interaction with electrostatic clusters in graphene ribbons.

Keywords: Lévy flight, Graphene, Electronic transport, Electrostatic barriers.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Esboço da Dissertação	4
1.1.1	Capítulo 2	4
1.1.2	Capítulo 3	4
1.1.3	Capítulo 4	5
1.1.4	Capítulo 5	5
1.1.5	Capítulo 6	5
2	Teorema Central do Limite Generalizado e os Voos de Lévy	7
2.1	Teorema Central do Limite e sua relação com o Processo de Difusão Normal	7
2.2	Teorema Central do Limite Generalizado e distribuições estáveis de Lévy	9
2.3	Voos de Lévy	11
2.4	Voos de Lévy para Luz	12
2.4.1	Transmissão	14
3	Transporte quântico	15
3.1	Modelo Tight Binding	16
3.1.1	Modelagem para 2DEG	17
3.1.2	Modelagem para grafeno	19
3.2	Teoria do espalhamento e Formalismo de Landauer-Büttiker	24
3.3	Metodo da Função de Green	26
3.4	Kwant	30
4	Metodologia	33
4.1	Modelagem do Sistema	33
4.2	Distribuição de pontos quânticos eletrostáticos	34
5	Resultados e Discussão	37
5.1	Transmissão	37
5.1.1	Grafeno submetido à potencial constante e a desordem de Anderson	39
5.1.2	2DEG submetido ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos	40
5.2	Transição Superdifusivo para Difusivo	41
5.2.1	Abordagem 1: Varias amostras de Vidro de Lévy eletrônico	41
5.2.2	Abordagem 2: Series temporais em uma única amostra de vidro de Lévy eletrônico	42
5.2.3	Efeito da largura da nanofita na transição de Lévy-para-difusivo	42

5.3	Discutindo possíveis origens para a transição Lévy-para-difusivo	44
5.3.1	Densidade de Corrente	45
5.3.2	Análise q -Gaussiana das series temporais dos incrementos de transmissão	46
5.3.3	Considerações sobre a Quebra de Simetria Quiral na Transição Lévy-para-Difusiva	48
6	Conclusão	51
6.1	Trabalhos publicados	51
6.2	Trabalhos em redação	52
6.3	Participações em eventos	52

Lista de Figuras

- 1.1 Esquema de uma vista superior do grafeno com (a) uma rede de pontos quânticos alinhados (0°) e (b) uma rede de pontos quânticos inclinada (30°) no topo, conectado por eletrodos de fonte e dreno. Os discos cinza indicam os pontos de metal que definem o potencial na superfície do grafeno. Distribuição de densidade eletrônica para espalhamento de Mie em cascata nos casos: (c) alinhados e (d) potenciais inclinados. (e) Uma imagem de microscopia eletrônica de uma amostra de grafeno com uma rede de pontos quânticos inclinada (30°), com esquematização da medição de tensões longitudinais e transversais. Figura retirada da referência [1]. 2
- 1.2 (Esquerda) Ilustração e (direita) micrografia eletrônica do interior de um vidro de Lévy óptico. Figuras retiradas das referências [24, 25], respectivamente. 3
- 2.1 Trajetórias de caminhadas aleatórias após 10000 passos. (a) Caminhada aleatória difusiva normal, com passos dados por uma distribuição gaussiana. (b) Caminhada aleatória de Levy, com passos dados por uma distribuição lei de potência com $\alpha = 1,5$. 11
- 2.2 (a) Histograma das posições finais de 10000 caminhantes após 10000 passos em escala mono-log. Os quadrados pretos se referem aos caminhantes brownianos e os círculos azuis se referem aos caminhantes de Lévy. (b) Desvio quadrático médio em função do tempo em escala log-log. Os quadrados pretos representa a dispersão browniana e os círculos azuis a dispersão de Lévy, as curvas solidas são seus respectivos ajustes por lei de potência. O desvio foi calculado entre 10000 caminhantes. 12
- 2.3 Representação do vidro de Lévy óptico bidimensional, as esferas de vidro tem seus diâmetros distribuídos por uma lei de potência. Figura retirada da referência [45]. 13
- 2.4 Transmissão em função do comprimento L através de um vidro de Lévy óptico. É possível observar que a transmissão da luz superdifusiva decai mais lentamente que a lei de Ohm regular. Figura retirada da referência [45]. 14
- 3.1 Relação de dispersão $E(\mathbf{k})$. (a) Para a rede quadrada. (b) Para o grafeno. As curvas pontilhadas são as aproximações para $\mathbf{k} \rightarrow 0$. 19

- 3.2 (a) Orbitais de valência do carbono no grafeno, três orbitais σ no plano do grafeno, responsáveis pelas propriedades mecânicas do grafeno e o orbital π perpendicular a malha responsáveis pelas propriedades eletrônicas. (b) Ocupação dos estados ao nível de Fermi. (c) Ilustração da base de vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 na rede de grafeno que tem dois átomos (A e B) por célula unitária. (d) Ilustração da rede recíproca, célula unitária em cinza e base de vetores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 . Figura retirada da referência [98]. 20
- 3.3 Representação de uma região espalhadora ligada por guias à dois reservatórios, cada um com potenciais eletroquímicos μ_1 e μ_2 . Os vetores \mathbf{a}^+ e \mathbf{a}^- representam, respectivamente, os modos propagantes que entram e que saem da região de espalhamento pelo guia da esquerda. Os vetores \mathbf{b}^+ e \mathbf{b}^- representam, respectivamente, os modos propagantes que entram e que saem da região de espalhamento pelo guia da direita. 24
- 3.4 Uma amostra condutora descrita pelo hamiltoniano H_c conectada a dois guias descritos respectivamente por H_p e H_q , através das matrizes acoplamento τ_p e τ_q . 28
- 3.5 Visualização através do pacote Kwant do 2DEG, AGNR e ZGNR, todas puras, e suas respectivas bandas de energias (a-c) e também suas respectivas (d-f) transmissões em função da energia. 31
- 4.1 Ilustração de (a) AGNR e (b) ZGNR conectados a dois terminais (em vermelho). Os círculos cinza representam o cluster de pontos quânticos eletrostáticos. 33
- 4.2 Diagramação do algoritmo para construção dos clusters eletrostáticos para a produção do vidro de Lévy eletrônico. 35
- 4.3 Exemplificação de um vidro de Lévy eletrônico no AGNR com dimensões $W_A = 49.5a_0$ e $L_A = 150.7a_0$. Os sítios em verde tem potencial eletrostático de valor V . 36
- 4.4 Histograma dos raios dos aglomerados (símbolos). A linha sólida é um ajuste obtido a partir da equação (4.2) com $\beta = 1.22 \pm 0.01$. 36
- 5.1 Transmissão através do vidro de Lévy eletrônico como função da energia de Fermi (linhas sólidas). As linhas pontilhadas são para as nanofitas de grafeno puras. 38
- 5.2 (a) Transmissão média como função do comprimento L para AGNR, com número de canais $N = 8$ (círculos), 13 (quadrados) e 47 (diamantes). (b) A mesmo gráfico para ZGNR, com $N = 7$ (círculos), 15 (quadrados) e 49 (diamantes). As linhas sólidas em (a) e (b) são ajustes obtidos a partir da Eq. (2.22). 38
- 5.3 A transmissão como função do comprimento L para AGNR com potencial eletrostático constante $\varepsilon_i = V$ em todos os sítios (círculos), e para AGNR com desordem de Anderson (quadrados). Ambos para $N = 1$ (preto), 6 (vermelho) e 15 (azul) (ou seja, para três energias de Fermi diferentes). 39
- 5.4 Transmissão média como função do comprimento L para 2DEG, com número de canais $N = 1$ (círculos), 3 (quadrados), 4 (diamantes), 5 (triângulo cima), 10 (triângulo lado), 30 (cruz) e 51 (estrela). As linhas sólidas em (a) são ajustes exponenciais e linhas sólidas (b) são ajustes obtidos a partir da equação (2.22). 40

- 5.5 O expoente γ como função de N para um conjunto de amostras de vidros de Lévy eletrônico com $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$. Linhas sólidas são apenas para guiar os olhos. 42
- 5.6 Series temporais $T(V)$ para diferentes N , transmissão em função do potencial eletrostático V para vidros de Lévy eletrônicos de AGNR, ZGNR e 2DEG. As larguras das nanofitas são $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$, e os comprimentos são $L_A = 1050.7a_0$, $L_Z = 1050.5a_0$ e $L_{2D} = 1050a_0$. 43
- 5.7 O expoente γ como função de N para apenas uma amostra de ELG com $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$ (Símbolos triangulares são para um dispositivo AGNR com saltos de segunda vizinhança). Linhas sólidas são apenas para guiar os olhos. 43
- 5.8 O expoente γ como função de N para uma amostra de ELG com $W_A = 59.5a_0$ e $W_Z = 60.0a_0$. Linhas sólidas são apenas para guiar os olhos. 44
- 5.9 Densidade de corrente para uma AGNR com $L_A = 1050.7a_0$ e $N = 1, 2, 5, 10, 20$ e 47 (de cima para baixo). A densidade de corrente aumenta à medida que a cor muda de azul para vermelho. 45
- 5.10 Densidade de corrente para uma ZGNR com $L_A = 1050.5a_0$ e $N = 1, 3, 5, 21$ e 47 (de cima para baixo). A densidade de corrente aumenta à medida que a cor muda de azul para vermelho. 46
- 5.11 Series temporais $\delta T(V)$ para diferentes N , velocidade de transmissão em função do potencial eletrostático V para vidros de Lévy eletrônicos de AGNR, ZGNR e 2DEG. As larguras das nanofitas são $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$, e os comprimentos são $L_A = 1050.7a_0$, $L_Z = 1050.5a_0$ e $L_{2D} = 1050a_0$. 47
- 5.12 Histograma da *velocidade de transmissão* δT e suas respectivas curvas de ajuste q-Gaussiano a partir da equação 5.1 para nanofitas de: (a) AGNR com $W_A = 49.5a_0$ e $L_A = 1050.7a_0$ com $N = 1$ (preto), 10 (vermelho) e 33 (azul), (b) ZGNR com $W_A = 49.6a_0$ e $L_A = 1050.5a_0$ com $N = 1$ (preto), 11 (vermelho) e 33 (azul) e (c) 2DEG com $W_A = 45a_0$ e $L_A = 1050a_0$ com $N = 6$ (preto), 10 (vermelho) e 30 (azul). 47
- 5.13 O expoente γ como função do parâmetro q , para AGNR e ZGNR. 49

Introdução

Na busca por análogos eletrônicos de fenômenos e dispositivos ópticos, o grafeno apresenta propriedades únicas, especialmente próximo ao ponto de neutralidade de carga, conhecido como ponto de Dirac. Nessa proximidade, o grafeno exibe uma relação de dispersão linear, qualitativamente coincidente com a relação de dispersão da luz [1–5]. Essa dispersão linear é devida à rede hexagonal de favo de mel do grafeno, que pode ser vista como uma rede Bravais triangular com uma base de dois átomos [6–8]. No ponto de Dirac, os portadores de carga se comportam como férmions de Dirac relativísticos sem massa, e a rede preserva a simetria quiral.

Devido às suas propriedades eletrônicas únicas que dão origem ao tunelamento de Klein [9, 10], onde férmions sem massa podem atravessar uma barreira de potencial com probabilidade de reflexão nula, o grafeno tem se destacado como um material promissor na área de pesquisa conhecida como óptica de elétrons [2, 11]. Assim, o grafeno pode ser considerado uma plataforma para explorar análogos eletrônicos de fenômenos ópticos, abrindo caminho para uma série de aplicações na óptica de elétrons.

A óptica de elétrons, também conhecida como *electron optics*, refere-se ao estudo e aplicação de ondas de elétrons de maneira análoga à manipulação de ondas de luz na óptica. Assim como na óptica, onde as ondas de luz são controladas usando lentes, espelhos, prismas e outros componentes ópticos para direcionar sua propagação, foco e manipulação, na óptica de elétrons, feixes de elétrons são gerenciados e manipulados usando várias técnicas para alcançar efeitos semelhantes [12]. Uma técnica comumente utilizada é o uso de gates eletrostáticos superiores/inferiores, que permite o controle do análogo eletrônico do índice de refração [11], possibilitando assim a manipulação do comportamento dos elétrons. Pontos quânticos definidos eletrostaticamente no grafeno, desempenham papéis similares a partículas dielétricas na óptica, e têm sido extensivamente estudados nesse contexto [13, 14].

Dentro desse contexto, pesquisas recentes têm explorado o uso de super-redes de grafeno e potenciais eletrostáticos para emular fenômenos ópticos. Por exemplo, o fenômeno do espalhamento de Mie, que é observado quando ondas de luz são dispersas elasticamente por objetos esféricos ou cilíndricos, foi estudado em uma super-rede de grafeno imersa em um potencial eletrostático cilíndrico [15–17]. Além disso, foi estudado o efeito de uma matriz regular de pontos quânticos eletrostáticos em nanofitas de grafeno, resultando na indução de uma deformação local dos potenciais nos sítios sob os pontos quânticos [18]. Estas previsões teóricas foram confirmadas experimentalmente por Caridad *et al.*, que apresentaram um análogo eletrônico do espalhamento de Mie usando uma super-rede de grafeno imersa em uma matriz regular de pontos quânticos eletrostáticos [1].

No experimento, as amostras de grafeno são clivadas mecanicamente, com uma rede de potenciais eletrostáticos regulares espaçados periodicamente, como mostrado na figura 1.1. Cada potencial eletrostático é criado por meio de metal depositado localmente na parte superior da folha de grafeno fechada, mais precisamente por um ponto circular de titânio (Ti) ou paládio

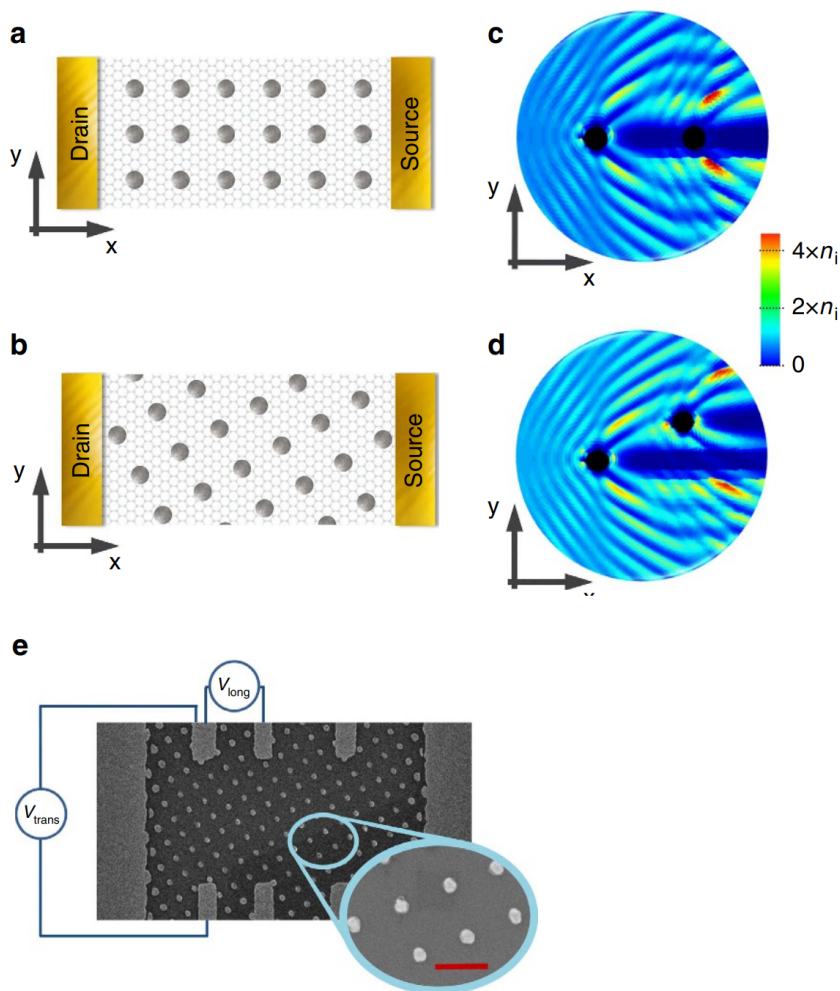


Figura 1.1: Esquema de uma vista superior do grafeno com (a) uma rede de pontos quânticos alinhados (0°) e (b) uma rede de pontos quânticos inclinada (30°) no topo, conectado por eletrodos de fonte e dreno. Os discos cinza indicam os pontos de metal que definem o potencial na superfície do grafeno. Distribuição de densidade eletrônica para espalhamento de Mie em cascata nos casos: (c) alinhados e (d) potenciais inclinados. (e) Uma imagem de microscopia eletrônica de uma amostra de grafeno com uma rede de pontos quânticos inclinada (30°), com esquematização da medição de tensões longitudinais e transversais. Figura retirada da referência [1].

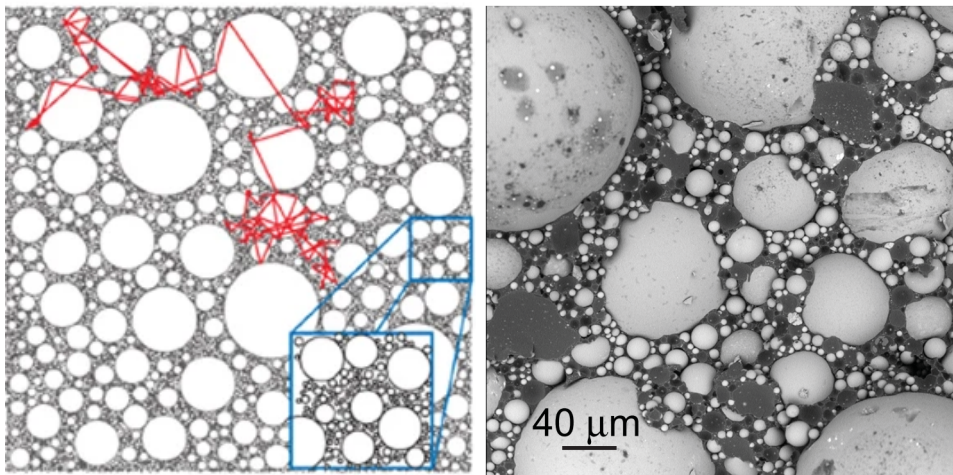


Figura 1.2: (Esquerda) Ilustração e (direita) micrografia eletrônica do interior de um vidro de Lévy óptico. Figuras retiradas das referências [24, 25], respectivamente.

(Pd) com diâmetro de 100nm, podendo deslocar o potencial local dos sítios na folha de grafeno negativamente ou positivamente, respectivamente, a depender da escolha.

Para demonstrar o espalhamento de Mie em cascata, foram produzidos dois tipos de dispositivos com a rede de potenciais eletrostáticos orientada em ângulos de 30° e 0° em relação à direção x , como ilustrado nas figuras 1.1(a) e 1.1(c), respectivamente. Na configuração com ângulo 0° , não pode ser detectada tensão transversal. No entanto, quando a matriz de pontos quânticos está inclinada, é esperado que seja detectada uma tensão transversal, medida como ilustrado na figura 1.1(e). A medida de tensão transversal neste experimento é indicativa do espalhamento de Mie em cascata. Este estudo foi seguido por uma série de trabalhos relevantes que exploram os efeitos de aglomerados de potenciais eletrostáticos em grafeno [19–23].

Dado o contexto da óptica de elétrons, é relevante mencionar um trabalho da óptica importante no transporte de ondas de luz, intitulado *A Lévy flight for light* [24]. Nesse trabalho, é proposto e desenvolvido um dispositivo óptico conhecido como *vidro de Lévy óptico*, no qual as ondas de luz seguem um padrão de transporte regido pela estatística de Lévy, também conhecido como voo de Lévy, como mostra a figura 1.2. Em um voo de Lévy, as etapas do processo de caminhada aleatória possuem uma distribuição de lei de potência, o que significa que saltos extremamente longos podem ocorrer, levando a um comportamento de superdifusão. Isso contrasta com a difusão normal, onde não há uma probabilidade significativa de ocorrência de saltos longos, afetando diretamente a transmissão da luz. Quando superdifusiva, a localização da transmissão apresenta um decaimento mais lento em comparação com a difusão normal.

O vidro de Lévy, em sua construção, incorpora microesferas de alto índice de refração, como o dióxido de titânio, em uma matriz de vidro. O aspecto crucial desse dispositivo é que as microesferas têm sua distribuição de diâmetros regida por uma lei de potência. Essa característica é fundamental para que a luz realize a dinâmica superdifusiva quando atravessa o vidro de Lévy. A lei de potência na distribuição de diâmetros das microesferas contribui para a ocorrência de saltos extremamente longos na trajetória da luz, caracterizando o comportamento superdifusivo observado nesse material óptico.

Diante desse dispositivo óptico que induz voos de Lévy à luz, nosso objetivo é propor o análogo eletrônico: o *vidro de Lévy eletrônico*. Este seria um dispositivo que permite a dinâmica superdifusiva de elétrons na matéria condensada. Inspiramo-nos em trabalhos teóricos e experimentais que empregam pontos quânticos eletrostáticos no grafeno para explorar a óptica de elétrons, destacando especialmente o estudo da referencia [1] como ponto de partida. Propomos um arranjo no qual o grafeno é submetido a clusters de pontos quânticos eletrostáticos circulares, cujos raios seguem uma distribuição de lei de potência, similar ao seu análogo óptico. Salientamos a plausibilidade experimental dessa proposta, uma vez que o hamiltoniano desse sistema é bastante semelhante ao apresentado em referências anteriores [15–18], que foram confirmadas experimentalmente por Caridad *et al.* [1]. Acreditamos que a realização experimental do vidro de Lévy eletrônico proposto por nós possa ser alcançada com adaptações ao arranjo experimental descrito na referência [1].

1.1 Esboço da Dissertação

A sequência desta dissertação está dividida em mais cinco capítulos, que serão brevemente apresentados nesse esboço.

1.1.1 Capítulo 2

O Capítulo 2 aborda o Teorema Central do Limite e sua generalização, o Teorema Central do Limite Generalizado, relacionando esses conceitos com os voos de Lévy, processos superdifusivos caracterizados por passos largos e distribuição de lei de potência. Mostra-se como esses voos são diferentes da difusão normal, sendo os voos de Lévy descritos pelo Teorema Central do Limite Generalizado e distribuições de Lévy, enquanto a difusão normal é descrita pelo Teorema Central do Limite e distribuições gaussianas. A aplicação do conceito de voos de Lévy na física é discutida, destacando a superdifusão em caminhadas aleatórias e seu uso na óptica, especificamente no vidro de Lévy óptico. Neste dispositivo, a transmissão da luz através desse vidro apresenta um comportamento superdifusivo, diferenciando-se do comportamento usual da difusão normal. Esse dispositivo é o que motiva nossa busca por um análogo eletrônico, o vidro de Lévy eletrônico, um sistema onde elétrons podem realizar voos de Lévy.

1.1.2 Capítulo 3

No capítulo 3 abordaremos os principais conceitos necessários para o estudo do transporte eletrônico em dispositivos mesoscópicos. Apresentaremos o modelo tight-binding, utilizado na descrição do hamiltoniano do nosso sistema. Além disso, discutiremos a teoria do espalhamento e o formalismo de Landauer-Büttiker, que estabelece a relação entre elementos da matriz de espalhamento e observáveis como condutância. Também revisaremos as aplicações das funções de Green no cálculo dos coeficientes de transmissão, e o pacote Kwant será apresentado como a ferramenta utilizada para realizar os cálculos numéricos neste trabalho.

1.1.3 Capítulo 4

Essencialmente, o Capítulo 4 fornece uma visão geral do sistema de estudo, denominado vidro de Lévy eletrônico. Este sistema consiste em nanofitas de grafeno com bordas armchair e zigzag submetidas a um cluster de pontos quânticos eletrostáticos. O capítulo também aborda a descrição do Hamiltoniano do sistema, que inclui termos de hopping entre os sítios da rede e potenciais eletrostáticos induzidos pelos pontos quânticos. Além disso, são dados os detalhes do método utilizado para a distribuição dos pontos quânticos do vidro de Lévy eletrônico e a caracterização da desordem no sistema.

1.1.4 Capítulo 5

O capítulo 5 apresenta os resultados obtidos na dissertação. Os resultados apresentados neste capítulo foram publicados na referencia [26]. Este capítulo une os principais conceitos mostrados em todos os capítulos anteriores. Através dos resultados obtidos através de cálculos numéricos, descrevemos o vidro de Lévy eletrônico. Observamos uma transição Lévy-para-difusivo no grafeno, investigamos características do sistema, as possíveis causas da transição e chegamos a qual é a causa mais plausível para a transição.

1.1.5 Capítulo 6

Este capítulo encerra nossa dissertação, resumindo os resultados obtidos e apresentando nossas conclusões. Reafirmamos a importância do estudo realizado e dos resultados obtidos ao longo deste trabalho. Além disso, discutiremos possíveis perspectivas para futuros trabalhos, buscando expandir os nossos resultados.

Teorema Central do Limite Generalizado e os Voos de Lévy

O Teorema Central do Limite (TCL) é um conceito fundamental na teoria das probabilidades, cujo desenvolvimento remonta a contribuições de importantes figuras como Laplace, Poisson, Markov e Chebyshev [27]. O TLC afirma que, à medida que o tamanho n da amostra aumenta, a distribuição da soma de n variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, com média e variância finitas, se aproxima de uma distribuição gaussiana. Isso ocorre independentemente da forma da distribuição das variáveis originais [28].

Inicialmente estudado por Einstein e Smoluchowski, o TCL estabelece uma conexão entre o movimento browniano e a difusão normal, sendo uma interpretação probabilística das propriedades do fenômeno difusivo normal (movimento browniano) [29–31]. No entanto, existem processos difusivos em que os passos (variáveis aleatórias) obedecem a distribuições com variância divergente, ou seja, apresentam passos largos que dominam a dinâmica. Desta forma, exibem uma dispersão mais rápida do que a difusão browniana e são conhecidos como voos de Lévy [32, 33]. Esses processos, ditos superdifusivos, estão fora do escopo do TCL e não são descritos por uma distribuição gaussiana, mas sim por distribuições com cauda pesada, como as leis de potência [34, 35].

Matematicamente, estes fenômenos são interpretados pelo Teorema Central do Limite Generalizado (TCLG), que afirma que a distribuição da soma de variáveis aleatórias identicamente distribuídas, cujas distribuições possuem caudas seguindo uma lei de potência com variância infinita, converge para uma das distribuições α -estáveis de Lévy [36].

Nesse capítulo, faremos uma breve discussão dos conceitos que fundamentam a compreensão do fenômeno dos voos de Lévy. Na seção 2.1, apresentaremos o TCL e sua conexão com a difusão normal. Em seguida, na seção 2.2, abordaremos a generalização do TCL, o TCLG, e seu resultado associado, as distribuições α -estáveis de Lévy. Posteriormente, na seção 2.3, apresentaremos o conceito de voos de Lévy e faremos uma comparação entre esse processo superdifusivo e o processo difusivo normal. Após introduzir o conceito de voo de Lévy, demonstraremos na seção 2.4 sua aplicação na compreensão da dinâmica da luz em meios ópticos desordenados, especificamente em um meio chamado vidro de Lévy, e, por fim, discutiremos o uso da transmissão como medida que pode caracterizar voos de Lévy.

2.1 Teorema Central do Limite e sua relação com o Processo de Difusão Normal

O TCL pode ser apresentado matematicamente como se segue. Suponhamos variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (X_1, X_2, \dots, X_n) . Essas variáveis aleatórias estão associadas a uma distribuição com média a e variância b^2 finita. Portanto, a soma dessas

variáveis $X_1 + X_2 + \dots + X_n$ terá média e variância na e nb^2 , respectivamente. Além disso, o TCL afirma que a variável z , definida como

$$z = \frac{1}{\sqrt{nb^2}} \sum_{j=1}^n [X_j - a] = \sum_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{n}} Y_j \quad (2.1)$$

terá sua distribuição de probabilidades dada por uma gaussiana normal

$$p(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2} \quad (2.2)$$

quando $n \rightarrow \infty$. Aqui, a variável aleatória definida $Y_i = \frac{X_i - a}{b}$ possui média 0 e variância 1.

Para demonstrar a relação acima, partimos da função característica de z dada por [37]

$$G_z(k) = \langle e^{ikz} \rangle \quad (2.3)$$

que pode ser reescrita como

$$G_z(k) = \left\langle \exp \left(ik \sum_{j=1}^n \frac{1}{\sqrt{n}} Y_j \right) \right\rangle = \prod_{j=1}^n \left\langle \exp \left(ik \frac{Y_j}{\sqrt{n}} \right) \right\rangle \quad (2.4)$$

usamos o fato de que todos os Y_i são variáveis independentes e distribuídos de forma idêntica, temos

$$G_z(k) = \left\langle \exp \left(ik \frac{Y_1}{\sqrt{n}} \right) \right\rangle^n = \left[g \left(\frac{k}{\sqrt{n}} \right) \right]^n. \quad (2.5)$$

Sendo $g(k)$ a função característica das variáveis aleatórias Y_j , já considerando a expansão em cumulantes (média 0, variância 1), $g(k/\sqrt{n})$ deve ser

$$g \left(\frac{k}{\sqrt{n}} \right) = \left\langle \exp \left(i \frac{k}{\sqrt{n}} Y_1 \right) \right\rangle = \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{k^2}{n} + \mathbf{O} \left(n^{-3/2} \right) \right). \quad (2.6)$$

Substituindo a expansão em termos dos cumulantes da equação 2.6 na equação 2.5, obtemos

$$G_z(k) = \left[\exp \left(-\frac{1}{2} \frac{k^2}{n} + \mathbf{O} \left(n^{-3/2} \right) \right) \right]^n = \exp \left(-\frac{1}{2} k^2 + n \mathbf{O} \left(n^{-3/2} \right) \right). \quad (2.7)$$

Agora, tomando que $n \mathbf{O}(n^{-3/2}) \rightarrow 0$ quando $n \rightarrow \infty$, a função característica de z fica

$$G_z(k) = e^{-k^2/2} \quad (2.8)$$

que é correspondente da distribuição gaussiana normal [38]

$$p(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-z^2/2}, \quad (2.9)$$

finalizando a demonstração.

O resultado desse teorema permite descrever a posição final l de um caminhante aleatório. Considerando uma sequência de n passos X_i estatisticamente independentes que obedecem a uma distribuição com média a e variância b^2 , onde a posição final do caminhante é $l = X_1 + X_2 + \dots + X_n = z\sqrt{nb^2} + na$. A partir do TCL para um n suficientemente grande, temos

$$p_n(l) = \frac{1}{\sqrt{2\pi nb^2}} \exp\left(-\frac{(l-na)^2}{2nb^2}\right) \quad (2.10)$$

dado que $p(z)dz = p_n(l)dl$ e $dl = dz\sqrt{nb^2}$.

Podemos definir a esperança de l como $\bar{l} = na$ e a variância de l como $\sigma^2 = nb^2$. Assim, ficamos com

$$p_n(l) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(l-\bar{l})^2}{2\sigma^2}\right). \quad (2.11)$$

Agora, vamos supor que a caminhada aleatória ocorra em intervalos de tempo Δt , de modo que o número total de passos após um tempo t seja $n = t/\Delta t$. Assim, teremos [39]

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp\left\{-\frac{(x-ct)^2}{2Dt}\right\} \quad (2.12)$$

onde

$$\bar{l}(t) = \frac{t}{\Delta t}a = \frac{a}{\Delta t}t = ct \quad (2.13)$$

e

$$\sigma^2(t) = \frac{t}{\Delta t}b^2 = \frac{b^2}{\Delta t}t = Dt, \quad (2.14)$$

que são, respectivamente, a esperança e a variância como funções do tempo. Aqui, $p(x,t)$ é solução da seguinte equação de difusão com arraste

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -c\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{D}{2}\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}, \quad (2.15)$$

onde $c = a/\Delta t$ é a velocidade média da partícula e $D = b^2/\Delta t$ é o coeficiente de difusão. Note que como mostrado na equação 2.14, para um caminhante difusivo normal (Browniano), a variância cresce linearmente com o tempo [37].

2.2 Teorema Central do Limite Generalizado e distribuições estáveis de Lévy

Na seção anterior, apresentamos o TCL, que demonstra que a soma de variáveis aleatórias tende a uma distribuição gaussiana, independentemente da distribuição original das variáveis. No entanto, a aplicabilidade do TCL depende das seguintes hipóteses [37–39]:

- As variáveis aleatórias somadas devem ser estatisticamente independentes.
- As contribuições para a soma são essencialmente idênticas.

- As variáveis aleatórias devem ter média e variância finitas.

Consideraremos, agora, um processo descrito por uma distribuição de lei de potência $f(x) \propto \frac{1}{x^{1+\alpha}}$. Esse tipo de distribuição é conhecido por ter uma cauda pesada, o que significa que a probabilidade de ocorrência de valores extremamente altos decai muito lentamente à medida que o valor da variável aumenta. Em comparação com a distribuição gaussiana, na qual a probabilidade de ocorrência de valores extremos diminui rapidamente, na distribuição de lei de potência, a probabilidade de ocorrência de eventos raros, como passos largos, é significativa [40, 41].

A média e o segundo momento dessa distribuição são dados, respectivamente, por

$$\mu[X] = \int_a^\infty x x^{-(1+\alpha)} dx = \left[\frac{x^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_a^\infty = \left[\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^{1-\alpha}}{1-\alpha} - \frac{a^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right] \begin{cases} \infty & \text{if } \alpha \leq 1, \\ \text{converge} & \text{if } \alpha > 1, \end{cases} \quad (2.16)$$

e

$$\mu[X^2] = \int_{-\infty}^\infty x^2 x^{-(1+\alpha)} dx = \left[\frac{x^{2-\alpha}}{2-\alpha} \right]_a^\infty = \left[\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^{2-\alpha}}{2-\alpha} - \frac{a^{2-\alpha}}{1-\alpha} \right] \begin{cases} \infty & \text{if } \alpha \leq 2, \\ \text{converge} & \text{if } \alpha > 2. \end{cases} \quad (2.17)$$

Podemos observar que a média diverge quando $\alpha < 1$ e o segundo momento diverge quando $\alpha < 2$. Por exemplo, se considerarmos um caminhante cujos passos são dados por uma distribuição do tipo $f(x) \propto \frac{1}{x^{1+\alpha}}$, com $0 < \alpha < 2$, teremos uma variável com variância infinita [42].

Devido à cauda pesada dessa distribuição, há uma probabilidade significativa de o caminhante dar um passo muito grande e dominar a caminhada, de modo que as contribuições não serão essencialmente iguais. Por esses dois motivos, variância infinita e contribuições não iguais, o TCL não pode ser aplicado a esse tipo de distribuição. Para abranger variância infinita surge uma generalização do TCL, que é descrita pelas distribuições estáveis de Lévy, apresentadas por Paul Lévy [43], que generalizam a distribuição normal. O TLGG demonstra que há uma distribuição limite para a soma de variáveis aleatórias identicamente distribuídas com variância infinita e essas distribuições são as distribuições estáveis de Lévy.

As distribuições de Lévy têm a seguinte expressão descrita em termos de uma transformada de Fourier [44]

$$P_\alpha(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \phi(k) e^{-ikx} dk. \quad (2.18)$$

$\phi(k)$ é a função característica das distribuições de Lévy que têm a seguinte forma [45]

$$\phi(k) = e^{-|ak|^\alpha}, \quad (2.19)$$

onde o parâmetro $a > 0$ é um fator de escala que mede a largura da distribuição, enquanto α é o parâmetro de estabilidade, que especifica o comportamento assintótico da distribuição. Quando $\alpha \geq 2$, a distribuição converge para a distribuição gaussiana. Por outro lado, para $0 < \alpha < 2$, a variância é infinita e a distribuição se comporta assintoticamente como uma lei de potência

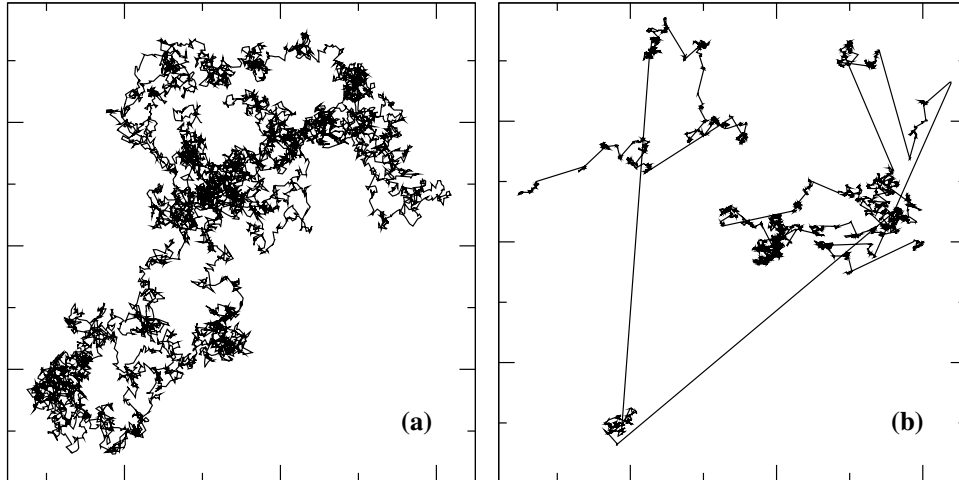


Figura 2.1: Trajetórias de caminhadas aleatórias após 10000 passos. (a) Caminhada aleatória difusiva normal, com passos dados por uma distribuição gaussiana. (b) Caminhada aleatória de Lévy, com passos dados por uma distribuição lei de potência com $\alpha = 1,5$.

$$P_{\alpha}(x) \sim \frac{1}{x^{1+\alpha}}. \quad (2.20)$$

Isso implica que caminhantes cujos passos seguem uma distribuição com cauda tipo lei de potência podem dar passos muito largos, resultando em uma difusão mais rápida do que a normal, fenômeno conhecido como superdifusão. Essa forma de caminhada aleatória é chamada de voo de Lévy, pois não é mais descrita por uma distribuição gaussiana, mas sim por uma distribuição estável de Lévy.

2.3 Voos de Lévy

Em um voo de Lévy, a distribuição dos deslocamentos é governada por uma distribuição de probabilidade de cauda pesada, o que significa que eventos extremos, como saltos grandes, têm uma probabilidade não desprezível de ocorrer. A figura 2.1 mostra uma comparação entre uma caminhada aleatória difusiva normal e uma caminhada aleatória de Lévy. Na difusão normal (figura 2.1(a)), cada passo contribui igualmente para a dinâmica do caminhante. No entanto, no voo de Lévy (figura 2.1(b)), observamos que o caminhante realiza passos longos com uma frequência observável, e esses passos longos dominam as contribuições na dinâmica.

Continuando a observar as características do voo de Lévy e comparar com o movimento Browniano, podemos examinar o histograma das posições finais, essencialmente isso nos dará a forma da distribuição das posições finais das caminhadas aleatórias. Na figura 2.2(a), observamos o histograma das posições finais de caminhantes difusivos normais, que de fato se comporta como uma gaussiana (quadrados pretos) através do decaimento parabólico no gráfico mono-log, enquanto a distribuição dos caminhantes de Lévy (círculos azuis) decai mais lentamente, apresentando a cauda pesada característica das distribuições estáveis.

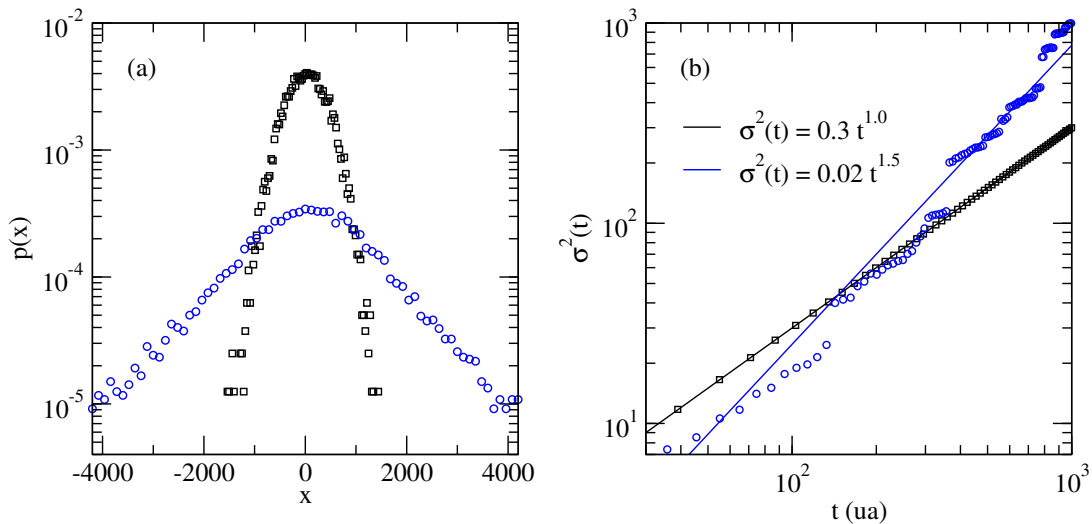


Figura 2.2: (a) Histograma das posições finais de 10000 caminhantes após 10000 passos em escala mono-log. Os quadrados pretos se referem aos caminhantes brownianos e os círculos azuis se referem aos caminhantes de Lévy. (b) Desvio quadrático médio em função do tempo em escala log-log. Os quadrados pretos representa a dispersão browniana e os círculos azuis a dispersão de Lévy, as curvas solidas são seus respectivos ajustes por lei de potência. O desvio foi calculado entre 10000 caminhantes.

A probabilidade não desprezível de possuir passos largos que dominam a dinâmica faz com que o segundo momento da posição cresça mais rápido do que numa difusão normal, levando a superdifusão. Neste caso o desvio quadrático médio assume a seguinte forma [24, 46, 47]

$$\langle x^2 \rangle = Dt^\mu. \quad (2.21)$$

Esta é uma forma mais geral de expressar a variância de um caminhante. Quando o expoente $\mu > 1$, ocorre uma dispersão mais rápida no tempo, ou seja, uma superdifusão. Por outro lado, quando $\mu = 1$, trata-se de uma difusão normal e recuperamos a relação linear da equação. Na Figura 2.2(b), observamos que a dispersão do caminhante browniano possui um desvio quadrático médio que escala linearmente com o tempo, enquanto no voo de Lévy, o desvio cresce mais rápido que linearmente, apresentando um expoente $\mu = 1.5$, ou seja, superdifusivo.

O conceito de voos de Lévy tem aplicações em padrões de busca de alimento de animais [48, 49], viagens humanas [50], na otimização de algoritmos de engenharia [51]. Na física, eles têm sido associados a diversos fenômenos, incluindo dinâmica de fluidos, sistemas dinâmicos e mecânica estatística [52], transporte em fluxos turbulentos [53], descrições estocásticas de partículas [54] e também na área de transporte eletrônico [10, 55–58].

2.4 Voos de Lévy para Luz

Para além das aplicações já citadas, o voo de Lévy é tema de pesquisa intensa na área da óptica, onde é usado para descrever o comportamento de feixes de luz em meios ordenados

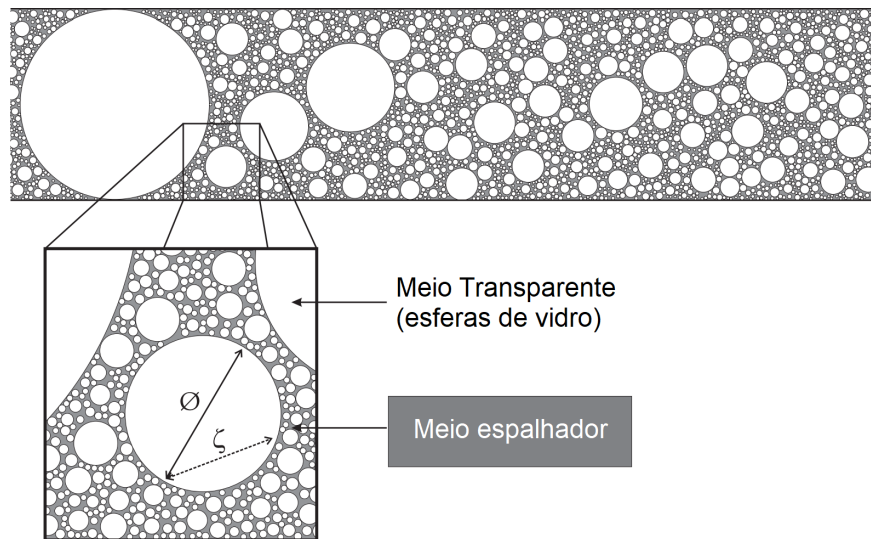


Figura 2.3: Representação do vidro de Lévy óptico bidimensional, as esferas de vidro tem seus diâmetros distribuídos por uma lei de potência. Figura retirada da referência [45].

[59] e desordenados [60, 61], entre outras aplicações [62–64]. Existem estudos que investigam a influência da configuração de materiais ópticos não homogêneos na possibilidade de obter transporte superdifusivo da luz, visto que é sabido que configurações com flutuações locais na densidade de espalhadores podem resultar em uma distribuição de comprimento de passo de cauda pesada.

Dentre esses estudos de voo de Lévy, o trabalho realizado por uma equipe de pesquisadores do European Laboratory for Nonlinear Spectroscopy [24, 45] se sobressai. O experimento consistiu em desenvolver um dispositivo óptico que permitisse a realização de um voo de Lévy pela luz, este dispositivo é o vidro de Lévy óptico. Para isso, os pesquisadores utilizaram microesferas de dióxido de titânio dispersas em uma matriz de vidro, como ilustrado na figura 2.3, onde as esferas maiores dão origem ao espalhamento de Mie. Curiosamente, o arranjo experimental deste trabalho se assemelha ao arranjo apresentado na referência [1] (Compare as Figuras 1.1 e 2.3).

Para que a luz pudesse realizar um voo de Lévy, a distribuição dos diâmetros das microesferas foi ajustada seguindo uma lei de potência, de modo a induzir os tamanhos dos passos da luz a seguir também uma distribuição de lei de potência. Entretanto, como a configuração das microesferas é fixa no vidro de Lévy óptico, os passos subsequentes são correlacionados, diferente de um voo de Lévy usual, onde os passos são decorrelacionados [65].

Dentre as formas de caracterizar voos de Lévy, podemos medir diretamente a distribuição dos passos da dinâmica, também é possível caracterizar os voos de Lévy através do tempo de primeira passagem, já que está relacionado com o tamanho dos passos [66]. Outra forma de caracterizar é através do índice de transmissão, que é a forma utilizada na referência [24].

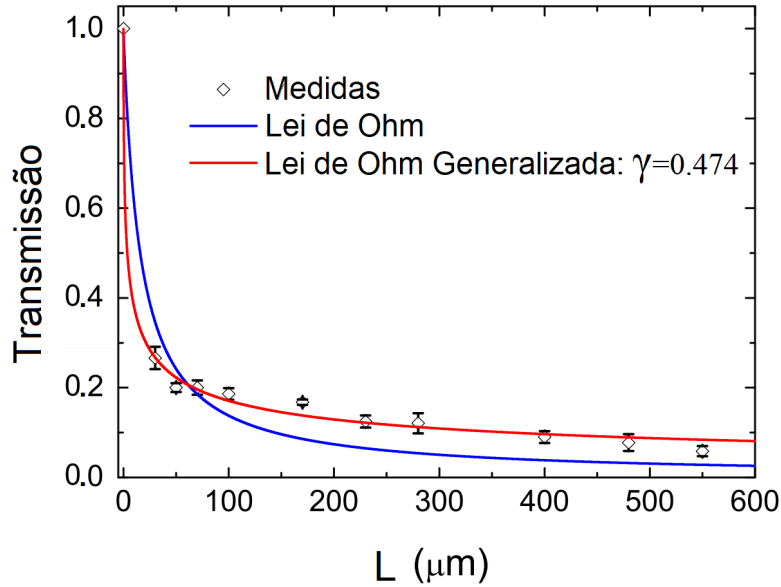


Figura 2.4: Transmissão em função do comprimento L através de um vidro de Lévy óptico. É possível observar que a transmissão da luz superdifusiva decai mais lentamente que a lei de Ohm regular. Figura retirada da referência [45].

2.4.1 Transmissão

A transmissão total em sistemas difusivos é conhecida por seguir tipicamente a lei de Ohm, decaindo linearmente com o inverso do comprimento da amostra. Para sistemas superdifusivos, essa lei pode ser generalizada como [66, 67]

$$T = \frac{1}{1 + (L/\ell)^\gamma}, \quad (2.22)$$

onde ℓ é o caminho médio livre, L é a espessura do meio e o fator 1 no denominador regulariza a função em $L = 0$. Quando $\gamma = 1$, temos o comportamento usual que dá origem ao transporte difusivo regular. Enquanto, quando $\gamma < 1$, temos uma diminuição lenta da transmissão caracterizando um regime de transporte superdifusivo.

Os autores da referência [24] observaram que quando a luz é transmitida através do vidro Lévy óptico, a transmissão ocorre mais lentamente do que a lei de Ohm, mostrando que ocorre transporte superdifusivo em vez de transporte difusivo regular. Eles obtiveram um expoente $\gamma = 0.474 \pm 0.05$ ao ajustar os dados experimentais com a lei de Ohm generalizada da equação 2.22, como mostrado na figura 2.4.

A equação 2.22 desempenhará um papel importante no desenvolvimento deste trabalho. Através do cálculo da transmissão, essa equação será utilizada na caracterização do regime de difusão no dispositivo eletrônico proposto por nós: o vidro de Lévy eletrônico, nosso objeto de investigação. O vidro de Lévy eletrônico é a proposta de um análogo ao vidro de Lévy óptico, capaz de fazer com que elétrons realizem voos de Lévy. Detalhes sobre sua construção serão fornecidos no Capítulo 4.

Transporte quântico

O estudo do transporte quântico através dispositivos mesoscópicos é essencial para compreender fenômenos que ocorrem em escalas intermediárias entre o regime atômico e o regime macroscópico. Nestes sistemas, os efeitos quânticos desempenham um papel fundamental e podem levar a comportamentos eletrônicos únicos e interessantes [68].

Para compreender o transporte quântico nestes dispositivos, devemos começar investigando a condutância, que é uma medida amplamente conhecida. Inicialmente, a expressão para a condutância em um condutor bidimensional, com largura W e comprimento L , é dada pela Lei de Ohm [69]

$$G = \sigma \frac{W}{L} \quad (3.1)$$

onde σ representa a condutividade, uma propriedade intrínseca do material da amostra, independente das dimensões específicas do material. No entanto, conforme o condutor é miniaturizado, ou seja, tomamos os limites $W \rightarrow 0$ e $L \rightarrow 0$, percebemos que a condutância não mais obedece à equação 3.1, tornando-a inviável para o estudo de dispositivos mesoscópicos. Portanto, é necessário reformular a abordagem, incorporando princípios que levem em conta a natureza quântica do sistema.

Para isso, é crucial considerar algumas escalas de comprimento que caracterizam o regime mesoscópico. Primeiramente, temos o comprimento de onda de de Broglie associado ao elétron (comprimento de onda de Fermi)

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}, \quad (3.2)$$

o qual é determinado pelo número de onda k_F , relacionado à energia de Fermi do condutor. λ_F é a escala de comprimento inferior do regime mesoscópico. Apenas os elétrons com energias próximas a energia de Fermi participam da condução. Para calcular a condutância, é crucial considerar comprimentos de onda próximos a λ_F .

O livre caminho médio l_m é outra escala relevante. Ele indica a distância média percorrida por um elétron entre duas colisões consecutivas. Quando o comprimento da amostra L é menor que l_m , o transporte eletrônico é balístico $L < l_m$, caso contrário, é difusivo $L > l_m$. Por último temos o comprimento de relaxação de fase l_ϕ , que representa a distância percorrida por um elétron sem que os efeitos de interferência sejam anulados. Um condutor está no regime mesoscópico quando suas dimensões estão entre λ_F e l_ϕ , ou seja, $\lambda_F < L < l_\phi$. Quando suas dimensões ultrapassam l_ϕ , o dispositivo volta a se comportar como um condutor de Ohm.

Neste capítulo faremos uma revisão dos conceitos chave para o estudo de transporte eletrônico através de dispositivos mesoscópicos, o qual inclui o método de diferenças finitas, a estrutura eletrônica do grafeno, o formalismo de Landauer-Büttiker e as funções de Green. Serão apresentados conceitos fundamentais que serão úteis para o desenvolvimento dos resultados

apresentados no Capítulo 5. Na seção 3.1, será apresentado o modelo tight-binding usado para descrever a estrutura eletrônica dos sólidos. Em seguida, na seção 3.2, trataremos da teoria do espalhamento e do formalismo de Landauer-Büttiker, que relaciona elementos da matriz de espalhamento com observáveis como corrente e condutância. Na seção 3.3, será apresentada a aplicação das funções de Green para a resolução de problemas de espalhamento. Por fim, na seção 3.4 apresentaremos a biblioteca do Python Kwant que foi utilizada para a realização dos cálculos numéricos.

3.1 Modelo Tight Binding

O modelo tight binding é uma abordagem teórica fundamental na física da matéria condensada, sendo amplamente empregado para descrever a estrutura eletrônica de sólidos. Sua utilidade é particularmente evidente ao explorar as propriedades eletrônicas de materiais [70].

Conforme sugere seu nome, esse modelo considera que os elétrons em um sólido estão fortemente vinculados aos seus orbitais atômicos locais (sítios) e são suscetíveis apenas à influência dos sítios vizinhos, apresentando uma probabilidade finita de tunelamento para esses vizinhos [71]. Essencialmente, a modelagem do tight binding consiste em expressar um hamiltoniano por meio de uma aproximação discreta, ou seja, uma discretização do hamiltoniano do elétron no sólido.

Com a discretização, consideramos os orbitais bem localizados, o que nos permite escrever uma função de Bloch $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$ expressa em termos dos orbitais [72]

$$|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} |j\rangle, \quad (3.3)$$

onde \mathbf{k} representa o vetor de onda localizado na primeira zona de Brillouin, N é o número de orbitais (sítios), o ket $|j\rangle$ denota o j -ésimo orbital, e \mathbf{R}_j é a posição real do j -ésimo orbital. Assumimos que na proximidade de cada sítio da rede o hamiltoniano total H pode ser aproximado pelo hamiltoniano dos átomos localizados. Nesse contexto, o hamiltoniano geral, sem interação elétron-elétron, é expresso como [73]:

$$H = \sum_{ij} h_{ij} |i\rangle \langle j|, \quad (3.4)$$

onde h_{ij} representa a energia de interação entre os sítios i e j , associado a energia de sítio quando $i = j$ e ao parâmetro de *hopping* quando os sítios i e j são vizinhos. Ao utilizarmos a notação de segunda quantização, temos

$$H = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (3.5)$$

onde c_i^\dagger e c_j são os operadores de criação e aniquilação, respectivamente, associados ao sítio i e j . Esta é a forma frequentemente adotada na literatura técnica. Essa escolha é amplamente difundida, pois, de maneira geral, é sempre possível descrever férmions em termos desses operadores, os quais respeitam o princípio de exclusão de Pauli [73].

O modelo tight binding é uma ferramenta teórica poderosa amplamente usada no estudo do transporte quântico em vários sistemas físicos [74–77], como por exemplo em fenômenos como magnetocondutância [78], efeito hall quântico [79–81], flutuações universais [82], entre outros. Esta abordagem permite uma descrição eficaz das interações eletrônicas em sólidos, fornecendo insights valiosos sobre suas propriedades fundamentais. Nesse trabalho usamos o modelo tight binding para modelar o gás de elétrons bidimensional (2DEG) e nanofitas de grafeno. A modelagem do gás de elétrons bidimensional servirá como um ponto de comparação, enquanto o foco central está na investigação das propriedades das fitas de grafeno submetidas a clusters eletrostáticos.

3.1.1 Modelagem para 2DEG

A formação de um 2DEG ocorre quando elétrons são confinados na interface entre dois materiais diferentes, como na junção entre uma fina camada isolante de silício e dióxido de silício, ou na interface entre GaAs e AlGaAs [83, 84]. Num contexto mais amplo, diversos artigos [85–88], utilizam o hamiltoniano tight-binding para uma rede quadrada como uma abordagem eficaz para modelar o 2DEG e compreender as propriedades eletrônicas desse sistema.

O hamiltoniano do elétron em uma rede quadrada é descrito pela equação de Schrödinger bidimensional

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} [\partial_x^2 + \partial_y^2] + V(x, y), \quad (3.6)$$

onde m^* é a massa efetiva no material e $V(x, y)$ é uma energia potencial. Utilizando o método das diferenças finitas [89], discretizamos os eixos e os transformamos em uma cadeia de pontos, ou seja, $x = na$ e $y = ma$, onde n e m são números inteiros associados às posições dos orbitais discretizados. O parâmetro a representa o espaçamento entre os sítios, comumente denominado de parâmetro de rede [70]. O hamiltoniano aplicado sobre o sítio $|n, m\rangle$, representando a função de onda discretizada, é expresso por

$$H|n, m\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m^*} [\partial_x^2 |n, m\rangle + \partial_y^2 |n, m\rangle] + V_{n,m} |n, m\rangle. \quad (3.7)$$

As derivadas de segunda ordem discretizadas do estado $|n, m\rangle$ são obtida a partir da expansão em series de Taylor como se segue [90]

$$|n+1, m\rangle = |x+a, y\rangle = |n, m\rangle + a \cdot \partial_x |n, m\rangle + \frac{a^2}{2} \partial_x^2 |n, m\rangle + \frac{a^3}{6} \partial_x^3 |n, m\rangle + O(a^4) \quad (3.8)$$

e

$$|n-1, m\rangle = |x-a, y\rangle = |n, m\rangle - a \cdot \partial_x |n, m\rangle + \frac{a^2}{2} \partial_x^2 |n, m\rangle - \frac{a^3}{6} \partial_x^3 |n, m\rangle + O(a^4). \quad (3.9)$$

Realizamos a soma das equações 3.8 e 3.9 e desprezando termos $O(a^4)$. Em seguida isolando $\partial_x^2 |n, m\rangle$ para obter a aproximação discreta para o operador segunda derivada em x atuando sobre o estado $|n, m\rangle$

$$\partial_x^2 |n, m\rangle = \frac{1}{a^2} [|n+1, m\rangle - 2|n, m\rangle + |n-1, m\rangle]. \quad (3.10)$$

Procedimento análogo pode ser aplicado para obter a discretização para o operador segunda derivada em y atuando em $|n, m\rangle$, resultando em

$$\partial_y^2 |n, m\rangle = \frac{1}{a^2} [|n, m+1\rangle - 2|n, m\rangle + |n, m-1\rangle]. \quad (3.11)$$

Desta forma, podemos escrever os operadores diferenciais ∂_x^2 e ∂_y^2 como uma soma de diferenças finitas [91]

$$\partial_x^2 = \frac{1}{a^2} \sum_{n,m} (|n+1, m\rangle \langle n, m| - 2|n, m\rangle \langle n, m| + |n-1, m\rangle \langle n, m|), \quad (3.12)$$

$$\partial_y^2 = \frac{1}{a^2} \sum_{n,m} (|n, m+1\rangle \langle n, m| - 2|n, m\rangle \langle n, m| + |n, m-1\rangle \langle n, m|). \quad (3.13)$$

Substituindo 3.12 e 3.13 em 3.6, obtemos

$$H = \sum_{n,m} \left(\frac{2\hbar^2}{m^*a^2} + V_{n,m} \right) |n, m\rangle \langle n, m| - \frac{\hbar^2}{2m^*a^2} (|n+1, m\rangle \langle n, m| + |n-1, m\rangle \langle n, m| + |n, m+1\rangle \langle n, m| + |n, m-1\rangle \langle n, m|). \quad (3.14)$$

Definimos o *hopping*, a energia de "salto", como $t \equiv \frac{\hbar^2}{2m^*a^2}$. Dessa forma, nossa equação de Schrödinger bidimensional discretizada resultante é dada por [70, 91]

$$H = \sum_{n,m} [(4t + V_{n,m}) |n, m\rangle \langle n, m| - t (|n+1, m\rangle \langle n, m| + |n-1, m\rangle \langle n, m| + |n, m+1\rangle \langle n, m| + |n, m-1\rangle \langle n, m|)]. \quad (3.15)$$

O primeiro termo da soma trata das energias de sítio, enquanto o segundo termo descreve a energia de *hopping* entre os primeiros vizinhos. Utilizarmos a notação do formalismo de segunda quantização conforme apresentado na equação 3.5, obtemos uma equação mais concisa para o hamiltoniano tight-binding utilizado em nosso trabalho para modelar o 2DEG

$$H = \sum_i [4t + \varepsilon_i] c_i^\dagger c_i - t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j \quad (3.16)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representa a soma sobre os primeiros vizinhos, e ε_i é a energia no sítio i .

A função de Bloch equação 3.3 pode ser utilizada para revelar a relação de dispersão da rede quadrada. Substituindo a equação 3.3 na equação 3.16 e definindo ε_0 como a energia de um elétron em repouso em um sítio temos a relação de dispersão $E(\mathbf{k})$ [70]

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2t \cos(k_x a) - 2t \cos(k_y a). \quad (3.17)$$

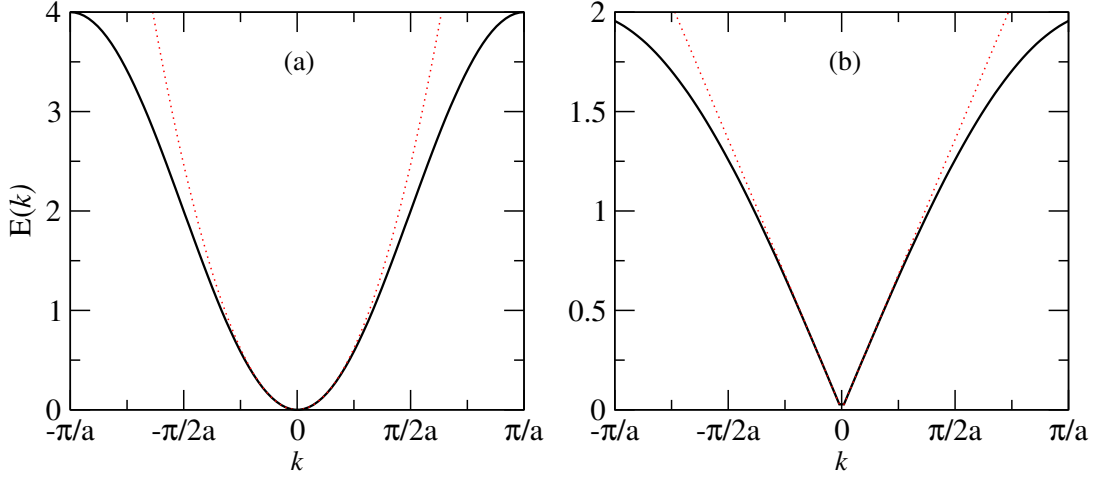


Figura 3.1: Relação de dispersão $E(\mathbf{k})$. (a) Para a rede quadrada. (b) Para o grafeno. As curvas pontilhadas são as aproximações para $\mathbf{k} \rightarrow 0$.

Note que, próximo ao fundo da banda, a dispersão é aproximadamente parabólica. Expandindo a dispersão fornecida na equação 3.17 para valores pequenos de \mathbf{k} ($k_x \rightarrow 0, k_y \rightarrow 0$), podemos desenvolver os cossenos em series de potencias resultando em

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - 2t \left(1 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 \right) - 2t \left(1 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 \right). \quad (3.18)$$

Simplificando, temos

$$E(\mathbf{k}) = (\varepsilon_0 - 4t) + t a^2 (k_x^2 + k_y^2). \quad (3.19)$$

Usando a definição $|\mathbf{k}|^2 = k_x^2 + k_y^2$, temos

$$E(\mathbf{k}) = (\varepsilon_0 - 4t) + \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m^*}. \quad (3.20)$$

A equação 3.20 mostra a relação de dispersão parabólica característica da rede quadrada, como ilustrado na figura 3.1(a). Esta dependência quadrática com o momento \mathbf{k} é a assinatura da dinâmica não-relativística do sistema [86, 92].

3.1.2 Modelagem para grafeno

Desde a primeira vez em que foi isolado [6], o grafeno tem sido amplamente estudado devido às suas propriedades eletrônicas únicas [7, 93, 94]. Nas últimas décadas, o transporte eletrônico em nanofitas de grafeno tem sido um foco intenso de pesquisa teórica e experimental. As propriedades eletrônicas dessas nanofitas abrem caminho para diversas aplicações tecnológicas, como destacado em várias pesquisas [8, 58, 95–97].

O grafeno é conhecido por sua estrutura atômica em forma de favo de mel, resultante da hibridização sp^2 dos orbitais $2s, 2p_x$ e $2p_y$ do carbono. Essa hibridização gera orbitais no plano σ (ligantes e ocupados) e σ^* (antiligantes e desocupados), enquanto os orbitais p_z originam

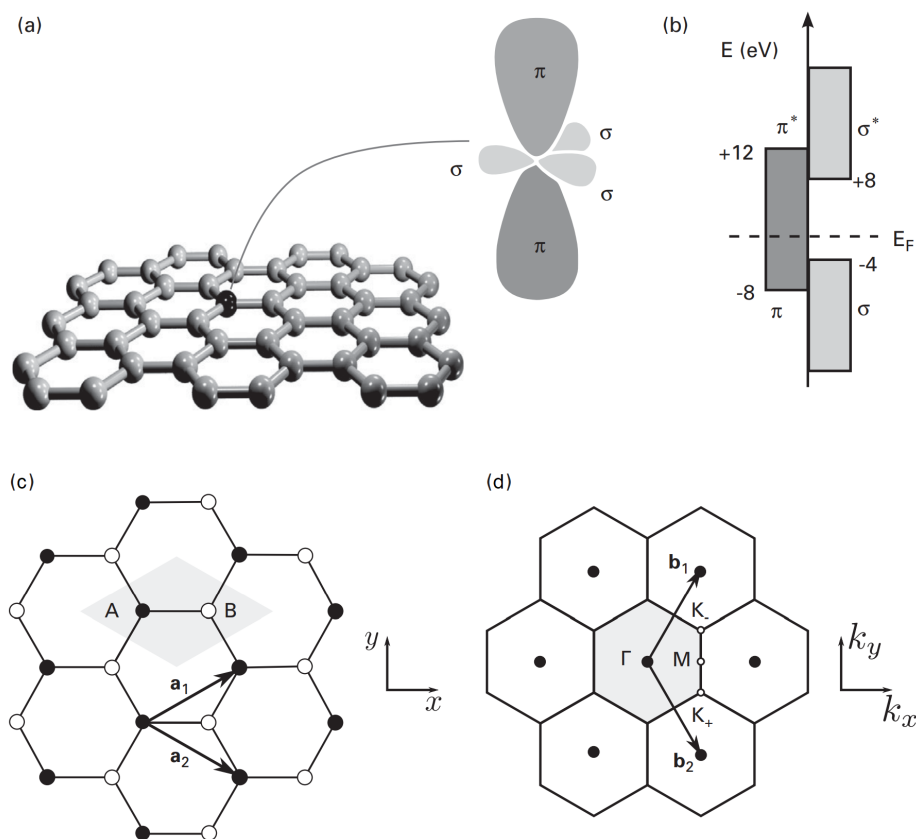


Figura 3.2: (a) Orbitais de valência do carbono no grafeno, três orbitais σ no plano do grafeno, responsáveis pelas propriedades mecânicas do grafeno e o orbital π perpendicular a malha responsáveis pelas propriedades eletrônicas. (b) Ocupação dos estados ao nível de Fermi. (c) Ilustração da base de vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 na rede de grafeno que tem dois átomos (A e B) por célula unitária. (d) Ilustração da rede recíproca, célula unitária em cinza e base de vetores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 . Figura retirada da referência [98].

os orbitais π (ligantes) e π^* (antiligantes) por interação lateral. Essa configuração confere ao grafeno propriedades únicas, como ilustrado na figura 3.2(a).

As bandas de ligação e antiligação σ apresentam uma separação energética significativa, como mostrado na figura 3.2(b), portanto, sua contribuição para as propriedades eletrônicas é comumente desconsiderada. As duas bandas restantes π e π^* descrevem completamente as excitações eletrônicas de baixa energia no grafeno. Por outro lado, as bandas π e π^* desempenham um papel crucial, descrevendo as excitações eletrônicas de baixa energia no grafeno. Essas bandas formam bandas de valência e condução que se cruzam no ponto de neutralidade de carga, situado nos vértices da zona de Brillouin hexagonal.

A estrutura de rede do grafeno consiste em átomos de carbono localizados nos vértices de uma grade hexagonal em um plano, com uma distância de ligação entre átomos de carbono de aproximadamente 1.42 Å. Esta rede de grafeno, como ilustrado na figura 3.2(c), pode ser

considerada como uma grade de Bravais triangular com dois átomos por célula unitária (A e B) e vetores de base ($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$)

$$\mathbf{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right), \quad (3.21)$$

aqui, $a = \sqrt{3}a_{cc}$, onde a_{cc} é a distância de ligação C–C no grafeno. Para obter os vetores ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$) da rede recíproca que satisfaçam a condição $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, mostrada na figura 3.2(d), utilizamos

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{Q}\mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{Q}\mathbf{a}_2} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (3.22)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{Q}\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{Q}\mathbf{a}_1} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (3.23)$$

onde \mathbf{Q} é a matriz rotação de 90 graus.

Devido à simetria, a interação (*overlap*) entre os elétrons dos orbitais p_z e os orbitais s ou p_x ou p_y é praticamente nula. Assim, as ligações π podem ser tratadas independentemente dos outros elétrons de valência. Essa aproximação para a banda π permite representar cada orbital por átomo, $p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)$ para átomos A e $p_z(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B)$ para átomos B. Para obter a relação de dispersão do hamiltoniano total, é necessário resolver a equação de Schrödinger. Com dois orbitais na célula unitária, de acordo com o teorema de Bloch, as autofunções nos pontos \mathbf{R}_i e \mathbf{R}_j só irão diferir por um fator de fase $e^{-\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}$. A função de Bloch é escrita como uma combinação linear de duas funções de Bloch, uma para cada sub-rede (A e B)

$$|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = C_A(\mathbf{k})|\tilde{p}_z^A(\mathbf{k})\rangle + C_B(\mathbf{k})|\tilde{p}_z^B(\mathbf{k})\rangle \quad (3.24)$$

onde

$$|\tilde{p}_z^A(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{cells}}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} |p_z^{A, \mathbf{R}_i}\rangle \quad (3.25)$$

$$|\tilde{p}_z^B(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{cells}}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} |p_z^{B, \mathbf{R}_i}\rangle \quad (3.26)$$

onde N_{cells} é o número de células unitárias na rede de grafeno, \mathbf{R}_i são os pontos na rede de Bravais, $|p_z^{\alpha, \mathbf{R}_i}\rangle$ representa o orbital da sub-rede $\alpha = A, B$ na rede de Bravais na posição \mathbf{R}_i , e os sobrescritos A e B referem-se a qual sub-rede na rede de Bravais se trata.

Assumimos que não há *overlap* $s = \langle p_z^A | p_z^B \rangle$ entre os orbitais p_z vizinhos, ou seja, que os orbitais são estados ortogonais entre eles. Desse modo, as funções de Bloch das sub-redes A e B formam um conjunto ortonormal

$$\langle \tilde{p}_z^\alpha(\mathbf{k}) | \tilde{p}_z^\beta(\mathbf{k}') \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\alpha, \beta} \quad (3.27)$$

onde $\alpha, \beta = A, B$. Com essa relação de ortogonalidade aplicada na equação de Schrödinger $H|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = E(\mathbf{k})|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$, obtemos um problema de autovalor 2×2

$$\begin{pmatrix} H_{AA}(\mathbf{k}) & H_{AB}(\mathbf{k}) \\ H_{BA}(\mathbf{k}) & H_{BB}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} C_A(\mathbf{k}) \\ C_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Os elementos do hamiltoniano são dados por

$$H_{AA}(\mathbf{k}) = \langle \tilde{p}_z^A(\mathbf{k}) | H | \tilde{p}_z^A(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{N_{cells}} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle p_z^{A,\mathbf{R}_i} | H | p_z^{A,\mathbf{R}_j} \rangle \quad (3.29)$$

e

$$H_{AB}(\mathbf{k}) = \langle \tilde{p}_z^A(\mathbf{k}) | H | \tilde{p}_z^B(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{N_{cells}} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle p_z^{A,\mathbf{R}_i} | H | p_z^{B,\mathbf{R}_j} \rangle \quad (3.30)$$

com $H_{AA} = H_{BB}$ e $H_{AB} = H_{BA}^*$. Considerando apenas a interação de primeiros vizinhos e que existem N_{cells} iterações no somatório, H_{AA} fica

$$H_{AA}(\mathbf{k}) = \frac{1}{N_{cells}} \sum_i \langle p_z^{A,\mathbf{R}_i} | H | p_z^{A,\mathbf{R}_i} \rangle = \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{A,0} \rangle = \epsilon_0 \quad (3.31)$$

e para H_{AB} , cada sitio tem três primeiros vizinhos, como mostrado na figura 3.2(c). Fazendo algumas manipulações, obtemos

$$\begin{aligned} H_{AB}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{N_{cells}} \sum_i \left(\langle p_z^{A,\mathbf{R}_i} | H | p_z^{B,\mathbf{R}_i} \rangle + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} \langle p_z^{A,\mathbf{R}_i} | H | p_z^{B,\mathbf{R}_i - \mathbf{a}_1} \rangle + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \langle p_z^{A,\mathbf{R}_i} | H | p_z^{B,\mathbf{R}_i - \mathbf{a}_2} \rangle \right) \\ &= \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,0} \rangle + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-\mathbf{a}_1} \rangle + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} \langle p_z^{A,0} | H | p_z^{B,-\mathbf{a}_2} \rangle \\ &= -t(1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2}) \\ &= -t\alpha(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Então, é possível escrever $H(\mathbf{k})$ como

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & -t\alpha(\mathbf{k}) \\ -t\alpha^*(\mathbf{k}) & \epsilon_0 \end{pmatrix} = \sum_{\mathbf{k}} [a_{\mathbf{k}}^\dagger \epsilon_0 a_{\mathbf{k}} + b_{\mathbf{k}}^\dagger \epsilon_0 b_{\mathbf{k}} - a_{\mathbf{k}}^\dagger t\alpha(\mathbf{k}) b_{\mathbf{k}} - b_{\mathbf{k}}^\dagger t\alpha(\mathbf{k}) a_{\mathbf{k}}]. \quad (3.33)$$

Através de uma transformada de Fourier discreta onde [73, 99, 100]

$$a_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} a_i, \quad b_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} b_i \quad (3.34)$$

e

$$a_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} a_i^\dagger, \quad b_{\mathbf{k}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} b_i^\dagger, \quad (3.35)$$

é possível obter o hamiltoniano tight binding

$$H = \sum_i \epsilon_i^A a_i^\dagger a_i + \sum_j \epsilon_j^B b_j^\dagger b_j - t_0 \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i. \quad (3.36)$$

Escrevendo de maneira compacta

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i - t_0 \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j, \quad (3.37)$$

esse é o modelo tight binding do grafeno que utilizaremos em nosso trabalho.

É possível obter as relações de dispersão a partir da diagonalização de $H(\mathbf{k})$ na equação 3.33. Neste caso obtemos que

$$\begin{aligned} E_{\pm}(\mathbf{k}) &= \varepsilon_0 \pm t |\alpha(\mathbf{k})| \\ &= \varepsilon_0 \pm t \sqrt{(1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2})(1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2})} \\ &= \varepsilon_0 \pm t \sqrt{3 + 2\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1) + 2\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2) + 2\cos(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Explicitando vetor de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, que é definido dentro da primeira zona de Brillouin, conseguimos expandir e assim obter a relação de dispersão

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 \pm t \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}. \quad (3.39)$$

É importante definir pontos especiais no espaço recíproco, os pontos \mathbf{K}_+ e \mathbf{K}_-

$$\mathbf{K}_+ = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right), \quad \mathbf{K}_- = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (3.40)$$

que são os pontos de cruzamento entre as bandas $+$ e $-$, ou seja, onde $\alpha(\mathbf{K}_+) = \alpha(\mathbf{K}_-) = 0$. Expandindo \mathbf{k} na vizinhança de \mathbf{K}_+ (ou \mathbf{K}_-) na forma $\mathbf{k} = \mathbf{K}_+ + \delta\mathbf{k}$ ($\mathbf{k} = \mathbf{K}_- + \delta\mathbf{k}$) obteremos

$$E_{\pm}(\delta\mathbf{k}) = \varepsilon \pm \frac{\sqrt{3}at}{2} |\delta\mathbf{k}|. \quad (3.41)$$

Definindo a velocidade de Fermi $v_F = \frac{\sqrt{3}at}{2\hbar}$, obtemos uma dispersão linear na vizinhança dos vértices da zona de Brillouin hexagonal

$$E_{\pm}(\delta\mathbf{k}) = \varepsilon \pm \hbar v_F |\delta\mathbf{k}|. \quad (3.42)$$

Essa relação de dispersão linear surge em excitações de baixa energia, e, neste regime, os portadores de carga podem ser descritos pelo hamiltoniano de Dirac $H = v_F \hat{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, comportando-se como férmions de Dirac relativísticos sem massa [6, 8, 86, 95]. Nas figuras 3.1 (a) e (b) podemos observar a diferença de comportamento da relação de dispersão da rede quadrada e do grafeno quando $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Enquanto a rede quadrada apresenta uma dispersão parabólica, enquanto o grafeno apresenta a linearidade na dispersão.

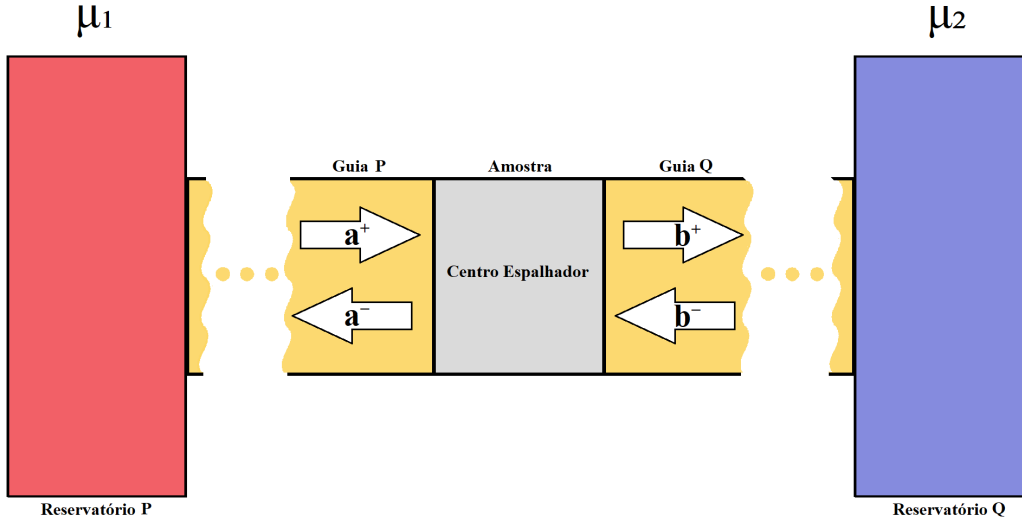


Figura 3.3: Representação de uma região espalhadora ligada por guias a dois reservatórios, cada um com potenciais eletroquímicos μ_1 e μ_2 . Os vetores \mathbf{a}^+ e \mathbf{a}^- representam, respectivamente, os modos propagantes que entram e que saem da região de espalhamento pelo guia da esquerda. Os vetores \mathbf{b}^+ e \mathbf{b}^- representam, respectivamente, os modos propagantes que entram e que saem da região de espalhamento pelo guia da direita.

3.2 Teoria do espalhamento e Formalismo de Landauer-Büttiker

No estudo do transporte quântico, a teoria do espalhamento desempenha um papel fundamental, especialmente ao investigar o comportamento de meios eletrônicos em sistemas complexos, como redes de grafeno ou o gás de elétrons bidimensional. Esses meios desordenados são frequentemente influenciados por interações induzidas durante seu processo de fabricação, exercendo impacto direto nas propriedades de transporte eletrônico [69].

Ao analisar o transporte em sistemas mesoscópicos, abordamos a condutividade eletrônica sob a perspectiva de um problema de espalhamento [101]. Essa abordagem proporciona uma compreensão detalhada da relação entre a condutância do sistema e a probabilidade de transmissão dos elétrons pela amostra, permitindo a exploração aprofundada de como as interações influenciam a transmissão eletrônica e se manifestam em propriedades condutivas notáveis.

Considere uma região de espalhamento conectada a dois reservatórios de elétrons por meio de dois guias. Na figura 3.3, é esquematizado o processo de entrada e saída de elétrons da região de espalhamento por cada guia. Os vetores \mathbf{a}^+ , \mathbf{b}^- que descrevem os estados dos elétrons que entram na região de espalhamento a partir dos reservatórios à esquerda e à direita, respectivamente. Então, para representar os modos que entram no sistema definimos o vetor

$$\Psi_{in} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^+ \\ \mathbf{b}^- \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

De maneira análoga, os vetores \mathbf{a}^- , \mathbf{b}^+ descrevem os estados dos elétrons que saem da região de espalhamento para os reservatórios à esquerda e à direita, respectivamente. Definimos o

vetor dos modos que saem do sistema como

$$\Psi_{out} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^- \\ \mathbf{b}^+ \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Os vetores \mathbf{a}^+ , \mathbf{a}^- , \mathbf{b}^+ e \mathbf{b}^- são N -dimensionais, onde N é o número de modos propagantes no guia direito e no guia esquerdo. Sendo assim, os vetores Ψ_{in} e Ψ_{out} são vetores $2N$ -dimensionais. Essa descrição vetorial é fundamental no transporte quântico, representando de forma clara os estados de entrada e saída de elétrons na região de espalhamento. Os modos de entrada (ondas incidentes) e saída (ondas espalhadas) estão relacionados pela matriz de espalhamento \mathbf{S} , conforme a seguinte expressão matemática

$$\Psi_{out} = \mathbf{S}\Psi_{in}. \quad (3.45)$$

A matriz \mathbf{S} pode ser escrita como

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

onde as matrizes t e t' representam os blocos de transmissão, enquanto as matrizes r e r' representam os blocos de reflexão, todas sendo matrizes $N \times N$. A matriz espalhamento \mathbf{S} é uma matriz quadrada com dimensões $2N \times 2N$. Essa matriz desempenha um papel essencial na teoria de Landauer-Büttiker, permitindo relacionar a corrente que atravessa um condutor com a probabilidade de transmissão do elétron extraídas dela [69].

Agora considere um condutor (centro espalhador) conectado a reservatórios com potenciais eletroquímicos μ_1 e μ_2 por guias que possuem N modos transversais (ou canais abertos), como mostrado na figura 3.3. O i -ésimo modo propagante tem probabilidades T_i de transmitir o elétrons através do centro espalhador. No regime de resposta linear, ou seja, baixas tensões ($V \rightarrow 0$), a condutância G é expressa como a razão entre a corrente líquida I no dispositivo e a diferença de potencial entre os reservatórios $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$

$$G = \frac{I}{V} = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/e}. \quad (3.47)$$

A corrente injetada pelo reservatório 1 é dada por

$$I_1^+ = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2)N, \quad (3.48)$$

onde o fator 2 nas equações de corrente é resultado da degenerescência de spin do sistema. A corrente de saída do terminal 2 é simplesmente a corrente injetada pelo terminal 1 multiplicada pela probabilidade de transmissão

$$I_2^+ = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \sum_{i=1}^N T_i. \quad (3.49)$$

O restante da corrente é refletida de volta ao terminal 1

$$I_1^- = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \sum_{i=1}^N (1 - T_i), \quad (3.50)$$

Por fim, a corrente líquida I que flui no dispositivo (e no circuito externo) é dada por

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \sum_{i=1}^N T_i. \quad (3.51)$$

Portanto, a condutância é igual a

$$G = \frac{\frac{2e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \sum_{i=1}^N T_i}{(\mu_1 - \mu_2)/e}. \quad (3.52)$$

Utilizando a relação

$$\sum_{i=1}^N T_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N |t_{ij}|^2 = \text{Tr}[tt^\dagger]$$

e simplificando a equação da condutância, chegamos a

$$G = \frac{2e^2}{h} \text{Tr}[tt^\dagger]. \quad (3.53)$$

Nesta equação, as matrizes t e t^\dagger são calculadas para a energia igual a E , representando a conhecida fórmula de Landauer, que explicita a dependência da condutância com os coeficientes de transmissão do elétron. Os resultados apresentados neste estudo serão expressos em termos da transmissão

$$T = \frac{G}{G_0} = \text{Tr}[tt^\dagger],$$

onde $G_0 = 2e^2/h$.

3.3 Metodo da Função de Green

O conceito de função de Green é fundamental tanto na matemática quanto na física, onde é empregada para resolver equações diferenciais não homogêneas sujeitas a condições iniciais ou de contorno determinadas. Na teoria de muitos corpos, particularmente na física quântica de campos, eletrodinâmica e mecânica estatística, a função de Green é essencial e tem uma vasta gama de aplicações, desde estruturas de lasers de cascata até semicondutores [102]. Nesta seção, nosso objetivo é relacionar a equação 3.53 com a função de Green.

Vejam algumas propriedades da função de Green. Suponhamos que $R(x)$ represente a solução (ou resposta) de uma equação diferencial com um operador diferencial D_{op} e um termo não homogêneo $S(x)$ (ou excitação), na seguinte forma

$$D_{op}R(x) = S(x). \quad (3.54)$$

Podemos definir a função de Green como

$$D_{op}G(x, x') = \delta(x - x'), \quad (3.55)$$

assim, podemos escrever a excitação como

$$\int D_{op}G(x, x')S(x')dx' = \int \delta(x - x')S(x')dx' = S(x), \quad (3.56)$$

substituindo 3.56 em 3.55

$$D_{op}R(x) = S(x) = \int D_{op}G(x, x')S(x')dx' = D_{op} \int G(x, x')S(x')dx', \quad (3.57)$$

de tal modo, que $R(x)$ pode ser obtido através de

$$R(x) = \int G(x, x')S(x')dx', \quad (3.58)$$

caso, conheçamos a função $G(x, x')$ do D_{op} .

Como vimos, o problema de espalhamento podem ser escritos como

$$[E - H_{op}] \Psi = S, \quad (3.59)$$

onde Ψ é a função de onda e S seria um termo devido a ondas incidentes dos guias. Desta forma a função de Green poderia ser empregada assim

$$[E - H_{op}(r)] G(r, r') = \delta(r - r') \quad (3.60)$$

Mas a função de Green G não é unicamente definida sem que seja especificada as condições de contorno. É comum que se defina duas funções de Green, a retardada e a avançada, correspondendo duas condições de contorno diferentes escritas que aparecem nas seguintes formas

$$(E - H_{op}(r, r') + i\eta) G^R(r, r') = \delta(r - r'); \quad (\eta \rightarrow 0^+) \quad (3.61)$$

e

$$(E - H_{op}(r, r') - i\eta) G^A(r, r') = \delta(r - r'); \quad (\eta \rightarrow 0^+). \quad (3.62)$$

No contexto dos sistemas discretizados, descritos pelo modelo tight-binding, a abordagem comum para resolver problemas como apresentados nas equações 3.61 e 3.62 é realizar a discretização espacial da função de Green de modo que ela se torna uma matriz

$$G^R(r, r') \rightarrow G^R(i, j), \quad (3.63)$$

onde os índices $i(j)$ representam o i -ésimo(j -ésimo) orbital da rede discretizada. De modo que as equações diferenciais 3.61 e 3.62 se tornam equações matriciais

$$((E + i\eta)\mathbb{1} - H) G^R = \mathbb{1}, \quad (3.64)$$

e

$$((E - i\eta)\mathbb{1} - H) G^A = \mathbb{1}. \quad (3.65)$$

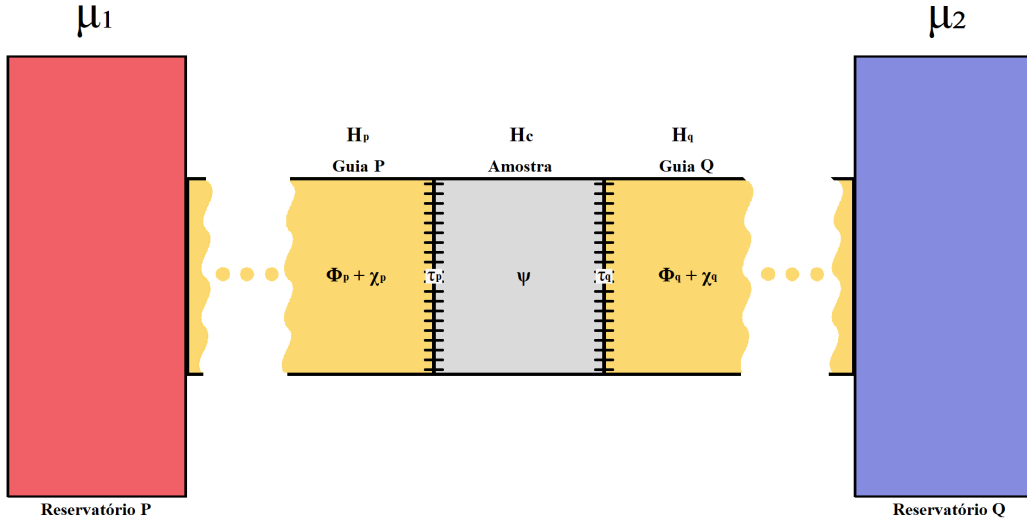


Figura 3.4: Uma amostra condutora descrita pelo hamiltoniano H_c conectada a dois guias descritos respectivamente por H_p e H_q , através das matrizes acoplamento τ_p e τ_q .

Onde $\mathbb{1}$ é a matriz identidade e H é a representação matricial do operador diferencial hamiltoniano H_{op} . Podemos obter G^R ao inverter $((E - i\eta)\mathbb{1} - H)$ numericamente, porém ainda há um problema: a matriz H tem dimensões infinitas, pois há guias semi-infinitos conectados ao condutor, como mostrado na figura 3.4. Desse modo será necessário fazer um truncamento que será mostrado agora. O hamiltoniano pode ser representado em blocos

$$H = \begin{pmatrix} H_p & \tau_p & 0 \\ \tau_p^\dagger & H_c & \tau_q^\dagger \\ 0 & \tau_q & H_q \end{pmatrix} \quad (3.66)$$

onde τ_p e τ_q são as matrizes de acoplamento entre o condutor e os guias e H_p e H_q são os hamiltoniano dos guias p e q isolados e H_c é o hamiltoniano apenas do condutor. E então a função de green da equação 3.64 fica

$$\begin{pmatrix} (E + i\eta)\mathbb{1} - H_p & -\tau_p & 0 \\ -\tau_p^\dagger & E\mathbb{1} - H_c & -\tau_q^\dagger \\ 0 & -\tau_q & (E + i\eta)\mathbb{1} - H_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_p & G_{pc} & G_{pq} \\ G_{cp} & G_c & G_{cq} \\ G_{qp} & G_{qc} & G_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{1} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

onde as matrizes $[(E + i\eta)\mathbb{1} - H_p]$ e $[(E + i\eta)\mathbb{1} - H_q]$ representam os guias isolados. Poderia ser adicionado o termo imaginário ($i\eta$) na matriz que representa o condutor mas não se faz necessário.

Podemos obter uma expressão explicita para G_c , que é a parte de nosso interesse. A partir da equação 3.67, podemos escrever

$$[(E + i\eta)\mathbb{1} - H_p]G_{pc} - [\tau_p]G_c = 0, \quad (3.68)$$

$$-[\tau_p^\dagger]G_{pc} + [E\mathbb{1} - H_c]G_c - [\tau_q^\dagger]G_{qc} = \mathbb{1}, \quad (3.69)$$

$$-[\tau_q]G_c + [(E + i\eta)\mathbb{1} - H_q]G_{qc} = 0. \quad (3.70)$$

Das equações 3.68 e 3.70 obtemos

$$G_{pc} = [(E + i\eta)\mathbb{1} - H_p]^{-1}[\tau_p]G_c = g_p^R \tau_p G_c \quad (3.71)$$

$$G_{qc} = [(E + i\eta)\mathbb{1} - H_q]^{-1}[\tau_q]G_c = g_q^R \tau_q G_c \quad (3.72)$$

onde

$$g_p^R = [(E + i\eta)\mathbb{1} - H_p]^{-1}$$

e

$$g_q^R = [(E + i\eta)\mathbb{1} - H_q]^{-1}.$$

Substituindo 3.71 e 3.72 em 3.69 obtemos

$$-\tau_p^\dagger g_p^R \tau_p G_c + [E\mathbb{1} - H_c]G_c - \tau_q^\dagger g_q^R \tau_q G_c = \mathbb{1} \quad (3.73)$$

isolando G_c chegamos a

$$G_c = [E\mathbb{1} - H_c - \tau_p^\dagger g_p^R \tau_p - \tau_q^\dagger g_q^R \tau_q]^{-1} \quad (3.74)$$

é possível notar que na equação 3.74 todas matrizes são finitas e os guias infinitos são levados em conta através dos termos $\tau_p^\dagger g_p^R \tau_p$ e $\tau_q^\dagger g_q^R \tau_q$ (também chamados de operadores autoenergia). A inversão das matrizes infinitas para obter g_p e g_q não se fazem necessárias desde que normalmente g_p e g_q podem ser obtidas analiticamente ou através de métodos numéricos mais sofisticados como método da função de Green recursivo [96, 103]

Definindo os operadores autoenergia,

$$\Sigma_p^R = \tau_p^\dagger g_p^R \tau_p$$

e

$$\Sigma_q^R = \tau_q^\dagger g_q^R \tau_q,$$

e fazendo $G_c = G^R$ na equação 3.74 fica como normalmente é apresentada nos livros textos

$$G^R = [E\mathbb{1} - H_c - \Sigma_p^R - \Sigma_q^R]^{-1}. \quad (3.75)$$

As autoenergias Σ^R descrevem os efeitos dos guias nos condutores e permitem que descrevamos um sistema infinito por um finito.

Por fim a condutância pode ser obtida em termos das funções de Green $G^{R(A)}$ e das autoenergias Σ_p^R e Σ_q^R [104, 105]. É possível descrever a transmissão usando a relação de Fisher-Lee [106]

$$T_{pq} = \text{Tr} \left[\Gamma_p G^R \Gamma_q G^A \right] \quad (3.76)$$

com

$$\Gamma_{p(q)} = i \left[\Sigma_{p(q)}^R - \Sigma_{p(q)}^A \right] \quad (3.77)$$

onde $\Sigma_{p(q)}^A$ é a autoenergia avançada, o conjugado hermitiano da autoenergia retardada $\Sigma_{p(q)}^R$ e $\Gamma_{p(q)}$ é a parte antihermitiana de $\Sigma_{p(q)}^R$ de descreve taxa de entrada e saída de elétrons devido ao acoplamento do condutor aos guias [107, 108].

As funções de Green são ferramenta poderosa para resolver problemas de espalhamento, visto que uma vez que obtém a função de green do condutor e as autoenergias dos guias você pode obter os coeficientes de transmissão, equação 3.76. No nosso estudo, desenvolvemos os cálculos numéricos dos coeficientes de transmissão através do chamado Kwant, pacote Python para cálculos numéricos de transporte quântico. Este usa do modelo tight-binding e se baseia em funções de Green e na abordagem da função de onda [91]. Isso nos permite analisar o comportamento de transporte no sistemas nanoestruturados de nosso interesse.

3.4 Kwant

O Kwant é uma biblioteca do Python feita para cálculos numéricos de transporte quântico e assim auxiliar na simulação de sistemas físicos de variadas dimensionalidades e geometrias desde que possam ser descritos através do modelo tight-binding [91]. O Kwant representa visualmente hamiltonianos como grafos, onde os nós ou sítios representam os orbitais moleculares e as arestas representam as ligações entre esses orbitais.

Através do Kwant é possível construir dispositivos e calcular suas propriedades eletrônicas. Para exemplificar, montaremos a rede quadrada e rede de grafeno com bordas armchair (AGNR) e zigzag (ZGNR) sem impurezas. Como ilustrado na figura 3.5, é possível representar as nanofitas e calcular propriedades eletrônicas de interesse, como densidade de estados, relação de dispersão, condutância, potencia de disparo e etc.

Na Figura 3.5(d-f), plotamos a transmissão como função da energia de Fermi. Observamos platôs discretos de transmissão para diferentes faixas de energia, indicando a quantização da condutância nestes dispositivos. Cada platô representa o número de canais N ou modos de propagação nos terminais abertos para aquela faixa de energia. Em outras palavras, o coeficiente de transmissão das redes puras corresponderá ao número de canais abertos a uma certa energia. Este número inteiro adimensional, conhecido como o número de modos de propagação nos terminais N , é diretamente proporcional à largura da nanofita W e ao vetor de onda de Fermi k_F através de $N = k_F W / \pi$. Mantendo W fixo, é possível controlar o valor de N apenas pela energia de Fermi. Se a largura W for mantida fixa, a estrutura eletrônica de cada nanofita permanece inalterada durante o cálculo numérico, independentemente do comprimento L da nanofita.

Estabelecemos uma relação direta entre N e a energia de Fermi, pois $T(E) = N$. Apresentaremos nossos resultados em termos de N . Para o sistema de gás de elétrons bidimensional (2DEG), a relação é $E/t_0 = 0.01, 0.03, 0.05, \dots$, correspondendo a $N = 1, 2, 3, \dots$. Da mesma forma, para o nanofita de grafeno (AGNR), temos $E/t_0 = 0.02, 0.05, 0.08, \dots$, correspondendo a $N = 1, 2, 3, \dots$. No caso do nanofita de grafeno zigzag (ZGNR), temos $E/t_0 = 0.02, 0.09, 0.15$, correspondendo a $N = 1, 3, 5, \dots$.

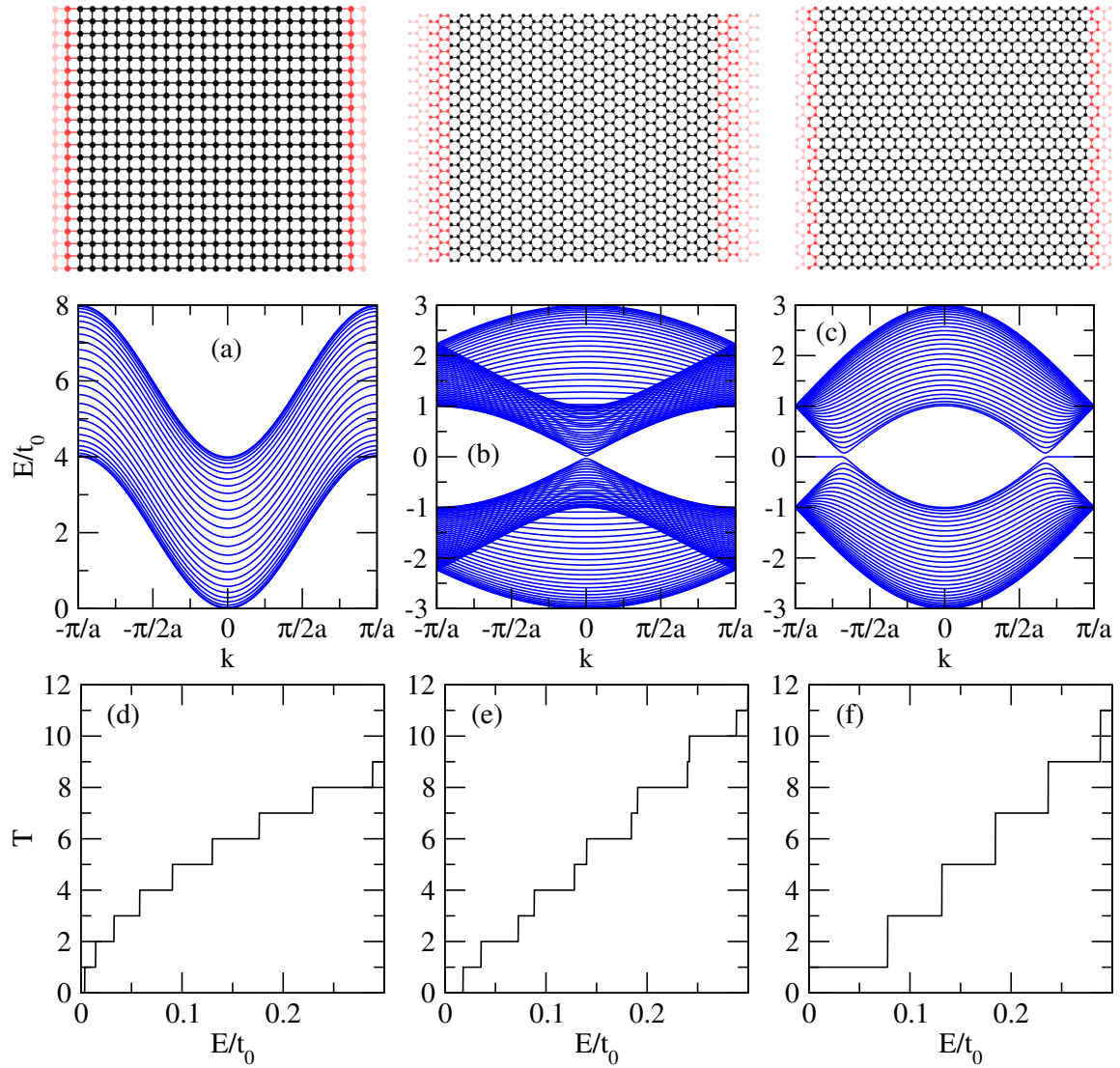


Figura 3.5: Visualização através do pacote Kwant do 2DEG, AGNR e ZGNR, todas puras, e suas respectivas bandas de energias (a-c) e também suas respectivas (d-f) transmissões em função da energia.

Metodologia

Neste capítulo, apresentamos o sistema com o qual estaremos trabalhando: nanofitas de grafeno com bordas armchair (AGNR) e zigzag (ZGNR) submetidas a um cluster de pontos quânticos eletrostáticos. Esse dispositivo eletrônico é o que denominamos de vidro de Lévy eletrostático, o análogo eletrônica do vidro de Lévy óptico discutido no Capítulo 2. Apresentaremos o hamiltoniano do nosso sistema e como é feita a distribuição dos pontos quânticos pelas nanofitas. Os cálculos numéricos do coeficiente de transmissão e outros observáveis de interesse foram realizados utilizando o Kwant [91], um algoritmo baseado na função de Green dentro da abordagem de tight-binding, conforme discutido no Capítulo 3.

4.1 Modelagem do Sistema

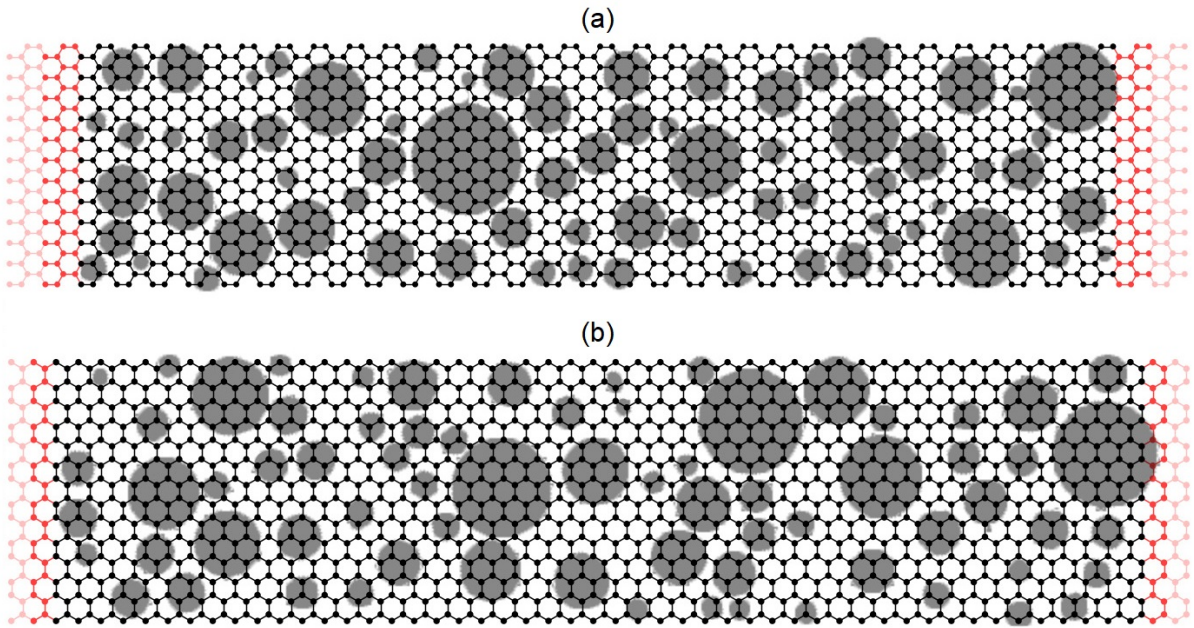


Figura 4.1: Ilustração de (a) AGNR e (b) ZGNR conectados a dois terminais (em vermelho). Os círculos cinza representam o cluster de pontos quânticos eletrostáticos.

O Hamiltoniano de tight-binding para o grafeno é dado por

$$\hat{H} = -t_0 \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i, \quad (4.1)$$

onde os índices i e j percorrem todos os sítios da rede e $\langle i, j \rangle$ denota os primeiros vizinhos. O

primeiro termo em \hat{H} representa o salto usual de elétrons entre os sítios da rede, c_i (c_i^\dagger) são os operadores de aniquilação (criação) e t_0 é a energia de salto, que tem um valor típico de 2.7 eV [8]. O segundo termo no Hamiltoniano é o potencial eletrostático induzido pelos pontos quânticos eletrostáticos. Portanto, o potencial eletrostático ε_i , que é a energia de sítio do i -ésimo sítio, será $\varepsilon_i = V$ quando o sítio estiver dentro da área do ponto quântico, e será $\varepsilon_i = 0$ caso contrário.

O Hamiltoniano da equação (4.1) é idêntico ao utilizado na referencia [18], que estudou os efeitos de uma matriz regular de pontos quânticos eletrostáticos em nanofitas de grafeno, e motivou o experimento desenvolvido pela referencia [1]. Essa escolha permite investigar o efeito da desordem de Lévy no transporte eletrônico e realizar uma comparação direta com uma desordem periódica. Não se espera que os pontos quânticos eletrostáticos modifiquem significativamente o parâmetro de salto, assim consideramos a mesma energia de salto dentro e fora dos aglomerados, também em conformidade com a referencia [18].

4.2 Distribuição de pontos quânticos eletrostáticos

Para realizar a simulação de transporte superdifusivo de elétrons inspirado no voo de Lévy, construímos um material denominado vidro de Lévy eletrônico. Definimos dois tipos de regiões no grafeno: uma região difusiva, onde definimos as barreiras eletrostáticas circulares, e uma região balística, que não está submetida a um potencial eletrostático. A montagem desse arranjo experimentalmente seria similar, com devidas adaptações, ao que é feito na referencia [1].

Para construir o vidro de Lévy eletrônico, seguimos quatro instruções:

1. Aleatoriamente selecionamos um ponto (x, y) e um raio R de modo que definiríamos uma circunferência dentro da rede, onde o ponto (x, y) é o centro do ponto quântico eletrostático e R o raio do ponto quântico;
2. Atribuímos a todos os sítios dentro da área da circunferência potencial eletrostático de valor de V ;
3. Aleatoriamente selecionamos um novo ponto (x, y) e um novo raio R . Se a circunferência do novo ponto quântico eletrostático se sobrepuser a um já existente, voltamos ao início do passo 3 sorteando um novo ponto (x, y) e um novo raio R , caso contrário, vamos para o passo 2;
4. Paramos após 5000 tentativas consecutivas fracassadas de introduzir um novo ponto quântico.

O raio máximo do ponto quântico é limitado a um oitavo da largura da rede sem haver perda de generalidade. Essa restrição (*cutoff*) é comum em estudos envolvendo distribuições de Lévy devido à divergência de seu segundo momento. As instruções foram diagramadas na figura 4.2. Ao realizar esse procedimento em uma nanofita, a disposição resultante é ilustrada na Figura 4.3. A distribuição dos raios dos pontos quânticos pode ser observada na figura 4.4 que mostra o histograma dos raios obtido a partir de 10^4 amostras diferentes de AGNR com

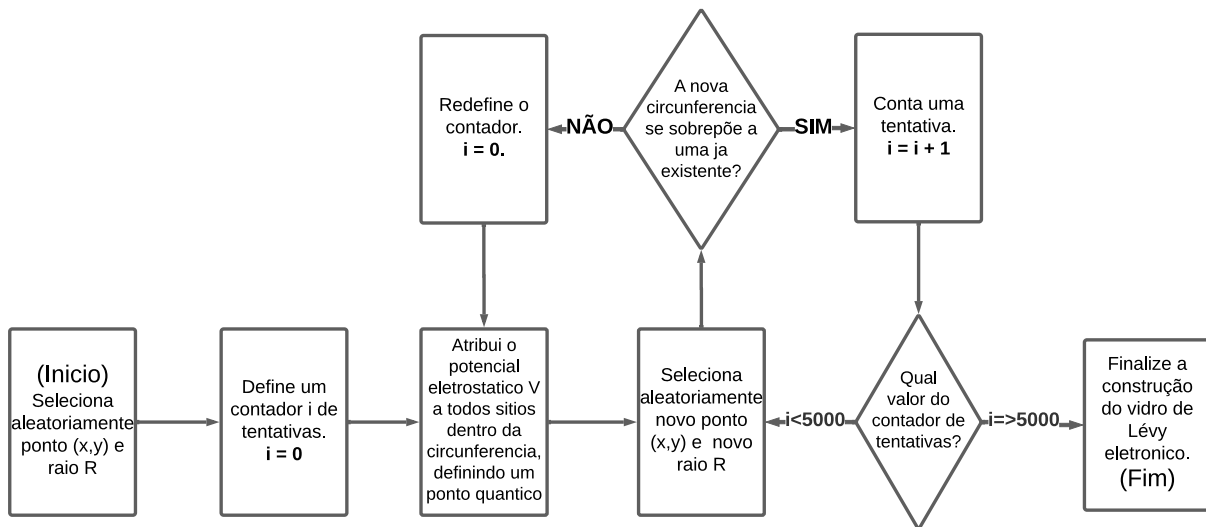


Figura 4.2: Diagramação do algoritmo para construção dos clusters eletrostáticos para a produção do vidro de Lévy eletrônico.

largura $W_A = 49.5a_0$ e comprimento $L_A = 150.7a - 0$, onde $a_0 = 2.49$ é a constante de rede do grafeno.

O histograma foi ajustado à lei de potência

$$P(R) \propto \frac{1}{R^{1+\beta}} \quad (4.2)$$

com um expoente $\beta = 1.22 \pm 0.01$, associado à dinâmica de Lévy discutida no Capítulo 2. Observa-se que, devido ao comportamento da distribuição de Lévy, um conjunto de pontos quânticos com raio R ocupa aproximadamente a mesma área que outro conjunto com um raio diferente. Essa característica é semelhante ao comportamento relatado pela referência [24]. Além disso, em nossas simulações, a fração da área da nanofita ocupada por pontos quânticos é de $42.24\% \pm 0.03$, e este resultado mostrado na figura 4.4 permanece inalterado para diferentes comprimentos de dispositivo L , larguras e tipos de borda.

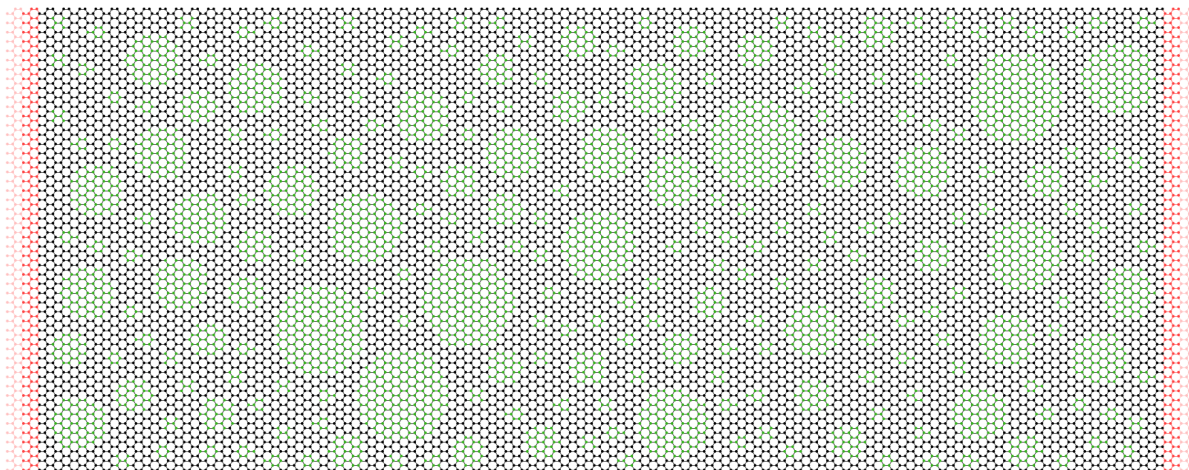


Figura 4.3: Exemplificação de um vidro de Lévy eletrônico no AGNR com dimensões $W_A = 49.5a_0$ e $L_A = 150.7a_0$. Os sítios em verde tem potencial eletrostático de valor V .

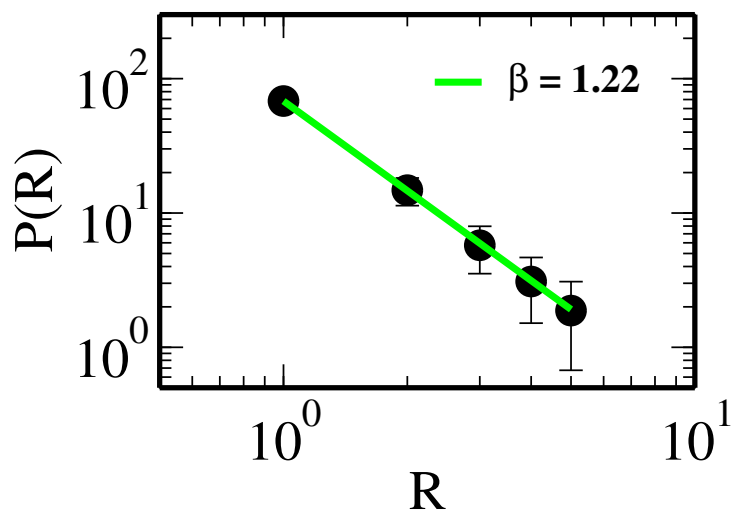


Figura 4.4: Histograma dos raios dos aglomerados (símbolos). A linha sólida é um ajuste obtido a partir da equação (4.2) com $\beta = 1.22 \pm 0.01$.

Resultados e Discussão

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos para as amostras de vidro de Lévy eletrônico AGNR e ZGNR, além de comparações com o 2DEG, derivadas das simulações realizadas para investigar o comportamento da transmissão em nanofitas de grafeno submetidas a um cluster de pontos quânticos eletrostáticos.

Iniciamos nossa análise examinando a transmissão média em função do comprimento das nanofitas para diferentes energias de Fermi. Caracterizamos os regimes de difusão nos dispositivos e observamos uma transição do regime superdifusivo (Lévy) para o regime difusivo normal no grafeno conforme a energia aumenta. Em seguida, prosseguimos com análises adicionais para identificar a possível origem da transição Lévy-para-difusivo no grafeno. Para isso, estudamos a densidade de corrente nos vidros de Lévy eletrônico e a estatística dos incrementos de transmissão nesses dispositivos.

Os resultados apresentados neste capítulo foram publicados na referencia [26] e contribuem significativamente para uma compreensão mais aprofundada do comportamento eletrônico em nanofitas de grafeno com pontos quânticos eletrostáticos. Além disso, fornecem insights valiosos para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos baseados nesses sistemas.

5.1 Transmissão

Começamos mostrando o coeficiente de transmissão como função da energia de Fermi na figura 5.1 para amostra de comprimento $L_A = 1050.7a_0$ e $L_Z = 1050.5a_0$. Para o vidro de Levy eletrônico, a transmissão (linha sólida) apresenta fortes flutuações mesoscópicas devido ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos. No caso de nanofitas sem impurezas (linhas pontilhadas) temos os platôs de transmissão referente ao número de modos propagantes, como discutido no Capítulo 3.

Para entender a influência do cluster de pontos quânticos eletrostáticos, analisaremos o coeficiente de transmissão médio como função do comprimento L . Para calcular a media construímos um conjunto de 6000 amostras de vidros de Lévy eletrônicos AGNR e ZGNR. Mantivemos as larguras fixas, $W_A = 49.5a_0$ e $W_Z = 49.6a_0$, e o potencial eletrostático $V = 0.25t_0$, enquanto variamos o comprimento até $L_A = 1050.7a_0$ e $L_Z = 1050.5a_0$, respectivamente. Dessa forma, pudemos observar o comportamento da curva do coeficiente de transmissão médio em função do comprimento das nanofitas. Além disso, para futura comparação entre redes hexagonais e quadradas, também construímos um conjunto 2DEG submetida a um cluster de pontos quânticos eletrostáticos, com $W_{2D} = 50a_0$ e L_{2D} até $1050a_0$.

A figura 5.2(a) mostra a transmissão média através da AGNR como uma função do comprimento L para três energias de Fermi diferentes: $E/t_0 = 0.2, 0.34$ e 1.2 , correspondendo ao número de canais $N = 8, 13$ e 47 , conforme discutido ao fim da seção 3.4. As transmissões médias (símbolos) foram calculadas a partir de um conjunto de 6000 vidros de Levy eletrônico

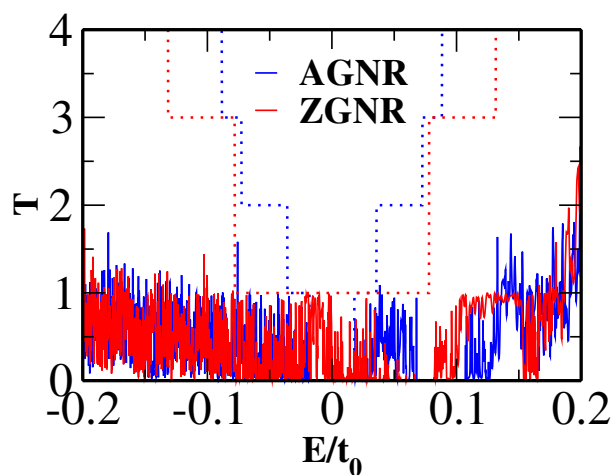


Figura 5.1: Transmissão através do vidro de Lévy eletrônico como função da energia de Fermi (linhas sólidas). As linhas pontilhadas são para as nanofitas de grafeno puras.

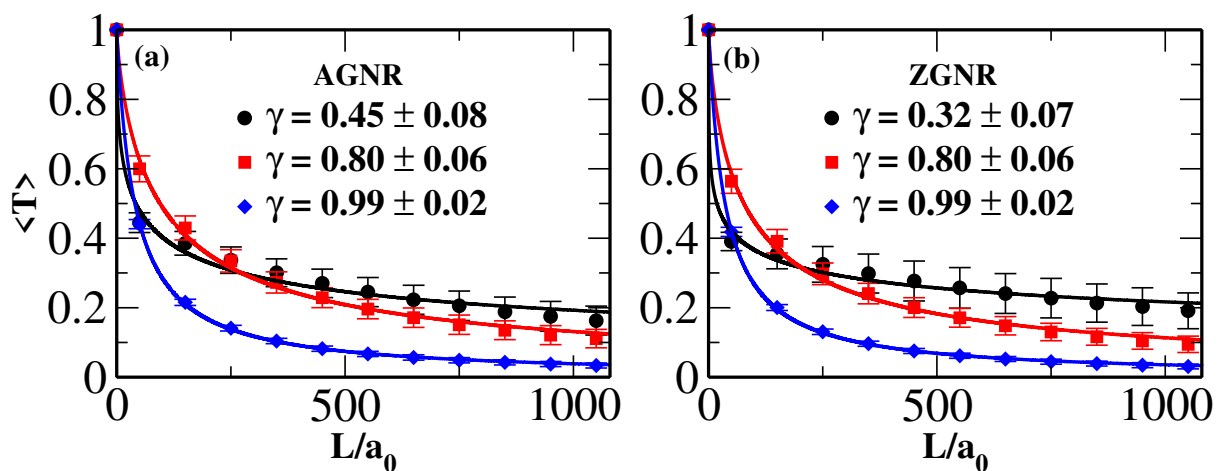


Figura 5.2: (a) Transmissão média como função do comprimento L para AGNR, com número de canais $N = 8$ (círculos), 13 (quadrados) e 47 (diamantes). (b) A mesmo grafico para ZGNR, com $N = 7$ (círculos), 15 (quadrados) e 49 (diamantes). As linhas sólidas em (a) e (b) são ajustes obtidos a partir da Eq. (2.22).

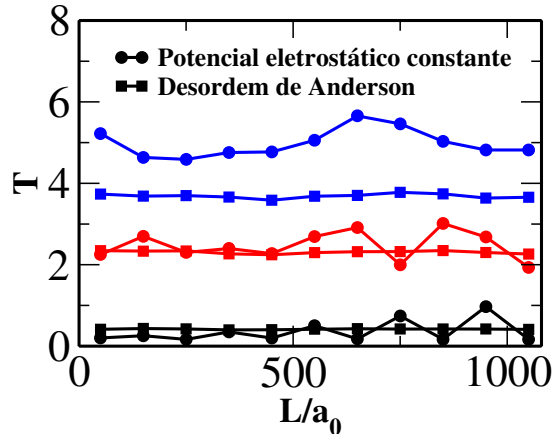


Figura 5.3: A transmissão como função do comprimento L para AGNR com potencial eletrostático constante $\varepsilon_i = V$ em todos os sítios (círculos), e para AGNR com desordem de Anderson (quadrados). Ambos para $N = 1$ (preto), 6 (vermelho) e 15 (azul) (ou seja, para três energias de Fermi diferentes).

nicos diferentes e normalizadas convenientemente para variar entre 0 e 1. A figura 5.2(b) é o equivalente para o ZGNR com $E/t_0 = 0.2, 0.4$ e 1.2 , onde $N = 7, 15$ e 49 , respectivamente.

Observamos que a transmissão média nas figuras 5.2(a) e (b) decresce como função de lei de potência do comprimento L . Utilizamos os dados da figura 5.2 para realizar um ajuste dos dados com a equação 2.22 e, assim, obter o expoente γ referente a cada valores de N (e suas respectivas energias de Fermi). O expoente γ , discutido no Capítulo 2, é utilizado na caracterização do regime de difusão, onde $\gamma = 1$ representa transporte difusivo normal e $\gamma < 1$ indica transporte superdifusivo. Obtivemos bons ajustes com os dados numéricos que nos forneceram o expoente γ . As figuras 5.2(a) e (b) mostram que para muitos canais abertos (alta energia de Fermi $E/t_0 = 1.2$), o expoente é $\gamma \simeq 1$ tanto para AGNR quanto para ZGNR. Por outro lado, quando diminuimos o número de canais (consequentemente reduzindo a energia de Fermi), o expoente diminui para $\gamma \simeq 0.5$, indicando uma transição não trivial do transporte de Lévy-para-difusivo à medida que a energia de Fermi aumenta.

Diante deste resultado, surge a seguinte indagação: "O comportamento da transmissão média observado nas figuras 5.2(a) e (b) é realmente devido ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos?"

Para responder a essa pergunta, é relevante examinar o comportamento do grafeno sob outros tipos de desordem. Além disso, também é relevante investigarmos como se comporta o 2DEG, que possui uma relação de dispersão diferente do grafeno conforme mostrado na figura 3.1, quando submetido ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos.

5.1.1 Grafeno submetido à potencial constante e a desordem de Anderson

Submetemos o grafeno a desordens típicas, como o potencial constante e a desordem de Anderson, para observar o comportamento das curvas de transmissão em função do comprimento. Inicialmente, realizamos um cálculo numérico da transmissão através do AGNR com

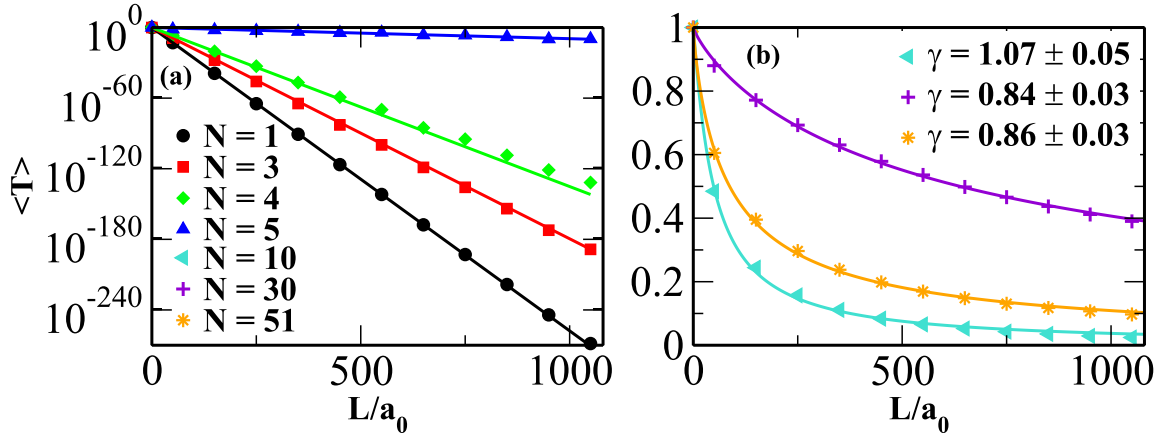


Figura 5.4: Transmissão média como função do comprimento L para 2DEG, com número de canais $N = 1$ (círculos), 3 (quadrados), 4 (diamantes), 5 (triângulo cima), 10 (triângulo lado), 30 (cruz) e 51 (estrela). As linhas sólidas em (a) são ajustes exponenciais e linhas sólidas (b) são ajustes obtidos a partir da equação (2.22).

um potencial eletrostático constante $\varepsilon_i = V$ em todos os sítios para três energias de Fermi diferentes. Na figura 5.3, observa-se que, para a AGNR, a transmissão permanece quase constante em função do comprimento (representado pelos círculos).

Em seguida, realizamos um cálculo numérico da transmissão do AGNR submetido a uma desordem de Anderson típica [109, 110]. Nesse caso, o potencial eletrostático ε_i varia aleatoriamente de sítio para sítio de acordo com uma distribuição uniforme no intervalo $(-V/2, V/2)$. Novamente, constatamos que, para a AGNR, a transmissão permanece quase constante em função do comprimento, conforme ilustrado na figura 5.3 (quadrados). Um comportamento similar foi observado para a ZGNR. Concluimos que a transição de Lévy-para-difusivo indicada na figura 5.2 é devida unicamente ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos.

5.1.2 2DEG submetido ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos

A outra verificação consiste em analisar o comportamento do 2DEG sob a influência do cluster de pontos quânticos eletrostáticos para determinar se a superdifusão observada é uma característica específica do grafeno.

Para investigar se estávamos realmente observando uma característica inerente ao grafeno ao submetê-lo ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos, geramos amostras da rede bidimensional de gás de elétrons quadrada (2DEG) sujeita ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos. Em seguida, analisamos as curvas de transmissão para diferentes números de canais abertos.

Na figura 5.4, podemos observar a transmissão média em função do comprimento para o 2DEG submetido ao cluster de pontos quânticos eletrostáticos. Notavelmente, o 2DEG apresenta dois comportamentos distintos de localização da transmissão. Para baixas energias de Fermi ($N < 10$), o 2DEG exibe uma localização exponencial, como observado na figura 5.4(a). Em contraste, para energias mais altas ($N \geq 10$), a localização é descrita pela equação 2.22, com todos os casos apresentando um expoente $\gamma \simeq 1$. Isso indica que na rede quadrada, sem-

pre observamos o comportamento difusivo normal, seja caracterizado pelo expoente $\gamma \simeq 1$ para energias mais altas, quanto pela localização exponencial (localização de Anderson) para energias mais baixas.

Isso nos leva à conclusão de que a transição de Lévy-para-difusivo é de fato uma consequência da interação dos clusters de pontos quânticos eletrostáticos com o grafeno. Esta conclusão é sustentada pelo fato de que tal transição não é observada ao submeter o grafeno a desordens típicas. Além disso, outros materiais com relações de dispersão diferentes do grafeno, como o 2DEG, quando interagem com os clusters de pontos quânticos eletrostáticos, não exibem um regime superdifusivo. Em vez disso, apresentam apenas um regime difusivo normal. Portanto, isso confirma que a transição de Lévy-para-difusivo é de fato devido à interação dos clusters de pontos quânticos eletrostáticos com o grafeno.

5.2 Transição Superdifusivo para Difusivo

Para caracterizar a transição de Lévy-para-difusivo, é conveniente utilizar a relação entre a energia de Fermi e o número de canais na nanofita N , como discutido na seção 3.4. Uma vez que conhecemos essa relação, podemos estudar como o expoente γ , obtido dos ajustes, varia em função de N .

Vamos apresentar duas abordagens: uma que mostra o comportamento médio de um conjunto de vidros de Lévy eletrônicos e outra que demonstra o comportamento médio de uma série temporal da transmissão de apenas uma amostra. Em seguida, iremos discutir se a transição de Lévy-para-difusivo ocorre ao aumentarmos a largura W das nanofitas.

5.2.1 Abordagem 1: Varias amostras de Vidro de Lévy eletrônico

A figura 5.5 mostra o expoente γ em função de N , variando de 1 a 55 para o AGNR, ZGNR e 2DEG. Quando $N > 10$, observamos um platô próximo a $\gamma = 1$ para os três tipos de vidro de Lévy eletrônico, indicando transporte difusivo regular. No entanto, quando $N < 10$, as redes hexagonais e quadradas exibem comportamentos distintos. Para AGNR e ZGNR, observamos um platô próximo a $\gamma = 0.5$, consistente com o transporte superdifusivo de Lévy. Por outro lado, para o 2DEG com $N < 10$, como discutido na subseção 5.1.2, a transmissão média não pode ser ajustada pela equação 2.22. Em vez disso, segue um perfil exponencial, compatível com a localização de Anderson [111].

Os resultados da figura 5.5 confirmam a presença de uma transição de Lévy-para-difusiva em nanofitas de grafeno imersas no cluster de pontos quânticos eletrostáticos. Essa transição é uma característica exclusiva das nanofitas de grafeno, independente do tipo de borda (AGNR ou ZGNR), e pode ser controlada pela energia de Fermi. No entanto, para acessar essa transição na figura 5.5, foi necessário produzir um conjunto com 6000 amostras, o que de fato representa o comportamento médio do ensemble dos vidros de Lévy eletrônico, mas torna o efeito experimentalmente inacessível. Diante disso, propomos uma segunda abordagem visando a viabilidade experimental.

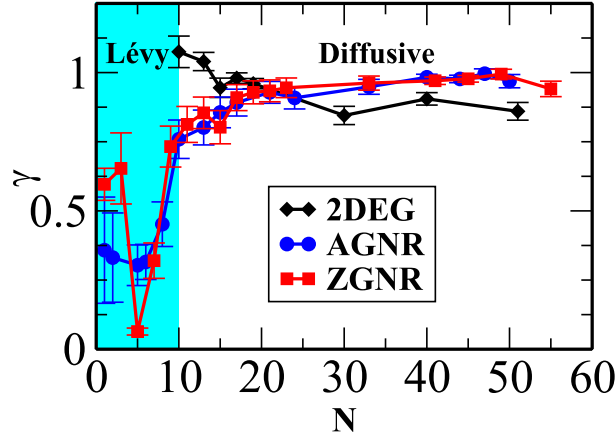


Figura 5.5: O expoente γ como função de N para um conjunto de amostras de vidros de Lévy eletrônico com $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$. Linhas sólidas são apenas para guiar os olhos.

5.2.2 Abordagem 2: Series temporais em uma única amostra de vidro de Lévy eletrônico

Uma configuração que pode ser considerada experimentalmente viável pode a realização de uma única amostra do vidro de Lévy eletrônico. Nessa abordagem, o potencial eletrostático V é aumentado linearmente de $0.23t_0$ para $0.27t_0$, enquanto é obtido os respectivos coeficientes de transmissão, formando assim uma *série temporal fictícia* $T(V)$ com 6000 passos de tempo. Aqui, V desempenha o papel de um *tempo fictício* [112, 113].

A figura 5.6 apresenta as séries temporais $T(V)$ para os vidros de Lévy eletrônicos de AGNR, ZGNR e 2DEG, com os respectivos comprimentos de $L_A = 1050.7a_0$, $L_Z = 1050.5a_0$ e $L_{2D} = 1050a_0$. A partir dessas séries temporais, foram calculados os coeficientes de transmissão médios, permitindo a construção das curvas de transmissão média como função do comprimento L para diferentes valores de N . Em seguida, procedemos com os ajustes para extrair o expoente γ , fornecendo assim γ como função de N para os vidros de Lévy eletrônicos.

Os resultados da figura 5.7, obtidos de apenas com uma única amostra de vidro de Lévy eletrônico, são totalmente compatíveis os mostrados na figura 5.5, o que demonstra a robustez da transição de transporte Lévy-para-difusivo. Para afirmar ainda mais a robustez da transição, desenvolvemos um cálculo numérico incluindo parâmetros de hopping entre segundos vizinhos [8]. Os símbolos triangulares na figura 5.7 correspondem aos dados para um AGNR incluindo hopping entre segundos vizinhos com energia $t'_0 = 0.1t_0$ [8]. Como esperado, observamos uma transição de transporte Lévy-para-difusivo, o que mostra que a inclusão de hopping entre segundos vizinhos não altera nossos resultados.

5.2.3 Efeito da largura da nanofita na transição de Lévy-para-difusivo

Por fim, também ampliamos a largura das nanofitas de grafeno para $W_A = 59.5a_0$ e $W_Z = 60.0a_0$. Implementamos o procedimento com apenas um exemplar de vidro de Lévy, conforme descrito pela abordagem 2 apresentada na subseção 5.2.2 acima, para obter a figura 5.8.

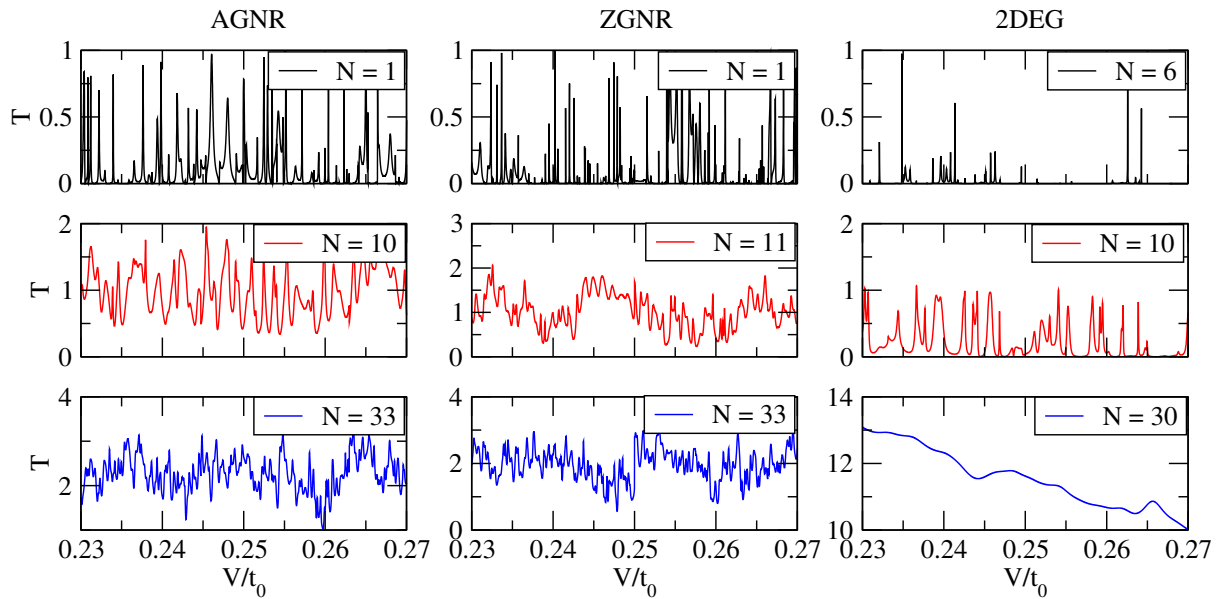


Figura 5.6: Series temporais $T(V)$ para diferentes N , transmissão em função do potencial eletrostático V para vidros de Lévy eletrônicos de AGNR, ZGNR e 2DEG. As larguras das nanofitas são $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$, e os comprimentos são $L_A = 1050.7a_0$, $L_Z = 1050.5a_0$ e $L_{2D} = 1050a_0$.

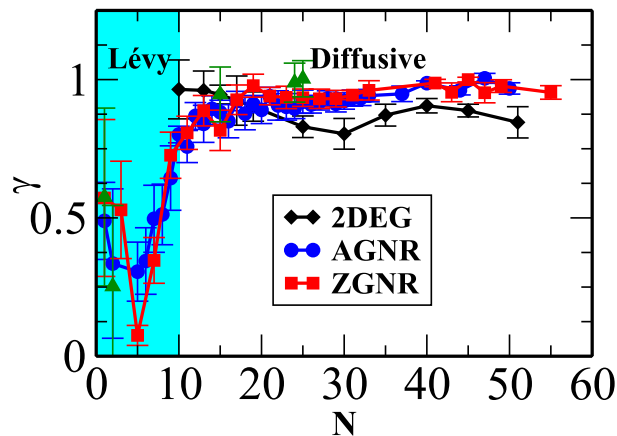


Figura 5.7: O expoente γ como função de N para apenas uma amostra de ELG com $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$ (Símbolos triangulares são para um dispositivo AGNR com saltos de segunda vizinhança). Linhas sólidas são apenas para guiar os olhos.

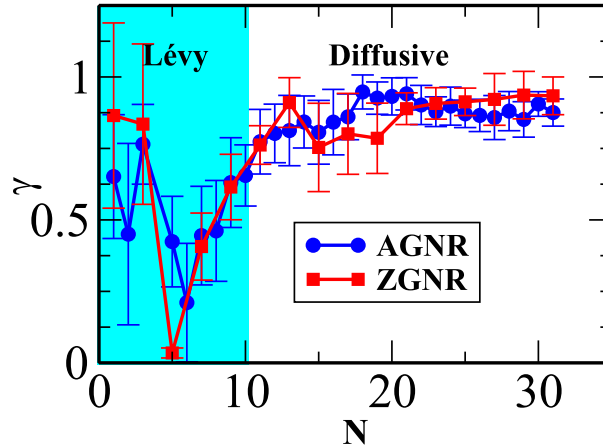


Figura 5.8: O expoente γ como função de N para uma amostra de ELG com $W_A = 59.5a_0$ e $W_Z = 60.0a_0$. Linhas sólidas são apenas para guiar os olhos.

Mais uma vez, a transição de transporte de Lévy-para-difusivo é visível. O resultado apresentado na figura 5.8 é consistente com os outros dois resultados apresentados nas figuras 5.5 e 5.7. Para ambas as bordas, a transição de Lévy-para-difusivo não é suprimida pelo aumento da largura da fita.

5.3 Discutindo possíveis origens para a transição Lévy-para-difusivo

Uma nanofita de grafeno imersa em um cluster de pontos quânticos eletrostáticos apresenta uma transição de transporte de Lévy-para-difusivo conforme a energia de Fermi varia. O transporte é superdifusivo no regime quântico, onde $N < 10$, e difusivo normal no regime semi-clássico, onde $N > 10$ [112, 114]. Estudos anteriores, como a referência [115], demonstraram que as flutuações de transmissão do grafeno em função do campo magnético exibem comportamento multifractal próximo ao ponto de Dirac e monofractal longe dele. Essa multifractalidade é atribuída às correlações quânticas induzidas por parâmetros externos, como um campo magnético ou potencial eletrostático, e diminui à medida que o número de canais N (ou a energia de Fermi) aumenta [112]. No entanto, é importante notar que o grafeno possui uma dispersão linear de energia próxima ao ponto de Dirac, o que preserva a simetria quiral. Entretanto, tanto a dispersão linear quanto a simetria quiral são quebradas pelo aumento da energia de Fermi [116–118].

Considerando esse contexto, é crucial explorar a origem da nossa transição de transporte de Lévy-para-difusivo. Listamos duas possíveis causas:

1. Perda de multifractalidade induzida pelo aumento da energia de Fermi;
2. Quebra da simetria quiral também induzida pelo aumento da energia de Fermi.

A seguir, analisaremos ambas as possibilidades e concluímos que nossos resultados são mais consistentes com a segunda hipótese.

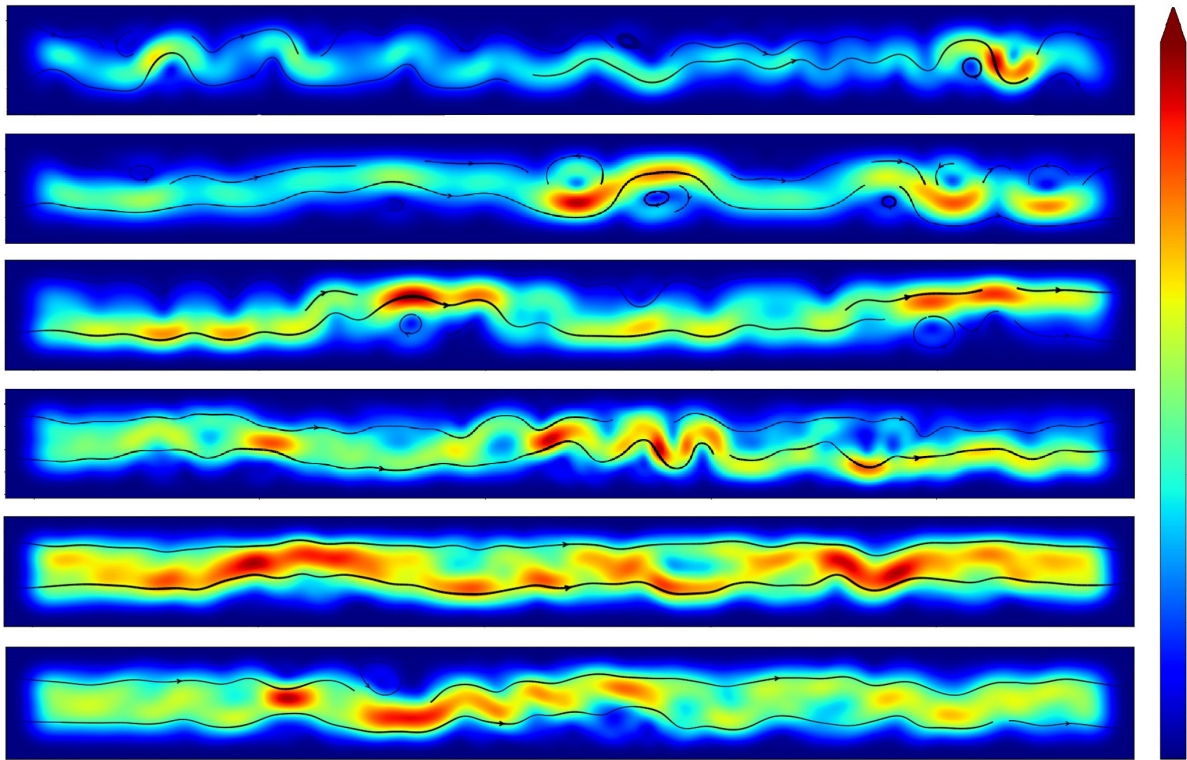


Figura 5.9: Densidade de corrente para uma AGNR com $L_A = 1050.7a_0$ e $N = 1, 2, 5, 10, 20$ e 47 (de cima para baixo). A densidade de corrente aumenta à medida que a cor muda de azul para vermelho.

5.3.1 Densidade de Corrente

Para compreender o transporte eletrônico em ambos os regimes e buscar a potencial causa da transição, analisamos a densidade de corrente em uma AGNR com $L_A = 1050.7a_0$ para diferentes números de canais, $N = 1, 2, 5, 10, 20$ e 47 (de cima para baixo), conforme mostrado na figura 5.9.

No regime quântico $N < 10$, caracterizado pela multifractalidade na transmissão e uma dinâmica de transmissão superdifusiva, observamos um desvio do fluxo de corrente em relação aos pontos quânticos eletrostáticos. Além disso, neste regime, o transporte de Lévy dá origem a vórtices que circundam os menores pontos quânticos, evidenciando um comportamento semelhante à turbulência em uma transição de Hall quântica inteira, conforme relatado na referência [113]. Por outro lado, no regime semi-clássico $N > 10$, o fluxo de corrente preenche toda a mostra devido à dinâmica de transmissão difusiva normal, sofrendo mais espalhamentos e destruindo os vórtices. Resultados semelhantes foram obtidos para um ZGNR, como mostrado na figura 5.10.

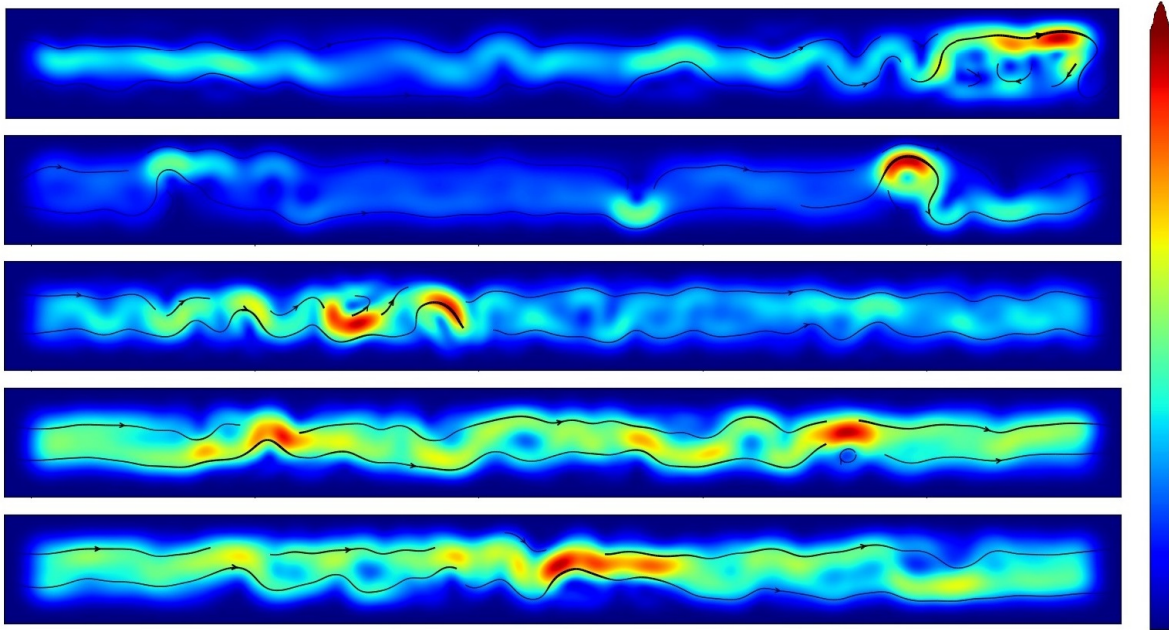


Figura 5.10: Densidade de corrente para uma ZGNR com $L_A = 1050.5a_0$ e $N = 1, 3, 5, 21$ e 47 (de cima para baixo). A densidade de corrente aumenta à medida que a cor muda de azul para vermelho.

5.3.2 Análise q -Gaussiana das séries temporais dos incrementos de transmissão

Para entender a dinâmica de transmissão superdifusiva e difusiva, ou seja, a transição de Lévy-para-difusiva e sua possível relação com multifractalidade, investigamos as assinaturas na distribuições dos incrementos de transmissão (ou velocidade de transmissão) usando a série temporal fictícia $T(V)$. A velocidade de transmissão é definida como $\delta T = T(V + \Delta V) - T(V)$ [119].

Na figura 5.11, observamos as séries dos incrementos de transmissão em função de V , que carregam assinaturas das correlações quânticas. Podemos notar que, para baixas energias de Fermi (curvas pretas) em ambos AGNR, ZGNR e 2DEG, há a ocorrência de incrementos maiores entre incrementos muito pequenos, indicando forte correlação. Conforme aumentamos a energia de Fermi, gradualmente os incrementos se tornam praticamente similares, observado pela redução da amplitude dos grandes incrementos nas curvas vermelhas, até que, por fim, chegam a incrementos praticamente idênticos nas curvas azuis, indicando perda de correlação.

Calculamos os histogramas das velocidades de transmissão. As figuras 5.12(a) e (b) mostram o histograma da velocidade de transmissão para AGNR e ZGNR, respectivamente. Na figura 5.12(a), os dados correspondem a uma AGNR com $L_A = 1050.7a_0$ e $N = 1, 10$ e 33 , enquanto na figura 5.12(b), correspondem a uma ZGNR com $L_A = 1050.5a_0$ e $N = 1, 11$ e 33 .

Para $N = 1$, tanto em AGNR quanto em ZGNR, observamos uma distribuição não gaussiana (círculos pretos) com um pico estreito ao redor de zero e caudas pesadas. No entanto, para $N = 10$ e 33 na AGNR e para $N = 11$ e 33 na ZGNR, a distribuição se aproxima de uma distribuição gaussiana. De acordo com a referencia [112], essa transição de comportamento

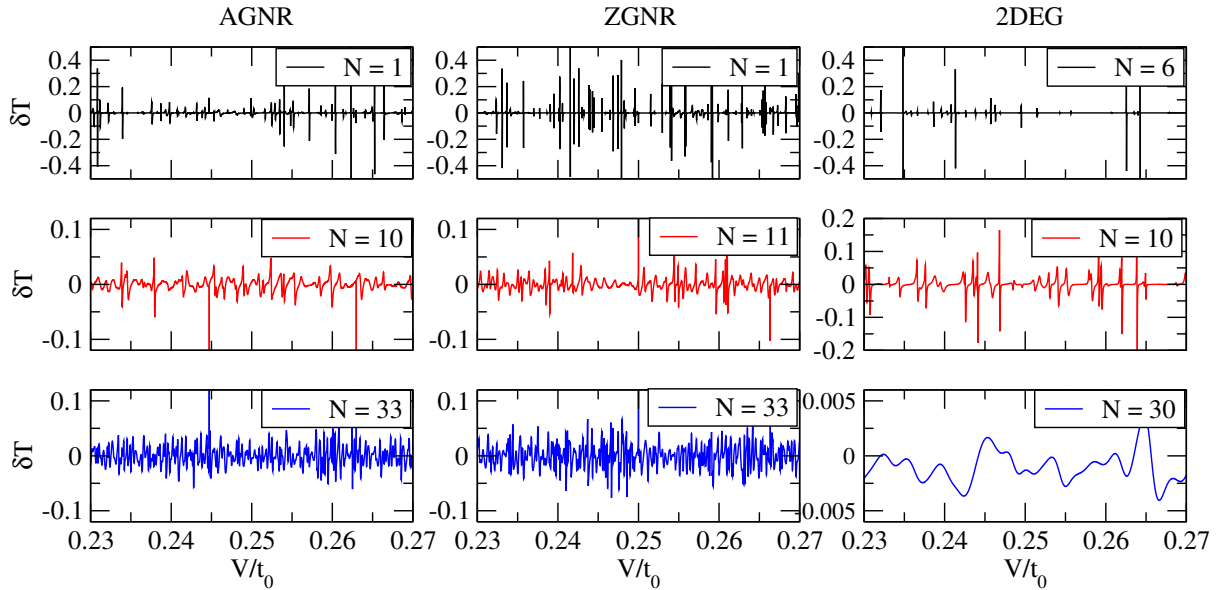


Figura 5.11: Series temporais $\delta T(V)$ para diferentes N , velocidade de transmissão em função do potencial eletrostático V para vidros de Lévy eletrônicos de AGNR, ZGNR e 2DEG. As larguras das nanofitas são $W_A = 49.5a_0$, $W_Z = 49.6a_0$ e $W_{2D} = 50a_0$, e os comprimentos são $L_A = 1050.7a_0$, $L_Z = 1050.5a_0$ e $L_{2D} = 1050a_0$

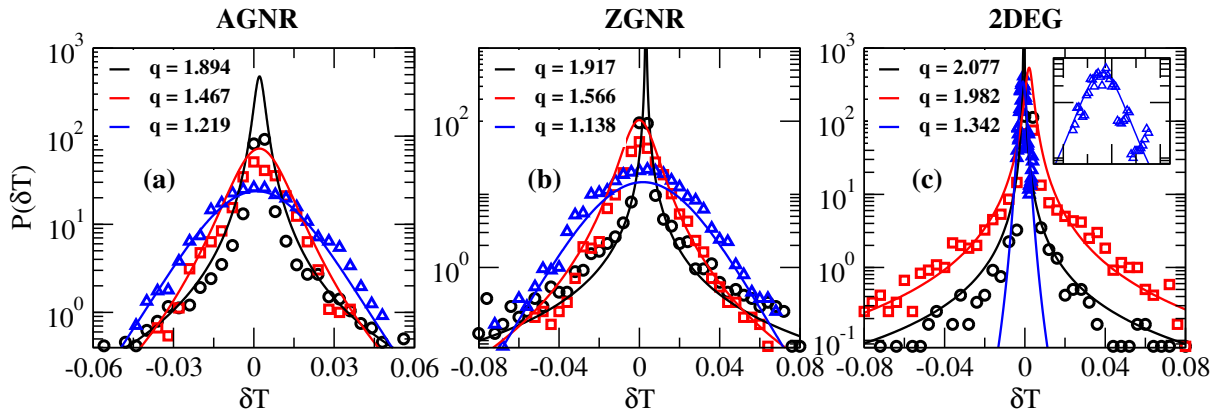


Figura 5.12: Histograma da *velocidade de transmissão* δT e suas respectivas curvas de ajuste q-Gaussiano a partir da equação 5.1 para nanofitas de: (a) AGNR com $W_A = 49.5a_0$ e $L_A = 1050.7a_0$ com $N = 1$ (preto), 10 (vermelho) e 33 (azul), (b) ZGNR com $W_A = 49.6a_0$ e $L_A = 1050.5a_0$ com $N = 1$ (preto), 11 (vermelho) e 33 (azul) e (c) 2DEG com $W_A = 45a_0$ e $L_A = 1050a_0$ com $N = 6$ (preto), 10 (vermelho) e 30 (azul).

não gaussiano para gaussiano é atribuída à perda de multifractalidade induzida pelo aumento da energia de Fermi.

Por outro lado, a figura 5.12(c) mostra que a amostra de 2DEG também apresenta uma transição de distribuição não gaussiana para gaussiana, o que indica que a perda de multifractalidade não é uma característica exclusiva da rede de grafeno. Portanto, podemos concluir que a perda de multifractalidade não pode ser a causa de nossa transição Lévy-para-difusiva. Afinal, a perda de multifractalidade também foi observada na amostra de 2DEG, enquanto a transição só foi observada nas amostras de grafeno.

Embora a perda de multifractalidade não seja a causa da transição de Lévy-para-difusiva, ainda podemos usar os histogramas para caracterizá-la. Os histogramas da figura 5.12 podem ser ajustados por funções de densidade de probabilidade q -Gaussianas

$$P(x) = \frac{\sqrt{\beta}}{C_q} [1 + (q-1)\beta(x-x_0)^2]^{-\frac{1}{q}}, \quad (5.1)$$

sendo

$$C_q = \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{3-q}{2(q-1)})}{\sqrt{q-1}\Gamma(\frac{1}{q-1})}, 1 < q < 3, \quad (5.2)$$

onde β representa uma medida da largura da distribuição e x_0 sua média. A equação 5.1 pode ser formalmente derivada da maximização da entropia de Tsallis [120]. Observa-se que, quando $q \rightarrow 1$, $P(x)$ converge para a distribuição gaussiana. Portanto, valores de q diferentes de 1 podem ser considerados como uma medida de não-gaussianidade. Esses ajustes nos permitem examinar a mudança na forma da distribuição à medida que aumentamos a energia de Fermi, o que pode fornecer informações adicionais sobre a transição de Lévy-para-difusiva nas amostras de grafeno. As linhas sólidas na figura 5.12 representam os melhores ajustes à equação (5.1). É evidente que q diminui à medida que N aumenta, possibilitando a associação do expoente de transmissão γ com o parâmetro q .

A figura 5.13 mostra o expoente γ em função de q para AGNR e ZGNR, onde a transição de Lévy-para-difusiva é evidente em torno de $q = 3/2$, tanto para AGNR quanto para ZGNR. Quando $q < 3/2$, a transmissão é difusiva e monofractal, enquanto para $q > 3/2$ é superdifusiva e multifractal. Conforme relatado em referências anteriores [121–123], a transição de uma distribuição não gaussiana para uma gaussiana está frequentemente associada a uma transição de fase. Portanto, a figura 5.13 fornece uma forte evidência de que a transição de Lévy-para-difusiva é uma transição de fase fora do equilíbrio.

5.3.3 Considerações sobre a Quebra de Simetria Quiral na Transição Lévy-para-Difusiva

A principal característica da rede de grafeno é sua dispersão de energia linear próxima ao ponto de Dirac, enquanto a rede quadrada tem uma dispersão parabólica. Como consequência da dispersão linear, os portadores de carga se comportam como férmions de Dirac relativísticos sem massa e podem tunelar através de barreiras de potencial eletrostático com probabilidade nula de reflexão, um fenômeno conhecido como efeito de tunelamento de Klein. No entanto, a

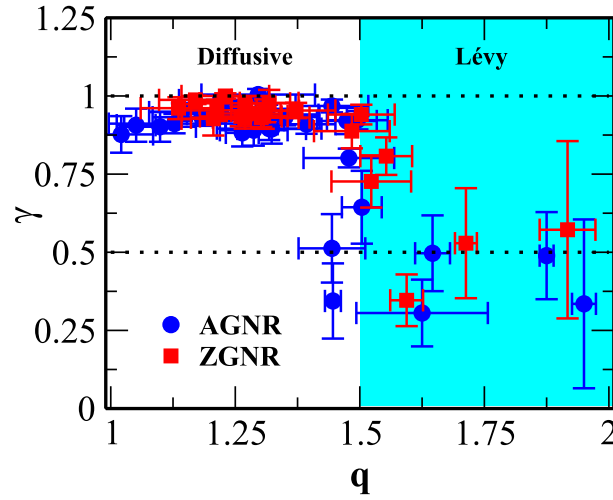


Figura 5.13: O expoente γ como função do parâmetro q , para AGNR e ZGNR.

dispersão linear é perdida ao se afastar do ponto de Dirac, devido a um aumento da energia de Fermi, levando os portadores de carga a se comportarem como férmions massivos.

Também podemos interpretar esse comportamento no contexto da Teoria de Matriz Aleatória [124]. O transporte eletrônico através da rede de grafeno, na ausência de um campo magnético e interação spin-órbita, é descrito pela classe BDI dos conjuntos quirais, enquanto para a rede quadrada é descrito pela classe AI dos conjuntos de Wigner-Dyson na nomenclatura de Cartan [117]. A rede de grafeno preserva as simetrias de reversão temporal, partícula-buraco e quiral no ponto de Dirac [117]. Longe do ponto de Dirac, a classe BDI se transforma na classe AI devido à quebra da simetria quiral [116–118], causada pelo aumento da energia de Fermi. Isso explica o comportamento diferente entre as redes de grafeno e a rede quadrada no regime quântico $N < 10$, e o comportamento semelhante no regime semi-clássico $N > 10$, conforme mostrado nas figuras 5.5 e 5.7.

Assim, chegamos a conclusão de que o transporte superdifusivo é uma característica exclusiva do vidro de Lévy eletrônico de grafeno no regime quântico ($N < 10$), enquanto o transporte difusivo é uma característica no regime semi-clássico ($N > 10$). Portanto, a explicação mais convincente para a transição observada de Lévy-para-difusiva em nossos cálculos é a quebra de simetria quiral. Além disso, as referências [125, 126] indicam que a quebra de simetria quiral está associada a uma transição de fase, reforçando que nossa transição de transporte pode ser uma transição de fase fora do equilíbrio associada à quebra de simetria quiral e, portanto, à perda da dispersão de energia linear.

Por fim, é interessante comparar nossas descobertas com as da referência [24]. A luz tem uma dispersão de energia linear semelhante à do elétron no grafeno perto do ponto de Dirac. No entanto, diferentemente da relação de dispersão do elétron no grafeno, a relação de dispersão da luz é sempre linear. Portanto, não se espera que a luz apresente uma transição de Lévy-para-difusiva no vidro de Lévy óptico; espera-se que ela sempre apresente comportamento superdifusivo. Também é importante notar que o 2DEG não possui uma relação de dispersão linear, e é por isso que não apresenta o comportamento superdifusivo no vidro de Lévy eletrônico.

Conclusão

Neste estudo, propomos um dispositivo denominado de vidro de Lévy eletrônico, inspirado no vidro de Lévy óptico realizado experimentalmente. Exploramos a transmissão de elétrons em nanofitas de grafeno com bordas armchair (AGNR) e zigzag (ZGNR), na presença de clusters eletrostáticos circulares cujo diâmetro segue uma distribuição de lei de potência. Ao analisar o efeito desses clusters no transporte eletrônico das nanofitas, comparamos com um sistema de gás de elétrons bidimensional (2DEG). Através de cálculos numéricos, observamos que a presença dos clusters induz no grafeno uma transição de transporte do regime Lévy (superdifusivo) para a difusão regular conforme a energia de Fermi aumenta, corroborada por uma análise q -Gaussiana, como representado na figura 5.13. Concluimos que o transporte superdifusivo nos vidros de Lévy eletrônicos é uma característica exclusiva do regime quântico de baixa energia, enquanto o transporte difusivo é uma característica do regime semiclássico. Portanto, é provável que a transição de transporte Lévy-para-difusivo observada seja causada pela quebra de simetria quiral à medida que nos afastamos do ponto de Dirac do grafeno.

Algumas perspectivas que futuros trabalhos seriam:

- Investigar como a geometria dos clusters eletrostáticos afeta o comportamento do transporte eletrônico, incluindo a verificação da possibilidade de regimes superdifusivos em clusters não circulares.
- Explorar vidros de Lévy eletrônicos baseados em interações diferentes de potenciais eletrostáticos, como campo magnético, interação spin-orbita, entre outros.
- Estudar a influência de diferentes distribuições de raios no cluster, variando o expoente β , para entender melhor a ocorrência do regime superdifusivo. Embora tenhamos mantido $\beta = 1.22$ neste estudo, a variação desse parâmetro pode fornecer insights adicionais sobre o fenômeno.

Em resumo, este estudo não apenas contribui para o entendimento do transporte eletrônico em nanofitas de grafeno, mas também abre portas para uma variedade de pesquisas futuras explorando as propriedades emergentes dos vidros de Lévy eletrônicos.

6.1 Trabalhos publicados

- "Lévy flight for electrons in graphene: Superdiffusive-to-diffusive transport transition", Diego B. Fonseca, Luiz Felipe C. Pereira, and Anderson L. R. Barbosa. Phys. Rev. B, 107:155432, Apr 2023.
- "Orbital Hall effect in mesoscopic devices", Diego B. Fonseca, Lucas L. A. Pereira, and Anderson L. R. Barbosa. Phys. Rev. B, 108:245105, Dec 2023.

- "Magnon state transfer in chains with correlated disorder", M.S.S. Junior, W.V.P. de Lima, V.A. Teixeira, Diego B. Fonseca, F. Moraes, A.L.R. Barbosa, G.M.A. Almeida, and F.A.B.F. de Moura. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 579:170880, Aug 2023.

6.2 Trabalhos em redação

- "Electronic Lévy glass with spin-orbit coupling cluster in graphene", Diego B. Fonseca, Luiz Felipe C. Pereira, and Anderson L. R. Barbosa.
- "Heisenberg XYZ disordered magnetic chains with exponential correlations: localization and quantum state transference", Diego B. Fonseca, A. L. R. Barbosa, F. Moraes, G. M. A. Almeida, and F. A. B. F. de Moura.

6.3 Participações em eventos

- "Superdiffusion in graphene: Localization effects in graphene lattices due to electrostatic Levy clusters". Poster apresentado no encontro de Encontro de Outono da SBF 2022.
- "A Lévy flight for graphene: Lévy-to-diffusive transport transition". Poster apresentado no XXXVI Encontro de Física do Norte e Nordeste 2022.
- "A Lévy flight for electrons in graphene: superdiffusive-to-diffusive transport transition". Poster apresentado no encontro de Encontro de Outono da SBF 2023.
- "Lévy flight for electrons in graphene: Superdiffusive-to-diffusive transport transition". Poster apresentado no XXXVII Encontro de Física do Norte e Nordeste 2023.

Referências Bibliográficas

- [1] José M. Caridad, Stephen Connaughton, Christian Ott, Heiko B. Weber, and Vojislav Krstić. An electrical analogy to mie scattering. *Nature Communications*, 7:12894, Set 2016.
- [2] Shaowen Chen, Zheng Han, Mirza M. Elahi, K. M. Masum Habib, Lei Wang, Bo Wen, Yuanda Gao, Takashi Taniguchi, Kenji Watanabe, James Hone, Avik W. Ghosh, and Cory R. Dean. Electron optics with p-n junctions in ballistic graphene. *Science*, 353(6307):1522–1525, 2016.
- [3] Zhenhua Wu, F. Zhai, F. M. Peeters, H. Q. Xu, and Kai Chang. Valley-dependent brewster angles and goos-hänchen effect in strained graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 106:176802, Apr 2011.
- [4] Hong-Ya Xu, Guang-Lei Wang, Liang Huang, and Ying-Cheng Lai. Chaos in dirac electron optics: Emergence of a relativistic quantum chimera. *Phys. Rev. Lett.*, 120:124101, Mar 2018.
- [5] Vadim V. Cheianov, Vladimir Fal’ko, and B. L. Altshuler. The focusing of electron flow and a veselago lens in graphene $p - n$ junctions. *Science*, 315(5816):1252–1255, 2007.
- [6] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei V Morozov, De-eng Jiang, Yanshui Zhang, Sergey V Dubonos, Irina V Grigorieva, and Alexandr A Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.
- [7] Kostya S Novoselov, Andre K Geim, Sergei Vladimirovich Morozov, Dingde Jiang, Michail I Katsnelson, Irina V Grigorieva, SVb Dubonos, Firsov, and AA. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *nature*, 438(7065):197–200, 2005.
- [8] 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.*, 81:109–162, Jan 2009.
- [9] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2:620, 2006.
- [10] Anderson L. R. Barbosa, Jonas R. F. Lima, and Luiz Felipe C. Pereira. Wave transmission and its universal fluctuations in one-dimensional systems with lévy-like disorder: Schrödinger, klein-gordon, and dirac equations. *Phys. Rev. E*, 106:054127, Nov 2022.

- [11] Pierre E Allain and Jean-Noel Fuchs. Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons. *The European Physical Journal B*, 83:301–317, 2011.
- [12] Peter Bøggild, José M Caridad, Christoph Stampfer, Gaetano Calogero, Nick Rübner Papior, and Mads Brandbyge. A two-dimensional dirac fermion microscope. *Nature communications*, 8(1):15783, 2017.
- [13] Mahdiyeh Sadrara and MirFaez Miri. Collective cloaking of a cluster of electrostatically defined core–shell quantum dots in graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 34(11):115703, jan 2022.
- [14] Mahdiyeh Sadrara and MirFaez Miri. Dirac electron scattering from a cluster of electrostatically defined quantum dots in graphene. *Phys. Rev. B*, 99:155432, Apr 2019.
- [15] R. L. Heinisch, F. X. Bronold, and H. Fehske. Mie scattering analog in graphene: Lensing, particle confinement, and depletion of klein tunneling. *Phys. Rev. B*, 87:155409, Apr 2013.
- [16] J. H. Bardarson, M. Titov, and P. W. Brouwer. Electrostatic confinement of electrons in an integrable graphene quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 102:226803, Jun 2009.
- [17] Christopher Gutiérrez, Lola Brown, Cheol-Joo Kim, Jiwoong Park, and Abhay N Papsupathy. Klein tunnelling and electron trapping in nanometre-scale graphene quantum dots. *Nature Physics*, 12:1069, 2016.
- [18] Holger Fehske, Georg Hager, and Andreas Pieper. Electron confinement in graphene with gate-defined quantum dots. *physica status solidi (b)*, 252(8):1868–1871, 2015.
- [19] Jamie D. Walls and Daniel Hadad. Suppressing klein tunneling in graphene using a one-dimensional array of localized scatterers. *Scientific Reports*, 5:8435, Set 2016.
- [20] Jamie D. Walls and Daniel Hadad. The talbot effect for two-dimensional massless dirac fermions. *Scientific Reports*, 6:26698, Set 2016.
- [21] Vít Jakubský, Şengul Kuru, and Javier Negro. Dirac fermions in armchair graphene nanoribbons trapped by electric quantum dots. *Phys. Rev. B*, 105:165404, Apr 2022.
- [22] Si-Yu Li and Lin He. Recent progresses of quantum confinement in graphene quantum dots. *Frontiers of Physics*, 17:33201, 2021.
- [23] Jungmin Park, Inseon Oh, Mi-Jin Jin, Junhyeon Jo, Daeseong Choe, Hyung Duk Yun, Suk Woo Lee, Zonghoon Lee, Soon-Yong Kwon, Hosub Jin, et al. Observation of spin-polarized anderson state around charge neutral point in graphene with fe-clusters. *Scientific Reports*, 10(1):4784, 2020.
- [24] Pierre Barthelemy, Jacopo Bertolotti, and Diederik S Wiersma. A lévy flight for light. *Nature*, 453(7194):495–498, 2008.

- [25] Matteo Burrelli, Vivekananthan Radhalakshmi, Romolo Savo, Jacopo Bertolotti, Kevin Vynck, and Diederik S. Wiersma. Weak localization of light in superdiffusive random systems. *Phys. Rev. Lett.*, 108:110604, Mar 2012.
- [26] Diego B. Fonseca, Luiz Felipe C. Pereira, and Anderson L. R. Barbosa. Lévy flight for electrons in graphene: Superdiffusive-to-diffusive transport transition. *Phys. Rev. B*, 107:155432, Apr 2023.
- [27] Hans Fischer. *A history of the central limit theorem: from classical to modern probability theory*, volume 4. Springer, 2011.
- [28] Louis Cranier. Central limit theorem. 2022.
- [29] Massimiliano Giona, Andrea Cairoli, and Rainer Klages. In the folds of the central limit theorem: Lévy walks, large deviations and higher-order anomalous diffusion. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 55(47):475002, nov 2022.
- [30] Albert Einstein. *Investigations on the Theory of the Brownian Movement*. Courier Corporation, 1956.
- [31] Marian Smoluchowski, Roman Smoluchowski, Mark Kac, Subramanyan Chandrasekhar, and Stanislaw M Ulam. *Marian Smoluchowski: Selected Scientific Works*. Wydawnictwa Uniwersytetu Warszawskiego, WUW, 2020.
- [32] Vladimir V Uchaikin. Self-similar anomalous diffusion and levy-stable laws. *Physics-Uspekhi*, 46(8):821, aug 2003.
- [33] V. Zaburdaev, S. Denisov, and J. Klafter. Lévy walks. *Rev. Mod. Phys.*, 87:483–530, Jun 2015.
- [34] Vladimir V. Uchaikin and Vladimir M. Zolotarev. *Chance and Stability*. De Gruyter, Berlin, Boston, 1999.
- [35] Rainer Klages, Günter Radons, and Shlesinger Michael F. Sokolov, Igor Mihajlovič. *Random Processes with Infinite Moments*, chapter 3, pages 75–91. John Wiley Sons, Ltd, 2008.
- [36] Boris Vladimirovich Gnedenko and Andreï Kolmogorov. *Limit distributions for sums of independent random variables*.
- [37] Tânia Tomé. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade Vol. 35*. Edusp, 2001.
- [38] William Feller. *An introduction to probability theory and its applications, Volume 2*, volume 81. John Wiley & Sons, 1991.
- [39] Sílvia RA Salinas. *Introdução à física estatística*. Edusp, 1999.

- [40] Rand R. Wilcox. 2 - probability and related concepts. In Rand R. Wilcox, editor, *Applying Contemporary Statistical Techniques*, pages 17–53. Academic Press, Burlington, 2003.
- [41] *Steady-State Properties of of GI/G/1*, pages 266–301. Springer New York, New York, NY, 2003.
- [42] Oliver C. Ibe. 11 - levy processes. In Oliver C. Ibe, editor, *Markov Processes for Stochastic Modeling (Second Edition)*, pages 329–347. Elsevier, Oxford, second edition edition, 2013.
- [43] Paul Lévy. L’addition des variables aléatoires définies sur une circonférence. *Bulletin de la Société mathématique de France*, 67:1–41, 1939.
- [44] Joseph Klafter, Michael F. Shlesinger, and Gert Zumofen. Beyond Brownian Motion. *Physics Today*, 49(2):33–39, 02 1996.
- [45] Pierre Barthelemy. *Anomalous Transport of Light*. PhD thesis, Citeseer, 2009.
- [46] J Klafter and G Zumofen. Probability distributions for continuous-time random walks with long tails. *The Journal of Physical Chemistry*, 98(30):7366–7370, 1994.
- [47] Solomon T. H. Urbach Jeffrey S. Swinney Harry L. Weeks, Eric R. Observation of anomalous diffusion and lévy flights. In *Lévy Flights and Related Topics in Physics*, pages 51–71, Berlin, Heidelberg, 1995. Springer Berlin Heidelberg.
- [48] Winston Campeau, Andrew M. Simons, and Brett Stevens. The evolutionary maintenance of lévy flight foraging. *PLOS Computational Biology*, 18(1):1–26, 01 2022.
- [49] N. Humphries, N. Queiroz, J. Dyer, N. Pade, M. Musyl, K. Schaefer, D. Fuller, J. Brunnschweiler, T. Doyle, J. Houghton, G. Hays, C. Jones, L. Noble, V. Wearmouth, E. Southall, and D. Sims. Environmental context explains lévy and brownian movement patterns of marine predators. *Nature*, 465:1066–1069, 2010.
- [50] Dirk Brockmann, Lars Hufnagel, and Theo Geisel. The scaling laws of human travel. *Nature*, 439(7075):462–465, 2006.
- [51] C. Hu, Z. Li, T. Zhou, A. Zhu, and C. Xu. A multi-verse optimizer with levy flights for numerical optimization and its application in test scheduling for network-on-chip. *Plos One*, 11:e0167341, 2016.
- [52] S. Buldyrev, S. Havlin, A. Kazakov, M. Luz, E. Raposo, H. Stanley, and G. Viswanathan. Average time spent by lévy flights and walks on an interval with absorbing boundaries. *Physical Review E*, 64, 2001.
- [53] T. H. Solomon, Eric R. Weeks, and Harry L. Swinney. Observation of anomalous diffusion and lévy flights in a two-dimensional rotating flow. *Phys. Rev. Lett.*, 71:3975–3978, Dec 1993.

- [54] I. Sokolov and R. Metzler. Towards deterministic equations for lévy walks: the fractional material derivative. *Physical Review E*, 67, 2003.
- [55] M. Leadbeater, V. I. Falko, and C. J. Lambert. Lévy flights in quantum transport in quasiballistic wires. *Phys. Rev. Lett.*, 81:1274–1277, Aug 1998.
- [56] S. Gattenlöhner, I. V. Gornyi, P. M. Ostrovsky, B. Trauzettel, A. D. Mirlin, and M. Titov. Lévy flights due to anisotropic disorder in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 117:046603, Jul 2016.
- [57] Egor I. Kiselev and Jörg Schmalian. Lévy flights and hydrodynamic superdiffusion on the dirac cone of graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 123:195302, Nov 2019.
- [58] Jonas R. F. Lima, Luiz Felipe C. Pereira, and Anderson L. R. Barbosa. Dirac wave transmission in lévy-disordered systems. *Phys. Rev. E*, 99:032118, Mar 2019.
- [59] Erick G. Rocha, Emanuel P. Santos, Bruno J. dos Santos, Samuel S. de Albuquerque, Pablo I. R. Pincheira, Carlos Argolo, and André L. Moura. Lévy flights for light in ordered lasers. *Phys. Rev. A*, 101:023820, Feb 2020.
- [60] Jiaqi Li, Han Wu, Zinan Wang, Shengtao Lin, Chongyu Lu, Ernesto P. Raposo, Anderson S. L. Gomes, and Yunjiang Rao. Lévy spectral intensity statistics in a raman random fiber laser. *Opt. Lett.*, 44(11):2799–2802, Jun 2019.
- [61] N. Mercadier, W. Guerin, M. Chevrollier, and R. Kaiser. Lévy flights of photons in hot atomic vapours. *Nature Physics*, 5:602, Set 2009.
- [62] A. A. Fernández-Marín, J. A. Méndez-Bermúdez, J. Carbonell, F. Cervera, J. Sánchez-Dehesa, and V. A. Gopar. Beyond anderson localization in 1d: Anomalous localization of microwaves in random waveguides. *Phys. Rev. Lett.*, 113:233901, Dec 2014.
- [63] A. A. Fernández-Marín, J. A. Méndez-Bermúdez, and Victor A. Gopar. Photonic heterostructures with lévy-type disorder: Statistics of coherent transmission. *Phys. Rev. A*, 85:035803, Mar 2012.
- [64] Luis A. Razo-López, Azriel Z. Genack, and Victor A. Gopar. Statistics of coherent waves inside media with lévy disorder. *Phys. Rev. Research*, 3:023035, Apr 2021.
- [65] C. W. Groth, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker. Transmission probability through a lévy glass and comparison with a lévy walk. *Phys. Rev. E*, 85:021138, Feb 2012.
- [66] Tal Koren, Michael A. Lomholt, Aleksei V. Chechkin, Joseph Klafter, and Ralf Metzler. Leapover lengths and first passage time statistics for lévy flights. *Phys. Rev. Lett.*, 99:160602, Oct 2007.
- [67] A Davis and A Marshak. Lévy kinetics in slab geometry: Scaling of transmission probability. *Fractal Frontiers*, pages 63–72, 1997.

- [68] DJ Scalapino, E Berg, and SA Kivelson. Mesoscopics and the high t_c problem. In *Perspectives Of Mesoscopic Physics: Dedicated to Yoseph Imry's 70th Birthday*, pages 239–247. World Scientific, 2010.
- [69] Supriyo Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
- [70] Steven H Simon. *The Oxford solid state basics*. OUP Oxford, 2013.
- [71] J. C. Slater and G. F. Koster. Simplified lcao method for the periodic potential problem. *Phys. Rev.*, 94:1498–1524, Jun 1954.
- [72] Pier A Mello and Narendra Kumar. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations. A Maximum Entropy Viewpoint*. Oxford University Press, 2004.
- [73] WP Lima, FRV Araújo, DR da Costa, SHR Sena, and JM Pereira Jr. Tight-binding model in first and second quantization for band structure calculations. *Brazilian Journal of Physics*, 52(2):42, 2022.
- [74] A. N. Rudenko, Shengjun Yuan, and M. I. Katsnelson. Toward a realistic description of multilayer black phosphorus: From gw approximation to large-scale tight-binding simulations. *Phys. Rev. B*, 92:085419, Aug 2015.
- [75] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón. Tight-binding description of graphene. *Phys. Rev. B*, 66:035412, Jul 2002.
- [76] AV Gert, MO Nestoklon, and IN Yassievich. Band structure of silicene in the tight binding approximation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 121:115–121, 2015.
- [77] R. M. Ribeiro and N. M. R. Peres. Stability of boron nitride bilayers: Ground-state energies, interlayer distances, and tight-binding description. *Phys. Rev. B*, 83:235312, Jun 2011.
- [78] A. Aldea, P. Gartner, and I. Corcotoi. Calculation of the magnetoconductance of mesoscopic rings in a tight-binding model. *Phys. Rev. B*, 45:14122–14130, Jun 1992.
- [79] C.-M. Ho and J. T. Chalker. Models for the integer quantum hall effect: The network model, the dirac equation, and a tight-binding hamiltonian. *Phys. Rev. B*, 54:8708–8713, Sep 1996.
- [80] Luis Brey and H. A. Fertig. Edge states and the quantized hall effect in graphene. *Phys. Rev. B*, 73:195408, May 2006.
- [81] C X Zhang and M A Zubkov. Influence of interactions on the anomalous quantum hall effect. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 53(19):195002, apr 2020.

- [82] F. A. F. Santana, J. M. da Silva, T. C. Vasconcelos, J. G. G. S. Ramos, and A. L. R. Barbosa. Spin hall angle fluctuations in a device with disorder. *Phys. Rev. B*, 102:041107, Jul 2020.
- [83] W.R. Clarke, M.Y. Simmons, C.-T. Liang, and G.K. Sujan. Ballistic transport in 1d gaas/algaas heterostructures. In *Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*. Elsevier, 2016.
- [84] G Eytan, Y Yayon, Michael Rappaport, Hadas Shtrikman, and Israel Bar-Joseph. Near-field spectroscopy of a gated electron gas. *Optical Properties of Semiconductor Nanostructures*, pages 1–18, 2000.
- [85] A. Jantayod and P. Pairor. Tunneling conductance of a metal/two-dimensional electron gas with rashba spin–orbit coupling junction within a lattice model. *Superlattices and Microstructures*, 88:541–550, 2015.
- [86] Ashutosh Singh, Tutul Biswas, Tarun Kanti Ghosh, and Amit Agarwal. Wave packet dynamics in various two-dimensional systems: A unified description. *Annals of Physics*, 354:274–287, 2015.
- [87] Zhirong Liu, Jinying Wang, and Jianlong Li. Dirac cones in two-dimensional systems: from hexagonal to square lattices. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(43):18855–18862, 2013.
- [88] J. Skjånes, E. H. Hauge, and Gerd Schön. Magnetotransport in a two-dimensional tight-binding model. *Phys. Rev. B*, 50:8636–8643, Sep 1994.
- [89] Richard L Burden, J Douglas Faires, and Annette M Burden. *Análise numérica*. Cengage Learning, 2016.
- [90] Hamilton L GUIDORIZZI. Um curso de cálculo, vol. 1, 2, 3 e 4. *LTC Editora, Rio de Janeiro*, 2001.
- [91] Christoph W Groth, Michael Wimmer, Anton R Akhmerov, and Xavier Waintal. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16(6):063065, 2014.
- [92] R Roldán, M O Goerbig, and J-N Fuchs. The magnetic field particle–hole excitation spectrum in doped graphene and in a standard two-dimensional electron gas. *Semiconductor Science and Technology*, 25(3):034005, feb 2010.
- [93] Vadim V. Cheianov, Vladimir Fal’ko, and B. L. Altshuler. The focusing of electron flow and a veselago lens in graphene $p-n$ junctions. *Science*, 315(5816):1252–1255, 2007.
- [94] J. G. G. S. Ramos, M. S. Hussein, and A. L. R. Barbosa. Fluctuation phenomena in chaotic dirac quantum dots: Artificial atoms on graphene flakes. *Phys. Rev. B*, 93:125136, Mar 2016.

- [95] Mikhail I. Katsnelson. Graphene: carbon in two dimensions. *Materials Today*, 10(1):20–27, 2007.
- [96] Caio H Lewenkopf and Eduardo R Mucciolo. The recursive green’s function method for graphene. *Journal of Computational Electronics*, 12:203–231, 2013.
- [97] J. G. G. S. Ramos, T. C. Vasconcelos, and A. L. R. Barbosa. Spin-to-charge conversion in 2D electron gas and single-layer graphene devices. *Journal of Applied Physics*, 123(3):034304, 01 2018.
- [98] Luis E. F. Foa Torres, Stephan Roche, and Jean-Christophe Charlier. *Electronic properties of carbon-based nanostructures*, page 11–90. Cambridge University Press, 2014.
- [99] Cristina Bena and Gilles Montambaux. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics*, 11(9):095003, sep 2009.
- [100] Runyu Fan, Lei Sun, Xiaofei Shao, Yangyang Li, and Mingwen Zhao. Two-dimensional dirac materials: Tight-binding lattice models and material candidates. *ChemPhysMater*, 2(1):30–42, 2023.
- [101] Yoseph Imry and Rolf Landauer. Conductance viewed as transmission. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S306–S312, Mar 1999.
- [102] G. Stephenson. *Mathematical Methods for Science Students*. Longmans, 1961.
- [103] X. W. Zhang and Y. L. Liu. Electronic transport and spatial current patterns of 2D electronic system: A recursive Green’s function method study. *AIP Advances*, 9(11):115209, 11 2019.
- [104] Hocine Boumrar, Mahdi Hamidi, Hand Zenia, and Samir Lounis. Equivalence of wave function matching and green’s functions methods for quantum transport: generalized fisher–lee relation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32(35):355302, jun 2020.
- [105] Supriyo Datta. Lessons from nanoelectronics.
- [106] Pierre Darancet, Valerio Olevano, and Didier Mayou. Quantum transport through resistive nanocontacts: Effective one-dimensional theory and conductance formulas for nonballistic leads. *Phys. Rev. B*, 81:155422, Apr 2010.
- [107] Supriyo Datta. *Quantum transport: atom to transistor*. Cambridge university press, 2005.
- [108] Supriyo Datta. Nanoscale device modeling: the green’s function method. *Superlattices and Microstructures*, 28(4):253–278, 2000.
- [109] Kentaro Nomura, Mikito Koshino, and Shinsei Ryu. Topological delocalization of two-dimensional massless dirac fermions. *Physical review letters*, 99(14):146806, 2007.

- [110] Caio H Lewenkopf, Eduardo R Mucciolo, and AH Castro Neto. Numerical studies of conductivity and fano factor in disordered graphene. *Physical Review B*, 77(8):081410, 2008.
- [111] Ping Sheng and Bart van Tiggelen. Introduction to wave scattering, localization and mesoscopic phenomena., 2007.
- [112] N.L. Pessoa, A.L.R. Barbosa, G.L. Vasconcelos, and A.M.S. Macedo. Multifractal magnetoconductance fluctuations in mesoscopic systems. *Physical Review E*, 104(5):054129, 2021.
- [113] Anderson L. R. Barbosa, Tiago H. V. de Lima, Iván R. R. González, Nathan L. Pessoa, Antônio M. S. Macêdo, and Giovani L. Vasconcelos. Turbulence hierarchy and multifractality in the integer quantum hall transition. *Phys. Rev. Lett.*, 128:236803, Jun 2022.
- [114] Lucas H Oliveira, Anderson L R Barbosa, and Marcel Novaes. Electronic transport in three-terminal chaotic systems with a tunnel barrier. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 55(37):375202, aug 2022.
- [115] Kazi Rafsanjani Amin, Samriddhi Sankar Ray, Nairita Pal, Rahul Pandit, and Aveek Bid. Exotic multifractal conductance fluctuations in graphene. *Communications Physics*, 1(1), February 2018.
- [116] Sven Gnutzmann and Burkhard Seif. Universal spectral statistics in wigner-dyson, chiral, and andreev star graphs. i. construction and numerical results. *Phys. Rev. E*, 69:056219, May 2004.
- [117] Philippe Jacquod, Robert S. Whitney, Jonathan Meair, and Markus Büttiker. Onsager relations in coupled electric, thermoelectric, and spin transport: The tenfold way. *Phys. Rev. B*, 86:155118, Oct 2012.
- [118] M. S. M. Barros, A. J. Nascimento Júnior, A. F. Macedo-Junior, J. G. G. S. Ramos, and A. L. R. Barbosa. Open chaotic dirac billiards: Weak (anti)localization, conductance fluctuations, and decoherence. *Phys. Rev. B*, 88:245133, Dec 2013.
- [119] P. W. Brouwer, S. A. van Langen, K. M. Frahm, M. Büttiker, and C. W. J. Beenakker. Distribution of parametric conductance derivatives of a quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 79:913–916, Aug 1997.
- [120] Hiroki Suyari. Mathematical structures derived from the q-multinomial coefficient in tsallis statistics. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 368(1):63–82, 2006.
- [121] Vito Latora, Andrea Rapisarda, and Constantino Tsallis. Non-gaussian equilibrium in a long-range hamiltonian system. *Phys. Rev. E*, 64:056134, Oct 2001.

- [122] A. Pluchino, A. Rapisarda, and C. Tsallis. Nonergodicity and central-limit behavior for long-range hamiltonians. *Europhysics Letters (EPL)*, 80(2):26002, sep 2007.
- [123] Iván R. Roa González, Bismarck C. Lima, Pablo I. R. Pincheira, Arthur A. Brum, Antônio M. S. Macêdo, Giovani L. Vasconcelos, Leonardo de S. Menezes, Ernesto P. Raposo, Anderson S. L. Gomes, and Raman Kashyap. Turbulence hierarchy in a random fibre laser. *Nature Communications*, 8:15731, 2017.
- [124] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, 69:731–808, Jul 1997.
- [125] M. V. Ulybyshev, P. V. Buividovich, M. I. Katsnelson, and M. I. Polikarpov. Monte carlo study of the semimetal-insulator phase transition in monolayer graphene with a realistic interelectron interaction potential. *Phys. Rev. Lett.*, 111:056801, Jul 2013.
- [126] Changhua Bao, Hongyun Zhang, Teng Zhang, Xi Wu, Laipeng Luo, Shaohua Zhou, Qian Li, Yanhui Hou, Wei Yao, Liwei Liu, Pu Yu, Jia Li, Wenhui Duan, Hong Yao, Yeliang Wang, and Shuyun Zhou. Experimental evidence of chiral symmetry breaking in kekulé-ordered graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 126:206804, May 2021.