



Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Propriedades eletrônicas de super-redes de grafeno com uma
modulação da velocidade de Fermi

Tiago Queiroz de Araújo

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

30 de agosto de 2017

Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Física

Tiago Queiroz de Araújo

**Propriedades eletrônicas de super-redes de grafeno com uma
modulação da velocidade de Fermi**

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. Jonas Romero Fonseca de Lima

**Recife - PE
30 de agosto de 2017**

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

A663p Araújo, Tiago Queiroz de
Propriedades eletrônicas de super-redes de grafeno com uma
modulação da velocidade de Fermi / Tiago Queiroz de Araújo. –
2017.

108 f.: il.

Orientador: Jonas Romero Fonseca de Lima.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de
Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada,
Recife, BR-PE, 2017.

Inclui referências e apêndice(s).

1. Super-rede de grafeno 2. Modulação da velocidade de Fermi
3. Propriedades eletrônicas I. Lima, Jonas Romero Fonseca de,
orient. II. Título

CDD 621

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

**Propriedades eletrônicas de super-redes de grafeno com uma modulação da
velocidade de Fermi**

Tiago Queiroz de Araújo

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 25/07/2017 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima
SEDE - UFRPE

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima
SEDE - UFRPE

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa
SEDE - UFRPE

Prof. Dr. Sérgio André Fontes Azevedo
SEDE - UFPB

Dedico primeiramente à Deus, meu
Tudo, à meu pai(*in memoriam*), e à
minha mãe...

*"De que vale a força e a sabedoria, se meu alvo não estiver em Ti?
Dou toda a juventude que há em mim."*

Anderson Freire.

*"Se eu não ganhar, se eu não chegar onde sonhei, que ainda dentro
de mim se ache o Senhor, a minha vida será bela mesmo estando
em guerra."*

Lucas Ing.

Agradecimentos

Agradeço...

Primeiramente à Deus pela presença constante, o amor, a sabedoria e os milagres diários em forma de cuidado e força para seguir adiante.

À minha mãe que mesmo longe é a coragem de enfrentar os desafios e espinhos do caminho, os valores fazem parte de mim até hoje, sendo um espelho de conquista e perseverança.

Ao meu orientador Prof. Jonas Romero, pela sua valiosa contribuição à minha formação, por ser um orientador presente e pela paciência e disponibilidade de repassar seus conhecimentos.

Aos professores do Departamento de Física da UFRPE que durante esses dois anos de mestrado me proporcionaram subir mais degraus de conhecimento e formação acadêmica.

Aos amigos discentes do Departamento de Física da UFRPE, em destaque a Willdauany pelo apoio e contribuição na hora que necessitei, pois amigos se conquistam, mas na adversidade é que se provam os seus valores. A amizade e valores de todos vocês irei carregar por toda a vida.

Aos familiares e amigos que se destacam no meio de intempéries nos ajudando, ouvindo e demonstrando que a compreensão vai muito mais do que simplesmente ações ou palavras.

À Capes pelo suporte financeiro.

Resumo

O grafeno é considerado como um dos mais promissores nanomateriais do século, suas características peculiares tem motivado a pesquisa em torno de seu uso e do estudo de suas propriedades eletrônicas para os mais diversos fins. As super-redes de grafeno atraíram um grande interesse de pesquisa nos últimos anos, uma vez que é possível manipular as propriedades eletrônicas do grafeno nessas estruturas. Elas podem ser periódicas, quase-periódicas ou desordenadas, cada uma apresentando diferentes propriedades eletrônicas. Neste trabalho, investigamos a possibilidade de transformar uma super-rede de grafeno periódica e quase-periódica uma em outra por uma modulação da velocidade de Fermi. Analisamos super-redes finitas e infinitas. Consideramos uma super-rede unidimensional e mostramos que a transformação pode ser perfeitamente feita para transportadores de carga que se deslocam na direção da super-rede. No entanto, para o movimento oblíquo, algumas características não podem ser transformadas pela velocidade de Fermi. Os resultados obtidos aqui são relevantes para o desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos baseados em grafeno.

Palavras-chave: Super-rede de grafeno; Modulação da velocidade de Fermi; Propriedades eletrônicas.

Abstract

Graphene is considered to be one of the most promising nanomaterials of the century., its peculiar characteristics have motivated the research around its use and the study of its electronic properties for the most diverse purposes. Graphene superlattices have attracted great research interest in the last years, since it is possible to manipulate the electronic properties of graphene in these structures. They can be periodic, quasi-periodic or disordered, each one presenting different electronic properties. In this work we investigate the possibility of transforming a periodic and quasi-periodic graphene superlattice one into another by a Fermi velocity modulation. We analyzed finite and infinite superlattices. We considered an one-dimensional superlattice and show that the transformation can be perfectly done for charge carriers moving in the direction of the superlattice. However, for oblique moving, some features can not be transformed by the Fermi velocity. The results obtained here are relevant for the development of novel graphene-based electronic devices.

Keywords: Graphene superlattice; Fermi velocity modulation; Electronic properties.

Sumário

1	Introdução	1
2	Grafeno: Propriedades, estrutura eletrônica e perspectivas	8
2.1	Introdução	9
2.1.1	O carbono	9
2.1.2	Hibridização	10
2.1.3	Ligações σ e π	12
2.2	O Grafeno	13
2.2.1	Introdução	13
2.2.2	Propriedades do grafeno	14
2.2.3	Obtenção do grafeno	16
2.2.4	Aplicações do grafeno	16
2.2.5	Estrutura Favo de Mel do grafeno	17
2.2.6	Modelo de Ligação-Forte (<i>tight-binding</i>) com primeiros vizinhos	21
2.2.7	Bandas de Energia no Grafeno	27
3	Super-Redes de Grafeno Finitas	36
3.1	Modelo Contínuo para uma super-rede de grafeno	36
3.2	Super-Rede de Grafeno Finita	41
3.2.1	O Modelo	41
3.2.2	Incidência Normal	53

3.2.3	Incidência Oblíqua	56
4	Super-Redes de Grafeno Infinitas	62
4.1	Super-Rede de Grafeno Infinita	62
4.1.1	O Modelo	62
4.1.2	Estrutura Eletrônica para $k_y = 0$	71
4.1.3	Estrutura Eletrônica para $k_y \neq 0$	73
5	Conclusão	76
A	Dedução da Equação de Dirac	78
	Referências Bibliográficas	86

Lista de Figuras

1.1	Super-redes crescidas por MBE: (a) uma super-rede é formada pelo crescimento periódico e alternado de camadas de dois semicondutores com energias de gap diferentes; (b) tendo energias de gap diferentes, há uma descontinuidade em energia nas interfaces entre camadas adjacentes. Como referência foram colocados eixos coordenados (energia e distância) no lado esquerdo da figura. Disponível na Referencia [114]	5
2.1	Estado fundamental do átomo de carbono. Disponível em: Site Algo Sobre, acesso em: 21/05/2017	9
2.2	Formas alotrópicas do carbono: (a) diamante, (b) grafite, (c) lonsdaleíta, (d),(e),(f) fulerenos, (g) carbono amorfo e (h) nanotubos de carbono. Disponível em: Wikipédia Imagens, acesso em 21/05/2017.	11
2.3	Estrutura cristalina do grafite e do diamante. Disponível em: Cultura Online, acesso em 21/05/2017.	11
2.4	A figura representa a formação híbrida dos orbitais sp^3 para o átomo de carbono. Disponível na Referência [81].	12
2.5	A figura representa a formação híbrida dos orbitais sp^2 para o átomo de carbono. Disponível na Referência [81].	12
2.6	A figura representa a formação híbrida dos orbitais sp para o átomo de carbono. Disponível na Referência [81].	12
2.7	Estrutura do grafeno. Disponível em: Blog Nerd Elétrico, acesso em 21/05/2017.	13

2.8	Rede Hexagonal do grafeno no espaço real, com seus respectivos vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . Disponível na Referência [82].	18
2.9	Os orbitais p_z e sp^2 do carbono. Disponível na Referência [82].	20
2.10	Rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco, com seus respectivos vetores unitários \vec{b}_1 e \vec{b}_2 . Disponível na Referência [82].	21
2.11	Os primeiros e segundos vizinhos na rede hexagonal do grafeno no espaço real. Disponível na Referência [82].	23
2.12	Representação dos 3 primeiros vizinhos da sub-rede A são $\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2, \vec{\delta}_3$ respectivamente. Disponível na Referência [82].	25
2.13	Primeira Zona de Brillouin para a rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco. Disponível na Referência [82].	26
2.14	Primeira Zona de Brillouin mostrando os 2 pontos de Dirac \vec{k} e \vec{k}' no espaço recíproco. Disponível na Referência [82].	27
2.15	Dispersão de energia das bandas de condução e valência do grafeno. Disponível na Referência [82].	32
2.16	Zona de Brillouin em 2D - Banda de condução. Disponível na Referência [82].	32
2.17	Zona de Brillouin em 2D - Banda de valência. Disponível na Referência [82].	33
3.1	Diagrama esquemático de uma folha de grafeno depositada em uma subestrutura heteroestruturada composta de dois materiais diferentes que podem abrir diferentes <i>gaps</i> de energia em diferentes regiões da folha de grafeno induzindo uma modulação periódica na energia de <i>gap</i> no grafeno. Os planos metálicos são colocados perto da folha de grafeno que induzem uma barreira de velocidade periódica. O período da super-rede de grafeno é $a + b$. Disponível na Referência [47].	37
3.2	A transmissibilidade como função da energia incidente para o caso de incidência normal. As super-redes consideradas são mostrados na figura. As regiões escritas em preto, azul e vermelho possuem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.	54

3.3	Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. As super-redes consideradas são mostradas na figura. A velocidade de Fermi aqui é igual em todos as regiões.	56
3.4	Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. As super-redes consideradas são mostrados na figura. As regiões escritas em branco, azul e vermelho tem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.	57
3.5	Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. Nesse gráfico consideramos que $\Delta_A = \Delta_B = 0$, $V_A = 60$ meV e $V_B = 0$. As super-redes consideradas são mostradas na figura. A velocidade de Fermi aqui é igual em todos as regiões.	59
3.6	Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. Nesse gráfico consideramos que $\Delta_A = \Delta_B = 0$, $V_A = 60$ meV e $V_B = 0$. As super-redes consideradas são mostrados na figura. As regiões escritas em branco, azul e vermelho tem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.	60
4.1	Gráfico da energia como função de k_x com $k_y = 0$ para super-redes de grafeno infinitas. As células unitárias das super-redes consideradas são mostradas no figura. As regiões escritas em preto, azul e vermelho possuem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente. . .	72
4.2	Gráfico da energia como função de k_y com $k_x = 0$ para super-redes de grafeno infinitas. As células unitárias dos super-redes consideradas são mostradas no figura. A velocidade de Fermi aqui é igual em todas as regiões.	74
4.3	Gráfico da energia como função de k_y com $k_x = 0$ em super-redes infinitas de grafite. As células unitárias das super-redes consideradas são mostradas no figura. As regiões escritas em preto, azul e vermelho possuem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente. . .	75

Capítulo 1

Introdução

A Física é a ciência que estuda a natureza e seus fenômenos em seus aspectos mais gerais analisando suas relações e propriedades, além de descrever e explicar a maior parte de suas consequências. A Física busca a compreensão científica dos comportamentos naturais e gerais do mundo ao nosso redor, desde as partículas elementares até o universo como um todo. Com o amparo do método científico e da lógica, e tendo a matemática como linguagem natural, esta ciência descreve a natureza através de modelos científicos. Sua presença no cotidiano é muito ampla, a aplicação da Física para o benefício humano contribuiu de uma forma inestimável para o desenvolvimento de toda a tecnologia moderna [1].

A Física da Matéria Condensada é um dos muitos campos da Física, até recentemente, a Física da Matéria Condensada era conhecida como Física do Estado Sólido, pois a maioria dos trabalhos existentes nessa área estava concentrada no estudo dos cristais e das propriedades dos elétrons no interior desses cristais. Com o avanço das técnicas de pesquisa nos materiais em sua fase sólida, estas técnicas começaram a ser utilizadas também para se investigar as propriedades da matéria em sua fase líquida, propiciando o aparecimento da denominação Física da Matéria Condensada, que é sem dúvida mais abrangente que a designação Física do Estado Sólido. Portanto, a Física da Matéria Condensada é o ramo da Física que tem como objetivo estudar as propriedades da matéria em fase sólida ou líquida, o início das pesquisas nesta área ocorreu nos primeiros anos deste século, englobando a Física do Estado Sólido e inclui sólidos amorfos e líquidos. Os exemplos mais conhecidos da Matéria

Condensada são os sólidos e os líquidos que se originam da interação da força elétrica dos átomos [2]. O campo da matéria condensada é considerado hoje o maior da física contemporânea, tendo crescido a partir da Física do Estado Sólido que hoje é uma de suas muitas vertentes [3]. A descoberta de uma nova classe de materiais, os chamados quase-cristais, no ano de 1984 [4],[5] causou grande surpresa no meio acadêmico. Até então apenas duas classes de estruturas sólidas eram conhecidos: sólidos cristalinos, estruturas altamente ordenadas que exibem simetrias translacional e orientacional caracterizadas pela repetição periódica de células unitárias idênticas; e sólidos amorfos, que não apresentam ordem estrutural. Os quase-cristais seriam então uma fase intermediária entre sólidos amorfos e cristalinos, uma vez que apresentam uma ordem orientacional, mas não são invariantes sob translação. Em diversos sistemas, físicos ou não, pode-se observar um comportamento auto-similar, ou seja, uma mudança de escala leva essencialmente ao mesmo sistema. A presença de objetos auto-similares em estruturas desordenadas e processos aleatórios é hoje muito comum na ciência de uma forma geral. Tais objetos são encontrados em sistemas físicos totalmente diferentes, como por exemplo, polímeros, galáxias, etc. Apesar desta diversidade de exemplos, em áreas aparentemente sem conexão e escalas tão diferentes, os objetos auto-similares são descritos por uma teoria matemática específica chamada geometria fractal [6]. Estes objetos auto-similares são então denominados fractais e caracterizados por uma dimensão fracionária, que é mais comumente conhecida como dimensão fractal, d_f . Existem ainda fractais que são compostos de subconjuntos fractais, chamados fractais compostos ou multifractais, que são analisados por uma função simplesmente denominada $f(\alpha)$, onde o espectro desta função $f(\alpha)$, também conhecido como espectro das singularidades, caracteriza a distribuição como multifractal [7]. Na Física da Matéria Condensada, muitas vezes se está interessado em sistemas que tenham resposta numa faixa bastante estreita dos espectros considerados (de frequências, de espalhamento e etc). Uma maneira de se obter tais propriedades em sistemas cristalinos é manipular as propriedades dos materiais através de técnicas de dopagem, que consiste por exemplo na adição de impurezas químicas elementares, no intuito de dotar esses materiais de propriedades de semicondução controlada específica para as mais diversas aplicações. Um exemplo simples de fractal é o Conjunto de Cantor, o qual é construído pela retirada do terço central de um segmento unitário, e em seguida do terço central dos

segmentos restantes.

O grafeno é um dos materiais de estudo da Matéria Condensada, descoberto experimentalmente em 2004 é a base para a constituição dos materiais gráfiticos de todas as outras dimensionalidades.

Apesar de sua descoberta recente, o grafeno já revelou uma ampla gama de fenômenos físicos e de aplicações. O grafeno é um alótropo do carbono [8], formado por uma monocamada de átomos de carbono arranjados em uma estrutura cristalina de favo de mel, podendo ser obtido por diversos métodos experimentais, sendo a esfoliação do grafite o modo mais simples. É tido como o primeiro material verdadeiramente bidimensional já que o mesmo é formado de uma única camada de átomos, em contraste com estruturas que se comportam como bidimensionais [9],[10]. Uma das mais gratas previsões teóricas para o grafeno, confirmada experimentalmente, é a de que os elétrons se comportam como férmions de Dirac sem massa nos chamados pontos de Dirac, agindo efetivamente como partículas “relativísticas” sem massa em um espaço-tempo de (1+2) dimensões, sendo uma dimensão temporal e duas espaciais [11],[12]. Esse comportamento tão peculiar abre o campo para emular Física de altas energias em Matéria Condensada, prometendo uma revolução na eletrônica de alta velocidade. Apresentamos aqui de um modo geral a estrutura do grafeno e os fundamentos da física de férmions de Dirac e como surge o modelo efetivo no grafeno, como partes essenciais para um melhor entendimento do nosso objetivo central de estudo [13],[14].

Devido ao tunelamento de Klein, os operadores de carga não podem ser confinados por potenciais eletrostáticos, o que limita os usos do grafeno em dispositivos eletrônicos. No entanto, foram encontradas formas diferentes de abrir *gaps* de energia na estrutura de banda do grafeno, criando confinamentos [15]-[18]. Essa incomum propriedade de transporte do grafeno que é o tunelamento quiral¹ de quase-partículas de baixas energias, o que conduz ao paradoxo de Klein [16] em estruturas de monocamada de grafeno, torna potenciais eletrostáticos estruturas transparentes aos portadores no grafeno, mas existe a possibilidade de confinar elétrons (buracos) em poços (barreiras) de potencial, em incidência normal nas barreiras de potencial não existe confinamento e em incidência oblíqua pode existir confinamento. O tunelamento Klein fora primeiro reportado no contexto da eletrodinâmica quântica

¹A quiralidade é dada pela projeção do pseudo-spin na direção do movimento dos portadores de carga.

em 1929 pelo físico Oscar Klein², que encontrou um resultado quando resolvia o problema de propagação de férmions de Dirac através de uma barreira única de potencial.

As super-redes de grafeno atraíram muito interesse nos últimos anos, uma vez que é possível controlar as propriedades eletrônicas do grafeno nesses sistemas. Em 1969, Esaki³ propôs o primeiro estudo sobre estruturas quânticas consistindo de múltiplas barreiras formadas por heterojunções de materiais semicondutores, as chamadas super-redes. Posteriormente, o advento de técnicas de crescimento de cristais, possibilitou a fabricação de heteroestruturas semicondutoras de alta qualidade e, conseqüentemente, levou a uma grande quantidade de estudos nessa área. Assim como no caso de barreiras simples e duplas, uma super-rede pode ser produzida em grafeno através da deposição de eletrodos sobre a folha de grafeno ou, alternativamente, utilizado-se substratos estruturados. Desde o surgimento e principalmente depois do aprimoramento da técnica de crescimento de cristais atômicamente controlados através de MBE (Epitaxia por Feixes Moleculares) mostra-se possível a construção de estruturas artificiais com aplicações para os mais diversos fins: desde estudos básicos em Física Quântica, até o desenvolvimento de estruturas complexas para novos dispositivos eletrônicos. Uma das estruturas mais estudadas crescidas por MBE, nesse caso, são as super-redes. Uma super-rede semicondutora é formada pelo crescimento periódico e alternado de camadas de dois semicondutores com energias de *gaps* diferentes, como mostra esquematicamente a Fig. 1.1(a). Como têm energia de *gap* diferentes, deve aparecer uma descontinuidade de energia nas interfaces entre duas camadas adjacentes, como mostra a Fig. 1.1(b). Notamos que as alterações são produzidas em apenas uma das direções espaciais.

Tais estruturas foram objeto de estudo recentes [19]-[22]. A super-rede poder ser periódica [23],[24] (ordenada), quase-periódica [25],[26] ou desordenada, cada uma com características próprias. As super-redes quase-periódicas podem seguir uma seqüência de Fibonacci⁴

²Oskar Benjamin Klein (Danderyd, 15 de setembro de 1894 — Estocolmo, 5 de fevereiro de 1977) foi um físico sueco.

³Reona Esaki, conhecido em uma forma ocidentalizada como Leona ou Leo Esaki (Osaka, 12 de março de 1925), é um físico japonês.

⁴Na matemática, a sucessão de Fibonacci (também seqüência de Fibonacci), é uma seqüência de números inteiros, começando normalmente por 0 e 1, na qual, cada termo subsequente corresponde a soma dos dois anteriores.

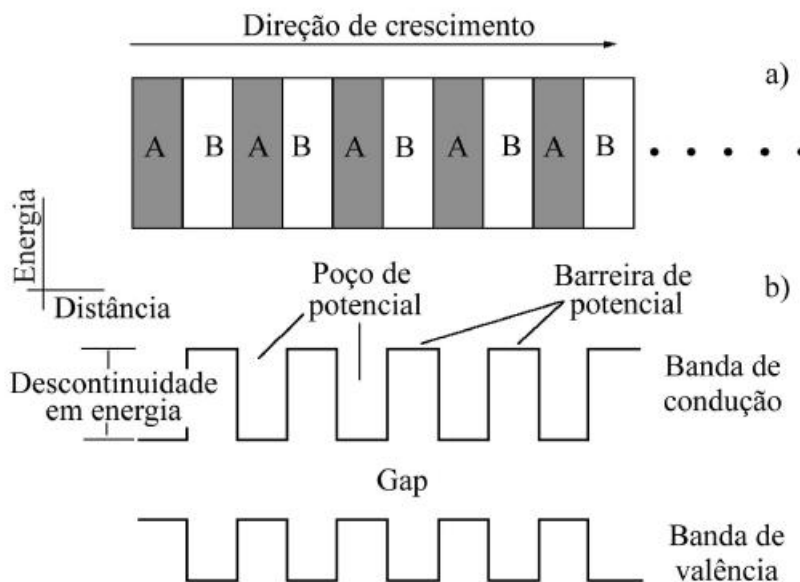


Figura 1.1: Super-redes crescidas por MBE: (a) uma super-rede é formada pelo crescimento periódico e alternado de camadas de dois semicondutores com energias de gap diferentes; (b) tendo energias de gap diferentes, há uma descontinuidade em energia nas interfaces entre camadas adjacentes. Como referência foram colocados eixos coordenados (energia e distância) no lado esquerdo da figura. Disponível na Referência [114]

[27],[28], Double Periodic [29] ou Thue-Morse⁵ [30],[31]. A estrutura de uma super-rede no grafeno pode ser gerada, por exemplo, por barreiras magnéticas [32],[33], potenciais eletrostáticas [34]-[36], uma combinação de ambos [37] ou por barreiras de velocidade de Fermi [38]. Essas barreiras de velocidade de Fermi podem ser criadas, por exemplo, colocando planos metálicos próximos do grafeno, o que alterará a concentração de carga em diferentes regiões, induzindo uma modulação da velocidade de Fermi. Outras formas de modificar a velocidade de Fermi no grafeno também foram propostas, estas incluem modificações por dopagem [39](onde o grafeno é dopado para criar uma alteração do nível de Fermi do material, o que tem implicações diretas na energia de *gap* do material e em seu espectro de absorção), por curvatura da folha de grafeno [40], por potenciais periódicos [41] e por modificações do substrato [42]. Consideramos neste trabalho uma super-rede de Fibonacci para o caso

⁵Em matemática e suas aplicações, a sequência de Thue-Morse, é a sequência infinita binária (formada apenas por 0s e 1s), em que o primeiro dígito é igual a 0 e os demais, calculados em blocos de 2^n dígitos.

quase-periódico, que pode ser vista como um protótipo de um quase-cristal unidimensional.

Demonstrou-se que uma modulação da velocidade de Fermi pode ser usada para controlar as propriedades eletrônicas do grafeno [43],[44]. Por exemplo, a modulação da velocidade de Fermi pode ser usada para induzir um *gap* de energia indireto em monocamadas [45] e bicamadas [46] de grafeno, para controlar o *gap* de energia [47], para criar guias de onda para elétrons [48],[49] e também para sintonizar a transmitividade de 0 a 1 [50] que pode ser usado para ligar/desligar o transporte eletrônico no grafeno.

Motivados por esses resultados, neste trabalho, investigamos a possibilidade de transformar as propriedades eletrônicas de super-redes de grafeno periódicas e quase periódicas uma na outra, através de uma modulação da velocidade de Fermi. Resolvemos o hamiltoniano de Dirac para o grafeno e analisamos as propriedades de transporte de super-redes finitas e a estrutura eletrônica de super-redes infinitas. É mostrado que, para os elétrons que se deslocam na direção da super-rede, a velocidade de Fermi pode transformar perfeitamente as super-redes. No caso de super-redes infinitas, para quanto maior o ângulo de incidência de elétrons, a velocidade de Fermi não pode transformar as super-redes, mas novas características do sistema foram obtidas. Para super-redes de grafeno infinitas, a velocidade de Fermi pode transformar as super-redes com sucesso, mesmo que os elétrons não se movam na direção da super-rede. Os resultados obtidos aqui são relevantes para o desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos baseados em grafeno.

Este trabalho organiza-se da seguinte maneira: no Capítulo 2 fazemos uma abordagem geral, mas específica sobre o grafeno começando pelo carbono e partindo depois para a estrutura do grafeno usando o modelo de *tight-binding* de primeiros vizinhos para obtermos a relação de dispersão no grafeno, finalizando com a teoria de Dirac para baixas energias. No Capítulo 3 escrevemos o hamiltoniano de Dirac para uma super-rede de grafeno com uma única camada com um potencial eletrostático constante, *gap* de energia e velocidade de Fermi. Em seguida resolvemos a equação de Dirac para um super-rede finita e analisamos a possibilidade de transformar as propriedades de transporte de super-redes periódicas e quase periódicos uma em outra por uma modulação da velocidade Fermi. No Capítulo 4, obtivemos a relação de dispersão e investigamos os efeitos da modulação da velocidade de Fermi na estrutura eletrônica de super-redes infinitas de grafeno. Os resultados de nosso

trabalho e algumas perspectivas estão no Capítulo 5.

Capítulo 2

Grafeno: Propriedades, estrutura eletrônica e perspectivas

O objetivo deste capítulo é descrever de forma quantitativa e qualitativa as propriedades do grafeno, dando assim uma abordagem geral e específica para que seja possível compreender o estudo central desse trabalho. Começaremos com algumas explicações sobre o carbono que é o elemento base do grafeno, discorrendo sobre o mesmo para entender seu papel no grafeno. Após isso, dedicaremos as devidas considerações para o grafeno, buscando compreender sua estrutura e seu eventual uso na tecnologia moderna usando para estudo do mesmo o modelo de ligação-forte (*tight-binding*) para o grafeno, como ferramenta essencial para compreensão de sua estrutura e de suas propriedades. Em seguida, introduzimos a teoria de Dirac, mostrando que a equação de Dirac governa o comportamento dos portadores de carga no grafeno para baixas energias, onde esses portadores são tratados como partículas relativísticas sem massa. Ao final deste capítulo, salientaremos algumas perspectivas para esse trabalho e para o mundo com respeito ao grafeno.

Distribuição eletrônica do átomo de carbono no estado fundamental

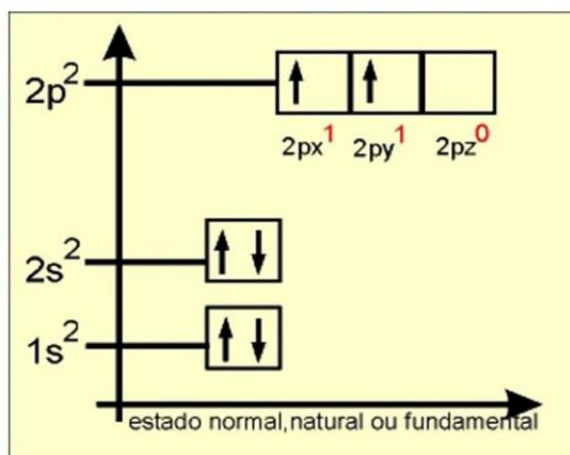


Figura 2.1: Estado fundamental do átomo de carbono. Disponível em: Site Algo Sobre, acesso em: 21/05/2017

2.1 Introdução

2.1.1 O carbono

Iniciaremos com algumas considerações sobre o carbono, elemento este que é uma peça fundamental nos organismos orgânicos [51]. Devido ao fato do mesmo estar presente também em matrizes energéticas, o carbono é muito importante para o desenvolvimento da ciência e tecnologia de materiais [52]. O carbono é um elemento que pertence ao grupo IV da tabela periódica, não-metálico e não-magnético, comumente encontrado na produção de diversos compostos e sólidos cristalinos. Seu número atômico é 6, possuindo 4 elétrons de valência que interagem entre si e são capazes de formar diversas formas alotrópicas¹ do carbono. O estado mais estável do carbono apresenta a configuração $1s^2, 2s^2, 2p^2$. Já o estado excitado assume a configuração $1s^2, 2s^1, 2p^3$. A distribuição eletrônica do carbono na forma fundamental², ver a Fig. 2.1, mostra que os elétrons de valência estão distribuídos nos orbitais $2s$ e $2p$, esses elétrons participam da ligação com outros átomos formando os compostos orgânicos.

¹outras, diferentes

² $1s^2, 2s^2, 2p^2$

Os elétrons no orbital $1s$ estão fortemente ligados ao núcleo do átomo, eles são chamados de elétrons de caroço e não participam das ligações químicas, enquanto aqueles presentes nos orbitais da camada de valência $2s$ e $2p$ são mais fracamente ligados ao núcleo e são responsáveis pela ação reativa do átomo de carbono. Para o caso de formação de cristais, em sua maioria somente por átomos, há uma hibridização dos orbitais s e p . Em suma, esses tipos de comportamentos significam que um dos dois elétrons do orbital s é excitado para o orbital $2p_z$, enquanto o outro elétron faz uma órbita entre os orbitais $2s$ e $2p$ dos átomos vizinhos, gerando dessa forma orbitais hibridizados [53].

2.1.2 Hibridização

Para o carbono, um orbital hibridizado é uma combinação linear dos orbitais s e p que leva o sistema à um estado de menor energia. De acordo com a Mecânica Quântica o que ocorre é uma combinação das funções de onda associadas aos elétrons devido à proximidade dos níveis de energia, que neste caso são orbitais que os elétrons ocupam. Os átomos de carbono hibridizados podem formar cadeias carbônicas com diferentes configurações e propriedades físicas como densidade, organização espacial, condutividade elétrica e estabilidade mecânica [54]. O carbono apresenta diferentes formas alotrópicas, (podemos ver alguns exemplos na Fig 2.2, dentre as quais se destacam grafite³, diamante⁴, conhecidos desde muito tempo atrás [55], fulerenos⁵, nanotubos de carbono⁶, que surgiram nas décadas de 80 e 90 e o grafeno que surgiu mais recentemente [56]-[58]. Na Fig. 2.3, podemos ver a estrutura do grafite e do diamante que são formas hibridizadas do carbono.

O carbono pode apresentar as seguintes hibridizações [59]:

- Hibridização sp^3 : Aqui ocorre uma mistura de um orbital s com mais três orbitais p , gerando quatro orbitais híbridos, que são chamados de sp . Uma geometria em forma de tetraedro é assumida pelos quatro orbitais, e eles formam quatro ligações σ com ângulo de $109,5^\circ$ entre eles, como mostra a Fig. 2.4.

³Grafite é um mineral, um dos alótropos do carbono.

⁴O diamante é um cristal sob uma forma alotrópica do carbono

⁵Os fulerenos são uma forma alotrópica do Carbono, a terceira mais estável após o diamante e o grafite.

⁶Os Nanotubos de Carbono são alótropos do carbono com uma nanoestrutura cilíndrica.

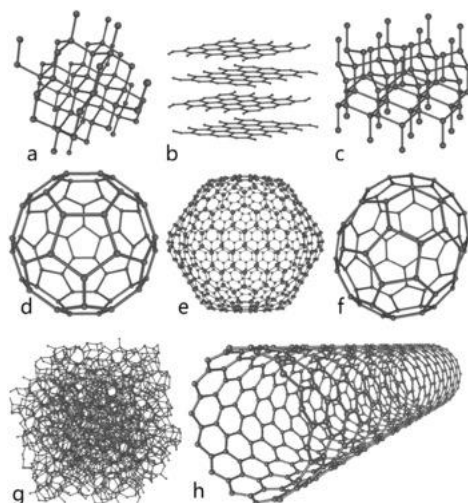


Figura 2.2: Formas alotrópicas do carbono: (a) diamante, (b) grafite, (c) lonsdaleíta, (d),(e),(f) fulerenos, (g) carbono amorfo e (h) nanotubos de carbono. Disponível em: Wikipédia Imagens, acesso em 21/05/2017.

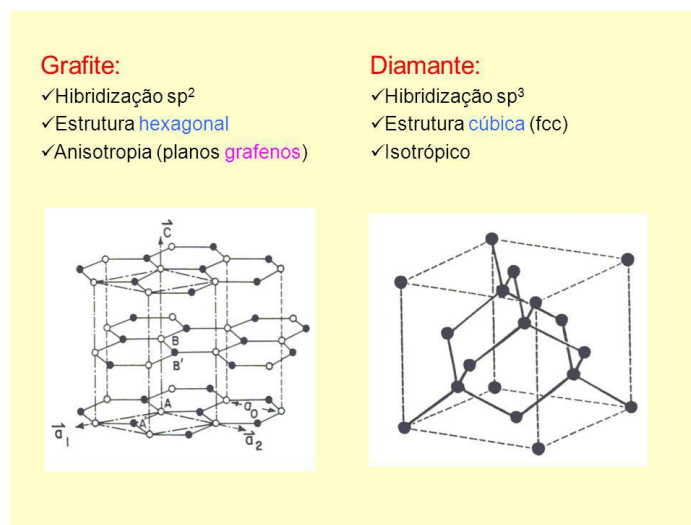


Figura 2.3: Estrutura cristalina do grafite e do diamante. Disponível em: Cultura Online, acesso em 21/05/2017.

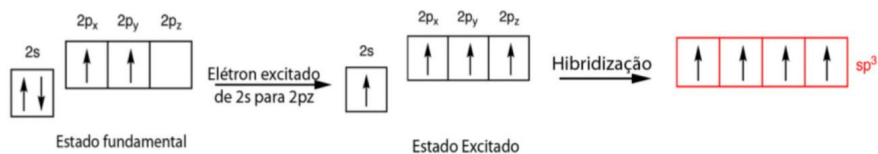


Figura 2.4: A figura representa a formação híbrida dos orbitais sp^3 para o átomo de carbono. Disponível na Referência [81].

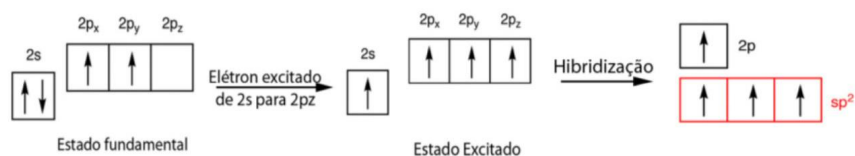


Figura 2.5: A figura representa a formação híbrida dos orbitais sp^2 para o átomo de carbono. Disponível na Referência [81].

- Hibridização sp^2 : Nesse caso ocorre uma mistura de um orbital s com dois orbitais p gerando três novos orbitais híbridos sp^2 . Os três orbitais novos ficam localizados no mesmo plano, formando um ângulo de 120° entre eles, como mostra a Fig. 2.5.
- Hibridização sp : Nesse caso, há a mistura de um orbital s com um orbital p , gerando dois orbitais sp , com um ângulo de 180° entre eles, como mostra a Fig. 2.6.



Figura 2.6: A figura representa a formação híbrida dos orbitais sp para o átomo de carbono. Disponível na Referência [81].

2.1.3 Ligações σ e π

A ligação sigma (σ) é a denominação dada à estrutura dos orbitais atômicos no mesmo eixo formando uma ligação simples, enquanto que as ligações pi (π) estão nos eixos paralelos

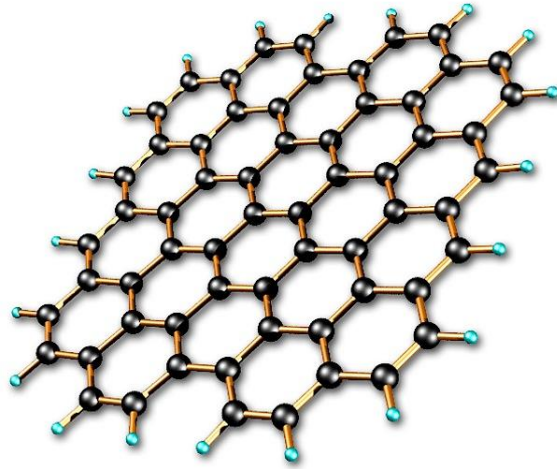


Figura 2.7: Estrutura do grafeno. Disponível em: Blog Nerd Elétrico, acesso em 21/05/2017.

e as mesmas acontecem em ligações duplas e triplas. Ligações π só podem ser formadas por orbitais p , e possuem a característica de serem mais fracas que as ligações σ . Nas ligações duplas e triplas do carbono, uma ligação é σ e as que sobram são π [60].

2.2 O Grafeno

2.2.1 Introdução

O grafeno é uma forma alotrópica do carbono, constitui-se de uma monocamada de átomos de carbono arranjados de forma hexagonal, ou seja, o grafeno é uma das inúmeras camadas que constituem o grafite [61],[62]. Dispostos em uma rede hexagonal plana, os átomos de carbono do grafeno, tornam o grafeno a base para outros materiais gráfiticos tais como o grafite (3D), os nanotubos de carbono (1D) e os fulerenos (quase-0D) [63]-[66]. O grafeno é uma estrutura bidimensional de átomos de carbono hibridizados em sp^2 , ou seja, entre um orbital- s e orbital- p , que formam três ligações σ no plano, os orbitais p_z não hibridizados formam ligações π fora do plano. As ligações σ são ligações fortes, responsáveis pelas propriedades mecânicas e elásticas, e as ligações π são responsáveis pelas propriedades eletrônicas do grafeno. Dispostos de forma hexagonal, em uma estrutura semelhante a favos de mel, como mostra a Fig. 2.7.

O empilhamento ordenado de camadas de grafeno é a estrutura base do cristal de grafite, e suas propriedades vêm sendo assunto de estudos teóricos e experimentais desde a década de 1940 [67],[68]. O prêmio Nobel de Física de 2010 foi dado aos cientistas Andre Geim⁷ e Konstantin Novoselov⁸, pelos mesmos conseguirem produzir, isolar, identificar e caracterizar o grafeno. Em seu trabalho, os mesmos revelam que é possível que uma camada do grafeno possa ser isolada em quantidade suficiente e adequada que possibilite a verificação de suas propriedades e estabilidade. Em seu trabalho, eles utilizaram uma fita adesiva para remover as camadas de grafeno de cristais de grafite. A Real Academia Sueca das Ciências, concededora do prêmio Nobel de 2010, emitiu nota afirmando que o grafeno é o primeiro material verdadeiramente bidimensional, representando toda uma classe de materiais 2D.

2.2.2 Propriedades do grafeno

Os arranjos bidimensionais de átomos vinham sendo estudados há muitas décadas, os mesmos eram modelados através de diversos métodos computacionais por exemplo, porém, as evidências experimentais dos mesmos são muito recentes. O grafeno é um material quase totalmente transparente, permitindo a passagem de 97,7% da luz visível. É mais resistente que uma amostra de aço que possua as mesmas dimensões e pode ser alongada até 20% sem que ocorra rompimento. Em suas propriedades térmicas e elétricas, o grafeno conduz calor e corrente elétrica melhor que o cobre, isso se explica por causa dos elétrons estarem deslocalizados. O sucesso experimental que se deu da descoberta do grafeno motivou inúmeras pesquisas, tanto experimentais como teóricas em torno das propriedades eletrônicas.

A aparição do grafeno na ciência deu-se aos estudos teóricos realizados por Wallace⁹ em 1947. Um dos resultados encontrados por Wallace nos dá a dimensão do grafeno em um papel muito importante no cenário tecnológico, além também de colocá-lo no meio de resultados de estudos de situações físicas de bastante interesse como a Eletrodinâmica Quântica. No

⁷Andre Geim FRS, Sóchi, 21 de outubro de 1958, é um físico holandês nascido na Rússia, conhecido como descobridor do grafeno e por demonstrações concretas da levitação magnética

⁸Sir Konstantin Novoselov (Nizhny Tagil, 23 de agosto de 1974) é um físico russo-britânico, conhecido por seus trabalhos na descoberta do grafeno, em conjunto com Andre Geim.

⁹Philip Russell Wallace (Toronto, 19 de abril de 1915 — Victoria (Colúmbia Britânica), 20 de março de 2006) foi um físico canadense.

estudo da estrutura de bandas do grafeno, notou-se que para baixas energias estas bandas apresentavam uma dispersão da energia que era linear no vetor de onda, isto se diferenciava do que era encontrando normalmente nos semicondutores. Esta relação de dispersão da energia do grafeno, considerada uma das mais interessantes, indica que para baixas energias, os tipos de excitações que são encontradas são os mesmos para férmions de Dirac¹⁰ encontrados na Eletrodinâmica Quântica, tendo como diferença unicamente a velocidade das quasipartículas, onde no grafeno é igual a velocidade de Fermi $v_f = c/300$, no lugar da velocidade da luz c [69]. O grafeno possui também propriedades ópticas de bastante interesse, isso se dá por causa de sua absorção de luz. Alguns estudos mostram que há um aumento da absorção de luz no grafeno proporcional ao número de camadas deste. Isto evidencia mais claramente o uso do grafeno em aplicações de optoeletrônica [70].

A condutividade térmica do grafeno é denominada pelas vibrações de rede, onde essas vibrações se comportam como ondas que se propagam em um sólido, enquanto que a condução térmica é efetuada por fônons¹¹. Peierls¹² e Landau¹³ argumentaram que não poderia existir ordenamento de longo alcance em materiais bidimensionais, devido ao movimento térmico de fônons de baixa energia, o que resulta em um desvio quadrático médio dos átomos de suas posições de equilíbrio [71]. Mas, os estudos recentes provaram que a síntese de uma camada de grafeno mostra claramente a existência de sólidos bidimensionais estáveis, deixando também suficientemente clara, a alta qualidade de cristal destes materiais [72].

¹⁰Na física de partículas, um férmion de Dirac é um férmion que não é sua própria antipartícula. Ele foi nomeado em homenagem ao físico Paul Dirac pelo fato de todos estes férmions obedecerem à equação de Dirac.

¹¹Um fônon, na física da matéria condensada, é uma quase-partícula que designa um quantum de vibração em um retículo cristalino rígido.

¹²Rudolph Ernst Peierls (Berlim, 5 de junho de 1907 — Oxford, 19 de setembro de 1995) foi um físico teuto-britânico.

¹³Lev Davidovich Landau (Baku, 22 de janeiro de 1908 — Moscou, 1 de abril de 1968) foi um físico e matemático soviético.

2.2.3 Obtenção do grafeno

A partir dos esforços para obter o grafeno, várias técnicas surgiram com o intuito de isolá-lo. Primeiro foi usada a esfoliação química, onde moléculas eram introduzidas quimicamente entre as camadas do grafite que se intercalavam com as folhas de grafeno. Depois, essas moléculas eram retiradas e só restava as folhas de grafeno. Contudo, esse método não foi muito promissor, porque não era possível isolar facilmente o grafeno e ainda era observado um enrolamento nas folhas de grafeno [73]. Uma outra alternativa seria o crescimento epitaxial por CVD¹⁴ de hidrocarbonetos em metais e a decomposição de carbonetos em silício sob tratamento térmico. Os filmes que são gerados por essa técnica possuem grande mobilidade de portadores de carga, mas a sua qualidade e seu tipo de cristal ainda estão sendo estudados [74]. Assim, chegamos ao primeiro isolamento do grafeno, realizado em 2004, que consistiu numa técnica de clivagem mecânica. Nessa técnica, um pedaço de grafite é esfoliado mecanicamente sobre uma fita adesiva diversas vezes, de forma que a ruptura mecânica das camadas vizinhas as separe. Depois, a fita adesiva com os flocos de grafeno esfoliados é fixada sobre um substrato, que normalmente é um substrato de silício com óxido de silício crescido termicamente sobre ele [75]. A partir da espessura do óxido, é possível obter contraste suficiente viabilizando a observação microscópica do grafeno no substrato de óxido de silício quando a fita adesiva é retirada. Apesar de ser uma técnica simples, a mesma não possibilita a produção industrial em larga escala de dispositivos eletrônicos que se baseiam no grafeno, por isso, outras formas já estão sendo estudadas para produção em larga escala, um desses métodos seria o crescimento epitaxial.

2.2.4 Aplicações do grafeno

O grafeno parecia impossível de existir, já que as flutuações térmicas impediam a sua formação bidimensional. Além das diversas propriedades já citadas anteriormente, as possibilidades de aplicação também crescem de forma assustadora, sendo hoje do ponto de vista tecnológico um dos mais promissores nanomateriais por causa das suas propriedades térmicas, óticas e elétricas [76]. O grafeno por exemplo, conduz tão bem como um metal,

¹⁴Deposição Química na Fase de Vapor.

porém essa condutividade pode ser controlada assim como acontece com os semicondutores [77]. Nos semicondutores tradicionais, os elétrons se comportam como se tivessem massa maior ou menor do que a que eles tem no vácuo, porém no grafeno eles se comportam como se não tivessem massa, como partículas relativísticas sem massa, ou como já mencionado anteriormente (férmions de Dirac) [78]. O grafeno pode ser aplicado hoje em diversas matrizes tecnológicas, e seu uso vem avançando bastante atualmente. Por exemplo, estudos já comprovam que o óxido de grafeno, entre suas propriedades, é capaz de remover material radioativo de águas que foram contaminadas. O que mostra também sua impermeabilidade com água, o que resulta na função de filtrador da mesma. Há também o uso do grafeno para desenvolver transmissores de modulação de rádio, como os menores já produzidos. É usado também no estudo de fabricação de baterias mais duráveis e mais rápidas de carregamento, com demora de gasto de bateria. É usado também em placas para captar energia solar, aumentar vida útil de componentes eletrônicos, aumentar a capacidade de transmissão de dados e armazenamento, e até mesmo aplicações em medicina, com próteses neurais e tratamentos em lugar de medicamentos [79].

2.2.5 Estrutura Favo de Mel do grafeno

O termo "grafeno" se dá pela combinação do "grafite" com o sufixo "eno", denominado em 1962 por Hanns Peter Boehm¹⁵. Mas, como já foi mencionado o grafeno só foi sintetizado em 2004 pelos professores russos da Universidade de Manchester, Andre Geim e Konstantin Novoselov, que conseguiram isolar experimentalmente uma monocamada plana de átomos de carbono e estudar suas propriedades físicas. Estes átomos de carbono estão ordenados de tal modo a formar uma estrutura hexagonal do tipo favo de mel, composta de duas sub-redes triangulares A e B [80],[81], como mostra a Fig. 2.8.

Os pontos na cor azul, representam os átomos de carbono na sub-rede A e os pontos vermelhos representam os átomos de carbono na sub-rede B. Primeiramente descrevemos o

¹⁵Hanns-Peter Boehm (Nascimento 9 January 1928 em Paris) é um químico alemão e professor emérito da Ludwig-Maximilians-Universität em Munich, Alemanha. Boehm é considerado um pioneiro no estudo do grafeno

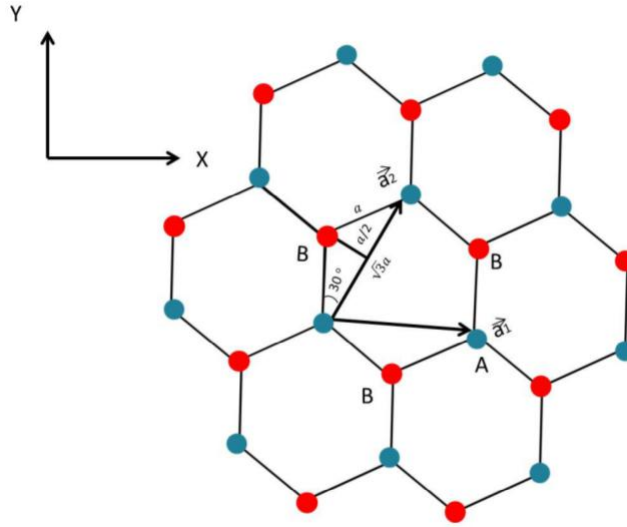


Figura 2.8: Rede Hexagonal do grafeno no espaço real, com seus respectivos vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . Disponível na Referência [82].

grafeno como uma rede de Bravais¹⁶ bidimensional. Para viabilizar isto, já que uma rede favo de mel não é uma rede de Bravais, precisamos de dois vetores primitivos, \vec{a}_1 e \vec{a}_2 , e uma base de átomos de carbono (Ver Fig. 2.8), formando assim uma ligação de um átomo da sub-rede A com um de seus primeiros vizinhos da sub-rede B.

No espaço real, temos que uma possível representação dos vetores primitivos, em coordenadas cartesianas, tendo como base a representação na Fig. 2.8, é dada por,

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \sqrt{3}a\hat{x} = (\sqrt{3}a, 0), \\ \vec{a}_2 &= \sqrt{3}a\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right) = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{3a}{2}\right), \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde o parâmetro de rede $a = 1.42\text{\AA}$, que representa a distância entre os átomos de carbono na rede hexagonal do grafeno. Podemos observar que é possível pensar que a rede favo de mel tem por base um hexágono de lado a contendo $1/3$ de átomo de carbono em cada um de

¹⁶É a denominação dada às configurações básicas que resultam da combinação dos sistemas de cristalização com a disposição das partículas em cada uma das células unitárias de uma estrutura cristalina, sendo estas células entendidas como os paralelepípedos que constituem a menor subdivisão de uma rede cristalina que conserva as características gerais de todo o retículo, permitindo que por simples replicação da mesma se possa reconstruir o sólido cristalino completo.

seus 6 vértices. Esse hexágono pode ser deslocado em relação ao seu centro por translações do tipo: $\mathbf{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$, sendo $n_1 = 0, 1, 2, \dots$ e $n_2 = 0, 1, 2, \dots$ quaisquer n números inteiros, permitindo construir toda a rede [82]. A estrutura cristalina formada na hibridização do tipo sp^3 é o diamante onde todos os orbitais combinam-se de forma linear para formar novos orbitais de simetria tetraédrica com ângulo de aproximadamente 109° entre eles, enquanto que o grafite e o grafeno tem estruturas cristalinas que podem ser entendidas de maneira simples utilizando a hibridização do tipo sp^2 , onde dois orbitais do tipo p , neste caso p_x e p_y , se combinam com o orbital sp gerando os seguintes orbitais híbridos [82],

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|s\rangle + |p_x\rangle + |p_y\rangle), \quad (2.2)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|s\rangle + |p_x\rangle - |2p_y\rangle), \quad (2.3)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle - |p_x\rangle), \quad (2.4)$$

o orbital p_z não se mistura aos demais, ele fica perpendicular ao plano (x, y) que contém os orbitais hibridizados sp^2 . Essas novas funções orbitais mostradas acima são ortogonais entre si no espaço de Hilbert¹⁷, e formam um ângulo de 120° entre si no espaço real. A forma dos orbitais na hibridização denominada sp^2 é mostrada na Fig. 2.9.

Assim, três orbitais de um dado átomo de carbono tem seus eixos principais de orientação no plano (x, y) com um ângulo entre eles de 120° , realizando três ligações com grande energia de ligação química, as ligações σ com os átomos de carbono vizinhos. Essas ligações σ representam as direções, onde dois elétrons com spins contrários, um proveniente de cada átomo, são compartilhados pelos átomos de carbono e ficam fortemente localizados no plano e na região do ponto médio da reta que une os dois átomos vizinhos. Portanto, percebemos assim que a estrutura formada por um arranjo de átomos de carbono nessa hibridização terá a forma de um favo de mel [83]. Sabemos que cada átomo de carbono tem 4 elétrons de

¹⁷É uma generalização do espaço euclidiano que não precisa estar restrita a um número finito de dimensões.

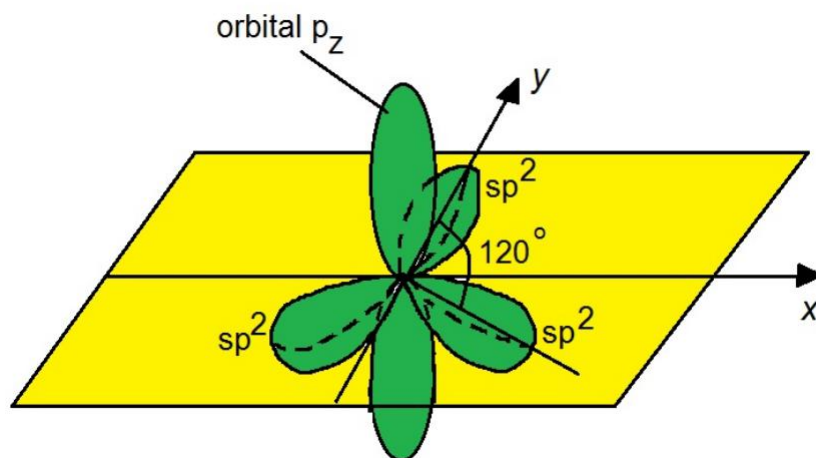


Figura 2.9: Os orbitais p_z e sp^2 do carbono. Disponível na Referência [82].

valência. Satisfazendo a regra do octeto ele deve realizar 4 ligações químicas, compartilhando seus 4 elétrons com os 3 átomos de carbono vizinhos possíveis na hibridização sp^2 . Três desses elétrons de um dado átomo de carbono ficam fortemente localizados em algum dos orbitais sp^2 associados à um dos orbitais sp^2 de um primeiro vizinho para formar uma ligação do tipo σ . O elétron restante passará para o orbital p_z , que é perpendicular ao plano da estrutura de favo de mel. No caso de uma ligação entre dois átomos de carbono apenas a interação entre os elétrons nos orbitais p_z leva à formação de orbitais moleculares híbridos devido à mistura dos orbitais p_z desses dois átomos e o tipo de ligação química realizada fica conhecida como do tipo π . Isso se explica pelo formato do orbital molecular que surge da combinação linear dos orbitais p_z desses átomos. Em uma estrutura cristalina do tipo favo de mel contendo um número muito grande de átomos de carbono, os orbitais p_z combinam-se para formar uma nuvem eletrônica¹⁸, essa nuvem dá origem a bandas de energia conhecidas como bandas π (menor energia) e π^* (maior energia) [84]. Os elétrons nesses orbitais π e π^* são fracamente ligados aos respectivos átomos de carbono e tem funções de onda deslocalizadas, quando comparada aos elétrons σ . Em virtude disso, é possível perceber que os elétrons σ desempenham um papel pouco decisivo no caso da rede favo de mel para o transporte de carga e spin, e assim toda a física do transporte deve-se aos elétrons ocupando as bandas π e π^* [85],[86]. Obtemos agora, a partir dos vetores unitários da rede direta, os vetores da

¹⁸Eletrônica, também chamada de Nuvem eletrônica ou Densidade eletrônica é a região externa do núcleo do átomo onde se localizam os elétrons.

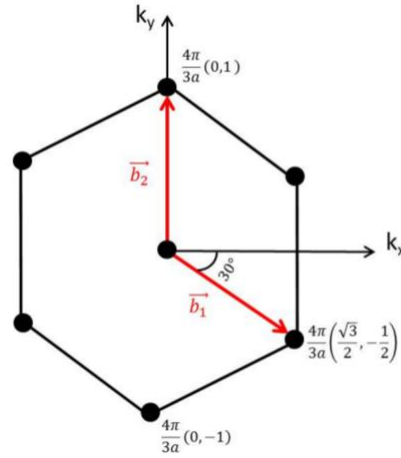


Figura 2.10: Rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco, com seus respectivos vetores unitários \vec{b}_1 e \vec{b}_2 . Disponível na Referência [82].

rede recíproca, como se seguem,

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{z})}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{z})} = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right), \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi(\vec{z} \times \vec{a}_1)}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{z})} = \frac{4\pi}{3a} (0, 1),\end{aligned}\tag{2.5}$$

nos quais \vec{z} é um vetor unitário perpendicular ao plano (x, y) da rede direta que contém a monocamada de grafeno. Os vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 da rede recíproca são mostrados na Fig. 2.10.

Agora encontraremos as bandas de energia do grafeno com base no modelo ligação-forte (*tight-binding*), após isto, demonstraremos a teoria de Dirac para férmions sem massa no grafeno, próximo do nível de Fermi.

2.2.6 Modelo de Ligação-Forte (*tight-binding*) com primeiros vizinhos

O modelo de *tight-binding* do grafeno foi usado por P.R. Wallace no ano de 1947, com objetivo de descrever um plano atômico no grafite, que consiste de múltiplas camadas de grafeno empilhadas. O hamiltoniano de ligação-forte (*tight-binding*) para o grafeno tem sido utilizado para prever suas propriedades. Esta aproximação de ligação-forte é bastante útil

quando a superposição dos orbitais eletrônicos considera só a interação entre os vizinhos mais próximos na rede cristalina, fazendo com que os orbitais atômicos sejam a base para a representação do hamiltoniano que descreve o transporte de elétrons de um átomo para outro na rede [87]-[91]. Entendemos portanto, que é favorável aplicar esse modelo para descrever fisicamente os elétrons nos orbitais p_z no grafeno. O modelo de ligação-forte (*tight-binding*) considerando a probabilidade de *hopping* (salto) de um elétron entre átomos que são primeiros e segundos vizinhos, está descrito pelo seguinte hamiltoniano, expresso em termos dos operadores de criação e aniquilação de elétrons formulados em segunda quantização [92],

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + b_{j\sigma}^\dagger a_{i\sigma}) - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + a_{j\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + b_{j\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) \quad (2.6)$$

no qual $\hat{a}_{i\sigma}$ ($\hat{a}_{i\sigma}^\dagger$) é um operador fermiônico que aniquila(cria) um elétron de spin verdadeiro, no i -ésimo átomo da sub-rede A, $\hat{b}_{j\sigma}$ ($\hat{b}_{j\sigma}^\dagger$) é um operador fermiônico que aniquila(cria) elétrons na sub-rede B, o símbolo $\langle ij \rangle$ representa a soma sobre os primeiros vizinhos e $\langle\langle ij \rangle\rangle$ representa a soma para segundos vizinhos. Observamos que os primeiros vizinhos de um átomo da sub-rede A (pontos cor azul) são 3 átomos da sub-rede B (pontos cor vermelho), e vice-versa, enquanto que os segundos vizinhos de um dado átomo totalizam 6 e são da mesma sub-rede, como se pode observar na Fig. 2.11, onde o átomo de carbono central da sub-rede A na posição A_0 tem como primeiros vizinhos os três átomos de carbono da sub-rede B nas posições B_{11} , B_{12} e B_{13} , como segundos vizinhos os seis átomos de carbono da mesma sub-rede A nas posições A_{21} , A_{22} , A_{23} , A_{24} , A_{25} e A_{26} , se expandindo dessa forma em toda a rede do grafeno.

O parâmetro de *hopping* entre primeiros vizinhos tem valor $t \simeq 2,8eV$, quando que entre os segundos vizinhos $t' < 0,2eV$ [93]. Uma vez que o parâmetro de *hopping* t é maior em pelo menos uma ordem de grandeza em relação a t' , desprezamos o segundo termo do hamiltoniano e usamos apenas o primeiro termo do hamiltoniano de ligação-forte para nossos cálculos. Salientamos também que quando o segundo parâmetro de hopping, t' é levado em conta, as bandas de energia no grafeno apresentam um pequeno *gap* próximo dos pontos de Dirac [94]. Agora, para diagonalizar o hamiltoniano passaremos para o espaço recíproco \vec{k} através da transformação discreta de Fourier, dadas como se segue,

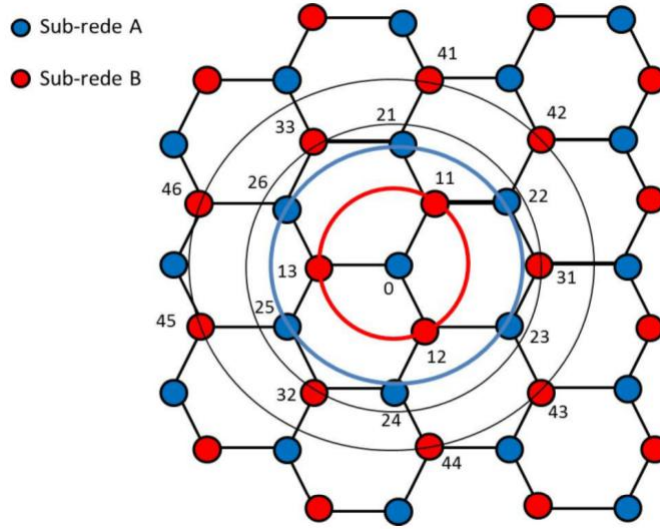


Figura 2.11: Os primeiros e segundos vizinhos na rede hexagonal do grafeno no espaço real. Disponível na Referência [82].

$$\begin{aligned}
 a_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}, & a_{i\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}, \\
 b_{j\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j}, & b_{j\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j},
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

nas quais o vetor de onda no espaço recíproco é dado por $\vec{k} = (k_x, k_y)$, e N é o número de átomos total em cada sub-rede. Substituindo os novos operadores de criação e aniquilação em função do vetor de onda \vec{k} no espaço recíproco no primeiro termo do hamiltoniano de ligação-forte, obtemos,

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}'\sigma} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \right), \tag{2.8}$$

e fixando o sub-índice j , nós temos que $\vec{r}_j = \vec{r}_{jn} = \vec{r}_i + \vec{\delta}_n$, onde $\vec{\delta}_n$ denota o vetor relativo entre um átomo na posição r_i e seus primeiros vizinhos, para obter,

$$\hat{H} = -t \sum_{\sigma} \left(\sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}'\sigma} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_n} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \sum_{n=1}^3 e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_n} \right) \tag{2.9}$$

É de nosso conhecimento, que a delta de Kronecker se define na forma $\delta_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{1}{N} \sum_i \pm e^{(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_i}$. Quando o vetor $\vec{k} = \vec{k}'$ a delta de Kronecker tem valor 1 e quando $\vec{k} \neq \vec{k}'$ a delta anula-se. Portanto,

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} (a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma}(-t) \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \delta_n} + b_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}(-t) \sum_{n=1}^3 e^{-i\vec{k} \cdot \delta_n}). \quad (2.10)$$

No modelo de ligação-forte o termo $t \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \delta_n}$ é chamado de fator geométrico, que nos concede informação sobre a geometria da rede que se está tratando, então fazendo $f(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \delta_n}$ e $f(\vec{k}^*) = -t \sum_{n=1}^3 e^{-i\vec{k} \cdot \delta_n}$ onde o vetor δ_n representa os primeiros vizinhos da sub-rede A ou B, respectivamente, temos,

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} (f(\vec{k}) a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} + f^*(\vec{k}) b_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}). \quad (2.11)$$

É possível depois disso, calcular os vetores $\vec{\delta}_n$ que conectam um átomo na sub-rede A aos primeiros vizinhos na sub-rede B na rede do grafeno, que em nosso caso sabemos que o átomo de carbono na sub-rede A tem três vizinhos na sub-rede B. Já que temos,

$$f(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \delta_n} = -t(e^{i\vec{k} \cdot \delta_1} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_2} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_3}), \quad (2.12)$$

na Fig. 2.12 se pode observar os 3 vetores primeiros vizinhos da sub-rede A, os quais estão em coordenadas cartesianas no espaço direto da rede do grafeno, descritos como se seguem,

$$\begin{aligned} \delta_1 &= a\hat{y}, \\ \delta_2 &= a \cos 30^\circ \hat{x} - a \sin 30^\circ \hat{y} = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y}), \\ \delta_3 &= -a \cos 30^\circ \hat{x} - a \sin 30^\circ \hat{y} = -\frac{a}{2}(\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Com posse dos 3 vetores de primeiros vizinhos $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ e fazendo $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ na equação, buscamos encontrar então o fator geométrico $f(\vec{k})$ e $f^*(\vec{k})$. Façamos primeiro, o

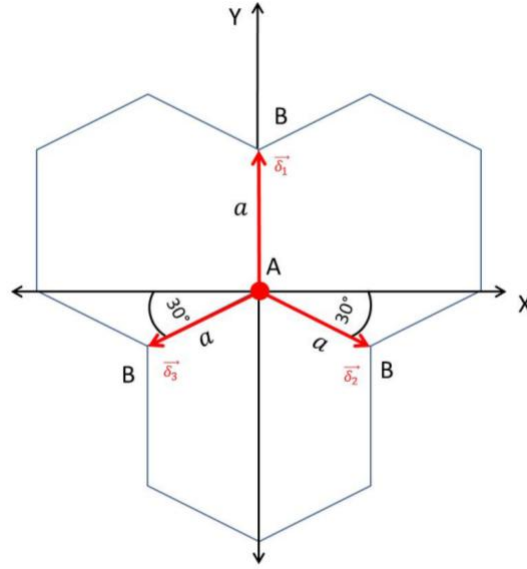


Figura 2.12: Representação dos 3 primeiros vizinhos da sub-rede A são $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$, $\vec{\delta}_3$ respectivamente. Disponível na Referência [82].

produto vetorial do vetor \vec{k} com cada um dos vetores δ_n , onde $n = 1, 2, 3$. Dessa forma temos,

$$\begin{aligned}\vec{k} \cdot \delta_1 &= (k_x \times 0) + (k_y \times a) = k_y a, \\ \vec{k} \cdot \delta_2 &= (k_x \times \frac{\sqrt{3}}{2}a) + (k_y \times -\frac{a}{2}) = \frac{\sqrt{3}}{2}ak_x - \frac{a}{2}k_y, \\ \vec{k} \cdot \delta_3 &= (k_x \times -\frac{\sqrt{3}}{2}a) + (k_y \times -\frac{a}{2}) = -\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x - \frac{a}{2}k_y.\end{aligned}\tag{2.14}$$

Como,

$$f(\vec{k}) = -t(e^{i\vec{k} \cdot \delta_1} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_2} + e^{i\vec{k} \cdot \delta_3}),\tag{2.15}$$

podemos concluir que,

$$\begin{aligned}e^{i\vec{k} \cdot \delta_1} &= e^{ik_y a}, \\ e^{i\vec{k} \cdot \delta_2} &= e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x - i\frac{a}{2}k_y}, \\ e^{i\vec{k} \cdot \delta_3} &= e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x - i\frac{a}{2}k_y}.\end{aligned}\tag{2.16}$$

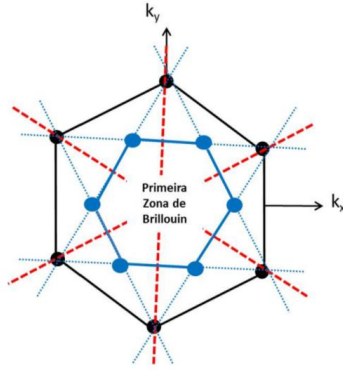


Figura 2.13: Primeira Zona de Brillouin para a rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco. Disponível na Referência [82].

Substituindo em (2.15), temos,

$$f(\vec{k}) = -t(e^{ik_y a} + e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x} \cdot e^{-i\frac{a}{2}k_y} + e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x} \cdot e^{-i\frac{a}{2}k_y}). \quad (2.17)$$

Sabemos que $\cos \theta = \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta})$. Dessa forma, podemos simplificar alguns termos na equação (2.17), onde escrevemos $\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x) = \frac{1}{2}(e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x} + e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x}) \implies 2 \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x) = (e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x} + e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x})$ e colocamos o termo $e^{ik_y a}$ em evidência chegamos na seguinte equação,

$$f(\vec{k}) = -te^{iak_y} [1 + 2e^{-i\frac{3}{2}ak_y} \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x)]. \quad (2.18)$$

De forma análoga, podemos obter também:

$$f^*(\vec{k}) = -te^{-iak_y} [1 + 2e^{i\frac{3}{2}ak_y} \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x)]. \quad (2.19)$$

Portanto as funções $f(\vec{k})$ e $f^*(\vec{k})$ descrevem as interações entre os primeiros vizinhos no espaço recíproco em k_x e k_y . Estando no espaço recíproco \vec{k} , na rede hexagonal do grafeno (ver Fig. 2.12), analisaremos as propriedades na primeira zona de Brillouin, a qual está ilustrada na Fig. 2.13.

Para construir a primeira zona de Brillouin para uma rede hexagonal, desenha-se inicialmente as retas (linhas de cor vermelha, ver Fig. 2.13.) a partir da origem até os pontos da

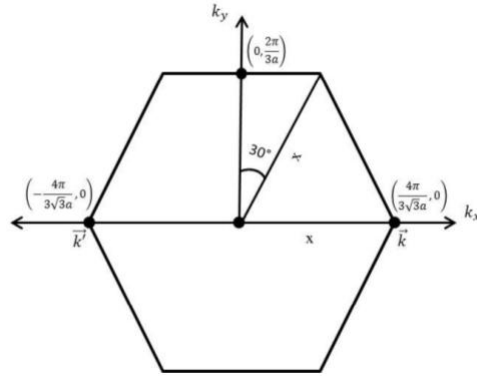


Figura 2.14: Primeira Zona de Brillouin mostrando os 2 pontos de Dirac \vec{k} e \vec{k}' no espaço recíproco. Disponível na Referência [82].

rede recíproca hexagonal e bissecciona-se as mesmas, estabelecendo as interfaces (linhas cor azul, ver Fig. 2.13.), formando-se uma rede hexagonal também, com a diferença que este hexágono não apresenta uma origem comparado com a rede direta e recíproca do grafeno. É próximo dos vértices da primeira zona de Brillouin que temos os chamados cones de Dirac, onde a dispersão da energia é linear, fazendo com que os elétrons tenham comportamento análogo ao de partículas relativísticas sem massa. Na Fig. 2.14 apresenta-se a primeira zona de Brillouin, onde é possível observar os dois pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' , onde $|\vec{K}| = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$.

Como se pode ver na Fig. 2.14, os pontos \vec{K} e \vec{K}' não são equivalentes na primeira zona de Brillouin porque não há nenhum vetor da rede recíproca que possa conectá-los. A importância da primeira zona de Brillouin é que ela fornece a mais alta simetria na rede e a partir dela pode-se construir as bandas de energia para a rede hexagonal do grafeno [95].

2.2.7 Bandas de Energia no Grafeno

Para obter as bandas de energia no grafeno, diagonalizaremos o hamiltoniano de ligação forte no espaço recíproco, resolvendo o problema de auto-valores para o grafeno isolado. Começamos da seguinte forma,

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} (f(\vec{k})a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} + f^*(\vec{k})b_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}) = \sum_{\vec{k}\sigma} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger & b_{\vec{k}\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \cdot \hat{H}_0 \cdot \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma} \\ b_{\vec{k}\sigma} \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

colocando assim o hamiltoniano de ligação-forte na forma,

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \psi_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{H}_0 \psi_{\vec{k}\sigma}, \quad (2.21)$$

onde $\psi_{\vec{k}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma} \\ b_{\vec{k}\sigma} \end{pmatrix}$ e $\psi_{\vec{k}\sigma}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger & b_{\vec{k}\sigma}^\dagger \end{pmatrix}$ são pseudo-spinores na chamada representação de Nambu [96] e \hat{H}_0 é o hamiltoniano do grafeno expresso em forma matricial, dado como,

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & f(\vec{k}) \\ f^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

É possível fazer o caminho inverso e obter o hamiltoniano de ligação-forte no espaço recíproco, substituindo as devidas componentes descritas. Podemos obter as auto-energias do hamiltoniano \hat{H}_0 dado em (2.22) as quais representam as possíveis energias de um elétron de vetor de onda \vec{k} no grafeno, prosseguindo da seguinte maneira,

$$\text{Det}(\hat{H}_0 - I\epsilon) = 0, \quad (2.23)$$

logo,

$$\begin{pmatrix} \epsilon & f(\vec{k}) \\ f^*(\vec{k}) & \epsilon \end{pmatrix} = 0. \quad (2.24)$$

Encontramos os seguintes autovalores,

$$\epsilon^2(\vec{k}) = |f(\vec{k})|^2. \quad (2.25)$$

Substituindo (2.18), pode-se obter $\epsilon(\vec{k})$,

$$\epsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_x\right) \cos\left(\frac{3}{2} a k_y\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_x\right)}, \quad (2.26)$$

cada uma dessas funções determina uma banda de energia no grafeno, sendo $\epsilon_+(\mathbf{k})$ a banda de maior energia e $\epsilon_-(\mathbf{k})$ a de menor energia, chamadas bandas π^* e π , respectivamente, elas são simétricas em relação à linha de energia nula. O potencial químico $\mu(T = 0) = E_F$ do grafeno em temperatura nula ($T = 0$) passa exatamente por zero, ou seja, o nível de Fermi no grafeno é exatamente zero. Olhando para a Fig. 2.14, podemos tirar as seguintes componentes para o vetor $\vec{k} = k_x\hat{x} + k_y\hat{y}$, para um dos pontos de Dirac, \vec{K} , como sendo $(k_x, k_y) = (\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0)$. Se nós substituirmos esses componentes do vetor \vec{k} , na equação (2.18), temos,

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= -t[e^{i0} + e^{-i0} \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}a\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a})] \Rightarrow \\ f(\vec{k}) &= -t[1 + 2\cos(\frac{2\pi}{3})] \Rightarrow \\ f(\vec{k}) &= -t[1 + 2 \cdot (-\frac{1}{2})] \Rightarrow \\ f(\vec{k}) &= 0. \end{aligned} \tag{2.27}$$

O mesmo acontece para as demais coordenadas nos pontos de Dirac. Percebemos assim, que $f(\vec{k})$ é nula nos pontos de Dirac. Analisaremos agora a função $f(\vec{k})$ nos pontos de Dirac $\vec{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(1, 0)$ e $\vec{K}' = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(-1, 0)$, onde ela é nula e por onde passa o nível de Fermi. É possível ver nesse caso que as bandas de energia se tocam e não existe gap de energia. Como uma dispersão nula não é desejável, expandimos $f(\vec{k})$ em torno do ponto de Dirac, tem-se,

$$f(\vec{q} + \vec{K}) \approx f(\vec{k}) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) |_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} = q_x \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} |_{\vec{k}} + q_y \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_y} |_{\vec{k}}. \tag{2.28}$$

Nesta aproximação de Taylor a função $f(\vec{k})$ fica em função das componentes do vetor de onda relativo $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$. Como sabemos que o primeiro termo é zero, prosseguimos para achar o segundo termo, que são derivadas correspondentes dadas na equação. Vamos usar as equações que foram encontradas para o fator geométrico $f(\vec{k}) = -t(2e^{-i\frac{a}{2}k_y} \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x) + e^{iak_y})$. Façamos as derivadas,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= t(2e^{-i\frac{a}{2}k_y} \cdot \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x) \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}a) \Rightarrow \\
\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= t(2 \cdot \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}a\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}) \cdot \frac{\sqrt{3}}{2})a \Rightarrow \\
\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= t(2 \cdot \sin(\frac{2\pi}{3}) \cdot \frac{\sqrt{3}}{2})a \Rightarrow \\
\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= t\frac{3}{2}a.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

De forma análoga, encontramos a outra derivada. Portanto, as duas derivadas correspondentes são,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= \frac{3}{2}at, \\
\frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_y} \Big|_{\vec{k}} &= -i\frac{3}{2}at.
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Então, substituindo as expressões encontradas,

$$f(\vec{q} + \vec{K}) \approx \frac{3}{2}at[q_x - iq_y]. \tag{2.31}$$

Em módulo,

$$|f(\vec{q} + \vec{K})| \approx \frac{3}{2}at|\vec{q}|. \tag{2.32}$$

onde a constante $\frac{3}{2}\frac{at}{\hbar}$ é a velocidade de Fermi v_F . Substituindo o valor do parâmetro de rede do grafeno $a = 1.42 \times 10^{-10}$ m, a constante de *hopping* $t = 2,8\text{eV}$ e a constante de Planck $\hbar = 6,59 \times 10^{-16}\text{eV}\cdot\text{s}$, vamos ter que $v_F \approx 0.9065 \times 10^6$ m/s. Esse valor corresponde aproximadamente 1/300 da velocidade da luz no vácuo e portanto os elétrons serão tratados como "relativísticos" apenas do ponto de vista da analogia formal com a teoria de elétrons de Dirac, conforme logo veremos.

Encontrado o fator geométrico,

$$|f(\vec{q} + \vec{K})| = \hbar v_f |\vec{q}|, \quad (2.33)$$

podemos obter que a energia para pontos próximos ao ponto de Dirac \vec{K} é dado,

$$\epsilon = \pm v_f \hbar |\vec{q}|. \quad (2.34)$$

Analisando a relação de dispersão linear para energia *versus* momento $\hbar|\vec{q}|$ no grafeno, podemos fazer associações análogas matemáticas entre os fenômenos de transporte no grafeno e os que estão presentes nas teorias estudadas pela Eletrodinâmica Quântica Relativística. Primeiramente, vemos que a dispersão de energia linear dada pela equação é semelhante à dispersão de energia de partículas relativísticas $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ para $m_0 = 0$, com a velocidade de Fermi substituindo a velocidade da luz. Podemos concluir assim, que os portadores de carga no grafeno podem ser vistos como partículas relativísticas sem massa [97], [98]. É possível constatar um movimento pseudo-hélico nos portadores de carga no grafeno. Esse tipo de movimento é dado pela projeção do pseudo-spin na direção do movimento dos portadores de carga. Ela é positiva para os elétrons e negativa para os buracos. Outra característica desta relação linear para a dispersão de energia próxima ao ponto de Dirac, sugere um grande movimento de cargas, mesmo com uma densidade eletrônica de portadores baixa para energias próximas ao nível de Fermi [99],[100]. Na Fig. 2.15 pode-se observar as bandas de energia de valência e de condução no grafeno, onde não há gap, explicando o motivo do grafeno ser denominado como um semicondutor de gap zero, se diferenciando de outros semicondutores.

Na Fig. 2.15, vemos as bandas de energia, onde a banda de valência que se encontra abaixo do nível de Fermi está inteiramente preenchida e a banda de condução que está acima do nível de Fermi, está inteiramente desocupada. Sabemos que o gap é nulo, sendo assim, não é necessário muita energia para que os elétrons saiam da banda de valência e cheguem até a banda de condução, criando um par elétron-buraco, ambos de efetivamente de massa nula. Nas Figs. 2.16 e 2.17, apresenta-se a primeira zona de Brillouin da rede do grafeno, onde pode-se observar os cones de Dirac no entorno de cada hexágono da rede no espaço recíproco

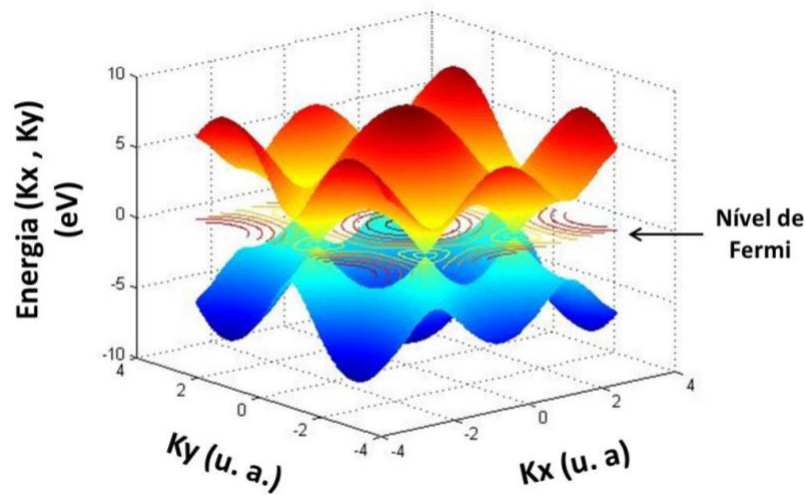


Figura 2.15: Dispersão de energia das bandas de condução e valência do grafeno. Disponível na Referência [82].

e em cada vértice dentro do hexágono que se encontra na zona de Brillouin temos um terço de cada cone de Dirac, somando-os, teremos dois cones de Dirac dentro da primeira zona de Brillouin, respectivamente.

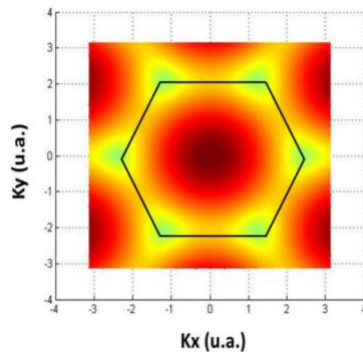


Figura 2.16: Zona de Brillouin em 2D - Banda de condução. Disponível na Referência [82].

Na Fig. 2.16, vê-se um ponto vermelho localizado no centro do hexágono que nos diz o nível de energia máximo da banda de condução totalmente desocupado e de maior simetria no espaço recíproco da rede do grafeno e na Fig. 2.17, vê-se outro ponto azul escuro no centro do hexágono, esse nos mostra o nível de energia mais baixo na banda de valência totalmente preenchido por elétrons e de maior simetria.

Mencionamos anteriormente, que a função $f(\vec{k})$ é nula nos respectivos pontos $\mathbf{K} =$

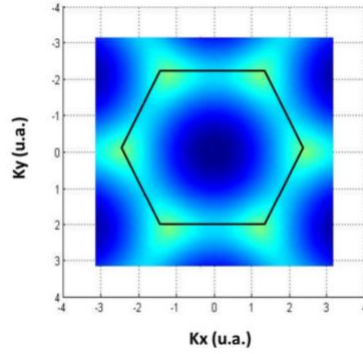


Figura 2.17: Zona de Brillouin em 2D - Banda de valência. Disponível na Referência [82].

$4\pi/(3\sqrt{3}a)\hat{x}$. A função também é nula nos outros 4 vértices do hexágono que formam a primeira zona de Brillouin, isto pode ser percebido na Fig. 2.15. Nas proximidades de cada um desses pontos, as bandas formam um cone duplo (um voltado para cima e outro para baixo, eles se tocam no ponto onde a energia é zero, isso nos dá as duas soluções de energia possíveis), mas somente $1/3$ de cada cone duplo está dentro da primeira zona de Brillouin. Como são 6 vértices, pode-se observar que existem $6 \times 1/3 = 2$ cones duplos, que são não equivalentes e podem ser montados de forma completa a partir de translações dos vértices com vetores da rede recíproca. Isso explica porque somente dois pontos de Dirac são não equivalentes [101],[102]. Considerando os cálculos que fizemos anteriormente para as bandas de energia vamos escrever uma equação de Dirac¹⁹ efetiva para o grafeno. Para mostrar que o hamiltoniano do grafeno descreve um férmion de Dirac sem massa, consideramos as matrizes de Pauli $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ para um pseudo-spin, na forma das matrizes $\vec{\sigma}$ mencionadas como se segue,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

que permite escrever o hamiltoniano do grafeno na forma abaixo,

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}) \psi_{\mathbf{q}\sigma}, \quad (2.36)$$

¹⁹A Dedução da Equação de Dirac está no Apêndice A.

sendo $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ e $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}) = \sigma_x q_x + \sigma_y q_y$. Na sequência, pode-se usar a propriedade da função delta de Kronecker: veja que $\sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{q}'} F_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}$ para quaisquer funções $F_{\mathbf{q}}$ e $G_{\mathbf{q}}$ e além disso pode-se utilizar a definição da função delta de Kronecker que aplicamos anteriormente. Fazendo isso, chegamos a forma abaixo,

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}') \psi_{\mathbf{q}'\sigma} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \hbar v_F \frac{1}{N} \sum_j \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}') \psi_{\mathbf{q}'\sigma} e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_j}. \quad (2.37)$$

Levamos o somatório sobre j ao limite do contínuo, tendo que $\psi_\sigma(\mathbf{r}_j) = \sum_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$ e que o termo $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}')$ pode ser obtido fazendo a substituição $\mathbf{q} = -i\nabla$, onde ∇ opera sobre as variáveis no espaço real, chegamos à,

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \sum_{\sigma} \int d^2\mathbf{r} \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) (\vec{\sigma} \cdot \nabla) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.38)$$

no qual $d^2\mathbf{r} = dx dy$ corresponde à integração das variáveis espaciais, depois que o limite para o contínuo foi tomado. Pode-se lembrar que $-i\hbar\nabla$ é o operador momentum \mathbf{p} na mecânica quântica e as matrizes σ_x e σ_y são as matrizes α de Dirac, surgindo assim uma teoria de Dirac para partículas sem massa.

Nós podemos observar que a equação (2.38), tem a forma de um valor médio, assumindo que ψ é uma função de onda clássica, porque a média de um operador \hat{O} com relação a uma função dada se define como $\langle \psi_\sigma | \hat{O} | \psi_\sigma \rangle = \int d^2\mathbf{r} \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{O} \psi_{\sigma}(\mathbf{r})$. O operador que enxergamos na equação (2.38) é o hamiltoniano de Dirac em duas dimensões espaciais, para uma partícula relativística sem massa, ou seja,

$$\hat{H}_D = -i\hbar v_F (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}). \quad (2.39)$$

Perspectivas gerais

Terminamos este capítulo com a obtenção da equação efetiva de Dirac para o grafeno, dada na equação (2.39), a mesma será usada em nossos cálculos teóricos para o estudo das

super-redes de grafeno. Entendemos ao final, que o grafeno se torna um dos mais promissores nanomaterias deste século, seu uso não só abrange estudos em trabalhos teóricos e experimentais, como tem alcançado patamares tecnológicos de grandes referências no mundo. Seu uso tem se disseminando e intensificado à medida que tantos pesquisadores se empenham em analisar e pesquisar as propriedades do grafeno, dando ênfase à suas aplicações, o que justifica nosso interesse de estudo nesse trabalho aqui presente. No capítulo 3 e 4, analisaremos as super-redes de grafeno finitas e infinitas, respectivamente.

Capítulo 3

Super-Redes de Grafeno Finitas

Neste capítulo iniciaremos os nossos estudos sobre as super-redes de grafeno. Aqui daremos nossa atenção à super-rede de grafeno finita, tendo como objetivo analisar as propriedades de transporte destas super-redes. Partindo do hamiltoniano de Dirac iremos obter a matriz de transferência para o grafeno e assim escrevermos o coeficiente de transmissão, ferramenta essencial para analisar numericamente nossos resultados para os casos de uma incidência normal e uma incidência oblíqua.

3.1 Modelo Contínuo para uma super-rede de grafeno

Usamos para descrever os estados eletrônicos de uma única camada de grafeno para baixas energias, o hamiltoniano de Dirac dado como se segue,

$$H = -i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y), \quad (3.1)$$

onde σ_i são as matrizes de Pauli atuando em um pseudo-spin relacionado à duas super-redes de grafeno e v_F é a velocidade de Fermi. Nós consideramos aqui um potencial eletrostático externo aplicado na rede do grafeno e a amostra tem um *gap* de energia com velocidade de Fermi, a abertura do *gap* é acompanhada de uma transferência de cargas no grafeno, de modo que a energia de Fermi se desloca para fora do *gap*, fazendo com que o grafeno permaneça se comportando como um condutor. Na prática isso significa que, para que o grafeno seja

utilizado em dispositivos eletrônicos, seriam necessárias altas voltagens externas de modo a deslocar a energia de Fermi para dentro e fora do gap, de modo a controlar a condutividade elétrica. Com isso, se faz necessário um procedimento de dopagem que permita o controle da abertura do gap, sem no entanto causar uma forte mudança na energia de Fermi. Esse *gap* de energia pode ser obtido por exemplo, se depositamos o grafeno em uma heteroestrutura de substrato composto por dois materiais diferentes, que podem abrir diferentes *gaps* de energia em diferentes regiões da super-rede de grafeno, ou seja, no caso do grafeno de duas camadas a dopagem diferenciada das duas camadas pode causar a abertura de um gap de energia. A modulação da velocidade de Fermi é obtida colocando planos metálicos próximos à super-rede de grafeno, isso alterará o transporte de carga em diferentes regiões da amostra de grafeno, criando barreiras de velocidade de Fermi, como podemos ver na Fig. 3.1.

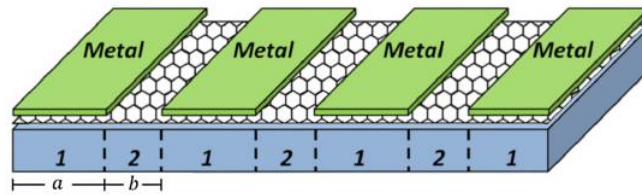


Figura 3.1: Diagrama esquemático de uma folha de grafeno depositada em uma subestrutura heteroestruturada composta de dois materiais diferentes que podem abrir diferentes *gaps* de energia em diferentes regiões da folha de grafeno induzindo uma modulação periódica na energia de *gap* no grafeno. Os planos metálicos são colocados perto da folha de grafeno que induzem uma barreira de velocidade periódica. O período da super-rede de grafeno é $a + b$. Disponível na Referência [47].

Dessa forma, a velocidade de Fermi, o potencial e o *gap* de energia mudam somente na direção x e o período da super-rede de grafeno é dado por $w_a + w_b$. Como a velocidade de Fermi é dependente da posição, o operador efetivo relativístico de Dirac não é mais hermitiano. Modificaremos o hamiltoniano de Dirac usual para o grafeno, para que tenhamos um operador hermitiano, de acordo com a Ref. [103], escrevemos o operador da seguinte forma,

$$H = -i\hbar\sqrt{v_F(x)}\sigma_x\frac{d}{dx}\sqrt{v_F(x)}, \quad (3.2)$$

é hermitiano, e podemos retornar para a equação (3.1), quando $v_F(x) = v_F$. Dessa forma, o hamiltoniano efetivo de Dirac para uma super-rede de grafeno com a velocidade de Fermi dependente da posição e com *gap* de energia é dado por,

$$H = -i\hbar(\sqrt{v_F(x)}\sigma_x\partial_x\sqrt{v_F(x)} + v_F(x)\sigma_y\partial_y) + V(x)\hat{1} + \Delta(x)\sigma_z, \quad (3.3)$$

onde $V(x)$ é o potencial eletrostático e $\Delta(x)$ é o *gap* de energia. Em nosso caso, nós temos,

$$v_F(x) = \begin{cases} v_A, & \text{na região A} \\ v_B, & \text{na região B} \end{cases}, \quad (3.4)$$

$$\Delta(x) = \begin{cases} \Delta_A, & \text{na região A} \\ \Delta_B, & \text{na região B} \end{cases}, \quad (3.5)$$

e

$$V(x) = \begin{cases} V_A, & \text{na região A} \\ V_B, & \text{na região B} \end{cases}. \quad (3.6)$$

A equação de Dirac é dada por,

$$H\psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (3.7)$$

Escrevemos,

$$\psi(x, y) = e^{-ik_y y}\phi(x), \quad (3.8)$$

e definimos que $\sqrt{v_F(x)}\psi(x) = \phi(x)$, apenas para rearranjar os termos, vamos substituir isto na equação de Dirac (3.3). Começaremos aplicando $\psi(x, y)$ em ambos os lados da equação, distribuindo e rearranjando os termos da seguinte forma,

$$\begin{aligned}
He^{-ik_y y}\psi(x) &= -i\hbar\sqrt{v_F(x)}\sigma_x\partial_x\sqrt{v_F(x)}e^{-ik_y y}\psi(x) - i\hbar v_F(x)\sigma_y\partial_y e^{-ik_y y}\psi(x) + \\
&\quad + V(x)\hat{1}e^{-ik_y y}\psi(x) + \Delta(x)\sigma_z e^{-ik_y y}\psi(x) \Rightarrow \\
H\psi(x) &= -i\hbar\sqrt{v_F(x)}\sigma_x\partial_x\phi(x) - \hbar v_F(x)\sigma_y k_y \frac{\phi(x)}{\sqrt{v_F(x)}} + V(x)\hat{1}\frac{\phi(x)}{\sqrt{v_F(x)}} + \\
&\quad + \Delta(x)\sigma_z \frac{\phi(x)}{\sqrt{v_F(x)}} \Rightarrow \\
H\phi(x) &= -i\hbar v_F(x)\sigma_x\partial_x\phi(x) - \hbar v_F(x)\sigma_y k_y\phi(x) + V(x)\hat{1}\phi(x) + \Delta(x)\sigma_z\phi(x).
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Portanto temos,

$$-i\hbar v_F(x)\sigma_x\partial_x\phi(x) + [\Delta(x)\sigma_z - \hbar v_F(x)k_y\sigma_y + V(x)\hat{1}]\phi(x) = E\phi(x), \tag{3.10}$$

onde $\hat{1}$ é uma matriz identidade e σ_n , com $n = x, y, z$ são as matrizes de Pauli. Sabemos que as matrizes de Pauli são dadas da seguinte forma,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.11}$$

Vamos substituir essas matrizes na equação (3.10), assim teremos,

$$\begin{aligned}
-i\hbar v_F(x) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \partial_x\phi(x) &= [\Delta(x) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} - \hbar v_F(x)k_y \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \\
&\quad + V(x) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - E]\phi(x).
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Para facilitar nossos cálculos, vamos multiplicar por σ_x^{-1} em ambos os lados da equação (3.12), assim,

$$\begin{aligned}
-i\hbar v_F(x) \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \partial_x\phi(x) &= [\Delta(x) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \\
+ \hbar v_F(x)k_y \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + V(x) \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - E \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}] \phi(x).
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Dividindo ambos os lados da equação por $1/\hbar v_F(x)$, e fazendo a multiplicação dos escalares pelas matrizes temos,

$$-i\partial_x\phi(x) = \left[\begin{pmatrix} 0 & \frac{\Delta(x)}{\hbar v_F(x)} \\ -\frac{\Delta(x)}{\hbar v_F(x)} & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -ik_y & 0 \\ 0 & ik_y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \frac{V(x)}{\hbar v_F(x)} \\ \frac{V(x)}{\hbar v_F(x)} & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \frac{E}{\hbar v_F(x)} \\ \frac{E}{\hbar v_F(x)} & 0 \end{pmatrix} \right] \phi(x). \quad (3.14)$$

Daí,

$$-i\partial_x\phi(x) = \begin{pmatrix} ik_y & \frac{\Delta(x)+V(x)-E}{\hbar v_F(x)} \\ \frac{-\Delta(x)+V(x)-E}{\hbar v_F(x)} & -ik_y \end{pmatrix} \phi(x). \quad (3.15)$$

Portanto, a equação pode ser escrita da seguinte forma,

$$-i\frac{d\phi(x)}{dx} = P(x)\phi(x), \quad (3.16)$$

onde,

$$P(x) = \begin{pmatrix} ik_y & \frac{-(E-V(x))+\Delta(x)}{\hbar v_F(x)} \\ \frac{-(E-V(x))-\Delta(x)}{\hbar v_F(x)} & -ik_y \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

Neste capítulo 3 e no capítulo 4, nós resolveremos a equação (3.16) para os casos de uma super-rede de grafeno finita e infinita, com intuito de investigar a possibilidade de transformar uma super-rede quase-periódica em periódica e vice-versa. A super-rede quase-periódica de grafeno que consideramos aqui, que é o nosso protótipo de quase-cristal, segue a sequência de Fibonacci para diferentes gerações, que é um tipo de sequência que uma super-rede quase-periódica pode ser representada. A sequência de Fibonacci é obtida a partir da relação de recorrência $S_{j+1} = \{S_j, S_{j-1}\}$ com $S_0 = \{B\}$ e $S_1 = \{A\}$, onde j é a geração de Fibonacci. Assim, nós temos, por exemplo, $S_2 = \{AB\}$, $S_3 = \{ABA\}$ e $S_4 = \{ABAAB\}$. Denotaremos a n 'ésima geração de Fibonacci por nG . Em todos os casos aqui presentes, consideramos $w_a = w_b = 20\text{nm}$.

3.2 Super-Rede de Grafeno Finita

3.2.1 O Modelo

Nosso objetivo aqui é obter o coeficiente de transmissão, a fim de investigar o transporte eletrônico em uma super-rede de grafeno finita. Para isso, nós usamos o método de matriz de transferência. Dentro da barreira j 'ésima, $V(x)$, $\Delta(x)$ e v_F são constantes, e nós vamos resolver a equação (3.16), prosseguindo escrevendo,

$$\frac{d\phi_A}{dx} - k_y\phi_A = i\eta_+\phi_B, \quad (3.18)$$

$$\frac{d\phi_B}{dx} - k_y\phi_B = i\eta_-\phi_A, \quad (3.19)$$

onde $\eta_{\pm} = [E - V(x) \pm \Delta]/\hbar v_F$ são os parâmetros de transição de $\phi_B(\phi_A)$ para $\phi_A(\phi_B)$, E é a energia incidente do elétron, e $k_0 = E/\hbar v_F$ corresponde ao número de onda eletrônica incidente. Se $\Delta \rightarrow 0$, as duas equações se reduzem aos casos das referências [104], [105].

Da equação (3.18) temos,

$$\phi_B = \frac{1}{i\eta_+} \frac{d\phi_A}{dx} - \frac{k_y\phi_A}{i\eta_+}. \quad (3.20)$$

Substituindo em (3.19),

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\eta_+} \frac{d^2\phi_A}{dx^2} - \frac{k_y}{i\eta_+} \frac{d\phi_A}{dx} + k_y \left(\frac{1}{i\eta_+} \frac{d\phi_A}{dx} - \frac{k_y\phi_A}{i\eta_+} \right) &= i\eta_-\phi_A \Rightarrow \\ \frac{1}{i\eta_+} \left(\frac{d^2\phi_A}{dx^2} - k_y^2\phi_A \right) &= i\eta_-\phi_A \Rightarrow \\ \frac{d^2\phi_A}{dx^2} - k_y^2\phi_A &= -k_j^2\phi_A \Rightarrow \\ \frac{d^2\phi_A}{dx^2} + (k_j^2 - k_y^2)\phi_A &= 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

De maneira análoga isolando ϕ_A na equação (3.19) e aplicando na equação (3.18) encontramos,

$$\frac{d^2\phi_B}{dx^2} + (k_j^2 - k_y^2)\phi_B = 0. \quad (3.22)$$

Logo, podemos concluir que a solução da equação (3.16) é,

$$\frac{d^2\phi_{A,B}}{dx^2} + (k_j^2 - k_y^2)\phi_{A,B} = 0, \quad (3.23)$$

onde $k_j = [(E - V_j)^2 - \Delta_j^2]^{1/2}/(\hbar v_j)$ é o vetor de onda que incide na barreira V_j , enquanto que sempre usamos a relação $\eta_{j+} \cdot \eta_{j-} = k_j^2$. O subscrito j denota as regiões na super-rede de grafeno com $j = 0, 1, 2, 3, \dots, e$, onde $j = 0$ denota a região incidente e $j = e$ denota a região de saída.

Iremos agora obter a matriz de transferência que conecta as funções de onda $\phi(x)$ em x e $x + \Delta x$ na barreira j 'ésima, seguindo o modelo na referência [104]. Vamos primeiro resolver as equações (3.21) e (3.22). Percebemos que elas são equações diferenciais de segunda ordem, as soluções dessas equações são simples. Para resolver (3.21), vamos supor que as soluções possíveis para essa equação são da forma $\phi_A(x) = ce^{rx}$, onde c é uma constante. Para esse tipo de solução, a equação diferencial possui uma equação característica, como a nossa equação diferencial é de segunda ordem a equação característica será um polinômio de segundo grau, temos,

$$x^2 + (k_j^2 - k_y^2) = 0, \quad (3.24)$$

as raízes desse polinômio são,

$$\begin{aligned} x_1 &= i\sqrt{(k_j^2 - k_y^2)}, \\ x_2 &= -i\sqrt{(k_j^2 - k_y^2)}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Sabemos também que $q_j = \sqrt{k_j^2 - k_y^2}$, portanto, a solução para a equação (3.21) é,

$$\phi_A(x) = ce^{rx} \Rightarrow \phi_A(x) = ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x}. \quad (3.26)$$

De forma análoga, resolvendo (3.22), obtemos,

$$\phi_B(x) = ce^{rx} \Rightarrow \phi_B(x) = ce^{iq_j x} + de^{-iq_j x}. \quad (3.27)$$

Nossas soluções por fim são,

$$\begin{aligned} \phi_A(x) &= ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x}, \\ \phi_B(x) &= ce^{iq_j x} + de^{-iq_j x}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Vamos agora encontrar qual a forma das constantes a, b, c e d das equações descritas em (3.28). Nosso objetivo é deixar as constantes c e d em função das constantes a e b . Para fazer isto vamos usar ϕ_A da equação (3.28) e substituir em (3.18), derivando e rearranjando os termos, assim temos,

$$\begin{aligned} iaq_j e^{iq_j x} - ibq_j e^{-iq_j x} - ak_y e^{iq_j x} - bk_y e^{-iq_j x} &= ic\eta_+ e^{iq_j x} + id\eta_+ e^{iq_j x} \Rightarrow \\ a(iq_j - k_y) e^{iq_j x} - b(iq_j + k_y) e^{-iq_j x} &= ic\eta_+ e^{iq_j x} + id\eta_+ e^{iq_j x}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Escrevemos $(iq_j - k_y) = \alpha$, $(iq_j + k_y) = \beta$ e $i\eta_+ = \gamma$, daí,

$$\begin{aligned} a\alpha e^{iq_j x} - b\beta e^{-iq_j x} &= c\gamma e^{iq_j x} + d\gamma e^{iq_j x} \Rightarrow \\ c &= \frac{a\alpha}{\gamma} - \frac{b\beta}{\gamma} e^{-2iq_j x} - d e^{-2iq_j x}. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Usando ϕ_B da equação (3.28) na equação (3.19), substituindo, derivando e rearranjando os termos nós obtemos,

$$\begin{aligned} icq_j e^{iq_j x} - idq_j e^{-iq_j x} + ck_y e^{iq_j x} + dk_y e^{-iq_j x} &= ia\eta_- e^{iq_j x} + b\eta_- e^{-iq_j x} \Rightarrow \\ c(iq_j + k_y) e^{iq_j x} - d(iq_j - k_y) e^{-iq_j x} &= ia\eta_- e^{iq_j x} + b\eta_- e^{-iq_j x}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Escrevemos $(iq_j - k_y) = \alpha$, $(iq_j + k_y) = \beta$ e $i\eta_- = \zeta$, daí,

$$\begin{aligned} c\beta e^{iq_j x} - d\alpha e^{-iq_j x} &= a\zeta e^{iq_j x} + b\zeta e^{-iq_j x} \Rightarrow \\ d &= \frac{-a\zeta}{\alpha} e^{2iq_j x} - \frac{b\zeta}{\alpha} + \frac{c\beta}{\alpha} e^{2iq_j x}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Encontradas as formas das constantes c e d , vamos substituí-las em ϕ_B da equação (3.28), queremos que ϕ_A e ϕ_B fiquem em função das constantes a e b . Substituindo e no final retornado aos valores de α, β, γ e ζ , lembrando também que $\eta_+ = k_j^2/\eta_-$, onde $\eta_- = l_j$, temos,

$$\begin{aligned} \phi_B &= \frac{a\alpha}{\gamma}e^{iq_jx} - \frac{b\beta}{\gamma}e^{-iq_jx} + \frac{a\zeta}{\alpha}e^{iq_jx} + \frac{b\zeta}{\alpha}e^{-iq_jx} - \frac{c\beta}{\alpha}e^{iq_jx} - \frac{a\zeta}{\alpha}e^{iq_jx} - \frac{b\zeta}{\alpha}e^{-iq_jx} + \frac{c\beta}{\alpha}e^{iq_jx} \Rightarrow \\ &\phi_B = \frac{a\alpha}{\gamma}e^{iq_jx} - \frac{b\beta}{\gamma}e^{-iq_jx} \Rightarrow \\ \phi_B &= a \frac{(iq_j - k_y)}{i\eta_+} e^{iq_jx} - \frac{b(iq_j + k_y)}{i\eta_+} e^{-iq_jx} \Rightarrow \\ \phi_B &= a \frac{l_j}{k_j} \frac{(iq_j - k_y)}{ik_j} e^{iq_jx} - b \frac{l_j}{k_j} \frac{(iq_j + k_y)}{ik_j} e^{-iq_jx}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Denotaremos que $l_j/k_j = p_j$, dessa forma as soluções $\phi_{A,B}$ tomam a forma,

$$\begin{aligned} \phi_A(x) &= ae^{iq_jx} + be^{-iq_jx}, \\ \phi_B(x) &= ap_j \frac{(iq_j - k_y)}{ik_j} e^{iq_jx} - bp_j \frac{(iq_j + k_y)}{ik_j} e^{-iq_jx}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Para conectar as funções de onda $\phi_{A,B}(x)$ entre quaisquer duas posições x_{j-1} e $x_{j-1} + \Delta x$ no potencial j 'ésima, nós iremos assumir uma base $\Phi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix}$, a qual é expressada como,

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= ae^{iq_jx} + be^{-iq_jx} \\ \varphi_2(x) &= ae^{iq_jx} - be^{-iq_jx}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Usando essa base, nós podemos reescrever as equações presentes em (3.34) da forma que se segue,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} = R_j(E, k_y) \begin{pmatrix} \varphi_1(x) \\ \varphi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

onde,

$$R_j(E, k_y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ ip_j \sin \theta_j & p_j \cos \theta_j \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

Aqui, $\theta_j = \arcsin(k_y/k_j)$ e $\theta_j = \arccos(q_j/k_j)$ são os ângulos entre as componentes q_j , k_j e k_y no potencial j'ésima. Verificando a equação (3.36),

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ ip_j \sin \theta_j & p_j \cos \theta_j \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x} \\ ae^{iq_j x} - be^{-iq_j x} \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \begin{pmatrix} ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x} \\ p_j[a(\cos \theta_j + i \sin \theta_j)e^{iq_j x} - b(\cos \theta_j - i \sin \theta_j)e^{-iq_j x}] \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

analisaremos agora o segundo termo da coluna na matriz da equação (3.38). Avaliaremos os termos com seno e cosseno a partir das definições de θ_j dadas anteriormente. Assim,

$$\begin{aligned} (\cos \theta_j + i \sin \theta_j) &= (\cos \arccos \frac{q_j}{k_j} + i \sin \arcsin \frac{k_y}{k_j}) \Rightarrow \\ (\cos \theta_j + i \sin \theta_j) &= \left(\frac{q_j}{k_j} + i \frac{k_y}{k_j}\right) = \left(\frac{q_j + ik_y}{k_j}\right) = \frac{i}{i} \left(\frac{q_j + ik_y}{k_j}\right) = \frac{iq_j - k_y}{ik_j}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

e

$$\begin{aligned} (\cos \theta_j - i \sin \theta_j) &= (\cos \arccos \frac{q_j}{k_j} - i \sin \arcsin \frac{k_y}{k_j}) \Rightarrow \\ (\cos \theta_j - i \sin \theta_j) &= \left(\frac{q_j}{k_j} - i \frac{k_y}{k_j}\right) = \left(\frac{q_j - ik_y}{k_j}\right) = \frac{i}{i} \left(\frac{q_j - ik_y}{k_j}\right) = \frac{iq_j + k_y}{ik_j}, \end{aligned} \quad (3.40)$$

substituindo na matriz em (3.38), temos por fim,

$$\begin{pmatrix} ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x} \\ ap_j \left(\frac{iq_j - k_y}{ik_j}\right) e^{iq_j x} - bp_j \left(\frac{iq_j + k_y}{ik_j}\right) e^{-iq_j x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

CQD.

Agora, dentro da mesma barreira, ou da região do poço, das posições x_{j_1} para $x_{j_1+\Delta x}$, a função de onda $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1}) \\ \phi_B(x_{j-1}) \end{pmatrix}$ evolui em outra forma $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1+\Delta x}) \\ \phi_B(x_{j-1+\Delta x}) \end{pmatrix}$, a qual pode ser expressada em termos da base Φ ,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix} = T_j(\Delta x, E, k_y) \begin{pmatrix} \varphi_1(x_{j-1}) \\ \varphi_1(x_{j-1}) \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

onde,

$$T_j(\Delta x, E, k_y) = \begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) & i \sin(q_j \Delta x) \\ ip_j \sin(q_j \Delta x + \theta_j) & p_j \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Vamos escrever quais são essas funções $\phi_A(x_{j-1} + \Delta x)$ e $\phi_B(x_{j-1} + \Delta x)$ em termos das já conhecidas ϕ_A e ϕ_B . Daí,

$$\begin{aligned} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) &= ae^{iq_j(x_{j-1}+\Delta x)} + be^{-iq_j(x_{j-1}+\Delta x)}, \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) &= ap_j \frac{(iq_j - k_y)}{ik_j} e^{iq_j(x_{j-1}+\Delta x)} - bp_j \frac{(iq_j + k_y)}{ik_j} e^{-iq_j(x_{j-1}+\Delta x)}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Vamos escrever também as funções $\varphi_1(x_{j-1})$ e $\varphi_2(x_{j-1})$ em termos das já conhecidas $\varphi_1(x)$ e $\varphi_2(x)$. Daí,

$$\begin{aligned} \varphi_1(x_{j-1}) &= ae^{iq_j x_{j-1}} + be^{-iq_j x_{j-1}}, \\ \varphi_2(x_{j-1}) &= ae^{iq_j x_{j-1}} - be^{-iq_j x_{j-1}}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Vamos verificar agora a equação (3.42),

$$\begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) & i \sin(q_j \Delta x) \\ ip_j \sin(q_j \Delta x + \theta_j) & p_j \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ae^{iq_j x_{j-1}} + be^{-iq_j x_{j-1}} \\ ae^{iq_j x_{j-1}} - be^{-iq_j x_{j-1}} \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

Vamos calcular os termos da matriz separadamente, para o primeiro termo temos,

$$\begin{aligned}
a[\cos(q_j \Delta x) + i \sin(q_j \Delta x)]e^{iq_j x_{j-1}} + b[\cos(q_j \Delta x) - i \sin(q_j \Delta x)]e^{-iq_j x_{j-1}} &\Rightarrow \\
ae^{iq_j \Delta x} \cdot e^{iq_j x_{j-1}} + be^{-iq_j \Delta x} \cdot e^{-iq_j x_{j-1}} &\Rightarrow \quad (3.47) \\
ae^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} + be^{-iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} &
\end{aligned}$$

E para o segundo termo,

$$\begin{aligned}
ap_j i \sin(q_j \Delta x + \theta_j) e^{iq_j x_{j-1}} + bp_j i \sin(q_j \Delta x + \theta_j) e^{-iq_j x_{j-1}} + \\
+ ap_j \cos(q_j \Delta x + \theta_j) e^{iq_j x_{j-1}} - bp_j \cos(q_j \Delta x + \theta_j) e^{-iq_j x_{j-1}} &\Rightarrow \quad (3.48) \\
p_j \{ a [\cos(q_j \Delta x + \theta_j) + i \sin(q_j \Delta x + \theta_j)] e^{iq_j x_{j-1}} + \\
- b [\cos(q_j \Delta x + \theta_j) - i \sin(q_j \Delta x + \theta_j)] e^{-iq_j x_{j-1}} \}. &
\end{aligned}$$

Vamos trabalhar os termos com seno e cosseno separadamente para podermos simplificar esse segundo termo da matriz, lembrando também das definições para θ_j , façamos,

$$\cos(q_j \Delta x + \theta_j) = \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{k_j} - \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{k_j}. \quad (3.49)$$

e

$$\sin(q_j \Delta x + \theta_j) = \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{k_j} + \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{k_j}. \quad (3.50)$$

Substituindo (3.49) e (3.50) em (3.48) temos,

$$\begin{aligned}
p_j \{ a [\cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{k_j} - \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{k_j} + i \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{k_j} + i \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{k_j}] e^{iq_j x_{j-1}} + \\
- b [\cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{k_j} - \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{k_j} - i \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{k_j} + i \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{k_j}] e^{-iq_j x_{j-1}} \} &\Rightarrow \\
p_j \{ a \frac{i}{i} [\frac{q_j}{k_j} + i \frac{k_y}{k_j}] e^{iq_j x_{j-1} + iq_j \Delta x} - b \frac{i}{i} [\frac{q_j}{k_j} - i \frac{k_y}{k_j}] e^{-iq_j \Delta x - iq_j x_{j-1}} \} &\Rightarrow \quad (3.51) \\
ap_j (\frac{iq_j - k_y}{ik_j}) e^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} - bp_j (\frac{iq_j + k_y}{ik_j}) e^{-iq_j(x_{j-1} + \Delta x)}. &
\end{aligned}$$

Substituindo o primeiro termo (3.47) e o segundo termo (3.51) na matriz (3.46), temos,

$$\begin{pmatrix} ae^{iq_j(x_{j-1}+\Delta x)} + be^{-iq_j(x_{j-1}+\Delta x)} \\ ap_j\left(\frac{iq_j-k_y}{ik_j}\right)e^{iq_j(x_{j-1}+\Delta x)} - bp_j\left(\frac{iq_j+k_y}{ik_j}\right)e^{-iq_j(x_{j-1}+\Delta x)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

CQD.

Assim, a relação entre $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1}) \\ \phi_B(x_{j-1}) \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix}$ pode ser finalmente escrita como,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix} = M_j(\Delta x, E, k_y) \begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1}) \\ \phi_B(x_{j-1}) \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

onde temos que M_j é dada por,

$$M_j(\Delta x, E, k_y) = T_j(\Delta x, E, K_y)R_j^{-1}(E, k_y) \quad (3.54)$$

.

Prosseguimos agora para encontrar M_j ,

$$\begin{aligned} M_j &= \begin{pmatrix} \cos(q_j\Delta x) & i\sin(q_j\Delta x) \\ ip_j\sin(q_j\Delta x + \theta_j) & p_j\cos(q_j\Delta x + \theta_j) \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\text{Det}R_j} \cdot \begin{pmatrix} p_j\cos\theta_j & 0 \\ -ip_j\sin\theta_j & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \\ &= \begin{pmatrix} \cos(q_j\Delta x) & i\sin(q_j\Delta x) \\ ip_j\sin(q_j\Delta x + \theta_j) & p_j\cos(q_j\Delta x + \theta_j) \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{p_j\cos\theta_j} \cdot \begin{pmatrix} p_j\cos\theta_j & 0 \\ -ip_j\sin\theta_j & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \\ &= \begin{pmatrix} \cos(q_j\Delta x) + \sin(q_j\Delta x)\tan\theta_j & i\frac{\sin(q_j\Delta x)}{p_j\cos\theta_j} \\ ip_j\sin(q_j\Delta x + \theta_j) - ip_j\tan\theta_j\cos(q_j\Delta x + \theta_j) & \frac{\cos(q_j\Delta x + \theta_j)}{\cos\theta_j} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Vamos agora trabalhar o primeiro e o segundo elemento da primeira coluna da matriz dada em (3.55), assim para o primeiro elemento temos,

$$\cos(q_j\Delta x) + \sin(q_j\Delta x)\tan\theta_j = \frac{\cos(q_j\Delta x - \theta_j)}{\cos\theta_j}. \quad (3.56)$$

Para o segundo elemento,

$$\begin{aligned}
ip_j[\sin(q_j\Delta x) + \theta_j - \tan\theta_j \cos(q_j\Delta x + \theta_j)] &\Rightarrow \\
= \frac{ip_j}{\cos\theta_j}[\sin(q_j\Delta x)(\cos^2\theta_j + \sin^2\theta_j)] &\Rightarrow \\
= \frac{ip_j \sin(q_j\Delta x)}{\cos\theta_j}. &
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Portanto,

$$M_j(\Delta x, E, k_y) = \begin{pmatrix} \frac{\cos(q_j\Delta x - \theta_j)}{\cos\theta_j} & i \frac{\sin(q_j\Delta x)}{p_j \cos\theta_j} \\ i \frac{p_j \sin(q_j\Delta x)}{\cos\theta_j} & \frac{\cos(q_j\Delta x + \theta_j)}{\cos\theta_j} \end{pmatrix}. \tag{3.58}$$

Essa é a chamada matriz de transferência para o grafeno, que será usada para obter nossos resultados para a super-rede de grafeno finita. Temos que $p_j = l_j/k_j$ com $l_j = [(E - V_j) - \Delta_j]/\hbar v_j$. q_j é a componente x do vetor de onda e é dada por $q_j = \sqrt{k_j^2 + k_y^2}$ e θ_j é o ângulo entre a componente x e o vetor de onda, q_j , e o vetor de onda k_j e é dado por $\theta_j = \arcsin(k_y/k_j)$. A matriz (3.58) conecta as funções de onda $\phi(x)$ com $\phi(x + \Delta x)$ na barreira j 'ésima onde a velocidade de Fermi $v_F(x)$ é constante, a relação $\phi(x + \Delta x) = M_j(\Delta x, E, k_y)\phi(x)$ implica que $\phi(x + \Delta x) = M_j(\Delta x, E, k_y)\phi(x)$. No potencial j 'ésimo, ($x_{j-1} < x < x_j$), nós temos que as funções de onda $\phi_{A,B}(x)$ podem ser relacionadas com $\phi_{A,B}(x_0)$ por,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} = Q(\Delta x_j, E, k_y) \begin{pmatrix} \phi_A(x_0) \\ \phi_B(x_0) \end{pmatrix}, \tag{3.59}$$

onde $\Delta x_j = x - x_{j-1}$, $\phi_{A,B}(x_0)$ são funções de onda incidente final de toda a estrutura, e a matriz Q é dada por,

$$Q(\Delta x_j, E, k_y) = M_j(\Delta x_j, E, k_y) \prod_{i=1}^{j-1} M_i(w_i, E, k_y). \tag{3.60}$$

Aqui w_i é a largura da barreira j 'ésima e a matriz Q está relacionada com a transformação do transporte de partículas carregadas na direção x . Podemos conectar as funções de onda

$\phi_{A,B}$ em qualquer posição x no interior de cada potencial com a matriz de transferência. A função inicial de dois componentes, $\begin{pmatrix} \phi_A(0) \\ \phi_B(0) \end{pmatrix}$, pode ser determinada pelas condições de contorno. Nós assumimos que um elétron livre de energia E incide na região $x < 0$ com um ângulo de incidência θ_0 . Nesta região, a função de onda eletrônica é uma superposição de pacotes de onda incidentes e reflectivas, assim no fim da incidência, nós temos quem as funções $\phi_A(0)$ e $\phi_B(0)$, são dadas como se segue,

$$\phi_A(0) = \phi_i(E, k_y) + \phi_r(E, k_y) = (1 + r)\phi_i(E, k_y), \quad (3.61)$$

onde $\phi_i(E, k_y)$ é o pacote de onda incidente do elétron em $x = 0$. Com intuito de obtermos $\phi_B(0)$ no fim da incidência, usamos as equações (3.35), reescrevendo as duas componentes da base em termos dos pacotes de onda incidentes, então,

$$\varphi_1(0) = \phi_i(E, k_y) + \phi_r(E, k_y) = (1 + r)\phi_i(E, k_y), \quad (3.62)$$

$$\varphi_2(0) = \phi_i(E, k_y) - \phi_r(E, k_y) = (1 - r)\phi_i(E, k_y). \quad (3.63)$$

Usando a equação (3.36), nós obtemos,

$$\begin{aligned} &= i \sin \theta_0 [(1 + r)\phi_i(E, k_y)] + \cos \theta_0 [(1 - r)\phi_i(E, k_y)] \Rightarrow \\ &= \phi_i(E, k_y) [\cos \theta_0 + ir \sin \theta_0 - (r \cos \theta_0 - ir \sin \theta_0)] \Rightarrow \\ &= \phi_i(E, k_y) [e^{i\theta_0} - r e^{-i\theta_0}], \end{aligned} \quad (3.64)$$

onde θ_0 é o ângulo de incidência na região $x < 0$. Nas derivações anteriores, nós usamos a relação $\phi_r(E, k_y) = r\phi_i(E, k_y)$, onde r é o coeficiente de reflexão. Obviamente temos,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(0) \\ \phi_B(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + r \\ e^{i\theta_0} - r e^{-i\theta_0} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y). \quad (3.65)$$

De modo similar, para a saída final nós temos,

$$\phi_A(x_e) = t\phi_i(E, k_y), \quad (3.66)$$

e

$$\begin{aligned} \varphi_1(0) &= t\phi_i(E, k_y) \\ \varphi_2(0) &= -t\phi_i(E, k_y). \end{aligned} \quad (3.67)$$

Prosseguindo,

$$\begin{aligned} \phi_B(x_e) &= i \sin \theta_e \varphi_1(0) + \cos \theta_e \varphi_2(0) \Rightarrow \\ &= \phi_i(E, k_y) [i \sin \theta_e t - \cos \theta_e t] \Rightarrow \\ &= \phi_i(E, k_y) t e^{i\theta_e}. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Assim,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(e) \\ \phi_B(e) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ t e^{i\theta_e} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y), \quad (3.69)$$

assumindo que $\phi_A(x_e) = t\phi_i(E, k_y)$, onde t é o coeficiente de transmissão da função de onda eletrônica ao longo de toda a estrutura e θ_e representa o ângulo de saída ao final. Supondo que a matriz \mathbf{X} conecta a função de onda no final da entrada com Eq.(3.65) e que na saída acaba com a Eq.(3.69), podemos conectar a entrada e a saída das funções de onda na equação que se segue,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_e) \\ \phi_B(x_e) \end{pmatrix} = \mathbf{X} \begin{pmatrix} \phi_A(0) \\ \phi_B(0) \end{pmatrix}, \quad (3.70)$$

com,

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^{2N} M_j(w_j, E, k_y), \quad (3.71)$$

onde w_j é a largura da barreira j th. Substituindo as equações (3.65) e (3.69) em (3.70) temos,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} t \\ te^{i\theta_e} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y) &= \mathbf{X} \begin{pmatrix} 1+r \\ e^{i\theta_0} - re^{i\theta_0} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y) \Rightarrow \\ \begin{pmatrix} t \\ te^{i\theta_e} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+r \\ e^{i\theta_0} - re^{i\theta_0} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.72)$$

de onde tiramos,

$$t = (1+r)x_{11} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{12}. \quad (3.73)$$

$$te^{i\theta_e} = (1+r)x_{21} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{22}. \quad (3.74)$$

Resolvendo estas equações podemos encontrar os coeficientes de reflexão e transmissão. Para o coeficiente de reflexão substituímos (3.73) em (3.74), assim,

$$\begin{aligned} [(1+r)x_{11} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{12}]e^{i\theta_e} &= (1+r)x_{21} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{22} \Rightarrow \\ x_{11}e^{i\theta_e} + rx_{11}e^{i\theta_e} + x_{12}e^{i\theta_0}e^{i\theta_e} - x_{12}re^{-i\theta_0}e^{i\theta_e} &= x_{21} + rx_{21} + x_{22}e^{i\theta_0} - x_{22}re^{-i\theta_0} \Rightarrow \\ r(x_{11}e^{i\theta_e} - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21} + x_{22}e^{-i\theta_0}) &= (x_{22}e^{i\theta_0} - x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e+\theta_0)} + x_{21}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Portanto, o coeficiente de reflexão é,

$$r(E, k_y) = \frac{(x_{22}e^{i\theta_0} - x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e+\theta_0)} + x_{21}}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}}. \quad (3.76)$$

Para encontrar o coeficiente de transmissão vamos substituir (3.76) em (3.73), daí,

$$\begin{aligned}
t = x_{11} + & \frac{x_{11}x_{22}e^{i\theta_0} - x_{11}e^{i\theta_e}x_{11} - x_{12}x_{11}e^{i(\theta_e+\theta_0)} + x_{11}x_{21}}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} + \\
& + x_{12}e^{i\theta_0} - \frac{x_{12}x_{22} + x_{11}x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} + x_{12}e^{i\theta_e}x_{12} - x_{21}x_{12}e^{-i\theta_0}}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}}
\end{aligned} \tag{3.77}$$

cancelando alguns termos,

$$\begin{aligned}
t = & \frac{x_{22}x_{11}e^{-i\theta_0} + x_{11}x_{22}e^{i\theta_0} - x_{21}x_{12}e^{i\theta_0} - x_{21}x_{12}e^{-i\theta_0}}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \\
t = & \frac{x_{22}x_{11}(e^{i\theta_0} + e^{-i\theta_0}) - x_{21}x_{12}(e^{i\theta_0} + e^{-i\theta_0})}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}}
\end{aligned} \tag{3.78}$$

Tomando que $\cos \theta_0 = \frac{e^{i\theta_0} + e^{-i\theta_0}}{2}$ e vamos usar a propriedade em que $Det[\mathbf{X}] = 1$,

$$t = \frac{2 \cos \theta_0 (x_{22}x_{11} - x_{21}x_{12})}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \tag{3.79}$$

Finalmente obtemos o coeficiente de transmissão,

$$t(E, k_y) = \frac{2 \cos \theta_0}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \tag{3.80}$$

Com o coeficiente de transmissão, nós podemos agora investigar numericamente o transporte eletrônico de uma super-rede de grafeno finita.

3.2.2 Incidência Normal

Consideremos a incidência normal de elétrons na super-rede. Uma vez que os potenciais eletrostáticos são transparentes para elétrons com incidência normal devido ao tunelamento de Klein, consideraremos apenas uma modulação do gap de energia, mantendo assim o grafeno como um condutor, com $\Delta_A = 60$ meV e $\Delta_B = 0$, mantendo $V_A = V_B = 0$.

Na Fig. 3.2 (a) - (d) consideramos os casos periódicos para diferentes números de regiões. Pode-se ver que, para as energias abaixo do *gap* de energia na região A, ocorre o que é chamado de tunelamento ressonante, onde, para alguns valores específicos da energia de

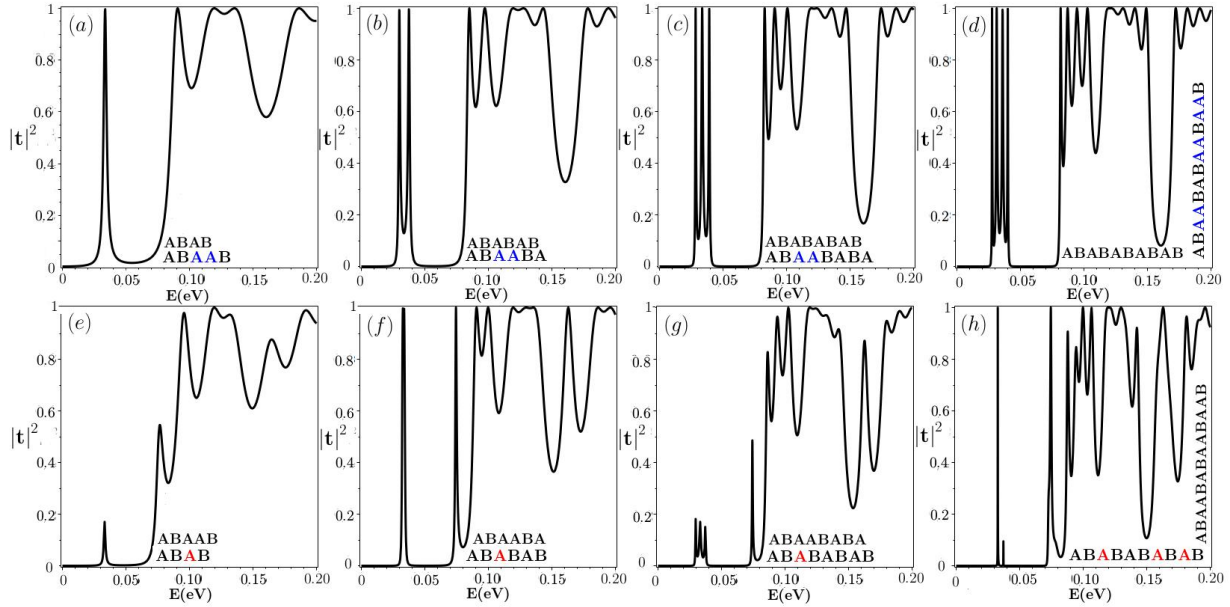


Figura 3.2: A transmissibilidade como função da energia incidente para o caso de incidência normal. As super-redes consideradas são mostrados na figura. As regiões escritas em preto, azul e vermelho possuem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.

incidência do elétron, a transmitância é igual a 1. Esses estados são chamados de estados quase-ligados. Quando o número de regiões aumenta, novos estados quase-ligados são criados próximos aos existentes. No limite de um número infinito de barreiras, esses estados de quase-ligados fechados tornam-se em mini-bandas de energia. Para energias superiores a 60 meV, observa-se um comportamento semelhante.

O caso quase-periódico para várias gerações de Fibonacci é considerado na Fig. 3.2 (e) - (h), onde consideramos os casos 4G, 3G com sequência dupla, 5G e 6G, respectivamente. Em contraste com o caso periódico, pode-se notar que, para algumas gerações Fibonacci, não há tunelamento ressonante, uma vez que a transmissão não excede 0.2 para energias abaixo de 60 meV, como pode ser visto na Fig. 3.2 (e) e (g). Para energias superiores ao *gap* de energia na região A, o comportamento da transmitância é semelhante ao caso periódico.

Olhando para a transmissão, verificamos que, no caso de uma incidência normal, é possível transformar uma super-rede de grafeno periódica em quase-periódica pela modulação da

velocidade de Fermi e vice-versa. Para entender como é possível, consideremos, por exemplo, a quarta geração Fibonacci dada pela super-rede $ABAAB$ e a super-rede periódica $ABAB$, que tem a transmitância dada pela Fig. 3.2 (e) e (a), respectivamente. Se mudarmos a velocidade de Fermi nas regiões sublinhadas de tal forma que o tempo que um elétron leva para atravessar as duas regiões sublinhadas na super-rede quase periódica seja o mesmo tempo para atravessar a região sublinhada no caso periódico, a transmitância destas duas super-redes de grafeno serão as mesmas. Assim, colocando $v_F = 2 \times 10^6 \text{ m/s}$ nas regiões sublinhadas do super-rede quase-periódica $ABAAB$ e mantendo $v_F = 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ nas outras regiões, a transmissão desta super-rede será dada pela Fig. 3.2 (a). Equivalentemente, fazendo $v_F = 0.5 \times 10^6 \text{ m/s}$ na região sublinhada da super-rede periódica $ABAB$ e mantendo $v_F = 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ nas outras regiões, a transmitância será dada pela Fig. 3.1 (e). Isto também acontece para as outras super-redes consideradas na Fig. 3.2. Ou seja, olhando para Fig. 3.2 vemos as descrições das regiões da super-rede, considerando na cor preta, temos o comportamento das super-redes sem a modulação da velocidade de Fermi, olhando para as descrições das super-redes que possuem regiões em azul e vermelho, temos o comportamento das super-redes com a modulação da velocidade de Fermi. Assim, as descrições da super-rede que possuem regiões A em azul está com velocidade de Fermi modificada ao dobro e assim elas conseguem reproduzir as mesmas características das super-redes que possuem as regiões em preto e assim a figura que representa as duas super-redes em cada caso é a mesma. O semelhante ocorre nas descrições da super-rede que possuem regiões A em vermelho, nessas a velocidade de Fermi está pela metade e assim elas conseguem reproduzir as mesmas super-redes com regiões em preto também, portanto, a figura que representa as duas super-redes também é a mesma para cada caso. Por isso escrevemos em uma mesma figura para (a) – (h) as super-redes com regiões em preto descrevendo as super-redes sem modulação da velocidade de Fermi, acompanhadas das super-redes com algumas regiões em azul e vermelho para cada caso específico de super-rede e de modulação.

Assim, para os elétrons com incidência normal na super-rede de grafeno finita, é possível transformar uma super-rede periódica em um super-rede quase-periódica e vice-versa. Vamos agora analisar se esse comportamento continua a ser o mesmo se a incidência for oblíqua.

3.2.3 Incidência Oblíqua

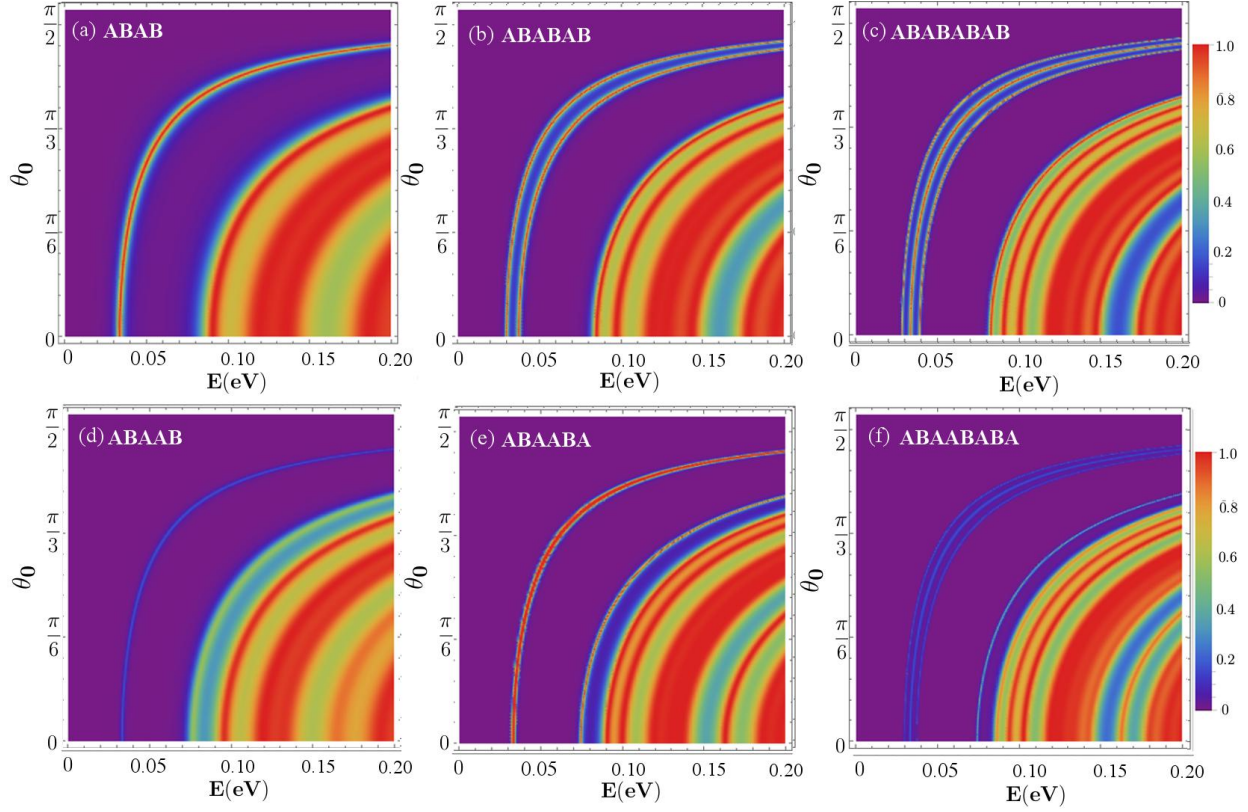


Figura 3.3: Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. As super-redes consideradas são mostradas na figura. A velocidade de Fermi aqui é igual em todas as regiões.

Para ver a influência do ângulo de incidência na transmitância, consideramos o gráfico de contorno mostrado na Fig. 3.3, onde consideramos alguns casos considerados na seção anterior. Pode-se notar que, para pequenos ângulos de incidência, recuperamos o caso de incidência normal. No entanto, à medida que o ângulo de incidência aumenta, os picos de transmissão são trazidos para maiores valores de energia até a transmitância se tornar igual a zero quando o ângulo de incidência está próximo à $\pi/2$ para o intervalo de energia considerado aqui. Isto acontece porque estamos considerando uma super-rede de grafeno unidimensional na direção x . Assim, olhando para a direção x , o aumento do ângulo de incidência é equivalente a ter um elétron com uma menor energia de incidência na super-rede, o que explica o comportamento mostrado na Fig. 3.3.

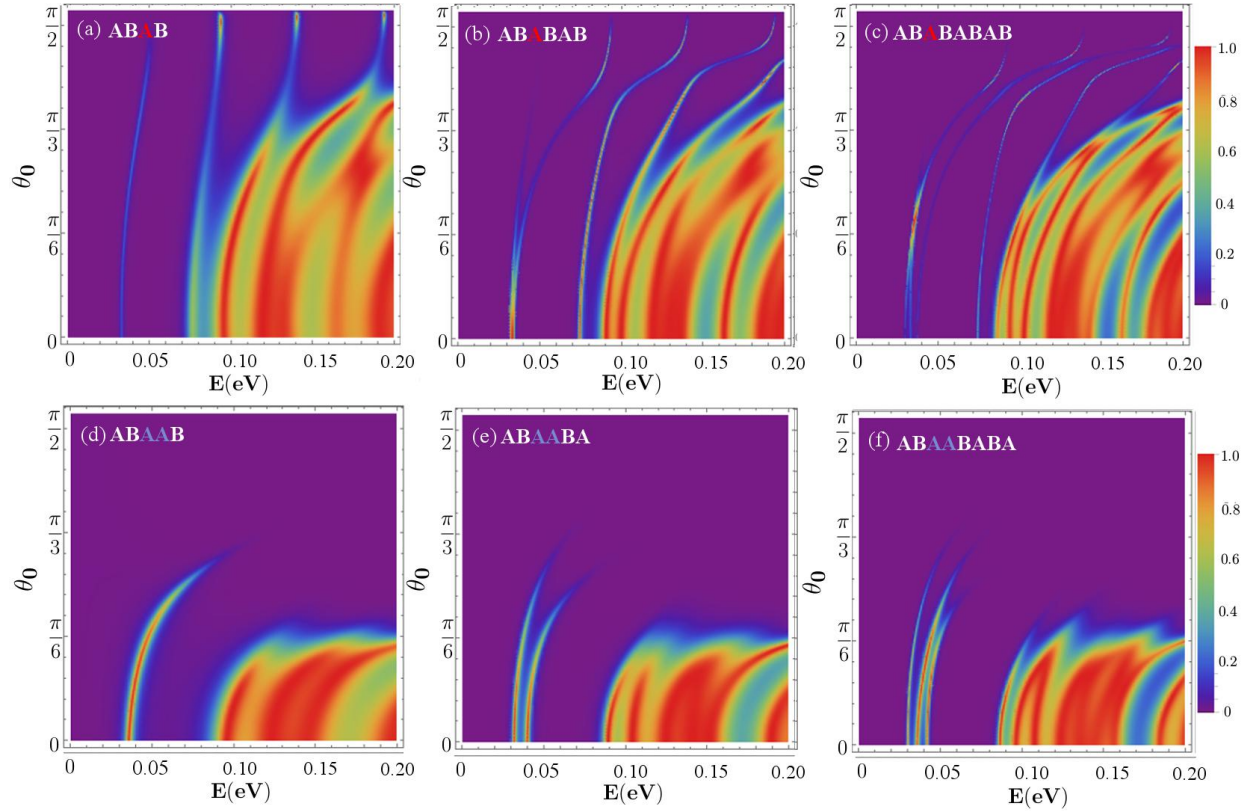


Figura 3.4: Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. As super-redes consideradas são mostrados na figura. As regiões escritas em branco, azul e vermelho tem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.

Na Fig. 3.4 consideramos as mesmas modificações na velocidade de Fermi que consideramos no caso de incidência normal, a fim de verificar se é possível transformar as super-redes periódicas e quase-periódicas uma em outra. Podemos ver isso, para valores pequenos de θ , Fig. 3.4 (a) - (c) são muito semelhantes à Fig. 3.3 (d) - (f). No entanto, quando θ aumenta (para ângulos de incidência superiores a $\approx 23^\circ$), a similaridade é perdida, revelando que só é possível transformar uma super-rede de grafeno periódica em uma quase-periódica por uma modulação de velocidade de Fermi para valores pequenos do ângulo de incidência. O mesmo ocorre quando tentamos transformar uma super-rede quase-periódica para uma super-rede de grafeno periódica, como pode ser visto comparando a Fig. 3.4 (d) - (f) com a Fig. 3.3 (a) - (c).

Embora não seja possível transformar as super-redes de grafeno para valores mais altos do ângulo de incidência, a Fig. 3.4 revela novos recursos do sistema. A modificação na velocidade de Fermi feita aqui torna a transmitância igual a 1 para alguns valores de energia mesmo para ângulos de incidência próximos de 90° para uma super-rede de grafeno periódica, como pode ser visto na Fig. 3.4 (a) - (c). Em contraste, para o caso quase periódico, a transmissão é zero com rapidez, quando o ângulo de incidência é maior do que $\approx 23^\circ$, que é mostrado na Fig. 3.4 (d) - (f). Assim, uma modulação da velocidade de Fermi pode ser usada para direcionar elétrons com ângulos de incidência mais altos ou para evitar que eles sejam filtrados pela super-rede de grafeno. Particularmente consideramos também outro caso para a incidência oblíqua, onde agora $\Delta_A = \Delta_B = 0$ e fazemos $V_A = 60$ meV e $V_B = 0$. Dessa forma criamos assim barreiras de potenciais.

Podemos ver na Fig. 3.5 considerando a distribuição de ressonância induzida por um potencial eletrostático periódico e quase-periódico, que no caso de barreiras de potenciais para pequenos valores de energia, onde aqui podemos observar que são energias menores que 20meV, a transmitividade pode ser igual a 1, mesmo quando o ângulo de incidência é próximo de 90° . Para maiores valores de energia (até 200 meV), os valores de energia onde a transmitividade é igual a 1 diminuem quando o ângulo de incidência aumenta.

Na Fig. 3.6 é considerada as mesmas modificações na velocidade de Fermi que fizemos para os casos anteriores. Nós buscamos aqui também transformar as super-redes periódicas e quase-periódicas uma em outra modulando a velocidade de Fermi. O comportamento observado é semelhante ao do caso anterior de incidência oblíqua, já que para valores pequenos de θ esse caso de barreira de potencial apresenta semelhanças entre si, podemos ver isso na Fig. 3.6 (a) - (c) comparando com a Fig. 3.5 (d) - (f). Porém, se θ aumenta a similaridade também vai sendo perdida e novamente não conseguimos a transformação de uma super-rede de grafeno periódica em uma quase-periódica modulando a velocidade de Fermi quando θ vai para ângulos maiores. Isso se repete para o caso quase-periódico, visto na Fig. 3.6 (d) - (f) comparada com a Fig. 3.5 (a) - (c).

É importante dizer que o comportamento aqui obtido é o mesmo para as gerações maiores de Fibonacci. Esta é a razão para considerar apenas três super-redes diferentes no caso oblíquo.

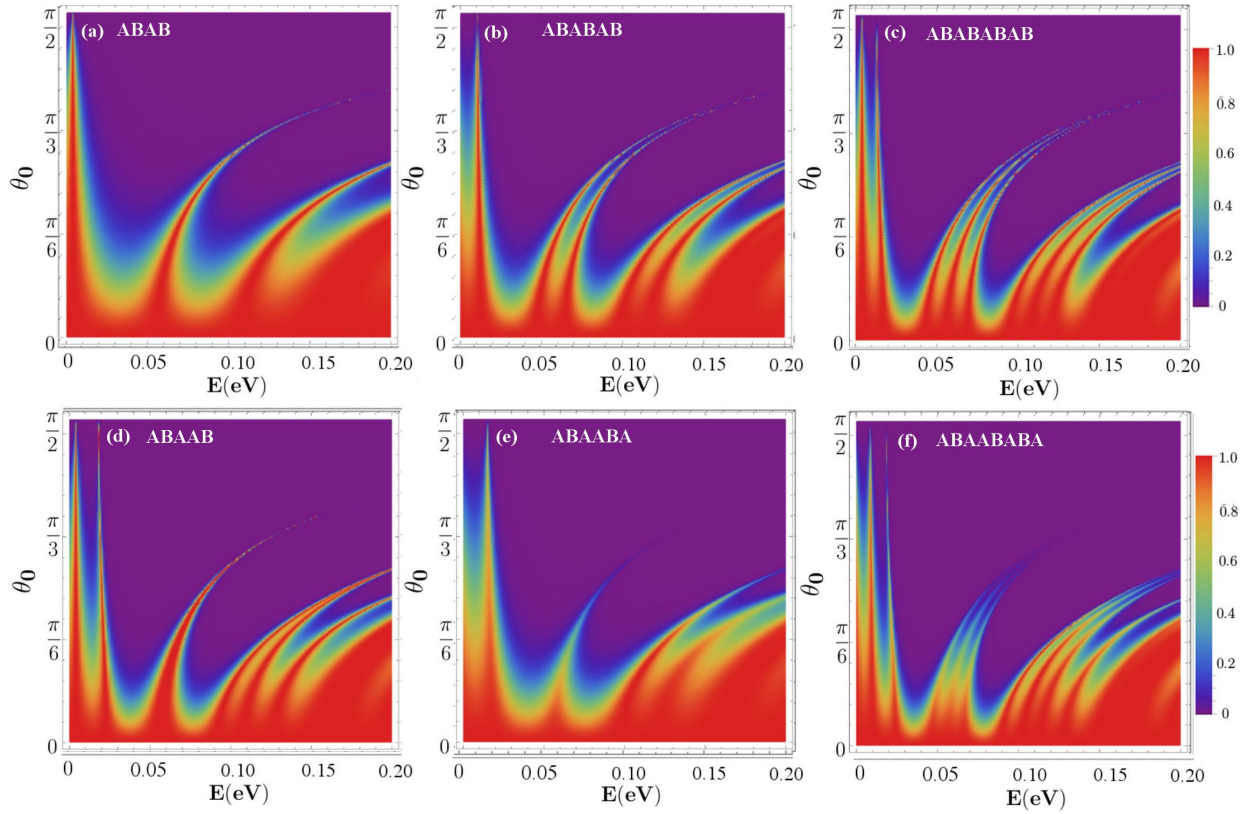


Figura 3.5: Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. Nesse gráfico consideramos que $\Delta_A = \Delta_B = 0$, $V_A = 60$ meV e $V_B = 0$. As super-redes consideradas são mostradas na figura. A velocidade de Fermi aqui é igual em todas as regiões.

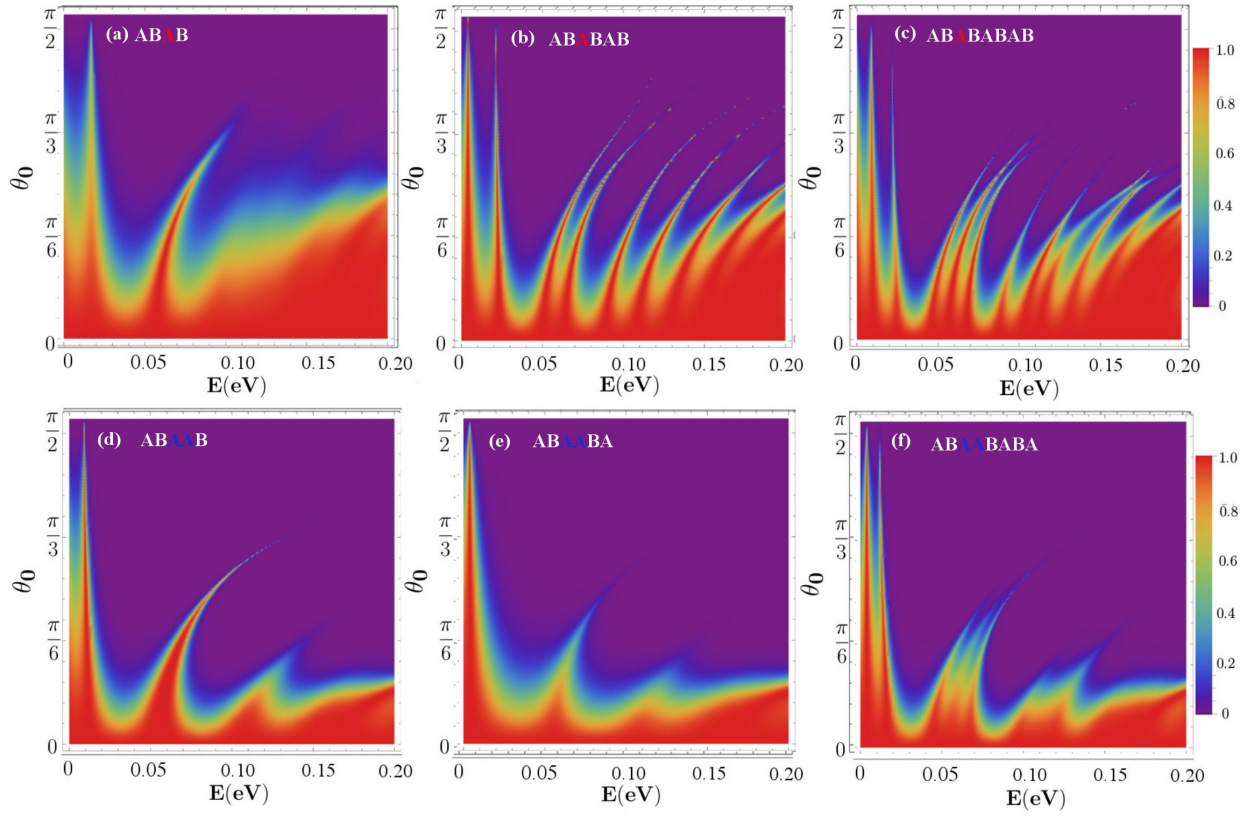


Figura 3.6: Gráfico de contorno da transmitividade em função da energia e do ângulo de incidência. Nesse gráfico consideramos que $\Delta_A = \Delta_B = 0$, $V_A = 60$ meV e $V_B = 0$. As super-redes consideradas são mostrados na figura. As regiões escritas em branco, azul e vermelho tem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.

Perspectivas Gerais

Finalizamos assim este capítulo de estudo das super-redes de grafeno finitas, trataremos a seguir as super-redes de grafeno infinitas para os mesmos casos considerados neste capítulo.

Capítulo 4

Super-Redes de Grafeno Infinitas

Neste capítulo continuaremos o nosso estudo sobre as super-redes de grafeno. Aqui analisaremos agora a super-rede infinita tendo como objetivo analisar a estrutura eletrônica destas super-redes. Começamos pelo modelo que consiste na solução do hamiltoniano de Dirac para o grafeno e através da expansão da solução obtemos a matriz que descreve as regiões da super-rede. A partir do teorema de Bloch conseguimos encontrar a relação de dispersão dada de forma implícita, para analisar nossas super-redes numericamente.

4.1 Super-Rede de Grafeno Infinita

4.1.1 O Modelo

Para podermos obter a relação de dispersão em uma super-rede infinita de grafeno, vamos obter a solução da equação (3.16), essa equação é uma Equação Diferencial Ordinária de primeira ordem. Como sempre para equações lineares, a solução geral da equação diferencial considerada pode ser obtida somando à uma solução particular a solução geral da equação homogênea associada, podemos ver a equação (3.16) é da forma,

$$i\frac{d\phi}{dx} - P(x)\phi = 0. \tag{4.1}$$

Na vizinhança de pontos $x_0 \in J \subset \mathbb{R}$ onde $\phi(x_0) \neq 0$, podemos verificar que $d\phi/dx/\phi =$

$-iP(x)$ e, portanto, $d/dx(\ln |y|) = -iP(x)$, onde que $i \ln |\phi(x)| = -i \int P(x)dx + C$, onde $C \in \mathbb{R}$ é uma constante qualquer, e portanto,

$$\phi(x) = Ke^{-i \int P(x)dx}, \quad (4.2)$$

onde $K \neq 0$ é uma constante arbitrária. Está é a solução geral da equação num intervalo onde $\phi(x) \neq 0$. Conclui-se que se y é diferente de zero num ponto $x_0 \in J$, então $K \neq 0$ e a fórmula define uma função diferente de zero e da classe $C^{(1)}$ ¹ em J . Por outro lado a função identicamente nula é solução da equação homogênea inicial, pelo que a única solução que se anula num ponto de J anula-se em todos. Ambos os casos ficam abrangidos na fórmula que descrevemos obtida considerando K uma constante arbitrária em \mathbb{R} . Note-se que neste caso o intervalo máximo de definição de cada solução é o intervalo de definição e continuidade da função e que a equação tem infinitas soluções uma para cada valor de $K \in \mathbb{R}$.

Em muitas aplicações, e esse é o nosso caso, não interessa obter todas as soluções, mas sim uma solução específica que tenha um certo valor ϕ_0 num instante $x = x_0$. Tem-se, então um problema de valor inicial,

$$i \frac{d\phi}{dx} - P(x)\phi = 0, \phi(x_0) = \phi_0. \quad (4.3)$$

Dividindo por y e integrando de x_0 a x no caso $\phi_0 \neq 0$, e tendo em conta que para $\phi_0 = 0$ a solução é a função identicamente nula, obtém-se uma única solução para este problema de valor inicial,

$$\phi(x) = \phi_0 e^{-i \int_{x_0}^x P(x')dx'}. \quad (4.4)$$

Logo a solução da equação (3.16) é,

¹Dado $S \in \mathbb{R}^n$ e $k \in \mathbb{N}$, adota-se a notação usual $C^k(S; \mathbb{R}^m)$ para o conjunto das funções definidas ou extensíveis a um subconjunto aberto de \mathbb{R}^n que contém S cujas derivadas até à ordem k são contínuas em S . Abrevia-se $C^k(S) = C^k(S; \mathbb{R})$. Estas notações com $k = \infty$ designam os correspondentes conjuntos de funções indefinidamente diferenciáveis em S , e com $k = 0$ designam os correspondentes conjuntos de funções contínuas em S .

$$\phi(x) = \mathcal{P} \exp \left(-i \int_{x_0}^x dx' P(x') \right) \phi(x_0), \quad (4.5)$$

onde \mathcal{P} é o operador de ordem de caminho, que coloca valores menores de x para a direita [106]-[107]. Como $P(x)$ é uma função constante por partes, se x e x_0 pertencem à região homogênea do espaço, a solução acima pode ser simplificada como,

$$\phi(x) = \Lambda(x - x_0) \phi(x_0), \quad (4.6)$$

onde $\Lambda(x - x_0) = \exp[-i(x - x_0)P(x)]$. Expandindo a exponencial, podemos escrever,

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x. \quad (4.7)$$

Portanto para o nosso caso vamos multiplicar $(x - x_0)$ pela matriz $P(x)$ dada na equação (3.17), assim,

$$P(x) = \begin{pmatrix} i(x - x_0)k_y & (x - x_0) \frac{-E+V(x)+\Delta(x)}{\hbar v_F(x)} \\ (x - x_0) \frac{-E+V(x)-\Delta(x)}{\hbar v_F(x)} & -i(x - x_0)k_y \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Portanto teremos assim $\exp[-iP(x)]$, onde expandindo teremos que $\exp[-iP(x)] = \cos[P(x)] + i \sin[P(x)]$, dessa forma a expansão que queremos é,

$$I - \frac{P^2}{2!} + \frac{P^4}{4!} + \dots + i \left[P - \frac{P^3}{3!} + \frac{P^5}{5!} + \dots \right], \quad (4.9)$$

onde I é a matriz identidade e P^n com $n = 2, \dots, \infty$ é a matriz $P(x)$ multiplicada por ela mesma n vezes. Para os nossos cálculos vamos calcular as matrizes de $n = 2$ até $n = 5$, apenas para mostrar que o resultando final resultará em uma expansão de senos e cossenos, o que significa que não estamos truncando a série, apenas considerando alguns primeiros termos nessa demonstração, sendo assim, a série continua infinitamente para $n = \infty$. Assim,

$$\begin{aligned}
P^2 &= \begin{pmatrix} \frac{(-E+V-\Delta)(-E+V+\Delta)(x-x_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - (x-x_0)^2 k_y^2 & 0 \\ 0 & \frac{(-E+V-\Delta)(-E+V+\Delta)(x-x_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} \end{pmatrix} \Rightarrow \\
P^2 &= \begin{pmatrix} (x-x_0)^2 \left[\frac{[E-V]^2 - \Delta^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2 \right] & 0 \\ 0 & (x-x_0)^2 \left[\frac{[E-V]^2 - \Delta^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2 \right] \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Chamando $(x-x_0) = \alpha/k(x)$ e $k(x) = ([E-V(x)]^2 - \Delta(x)^2)/\hbar^2 v_F^2(x) - k_y^2)^{1/2}$ temos que,

$$P^2 = \begin{pmatrix} \frac{\alpha^2}{k^2} k^2 & 0 \\ 0 & \frac{\alpha^2}{k^2} k^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha^2 & 0 \\ 0 & \alpha^2 \end{pmatrix}. \tag{4.11}$$

Prosseguindo para os demais produtos da matriz $P(x)$ de maneira análoga, escreveremos somente o produto final e rearranjaremos os termos, logo,

$$\begin{aligned}
P^3 &= \begin{pmatrix} ik_y \left(\frac{([E-V]^2 - \Delta^2)(x-x_0)^3}{\hbar^2 v_F^2} - (x-x_0)^3 k_y^2 \right) & \frac{(-E+V+\Delta) \left(\frac{([E-V]^2 - \Delta^2)(x-x_0)^3}{\hbar^2 v_F^2} - (x-x_0)^3 k_y^2 \right)}{\hbar v_F} \\ \frac{(-E+V-\Delta) \left(\frac{([E-V]^2 - \Delta^2)(x-x_0)^3}{\hbar^2 v_F^2} - (x-x_0)^3 k_y^2 \right)}{\hbar v_F} & -ik_y \left(\frac{([E-V]^2 - \Delta^2)(x-x_0)^3}{\hbar^2 v_F^2} - (x-x_0)^3 k_y^2 \right) \end{pmatrix} \Rightarrow \\
P^3 &= \begin{pmatrix} i(x-x_0)^3 k_y k^2 & \frac{(x-x_0)^3 (-E+V+\Delta) k^2}{\hbar v_F} \\ \frac{(x-x_0)^3 (-E+V-\Delta) k^2}{\hbar v_F} & -i(x-x_0)^3 k_y k^2 \end{pmatrix} \Rightarrow \\
P^3 &= \begin{pmatrix} i\alpha^3 \frac{k_y}{k} & \alpha^3 \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k} \\ \alpha^3 \frac{(-E+V-\Delta)}{\hbar v_F k} & -i\alpha^3 \frac{k_y}{k} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Para P^4 e P^5 as matrizes ficam com os termos grandes, então faremos as multiplicações e o rearranjo termo a termo da matriz e no final montaremos a matriz correspondente, sempre considerando as definições de $(x-x_0)$ e $k(x)$ que definimos anteriormente. Vamos começar com P^4 , para o primeiro termo da matriz na primeira coluna temos,

$$\begin{aligned}
P_{11} &= \frac{(-E + V + \Delta)(-E + V - \Delta)(x - x_0)^2 \left(\frac{(-E+V+\Delta)(-E+V-\Delta)(x-x_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - (x - x_0)^2 k_y^2 \right)}{\hbar^2 v_F^2} \\
&\quad - (x - x_0)^2 k_y^2 \left(\frac{(-E + V + \Delta)(-E + V - \Delta)(x - x_0)^2}{\hbar^2 v_F^2} - (x - x_0)^2 k_y^2 \right) \Rightarrow (4.13) \\
P_{11} &= (x - x_0)^4 k^2 \left(\frac{([E - V]^2 - \Delta^2)}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2 \right) \Rightarrow \\
P_{11} &= (x - x_0)^4 k^4 = \alpha^4.
\end{aligned}$$

O primeiro termo da segunda coluna da matriz é zero, assim,

$$P_{12} = 0. \quad (4.14)$$

O segundo termo da primeira coluna da matriz também é zero, assim,

$$P_{21} = 0. \quad (4.15)$$

O segundo termo da segunda coluna da matriz é o mesmo que o primeiro termo da primeira coluna, assim,

$$P_{22} = \alpha^4. \quad (4.16)$$

Portanto a matriz P^4 é,

$$P^4 = \begin{pmatrix} \alpha^4 & 0 \\ 0 & \alpha^4 \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Vamos agora calcular P^5 faremos novamente termo a termo separado e depois montaremos a matriz final. Para o primeiro termo da primeira coluna da matriz temos,

$$\begin{aligned}
P_{11} &= i(x - x_0)^5 k_y k^2 \left(\frac{([E - V]^2 - \Delta^2)}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2 \right) \Rightarrow \\
P_{11} &= i(x - x_0)^5 k_y k^4 = i\alpha^5 \frac{k_y}{k}.
\end{aligned} \quad (4.18)$$

Para o primeiro termo da segunda coluna da matriz façamos,

$$P_{12} = (-E + V + \Delta)(x - x_0) \cdot \left(\frac{(x - x_0)^4 k^2 \left(\frac{[E-V]^2 - \Delta^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2 \right)}{\hbar v_F} \right) \Rightarrow \quad (4.19)$$

$$P_{12} = (x - x_0)^5 k^4 \cdot \left(\frac{(-E + V + \Delta)}{\hbar v_F k} \right) = \alpha^5 \frac{(-E + V + \Delta)}{\hbar v_F k}.$$

De maneira análoga que fizemos para o primeiro termo da segunda coluna da matriz, fazemos para achar o segundo termo da primeira coluna da matriz e assim,

$$P_{21} = \alpha^5 \frac{(-E + V - \Delta)}{\hbar v_F k}. \quad (4.20)$$

De maneira análoga que fizemos para o primeiro termo da primeira coluna da matriz, fazemos para achar o segundo termo da segunda coluna da matriz e assim,

$$P_{22} = -i\alpha^5 \frac{k_y}{k}. \quad (4.21)$$

E assim a matriz P^5 é,

$$P^5 = \begin{pmatrix} i\alpha^5 \frac{k_y}{k} & \alpha^5 \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k} \\ \alpha^5 \frac{(-E+V-\Delta)}{\hbar v_F k} & -i\alpha^5 \frac{k_y}{k} \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

E temos que a matriz P que é a equação (4.8),

$$P(x) = \begin{pmatrix} i\alpha \frac{k_y}{k} & \alpha \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k} \\ \alpha \frac{(-E+V-\Delta)}{\hbar v_F k} & -i\alpha k_y \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Agora que encontramos essas matrizes vamos voltar para a expansão dada na equação (4.9) e substituir, assim temos,

$$\Lambda(x - x_0) = \exp[-iP(x)] = I - \frac{P^2}{2!} + \frac{P^4}{4!} + \dots - i\left[P - \frac{P^3}{3!} + \frac{P^5}{5!} + \dots\right]. \quad (4.24)$$

Logo,

$$\begin{aligned} \Lambda(x - x_0) = & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2!} \cdot \begin{pmatrix} \alpha^2 & 0 \\ 0 & \alpha^2 \end{pmatrix} + \frac{1}{4!} \cdot \begin{pmatrix} \alpha^4 & 0 \\ 0 & \alpha^4 \end{pmatrix} + \dots - i \left[\begin{pmatrix} i\alpha \frac{k_y}{k} & \alpha \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k} \\ \alpha \frac{(-E+V-\Delta)}{\hbar v_F k} & -i\alpha k_y \end{pmatrix} - \right. \\ & \left. + \frac{1}{3!} \cdot \begin{pmatrix} i\alpha^3 \frac{k_y}{k} & \alpha^3 \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k} \\ \alpha^3 \frac{(-E+V-\Delta)}{\hbar v_F k} & -i\alpha^3 \frac{k_y}{k} \end{pmatrix} + \frac{1}{5!} \cdot \begin{pmatrix} i\alpha^5 \frac{k_y}{k} & \alpha^5 \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k} \\ \alpha^5 \frac{(-E+V-\Delta)}{\hbar v_F k} & -i\alpha^5 \frac{k_y}{k} \end{pmatrix} + \dots \right]. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Vamos trabalhar a soma dos termos dessas matrizes separadamente e no final montamos a matriz final, dessa forma somando os primeiros termos das primeiras colunas temos,

$$\begin{aligned} \Lambda_{11} = 1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} + \dots + \alpha \frac{k_y}{k} - \frac{\alpha^3 k_y}{3! k} + \frac{\alpha^5 k_y}{5! k} + \dots \Rightarrow \\ \Lambda_{11} = \cos \alpha + \sin \alpha \frac{k_y}{k}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Somando agora os primeiros termos das segundas colunas temos,

$$\begin{aligned} \Lambda_{12} = -i\alpha \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k} - i \frac{\alpha^3 (-E+V+\Delta)}{3! \hbar v_F k} + i \frac{\alpha^5 (-E+V+\Delta)}{5! \hbar v_F k} + \dots \Rightarrow \\ \Lambda_{12} = -i \sin \alpha \frac{(-E+V+\Delta)}{\hbar v_F k}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

De forma análoga somando os segundos termos das primeiras colunas das matrizes temos,

$$\Lambda_{21} = -i \sin \alpha \frac{(-E+V-\Delta)}{\hbar v_F k}. \quad (4.28)$$

De forma análoga somando os segundos termos das segundas colunas das matrizes temos,

$$\Lambda_{22} = \cos \alpha - \sin \alpha \frac{k_y}{k}. \quad (4.29)$$

Portanto,

$$\Lambda(x - x_0) = \begin{pmatrix} \cos \alpha + \sin \alpha \frac{k_y}{k(x)} & -i \sin \alpha \frac{(-E+V(x)+\Delta(x))}{\hbar v_F(x)k(x)} \\ -i \sin \alpha \frac{(-E+V(x)-\Delta(x))}{\hbar v_F(x)k(x)} & \cos \alpha - \sin \alpha \frac{k_y}{k(x)} \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

aqui $\alpha = (x - x_0)k(x)$, com $k(x) = [(E - V(x))^2 - \Delta(x)^2]/\hbar^2 v_F^2(x) - k_y^2)^{1/2}$. Os próximos passos no cálculo da relação de dispersão dependem da super-rede. Vamos mostrar aqui, por exemplo, o cálculo para o caso periódico, onde a célula unitária é composta por uma região A e uma região B. A função de onda satisfaz o teorema de Bloch, assim $\psi(w_A + w_B) = \exp[ik_x(w_A + w_B)]\psi_0$, onde k_x é o vetor de onda de Bloch. Da equação (4.6) podemos escrever $\phi(w_A + w_B) = \Lambda(w_A + w_B)\phi(0)$, que é equivalente a $\psi(w_A + w_B) = \Lambda(w_A + w_B)\psi(0)$, onde $\Lambda(w_A + w_B) = \Lambda(w_B)\Lambda(w_A)$. Comparando isto com o teorema de Bloch pode-se ver,

$$\det[\Lambda(w_A + w_B) - \exp[ik_x(w_A + w_B)]] = 0, \quad (4.31)$$

Que produz a relação,

$$2 \cos k_x(w_A + w_B) = \text{Tr}[\Lambda(w_A + w_B)]. \quad (4.32)$$

Essa equação nos dá a relação de dispersão, dada implicitamente como,

$$2 \cos k_x(w_A + w_B) = \text{Tr}[\Lambda(w_A + w_B)] = \text{Tr}[\Lambda(w_B)\Lambda(w_A)]. \quad (4.33)$$

Temos que,

$$\Lambda(w_A) = \begin{pmatrix} \cos(ak_1) + \sin(ak_1)\frac{k_y}{k_1} & -i \sin(ak_1)\frac{(-E+V_1+\Delta_1)}{\hbar v_1 k_1} \\ -i \sin(ak_1)\frac{(-E+V_1-\Delta_1)}{\hbar v_1 k_1} & \cos(ak_1) - \sin(ak_1)\frac{k_y}{k_1} \end{pmatrix}, \quad (4.34)$$

e

$$\Lambda(w_B) = \begin{pmatrix} \cos(ak_2) + \sin(ak_2)\frac{k_y}{k_2} & -i \sin(ak_2)\frac{(-E+V_2+\Delta_2)}{\hbar v_2 k_2} \\ -i \sin(ak_2)\frac{(-E+V_2-\Delta_2)}{\hbar v_1 k_2} & \cos(ak_2) - \sin(ak_2)\frac{k_y}{k_2} \end{pmatrix}, \quad (4.35)$$

Vamos fazer $\Lambda(w_B)\Lambda(w_A)$, como na multiplicação os termos irão ficar grandes, faremos termo a termo separadamente, dessa forma,

$$\begin{aligned} \Lambda(w_B)\Lambda(w_A)_{11} &= \cos(bk_2) \cos(ak_1) + \frac{k_y}{k_1} \sin(ak_1) \cos(bk_2) + \cos(ak_1) \frac{k_y}{k_2} \sin(bk_2) + \\ &+ \frac{k_y^2}{k_1 k_2} \sin(bk_2) \sin(ak_1) - \sin(ak_1) \sin(bk_2) \frac{(-E + V_1 - \Delta_1)(-E + V_2 + \Delta_2)}{\hbar^2 v_1 v_2 k_1 k_2}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

e

$$\begin{aligned} \Lambda(w_B)\Lambda(w_A)_{12} &= -i \sin(ak_1) \cos(bk_2) \frac{(-E + V_1 + \Delta_1)}{\hbar v_1 k_1} - i \frac{k_y}{k_2} \sin(ak_1) \sin(bk_2) \frac{(-E + V_1 + \Delta_1)}{\hbar v_1 k_1} - \\ &+ i \sin(bk_2) \cos(ak_1) \frac{(-E + V_2 + \Delta_2)}{\hbar v_2 k_2} + i \sin(bk_2) \frac{k_y}{k_1} \sin(ak_1) \frac{(-E + V_2 + \Delta_2)}{\hbar v_2 k_2}, \end{aligned} \quad (4.37)$$

e

$$\begin{aligned} \Lambda(w_B)\Lambda(w_A)_{21} &= -i \sin(ak_1) \cos(bk_2) \frac{(-E + V_1 - \Delta_1)}{\hbar v_1 k_1} + i \frac{k_y}{k_2} \sin(ak_1) \sin(bk_2) \frac{(-E + V_1 - \Delta_1)}{\hbar v_1 k_1} - \\ &+ i \sin(bk_2) \cos(ak_1) \frac{(-E + V_2 - \Delta_2)}{\hbar v_2 k_2} - i \sin(bk_2) \frac{k_y}{k_1} \sin(ak_1) \frac{(-E + V_2 - \Delta_2)}{\hbar v_2 k_2}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

e

$$\begin{aligned} \Lambda(w_B)\Lambda(w_A)_{22} &= \cos(ak_1) \cos(bk_2) - \frac{k_y}{k_1} \sin(ak_1) \cos(bk_2) - \cos(ak_1) \frac{k_y}{k_2} \sin(bk_2) + \\ &+ \frac{k_y^2}{k_1 k_2} \sin(bk_2) \sin(ak_1) - \sin(ak_1) \sin(bk_2) \frac{(-E + V_1 + \Delta_1)(-E + V_2 - \Delta_2)}{\hbar^2 v_1 v_2 k_1 k_2}, \end{aligned} \quad (4.39)$$

Como estamos procurando o Traço da matriz, por definição somaremos os termos da diagonal principal, ou seja, $\Lambda(w_A + w_B)_{12} + \Lambda(w_A + w_B)_{22}$, então,

$$\begin{aligned} &= \cos(bk_2) \cos(ak_1) + \frac{k_y}{k_1} \sin(ak_1) \cos(bk_2) + \cos(ak_1) \frac{k_y}{k_2} \sin(bk_2) + \\ &+ \frac{k_y^2}{k_1 k_2} \sin(bk_2) \sin(ak_1) - \sin(ak_1) \sin(bk_2) \frac{(-E + V_1 - \Delta_1)(-E + V_2 + \Delta_2)}{\hbar^2 v_1 v_2 k_1 k_2} + \\ &+ \cos(ak_1) \cos(bk_2) - \frac{k_y}{k_1} \sin(ak_1) \cos(bk_2) - \cos(ak_1) \frac{k_y}{k_2} \sin(bk_2) + \\ &+ \frac{k_y^2}{k_1 k_2} \sin(bk_2) \sin(ak_1) - \sin(ak_1) \sin(bk_2) \frac{(-E + V_1 + \Delta_1)(-E + V_2 - \Delta_2)}{\hbar^2 v_1 v_2 k_1 k_2} \\ &= 2 \cos(ak_1) \cos(bk_2) + 2 \left[\frac{k_y^2}{k_1 k_2} + \left(\frac{-[E - V_1]^2 + \Delta_1 \Delta_2}{\hbar^2 k_1 k_2 v_1 v_2} \right) \right] \sin(ak_1) \sin(bk_2). \end{aligned} \quad (4.40)$$

Como $2 \cos k_x(w_A + w_B) = \text{Tr}[\Lambda(w_A + w_B)] = \text{Tr}[\Lambda(w_B)\Lambda(w_A)]$ a equação fica,

$$\begin{aligned} \cos k_x(w_A + w_B) &= \cos(ak_1) \cos(bk_2) + \left[\frac{k_y^2}{k_1 k_2} + \left(\frac{-[E - V_1]^2 + \Delta_1 \Delta_2}{\hbar^2 k_1 k_2 v_1 v_2} \right) \right] \sin(ak_1) \sin(bk_2) \\ &= \cos(ak_1) \cos(bk_2) + \left[\left(\frac{k_y^2 \hbar^2 v_1 v_2 - [E - V_1]^2 + \Delta_1 \Delta_2}{\hbar^2 k_1 k_2 v_1 v_2} \right) \right] \sin(ak_1) \sin(bk_2), \end{aligned} \quad (4.41)$$

onde $k_1 = ([[E - V_1]^2 - \Delta_1]/\hbar^2 v_1 - k_y^2)^{1/2}$ e $k_2 = ([[E - V_2]^2 - \Delta_2]/\hbar^2 v_2 - k_y^2)^{1/2}$. Para a terceira geração de Fibonacci, onde a célula unitária é composta pelas regiões ABA, a equação (4.32) torna-se,

$$2 \cos k_x(2w_A + w_B) = \text{Tr}[\Lambda(w_A + w_B + w_A)]. \quad (4.42)$$

O mesmo pode ser feito para todas as gerações de Fibonacci. Com a relação de dispersão, agora podemos analisar a estrutura eletrônica das super-redes de grafeno. Um dos nossos interesses aqui é investigar como a localização do ponto Dirac do grafeno muda com a modulação da velocidade de Fermi. Assim, consideraremos que $\Delta_A = \Delta_B = 0$ e que a super-rede é criada por um potencial eletrostático constante por partes com $V_A = 50$ meV e $V_B = 0$.

4.1.2 Estrutura Eletrônica para $k_y = 0$

Com base nos resultados obtidos para as super-redes de grafeno finitas, consideraremos primeiro $k_y = 0$, o que é equivalente ao caso de incidência normal considerado no capítulo anterior.

Isso está feito na Fig. 4.1, onde traçamos a energia como uma função de k_x para a primeira zona de Brillouin. Na figura (4.1) de (a) a (d) consideramos super-redes periódicas de grafeno com a célula unitária composta pelas regiões AB, ABAB e ABABAB, respectivamente. Consideramos células de unidades diferentes porque tentaremos transformar cada uma dessas super-redes em um super-rede quase-periódica específica. Na Fig. 4.1 (a) pode-se ver a localização em energia do cone de Dirac, que é dado por $E = V_A/2$. Para os outros casos periódicos, a localização do cone de Dirac permanece a mesma, mas os níveis de energia se aproximaram um do outro como consequência do aumento do tamanho da célula unitária.

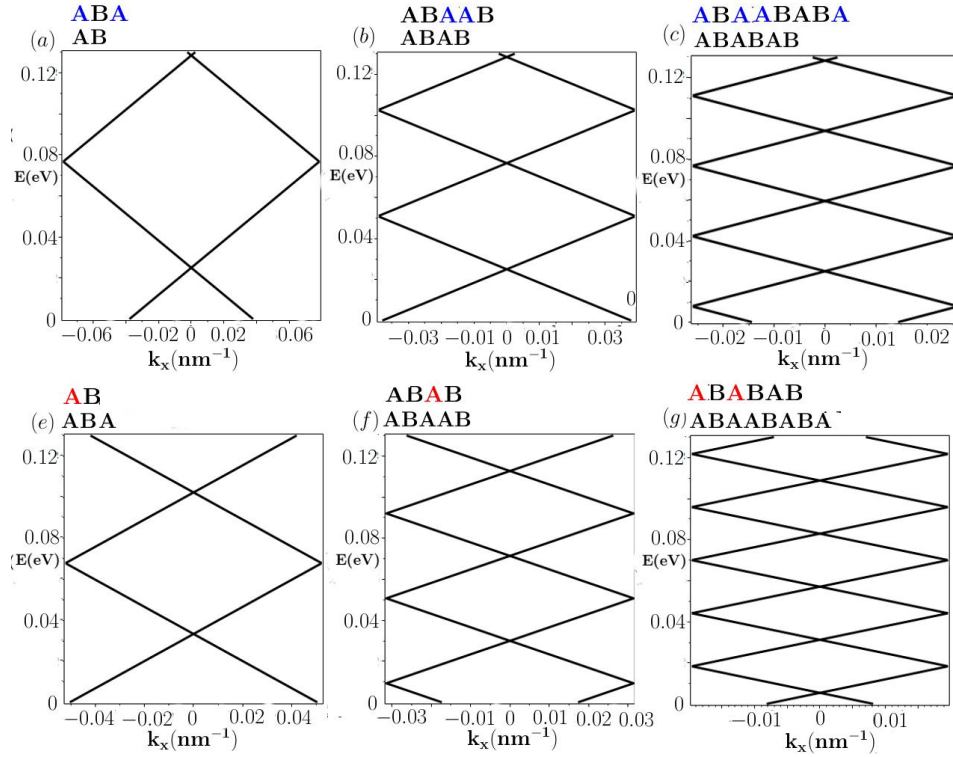


Figura 4.1: Gráfico da energia como função de k_x com $k_y = 0$ para super-redes de grafeno infinitas. As células unitárias das super-redes consideradas são mostradas no figura. As regiões escritas em preto, azul e vermelho possuem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.

O caso quase periódico é plotado na Fig. 4.1 de (e) a (h), onde consideramos a célula unitária seguindo a terceira sequência Fibonacci até a quinta, respectivamente. Os níveis de energia extras que aparecem na estrutura eletrônica à medida que a geração Fibonacci aumenta são entendidos como um comportamento semelhante ao Conjunto-Cantor², ou seja, essa característica de repetição que os níveis de energia apresentam é uma característica fractal desse tipo de super-redes que já foram obtidos para grafeno.

A localização em energia do ponto de Dirac para uma super-rede genérica pode ser obtida a partir da relação $N_A k_A + N_B k_B = 0$ ⁵⁰, onde $N_A(N_B)$ é o número de regiões $A(B)$ na célula unitária da super-rede e $k_A(k_B)$ são o valor de $k(x)$ na região $A(B)$. Assim, a localização é dada por:

²O conjunto de Cantor é um subconjunto do intervalo $[0,1]$ definido pelo matemático Georg Cantor como limite de um processo iterativo.

$$E = \frac{V_A N_A}{N_A + N_B}. \quad (4.43)$$

É importante lembrar que o resultado acima é válido apenas para $w_A = w_B$, $\Delta_A = \Delta_B = V_B = 0$ e $v_A = v_B$. Sem esses pressupostos, a equação acima é diferente. Alterando a velocidade de Fermi de algumas regiões, seguindo a mesma ideia que consideramos para o caso da super-rede finita é possível transformar exatamente as super-redes periódicas em quase periódicas considerados na Fig. 4.1 e vice-versa, recuperando o resultado para super-redes finitas na incidência normal. Então, mesmo que as super-redes periódicas e quase periódicas tenham diferentes locais para o ponto de Dirac, uma modificação da velocidade de Fermi pode perfeitamente transformar estes locais em uma e em outra super-rede. Assim como no capítulo anterior, as descrições das regiões da super-rede na cor preta, é o comportamento das super-redes sem a modulação da velocidade, olhando para as descrições das regiões em azul e vermelho, temos o comportamento das super-redes com a modulação da velocidade de Fermi. Assim, as descrições da super-rede que possuem regiões A em azul está com velocidade de Fermi modificada ao dobro e assim elas conseguem reproduzir as mesmas características das super-redes que possuem regiões em preto e assim a figura que representa as super-redes em cada caso é a mesma. O semelhante ocorre nas descrições da super-rede que possuem regiões A em vermelho, nessa a velocidade de Fermi está pela metade e assim elas conseguem reproduzir as mesmas super-redes com regiões em preto também, portanto, a figura que representa as duas super-redes também é a mesma para cada caso. Por isso escrevemos em uma mesma figura para (a) – (h) as regiões em preto descrevendo as super-redes sem modulação da velocidade de Fermi, acompanhadas das super-redes com algumas regiões em azul e vermelho para cada caso específico de super-rede e de modulação.

4.1.3 Estrutura Eletrônica para $k_y \neq 0$

O caso com $k_y \neq 0$ é considerado na Fig. 4.2, onde plotamos a energia em termos de k_y para $k_x = 0$. Consideramos os mesmos casos que na Fig. 4.1. Pode-se notar que, para os casos periódicos, existe uma dispersão linear na direção k_y na localização do cone de Dirac, mas para as bandas superiores a dispersão é muito menor, tornando-se quase zero

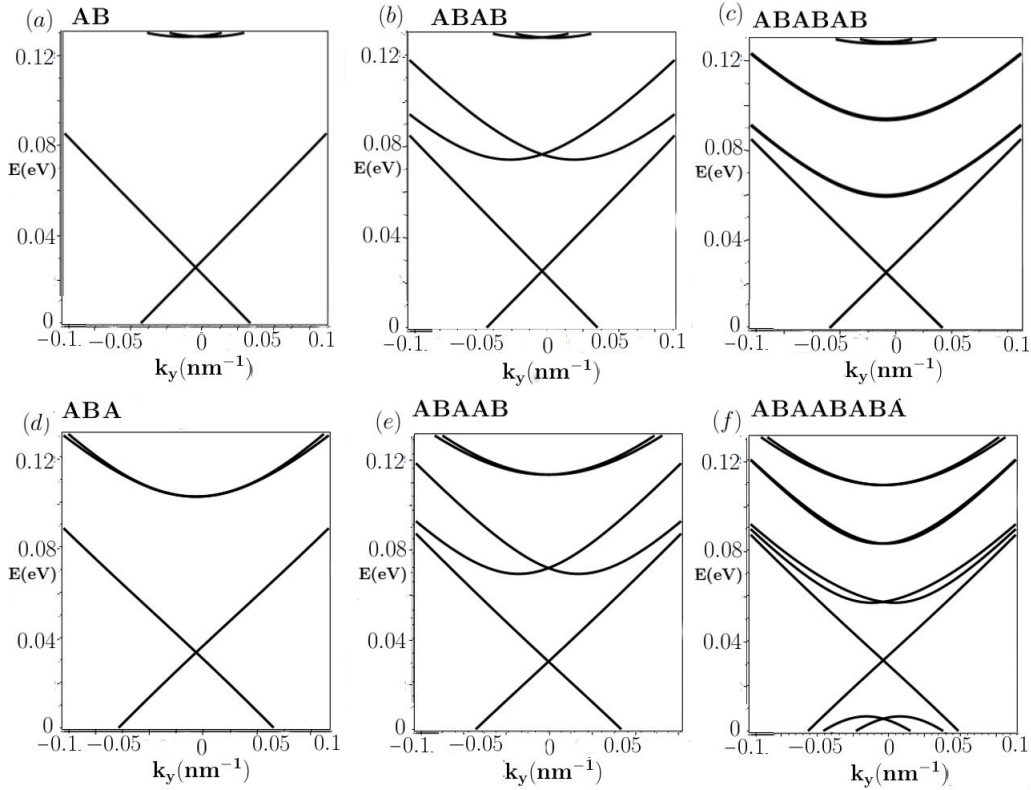


Figura 4.2: Gráfico da energia como função de k_y com $k_x = 0$ para super-redes de grafeno infinitas. As células unitárias dos super-redes consideradas são mostradas no figura. A velocidade de Fermi aqui é igual em todas as regiões.

para algumas bandas, o que não aconteceu na direção de k_x . Para os casos quase-periódicos, a dispersão na direção k_y para as bandas superiores é maior em comparação com os casos periódicos, mas ainda são muito menores do que a direção k_x .

A tentativa de transformar as super-redes periódicas e quase periódicos uma em outra pela modulação da velocidade de Fermi é plotada na Fig. 4.3, onde a Fig. 4.3 (a)-(c) ((d) – (f)) estão tentando recuperar a Fig. 4.2 (a)-(c) ((d)-(f)). Como se pode ver, para pequenos valores de $|k_y|$ é possível transformar as super-redes. No entanto, à medida que o valor de k_y aumenta, já não é mais possível, uma vez que após a mudança na velocidade de Fermi as super-redes periódicas permanecem quase sem dispersão na direção de k_y e as super-redes quase-periódicas ainda apresentam uma maior dispersão.

Assim, para o caso com $k_y = 0$, é possível induzir perfeitamente uma transição periódica para a quase-periódica e vice-versa por uma modulação da velocidade de Fermi. No entanto,

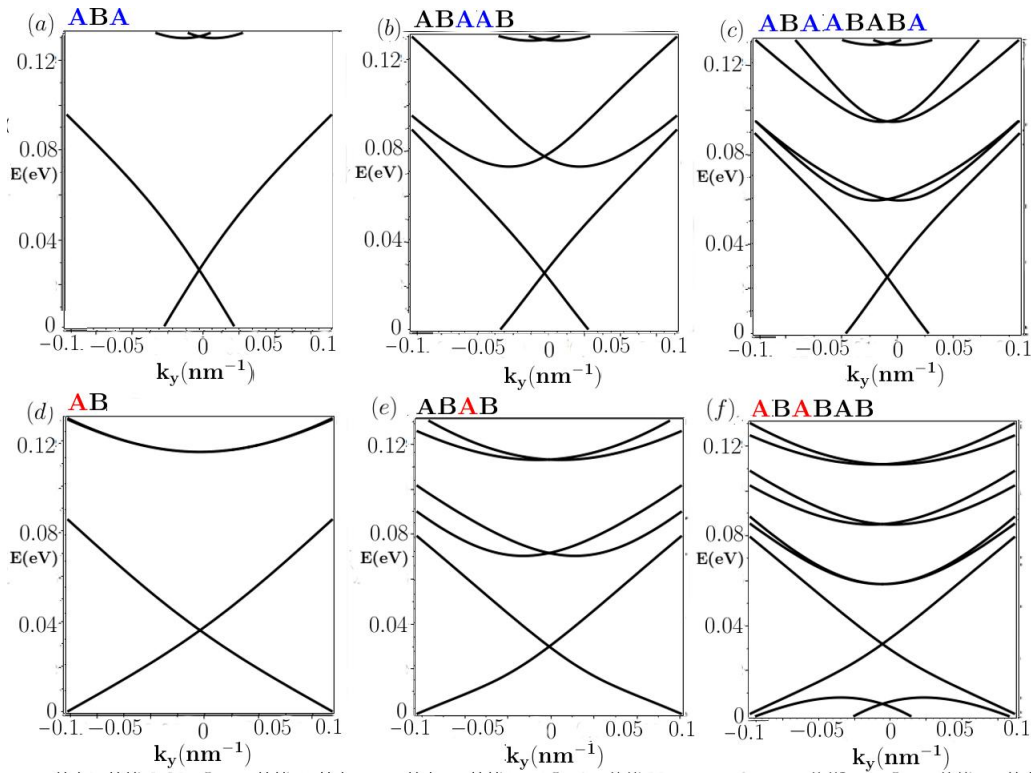


Figura 4.3: Gráfico da energia como função de k_y com $k_x = 0$ em super-redes infinitas de grafite. As células unitárias das super-redes consideradas são mostradas no figura. As regiões escritas em preto, azul e vermelho possuem velocidade de Fermi igual a 1×10^6 m/s, 2×10^6 m/s e 0.5×10^6 m/s, respectivamente.

para $k_y \neq 0$, uma mudança da velocidade de Fermi só pode transformar uma super-rede de grafeno periódica (quase-periódica) em uma super-rede quase-periódica (periódica) com uma dispersão menor (maior) na direção de k_y .

Perpectivas Gerais

Finalizamos assim este capítulo de estudo das super-rede de grafeno infinitas, para os casos considerados também no capítulo anterior e no próximo capítulo iremos apresentar nossas conclusões sobre este trabalho, salientando algumas considerações sobre possíveis trabalhos futuros.

Capítulo 5

Conclusão

Um dos elementos mais abundantes no universo é o átomo de carbono C , é também encontrado em todas as formas conhecidas de vida. Considerando sistemas à base de carbono encontramos várias estruturas que ligam seus átomos de carbono de diferentes maneiras, chamamos elas de alótropos. Os alótropos do carbono relativamente conhecidos são o diamante e o grafite. Ambos são formados por átomos de carbono mas têm propriedades diferentes. O grafeno é um dos alótropos do carbono, o mesmo possui propriedades únicas as quais podem ser usadas para a próxima geração de dispositivos eletrônicos. Dentre as propriedades notáveis do grafeno, pode-se citar: alta flexibilidade, ductibilidade e alta mobilidade eletrônica. Devido a estas e a outras propriedades surpreendentes no grafeno, há uma grande variedade de propostas para possíveis aplicações. A construção de dispositivos baseados em grafeno traria um forte impacto na eletrônica, fotônica, spintrônica, e optoeletrônica, levando a uma revolução da indústria tecnológica. Apresentamos aqui um panorama geral da teoria de férmions de Dirac sem massa e suas conexões com o material bidimensional conhecido como grafeno. A emergência da teoria de férmions de Dirac no grafeno foi discutida através do modelo de ligação-forte, onde estudamos a estrutura eletrônica do grafeno e percebemos que sua solução quando fazemos uma expansão próximo aos pontos de Dirac em uma rede do tipo favo de mel, leva à descrição de férmions de Dirac sem massa em $(1+2)$ dimensões. Construimos assim uma teoria efetiva de Dirac para o grafeno para a partir dos resultados obtidos usarmos na resolução de nossa problematização inicial que era averiguar as super-redes de grafeno.

Nós investigamos a possibilidade de transformar uma super-rede periódica de grafeno em uma super-rede de grafeno quase-periódica e vice-versa por uma modulação da velocidade de Fermi. Analisamos as propriedades de transporte de super-redes finitas e a estrutura eletrônica de super-redes infinitas resolvendo o hamiltoniano de Dirac para o grafeno em ambos os casos. Para super-redes finitas, verificamos que a transformação é perfeita para o caso de incidência normal. Como o ângulo de incidência θ aumenta, a transformação perfeita começa a ser perdida, quando θ torna-se superior a 23° , quando a velocidade de Fermi não pode mais transformar as super-redes. No entanto, para estes valores mais elevados de θ , a modulação da velocidade de Fermi traz novos recursos para o sistema. Para as super-redes finitas temos um resultado semelhante. Quando $k_y = 0$, as transições entre as super-redes são perfeitas. À medida que k_y aumenta, a estrutura eletrônica das super-redes não se transforma exatamente uma em outra, mas as transições ainda são muito boas.

Aqui, consideramos a transformação entre super-redes periódicas e quase-periódicas de Fibonacci, mas a modulação da velocidade de Fermi também pode ser usada para transformar outras super-redes quase-periódicas, como a Doble-Periodic ou Thue-Morse e super-redes desordenadas, sendo possível considerar um tipo de super-rede e fazer com que ela tenha as propriedades eletrônicas dos outros. Uma vez que a mudança da velocidade Fermi no grafeno é um tópico com importantes avanços de pesquisa nos últimos anos, os resultados obtidos aqui são úteis para futuras aplicações de grafeno em dispositivos eletrônicos. Deste nosso trabalho, foi gerado um artigo, demonstrando a importância desse estudo para outras pesquisas baseadas em super-redes de grafeno. O artigo foi aceito para publicação nesse ano de 2017 na revista *Physics Letters A*, o mesmo pode ser encontrado na Referência [115].

Apêndice A

Dedução da Equação de Dirac

Existem diversos materiais dedicados à equação de Dirac, tanto nos livros de texto de Mecânica Quântica e de Teoria de Campos, quanto em livros especializados [108]-[110]. Vamos apresentar uma dedução formal da equação de Dirac, iniciando pela lei de conservação de energia da mecânica: a energia total de um sistema mecânico conservativo é constante [111],[112]. Seguindo a Ref. [113], para uma partícula temos,

$$K + V = E = \text{const}, \quad (\text{A.1})$$

onde K é a energia cinética, V é a energia potencial e E é a energia total da partícula. Expressamos a energia cinética em termos do momento da partícula \vec{p} ,

$$K = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (\text{A.2})$$

onde m é a massa da partícula. Vemos que a energia potencial é uma função das coordenadas $V = V(\vec{r})$. Escrevemos a equação (A.1) na forma,

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}). \quad (\text{A.3})$$

Como procuramos montar a equação de onda não relativística, a partir da equação (A.2), fazemos uma substituição da energia total, das coordenadas e dos momentos por seus operadores correspondentes que atuam em uma função de onda ψ ,

$$\begin{aligned}
E \rightarrow \hat{E}\psi &= i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}, & x \rightarrow \hat{x}\psi &= x\psi, & y \rightarrow \hat{y}\psi &= y\psi, & z \rightarrow \hat{z}\psi &= z\psi, \\
p_x \rightarrow \hat{p}_x\psi &= -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x}, & p_y \rightarrow \hat{p}_y\psi &= -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial y}, & p_z \rightarrow \hat{p}_z\psi &= -i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial z}.
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Substituindo os operadores da equação (A.4) na equação (A.3) chegamos a equação de onda,

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)\psi. \tag{A.5}$$

A equação (A.5) é a equação de Schrödinger, que descreve uma partícula quântica não relativística sujeita a um campo potencial V . A derivada em relação ao tempo de primeira ordem no lado esquerdo da equação (A.5) torna possível descrever a evolução temporal da partícula. Na montagem da equação de onda de uma partícula relativística é necessário obter uma equação de onda em que a derivada em relação ao tempo seja também de primeira ordem. Para uma partícula relativística, temos a seguinte fórmula da energia relativística E ,

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + (mc^2)^2 = p_x^2 c^2 + p_y^2 c^2 + p_z^2 c^2 + (mc^2)^2, \tag{A.6}$$

onde m é a massa da partícula, c é a velocidade de luz e \vec{p} é o momento relativístico. Fazendo uma substituição das quantidades na equação (A.6) pelos operadores da equação (A.4), obtemos a equação,

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = -c^2 \hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - c^2 \hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} - c^2 \hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + (mc^2)^2 \psi, \tag{A.7}$$

dividindo-a por $c^2 \hbar^2$ temos,

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \psi = 0. \tag{A.8}$$

Na equação (A.7) a derivada em relação ao tempo é de segunda ordem devido ao quadrado da energia na equação (A.6). Aplicando a raiz quadrada na equação (A.6), obtemos,

$$E = \sqrt{\vec{p}^2 c^2 + (mc^2)^2} = \sqrt{p_x^2 c^2 + p_y^2 c^2 + p_z^2 c^2 + (mc^2)^2}, \quad (\text{A.9})$$

onde o termo da energia é de primeira ordem. Porém, a raiz quadrada no lado direito torna difícil uma interpretação deste termo depois da substituição das componentes do momento pelos operadores. Analisando dimensionalmente as quantidades do lado direito da equação (A.8) demonstramos que os termos $p_x c$, $p_y c$, $p_z c$ e mc^2 podem ser escritos na forma de uma combinação linear com alguns coeficientes α_1 , α_2 , α_3 e β ,

$$E = \alpha_1 p_x c + \alpha_2 p_y c + \alpha_3 p_z c + \beta mc^2. \quad (\text{A.10})$$

Elevando ambos os lados da equação (A.9) ao quadrado e mantendo a ordem de multiplicação dos coeficientes, temos,

$$\begin{aligned} E^2 &= (\alpha_1 p_x c + \alpha_2 p_y c + \alpha_3 p_z c + \beta mc^2) \cdot (\alpha_1 p_x c + \alpha_2 p_y c + \alpha_3 p_z c + \beta mc^2) \\ &= (\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1) p_x p_y c^2 + (\alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2) p_y p_z c^2 + (\alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_3) p_z p_x c^2 + \\ &\quad + (\alpha_1 \beta + \beta \alpha_1) p_x c m c^2 + (\alpha_2 \beta + \beta \alpha_2) p_y c m c^2 + (\alpha_3 \beta + \beta \alpha_3) p_z c m c^2 + \\ &\quad + \alpha_1^2 p_x^2 c^2 + \alpha_2^2 p_y^2 c^2 + \alpha_3^2 p_z^2 c^2 + \beta^2 (mc^2)^2, \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Comparando a equação (A.10) com a equação (A.6), obtemos as seguintes condições para os coeficientes,

$$\begin{aligned} \alpha_1^2 &= 1, \quad \alpha_2^2 = 1, \quad \alpha_3^2 = 1, \quad \beta^2 = 1, \\ \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 &= 0, \quad \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 = 0, \quad \alpha_3 \alpha_1 + \alpha_1 \alpha_3 = 0, \\ \alpha_1 \beta + \beta \alpha_1 &= 0, \quad \alpha_2 \beta + \beta \alpha_2 = 0, \quad \alpha_3 \beta + \beta \alpha_3 = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Das condições da equação (A.11), chegamos a conclusão de que os coeficientes α_1 , α_2 , α_3 e β não podem ser números, pois os números obedecem à lei de comutação com respeito à multiplicação, isto é, para dois números x_1 e x_2 , diferentes de zero, temos $x_1 x_2 = x_2 x_1$ e $x_1 x_2 + x_2 x_1 = 2x_1 x_2$. Considerando os coeficientes α_1 , α_2 , α_3 e β como matrizes, é possível

encontrar 4 matrizes que obedecem às condições da equação (A.11). A dimensão mínima destas matrizes é 4×4 . As matrizes α_1 , α_2 , α_3 e β são chamadas de matrizes de Dirac, dadas por,

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.14})$$

Efetuada a substituição das quantidades na equação (A.10) pelos operadores da equação (A.4), chegamos a equação,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\alpha_1 i c \hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} - \alpha_2 i c \hbar \frac{\partial \psi}{\partial y} - \alpha_3 i c \hbar \frac{\partial \psi}{\partial z} + \beta m c^2 \psi, \quad (\text{A.15})$$

que representa a equação de Dirac. A equação de Dirac descreve o comportamento quântico de uma partícula relativística de spin 1/2, como por exemplo o elétron. Como a equação (A.15) é uma equação matricial, a função de onda é um objeto de 4 componentes, chamado de spinor de Dirac, que pode ser escrito na forma de uma coluna,

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Dividindo os lados esquerdo e direito da equação (A.15) por $c\hbar$, obtemos,

$$i\frac{1}{c}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\alpha_1 i\frac{\partial\psi}{\partial x} - \alpha_2 i\frac{\partial\psi}{\partial y} - \alpha_3 i\frac{\partial\psi}{\partial z} + \beta\frac{mc}{\hbar}\psi. \quad (\text{A.17})$$

Introduzimos as notações que são usadas na área da teoria relativística e de campos. As coordenadas espaciais e de tempo são reunidas em um quadrivetor x^μ , em que o índice μ recebe os valores 0, 1, 2, 3,

$$\begin{aligned} x^\mu &= (x^0, x^1, x^2, x^3) \\ &= (x^0, x^i) = (x^0, \vec{x}), i = 1, 2, 3, \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

com componentes,

$$x^0 = ct, x^1 = x, x^2 = y, x^3 = z. \quad (\text{A.19})$$

O 4-vetor x^μ representa os pontos do espaço-tempo. Para denotar as derivadas pelas coordenadas usamos o símbolo $\partial_\mu = \partial/\partial x^\mu$. Usaremos também as unidades naturais em que é aceita a convenção $c = \hbar = 1$. Aplicando as notações e convenções indicadas acima na equação (A.19), temos,

$$i\partial_0\psi = (-\alpha_1 i\partial_1 - \alpha_2 i\partial_2 - \alpha_3 i\partial_3 + \beta m)\psi. \quad (\text{A.20})$$

Na área da teoria relativística é usada também uma convenção de somatório por índices repetidos¹ de Einstein². Se em uma fórmula existe um termo de produto de quantidades que possuem o mesmo índice, isto significa que por este índice é efetuado um somatório. Assim, não precisamos escrever o símbolo de soma. Aplicamos esta convenção para o somatório dos termos semelhantes do lado direito da equação (A.20),

¹Em matemática, em particular em álgebra multilinear, a notação de Einstein é uma convenção introduzida por Albert Einstein em 1916 para simplificar a escrita de somatórios.

²Albert Einstein (Ulm, 14 de março de 1879 — Princeton, 18 de abril de 1955) foi um físico teórico alemão.

$$\alpha_1 i \partial_1 + \alpha_2 i \partial_2 + \alpha_3 i \partial_3 = \sum_{i=1}^3 \alpha_i i \partial_i = \alpha_i i \partial_i, \quad (\text{A.21})$$

e chegamos à forma compacta da equação,

$$i \partial_0 \psi = (-\alpha_i i \partial_i + \beta m) \psi. \quad (\text{A.22})$$

O lado direito da equação (A.24), bem como o da equação (A.17), representa o hamiltoniano de Dirac para a partícula livre,

$$\hat{H} = (-i \alpha_i i \partial_i + \beta m). \quad (\text{A.23})$$

Sendo o hamiltoniano um operador hermitiano, as matrizes β , α_i também são hermitianas,

$$\beta^\dagger = \beta, \alpha_i^\dagger = \alpha_i. \quad (\text{A.24})$$

Multiplicando os termos da equação (A.24) por β à esquerda, temos,

$$\beta i \partial_0 \psi = (-\beta \alpha_i i \partial_i + \beta^2 m) \psi. \quad (\text{A.25})$$

Na equação (A.27) introduzimos para a matriz β e para o produto $\beta \alpha_i$ a notação,

$$\beta = \gamma^0, \beta \alpha_i = \gamma^i, \quad (\text{A.26})$$

e escrevemos todos os termos no lado esquerdo aplicando a condição $\beta^2 = 1$ da equação (A.12),

$$\gamma^0 i \partial_0 \psi + \gamma^i i \partial_i \psi - m \psi = 0. \quad (\text{A.27})$$

Usando a convenção de somatório por índices repetidos, podemos reunir os dois primeiros termos na equação (A.29) como,

$$\gamma^0 i \partial_0 + \gamma^i i \partial_i = \gamma^\mu i \partial_\mu. \quad (\text{A.28})$$

Assim, chegamos ao aspecto usual da equação de Dirac que é usado comumente na teoria relativística,

$$(\gamma^\mu i \partial_\mu - m)\psi = 0. \quad (\text{A.29})$$

As matrizes γ^μ também são chamadas de matrizes de Dirac. E são dadas como,

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.30})$$

$$\gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.31})$$

Utilizando a equação (A.28) como definições das matrizes γ^μ e as condições para as matrizes β , α_i da equação (A.12), podemos obter as condições obedecidas pelas matrizes γ^μ ,

$$\begin{aligned} (\gamma^0)^2 &= \beta^2 = 1, \\ (\gamma^i)^2 &= \beta \alpha_i \beta \alpha_i = -\beta \beta \alpha_i \alpha_i = -\beta^2 \alpha_i^2 = -1, \\ \gamma^0 \gamma^i + \gamma^i \gamma^0 &= \beta \beta \alpha_i + \beta \alpha_i \beta = \beta^2 \alpha_i - \beta \beta \alpha_i = \beta^2 \alpha_i - \beta^2 \alpha_i = 0, \\ i \neq j, \gamma^i \gamma^j + \gamma^j \gamma^i &= \beta \alpha_i \beta \alpha_j + \beta \alpha_j \beta \alpha_i = -\beta \beta \alpha_i \alpha_j - \beta \beta \alpha_j \alpha_i = -\beta^2 (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

De forma compacta podemos escrever as expressões anteriores, como,

$$\begin{aligned}(\gamma^0)^2 = 1, (\gamma^i)^2 = -1, \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu \\ = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 0, \mu \neq \nu,\end{aligned}\tag{A.33}$$

onde, as chaves $\{, \}$ designam o anticomutador.

Referências Bibliográficas

- [1] TERRAZZAN, Eduardo Adolfo. A inserção da física moderna e contemporânea no ensino de física na escola de 2º grau. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 9, n. 3, p. 209-214, 1992.
- [2] GIROTTO, Emerson M.; SANTOS, Ivair A. Medidas de resistividade elétrica DC em sólidos: como efetuá-las corretamente. **Química Nova**, v. 25, n. 4, p. 639-647, 2002.
- [3] OLIVEIRA, Ivan S.; DE JESUS, Vitor LB. **Introdução à física do estado sólido**. Editora Livraria da Física, 2005.
- [4] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [5] Dov Levine, Paul Joseph Steinhardt, Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [6] Mandelbrot, B. B., *Fractals: Form, Chance and Dimension*, Freeman, 1977.
- [7] Vasconcelos, M. S., Albuquerque E. L. e Nogueira Jr., E., Multifractal Analysis of Plasmon-polariton and Light Transmission Spectra in Quasiperiodic Multilayers, *Physica A* **268** 165-174 (1999).
- [8] WHITE, D. P. A Mecânica Quântica e os Orbitais Atômicos. In: *Química, a Ciência Central*. 9. ed. São Paulo, SP: Pearson Prentice Hall, 2005. cap 6, p. 195-211.
- [9] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *The Electronic Properties of Graphene*, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109. 54p. (2009).

- [10] PERUZZO, T. CANTO, E. O que é o Grafeno? (Nobel 2010) — Revista Informe-se sobre a Química - Edição para Professores, São Paulo, n. 41, p.1, 2010.
- [11] NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, v. 306, n. 5696, p. 666-669, Oct. 2004.
- [12] Tongay, Sefaattin, et al. Rectification at graphene-semiconductor interfaces: zero-gap semiconductor-based diodes. **Physical Review X** 2.1 (2012): 011002.
- [13] Dong LX e Chen Q. Properties, synthesis, and characterization of graphene. *Front. Mater. Sci.* 2010; 4: 45-51.
- [14] Ferrari, Andrea C., et al. Science and technology roadmap for graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems. **Nanoscale** 7.11 (2015): 4598-4810.
- [15] V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1067 (2012).
- [16] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nat Phys* **2**, 620 (2006).
- [17] J. Gebhardt, R. J. Koch, W. Zhao, O. HÖfert, K. Gotterbarm, S. Mammadov, C. Papp, A. Görling, H.-P. Steinrück, and T. Seyller, *Phys. Rev. B* **87**, 155437 (2013).
- [18] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly, and J. van den Brink, *Phys. Rev. B* **76**, 073103 (2007).
- [19] S. Marchini, S. Günther, and J. Wintterlin, *Phys. Rev. B* **76**, 075429 (2007).
- [20] A. L. Vázquez de Parga, F. Calleja, B. Borca, M. C. G. Passeggi, J. J. Hinarejos, F. Guinea, and R. Miranda, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 056807 (2008).
- [21] S. Rusponi, M. Papagno, P. Moras, S. Vlaic, M. Etzkorn, P. M. Sheverdyeva, D. Pacilé, H. Brune, and C. Carbone, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 246803 (2010).
- [22] H. Yan, Z.-D. Chu, W. Yan, M. Liu, L. Meng, M. Yang, Y. Fan, J. Wang, R.-F. Dou, Y. Zhang, Z. Liu, J.-C. Nie, and L. He, *Phys. Rev. B* **87**, 075405 (2013).
- [23] C. Bai and X. Zhang, *Phys. Rev. B* **76**, 075430 (2007).

- [24] M. Barbier, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **80**, 205415 (2009).
- [25] N. Abedpour, A. Esmailpour, R. Asgari, and M. R. R. Tabar, *Phys. Rev. B* **79**, 165412 (2009).
- [26] A. Esmailpour, H. Meshkin, and R. Asgari, *Solid State Communications* **152**, 1896 (2012).
- [27] S. H. R. Sena, J. M. P. Jr, G. A. Farias, M. S. Vasconcelos, and E. L. Albuquerque, *Journal of Physics: Condensed Matter* **22**, 465305 (2010).
- [28] P.-L. Zhao and X. Chen, *Applied Physics Letters* **99**, 182108 (2011).
- [29] X. Chen, P.-L. Zhao, and Q.-B. Zhu, *Journal of Physics D: Applied Physics* **46**, 015306 (2013).
- [30] C. Li, H. Cheng, R. Chen, T. Ma, L.-G. Wang, Y. Song, and H.-Q. Lin, *Applied Physics Letters* **103**, 172106 (2013).
- [31] H. Huang, D. Liu, H. Zhang, and X. Kong, *Journal of Applied Physics* **113**, 043702 (2013).
- [32] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, A. Matulis, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **77**, 235443 (2008).
- [33] L. Dell'Anna and A. De Martino, *Phys. Rev. B* **79**, 045420 (2009).
- [34] R. P. Tiwari and D. Stroud, *Phys. Rev. B* **79**, 205435 (2009).
- [35] G. M. Maksimova, E. S. Azarova, A. V. Telezhnikov, and V. A. Burdov, *Phys. Rev. B* **86**, 205422 (2012).
- [36] J. R. F. Lima, *Journal of Applied Physics* **117**, 084303 (2015).
- [37] F. Zhai and K. Chang, *Phys. Rev. B* **85**, 155415 (2012).
- [38] P. M. Krstaji and P. Vasilopoulos, *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 135302 (2011).

- [39] C. Attaccalite and A. Rubio, *physica status solidi (b)* **246**, 2523 (2009).
- [40] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E. Y. Andrei, *Nat Nano* **3**, 491 (2008).
- [41] C.-H. Park, L. Yang, Y.-W. Son, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Nat Phys* **4**, 213 (2008).
- [42] C. Hwang, D. A. Siegel, S.-K. Mo, W. Regan, A. Ismach, Y. Zhang, A. Zettl, and A. Lanzara, *Sci. Rep.* **2**, 590 (2012).
- [43] J. R. F. Lima, *Physics Letters A* **379**, 1372 (2015).
- [44] J. R. Lima, *The European Physical Journal B* **90**, 5 (2017).
- [45] J. R. F. Lima and F. Moraes, *Solid State Communications* **201**, 82 (2015).
- [46] H. Cheraghchi and F. Adinehvand, *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**, 015302 (2014).
- [47] J. R. F. Lima, *Physics Letters A* **379**, 179 (2015).
- [48] A. Raoux, M. Polini, R. Asgari, A. R. Hamilton, R. Fazio, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* **81**, 073407 (2010).
- [49] J.-H. Yuan, Z. Cheng, Q.-J. Zeng, J.-P. Zhang, and J.-J. Zhang, *Journal of Applied Physics* **110**, 103706 (2011).
- [50] J. R. F. Lima, L. F. C. Pereira, and C. G. Bezerra, *Journal of Applied Physics* **119**, 244301 (2016).
- [51] BRASIL. A Bioquímica da Vida. *Revista a Bioquímica da Vida como Ela É*, Porto Alegre, RS, 27 nov. 2014. Disponível em: <<https://abioquimicacomoelae.com.br/6-numeros-antiores/numero-1/textos/a-bioquimica-da-vida/>>. Acesso em: 18 mai. 2017.
- [52] BRASIL. Materiais de Carbono e os Avanços Tecnológicos. *16ª Feira Internacional de Máquinas-Ferramenta e Sistemas Integrados de Manufatura*, São Paulo, SP, 20 a 24 jun. 2017. Disponível em: <http://www.cimm.com.br/portal/noticia/exibir_noticia/7892-materiais-de-carbono-e-os-avancos-tecnologicos>. Acesso em: 19 mai. 2017.

- [53] WHITE, D. P. Ligação Covalente e Superposição de Orbitais. In: *Química, a Ciência Central*. 9. ed. São Paulo, SP: Pearson Prentice Hall, 2005. cap 9, p. 303-309.
- [54] RAMOS, J. M. IZOLANI, A. O. TÊILEZ, C. A. SANTOS, M. J. G. O Conceito de Hibridização — Revista Química Nova na Escola do Ministério da Educação - Portal do Professor, Rio de Janeiro, n. 28, p.24–27, 2008.
- [55] LABORATÓRIO VIRTUAL DE QUÍMICA - UNESP. O Carbono. Disponível em: <http://www2.fc.unesp.br/lvq/LVQ_tabela/006_carbono.html>. Acesso em 21 mai. 2017.
- [56] HYPE SCIECE. Fullerenos - da promessa à realidade. Disponível em: <<http://hypescience.com/fullerenos-da-promessa-a-realidade/>>. Acesso em 21 mai. 2017.
- [57] GMN - Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Sobre os Nanotubos de Carbono. Disponível em: <<http://www.ufrgs.br/lacer/gmn/nanotubosbr.htm>>. Acesso em 21 mai. 2017.
- [58] FILHO, A. G. S. FAGAN, S. B. Funcionalização de Nanotubos de Carbono — Revista Química Nova, São Paulo, n. 30, On-line Version, disponível em <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttextpid=S0100-40422007000700037>, 2007.
- [59] BARBOSA, L. C. a. Hibridização dos orbitais e forma tridimensional das moléculas. In: *Introdução à Química Orgânica*. 2. ed. São Paulo, SP: Pearson Prentice Hall, 2011. cap 1, p. 06-10.
- [60] ATKINS, P. JONES, L. Fórmula e Estrutura das Moléculas. In: *Princípios de Química*. 5. ed. São Paulo, SP: Bookman, 2011. cap 3, p. 208-209.
- [61] TAVARES, I. M. *Efeitos de campo magnético dependente da posição em monocamadas e bicamadas de grafeno*. 2014. 60 f. Dissertação (Mestrado em Física). Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2014.

- [62] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene*, Science (New York, N.Y.) **320**, 1308. (2008).
- [63] BRASIL. A Tecnologia do grafeno desembarca no Brasil. *Revista Ciência Hoje*, Rio de Janeiro, RJ, 07 jun. 2013. Disponível em: <http://www.cienciahoje.org.br/noticia/v/ler/id/2950/n/a_tecnologia_do_grafeno_desembarca_no_brasil>. Acesso em: 31 mai. 2017.
- [64] PEIERLS, R. E. Quelques propriétés typiques des corps solides. **Annales de L'Institut Henry Poincaré**, v. 5, p. 45, 1935.
- [65] LANDAU, L. D. Zur Theorie der Phasenumwandlungen II. **Physik Z. Sowjetunion**, v. 11, p. 9, 1937.
- [66] ALDO J. G. ZARBIN; MARCELA M. OLIVEIRA. Nanoestruturas de carbono (nanotubos, grafeno): Quo Vadis? — Revista Química Nova, São Paulo, n. 36, On-line Version, disponível em <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttextpid=S0100-40422013001000009>, 2013.
- [67] Neto, Antonio Castro, Francisco Guinea, and Nuno Miguel Peres. Drawing conclusions from graphene. **Physics World** **19.11** (2006): 33.
- [68] Geim, Andre Konstantin. Graphene: status and prospects. **science** **324.5934** (2009): 1530-1534.
- [69] DOS SANTOS, JMB Lopes. O Grafeno. **Revista de Ciência Elementar**, v. 2, n. 2, 2014.
- [70] SOUZA, Eunezio Antonio De. Mackgrafe: centro de pesquisas avançadas em grafeno e nanomateriais (grafeno: fotônica e opto-eletrônica, colaboração upm-nus). 2016.
- [71] MARIANI, Eros; VON OPPEN, Felix. Flexural phonons in free-standing graphene. *Physical review letters*, v. 100, n. 7, p. 076801, 2008.

- [72] SILVA, Everson Frazão da. Estudo dos cristais fotônicos quasi-periódicos de Fibonacci, Octonacci e Dodecanacci com grafenos. 2016. Dissertação de Mestrado. Brasil.
- [73] Januario, A. C., B. R. Remédio, and R. A. Sousa. "PRODUÇÃO DE GRAFENO PELO MÉTODO DE ESFOLIAÇÃO QUÍMICA E SUAS POTENCIAIS APLICAÇÕES".
- [74] Barcelos, Ingrid David. "Crescimento de Grafeno por CVD em folhas de Cobre."(2011).
- [75] Cansan, Anderson, et al. "MICROESFOLIAÇÃO MECÂNICA DO GRAFITE PIROLÍTICO FORTEMENTE ORIENTADO."Congresso de Pesquisa e Extensão da Faculdade da Serra Gaúcha. Vol. 3. No. 3. 2015.
- [76] DE JESUS, Karla Acemano; FREIRE, Estevão; GUIMARÃES, Maria José OC. Grafeno: aplicações e tendências tecnológicas. 2012.
- [77] Guimarães, Maria José OC, and Karla Acemano de Jesus. "ESTUDO DE PROSPECÇÃO TECNOLÓGICA EM GRAFENOS."
- [78] NOVOSELOV, Kostya S. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. **nature**, v. 438, n. 7065, p. 197-200, 2005.
- [79] PARK, Cheol-Hwan et al. New generation of massless Dirac fermions in graphene under external periodic potentials. **Physical review letters**, v. 101, n. 12, p. 126804, 2008.
- [80] BUENO, Maria Jannaira et al. Propriedades eletrônicas de grafeno com defeitos. 2011.
- [81] CUNHA, Anderson Magno Chaves. **Correspondência entre ondas de spin de um ferromagneto em uma rede favo de mel e a banda de energia do grafeno.** 2014. Tese de Doutorado.
- [82] DARTORA, C. A.; JIMENEZ, Miguel J. Saldaña; ZANELLA, Fernando. (Fundamentals of the massless Dirac fermion physics in (1+ 2)-D and graphene). **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 37, n. 3, p. 3301-1-3301-13, 2015.
- [83] LIMA, Denille Brito de. **Variações do grafeno: uma abordagem ab-initio de novas estruturas bidimensionais.** 2012. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.

- [84] SILVA, Ederson Esteves da et al. Obtenção de grafeno por esfoliação eletroquímica. 2015.
- [85] NOGUEIRA, NEWTON PIONÓRIO; VIA, TRANSPORTE DE CARGAS EM GRAFENOS; QUÂNTICO, TUNELAMENTO. CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAIS.
- [86] SARANGO, Guayllas; LUIS, José. **Estudio Teórico computacional de las propiedades estructurales y electrónicas de Grafeno y Germaneno con el enfoque de la teoría del funcional de la densidad**. 2016. Trabalho de Conclusão de Curso. Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.
- [87] AGUIAR, Acrísio Lins. Estudo da Interação da Benzonitrila com Nanoestruturas de Carbono (Grafeno, Nanotubos e Fullerenos). 2008.
- [88] REICH, Stephanie et al. Tight-binding description of graphene. **Physical Review B**, v. 66, n. 3, p. 035412, 2002.
- [89] PEREIRA, Vitor M.; NETO, AH Castro; PERES, N. M. R. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. **Physical Review B**, v. 80, n. 4, p. 045401, 2009.
- [90] GUNLYCKE, D.; WHITE, C. T. Tight-binding energy dispersions of armchair-edge graphene nanostrips. **Physical Review B**, v. 77, n. 11, p. 115116, 2008.
- [91] GRÜNEIS, Alexander et al. Tight-binding description of the quasiparticle dispersion of graphite and few-layer graphene. **Physical Review B**, v. 78, n. 20, p. 205425, 2008.
- [92] NETO, AH Castro et al. The electronic properties of graphene. *Reviews of modern physics*, v. 81, n. 1, p. 109, 2009.
- [93] MUÑOZ, William Armando et al. Efeitos de desordem e localização eletrônica em bicamada de grafeno. 2010.
- [94] JIMENEZ, Miguel Jorge Saldaña. Estudo de transporte e tunelamento quântico em estruturas de grafeno dopadas. 2015.

- [95] MAFRA, Daniela Lopes. **Dispersão de fônons na vizinhança do ponto de Dirac do grafeno por espalhamento Raman**. Belo Horizonte: Universidade Federal de Minas Gerais, 2008.
- [96] GUO, Hao; CHIEN, Chih-Chun; HE, Yan. Theories of linear response in BCS superfluids and how they meet fundamental constraints. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 172, n. 1-2, p. 5-46, 2013..
- [97] DE MOURA CUNHA, Márcio; DE LIMA RIBEIRO, Carlos Alberto. A equação de Dirac aplicada ao Grafeno.
- [98] DE MARTINO, A.; DELL'ANNA, L.; EGGER, R. Magnetic confinement of massless Dirac fermions in graphene. **Physical review letters**, v. 98, n. 6, p. 066802, 2007.
- [99] HORNG, Jason et al. Drude conductivity of Dirac fermions in graphene. **Physical Review B**, v. 83, n. 16, p. 165113, 2011.
- [100] NAIR, Rahul Raveendran et al. Fine structure constant defines visual transparency of graphene. **Science**, v. 320, n. 5881, p. 1308-1308, 2008.
- [101] MALKO, Daniel et al. Competition for graphene: graphynes with direction-dependent dirac cones. **Physical review letters**, v. 108, n. 8, p. 086804, 2012.
- [102] PLETIKOSIĆ, Ivo et al. Dirac cones and minigaps for graphene on Ir (111). **Physical Review Letters**, v. 102, n. 5, p. 056808, 2009.
- [103] N. M. R. Peres, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 095501 (2009).
- [104] L. G. Wang and S. Y. Zhu, *Phys. Rev. B* **81**, 205444 (2010).
- [105] D. P. Arovas, L. Brey, H. A. Fertig, E.-A. Kim, and K. Ziegler, arXiv:1002.3655v2 (unpublished).
- [106] B. H. J. McKellar and G. J. Stephenson, *Phys. Rev. A* **36**, 2566 (1987).
- [107] D. P. Arovas, L. Brey, H. A. Fertig, E.-A. Kim, and K. Ziegler, *New Journal of Physics* **12**, 123020 (2010).

-
- [108] L.I. Schiff, Quantum Mechanics (McGraw-Hill, New York, 1968).
- [109] W. Greiner, Relativistic Quantum Mechanics (Springer, Berlin, 2000).
- [110] L.H. Ryder, Quantum Field Theory (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [111] B. Thaller, The Dirac Equation (Springer-Verlag, Berlin, 1992).
- [112] V.G. Bagrov and D.M. Gitman, The Dirac Equation and its Solutions (Walter de Gruyter, Berlin, 2014).
- [113] SMIRNOV, Andrei; FARIAS JR, Dantas; JORGE, Antonio. Representações da Equação de Dirac em 1+ 1 Dimensões. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 38, n. 3, 2016.
- [114] CHIQUITO, Adenilson J.; LANCIOTTI JR, Francesco. Super-redes semicondutoras: um laboratório de mecânica quântica. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 26, n. 4, p. 315-322, 2004.
- [115] ARAÚJO, T. Q.; LIMA, Jonas RF. Periodic to quasi-periodic graphene superlattice transition by Fermi velocity modulation. **Physics Letters A**, 2017.