



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

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Flutuações do ângulo spin Hall em grafeno

*Juliana Maria da Silva*

Dissertação de Mestrado

Recife - PE

30 de Julho de 2020

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

*Juliana Maria da Silva*

**Flutuações do ângulo spin Hall em grafeno**

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

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

**Recife - PE  
30 de Julho de 2020**

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

---

- D111f DA SILVA, JULIANA MARIA  
Flutuações do ângulo spin Hall em grafeno / JULIANA MARIA DA SILVA. - 2020.  
85 f. : il.
- Orientador: Anderson Luiz da Rocha e Barbosa.  
Inclui referências.
- Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal Rural de Pernambuco, Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada, Recife, 2020.
1. Spintrônica. 2. Transporte Eletrônico. 3. Flutuações. 4. Efeito Hall de Spin. 5. Grafeno. I. Barbosa, Anderson Luiz da Rocha e, orient. II. Título

CDD 621

---

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

**Flutuações do ângulo spin Hall em grafeno**

*Juliana Maria da Silva*

Dissertação julgada adequada para obtenção do título de mestre em Física, defendida e aprovada por unanimidade em 30/07/2020 pela Comissão Examinadora.

Orientador:

---

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha e Barbosa  
UFRPE

Banca Examinadora:

---

Prof. Dr. Pedro Hugo de Figueiredo  
UFRPE

---

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos  
UFPB

*"Uma das funções sociais da ciência é a de libertar as pessoas das superstições."*

*(Stevan Weinberg)*

Dedico esta, bem como todas as minhas demais conquistas, a todos os meus amigos e familiares.

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, por tudo o que tem realizado em minha vida. Também agradeço a minha família, em especial meus pais que desde sempre me apoiam e motivam a buscar o conhecimento. Um agradecimento especial ao meu esposo Victor, que me apoia em todas as minhas empreitadas com um sorriso no rosto. Agradeço as pessoas maravilhosas que o mestrado me levou a conhecer, em especial Amanda, Djardiel, Josival e Marconi. Todos os momentos compartilhados, sejam de alegria ou sofrimento, contribuíram neste trabalho, meu muito obrigado a todos. Agradeço a todos os professores do programa, sempre dispostos e pacientes. Em especial um agradecimento ao professor Anderson Barbosa, que superou as expectativas quanto à orientação, se concluiu essa jornada com uma bagagem de conhecimento além do que imaginei, é devido a sua persistência e paciência, seu comportamento faz jus ao nome de Orientador. Agradeço a todos os funcionários do DF-UFRPE, em especial a Neto, sempre à disposição pra socorrer os alunos. Agradeço a todos que conheci nessa jornada até aqui, cada um contribuiu da sua forma para que este trabalho fosse concretizado. Por fim, agradeço a FACEPE pelo apoio financeiro.

# Resumo

Nesta dissertação, investigamos as flutuações do ângulo spin Hall em grafeno. Para isso, simulamos o efeito Hall de spin em uma estrutura de rede hexagonal desordenada conectada a quatro terminais, com interação spin-órbita do tipo Rashba. Apresentamos aqui uma revisão de conceitos analíticos envolvidos no nosso trabalho, como a teoria de Landauer-Büttiker e a descrição tight-binding para o grafeno. Mostramos numericamente que as flutuações da eficiência da conversão da corrente de carga para spin estão relacionadas com as flutuações da corrente de carga, diretamente proporcionais a intensidade da interação spin-órbita e inversamente proporcionais a energia. Além disso, mostramos uma conexão entre os resultados numéricos obtidos e a teoria analítica existente, ou seja, demonstramos que o grafeno segue uma relação universal entre o produto do máximo desvio do ângulo spin Hall e a condutividade de carga. Por fim, obtivemos o livre caminho médio para o grafeno na nossa rede.

**Palavras-chave:** Spintrônica, Transporte Eletrônico, Flutuações, Efeito Hall de Spin, Grafeno.



# Abstract

In this work, we have investigated the fluctuations of the spin Hall angle in graphene. Furthermore, we developed a numerical calculation for the spin Hall effect in a disorderly structure with hexagonal lattice that is connected to the four terminals, with Rashba spin-orbit interaction. We present a review of analytical concepts involved in our work, as the Landauer-Büttiker theory and the tight-binding model for graphene. We show that fluctuations of efficiency for conversion of the charge current to spin current are related with fluctuations of the charge current, directly proportional to the intensity of the spin-orbit interaction and inversely proportional to energy. Moreover, we show a connection between the numerical results obtained and the existing analytical theory, that is, we demonstrate that graphene follows a universal relationship between the product of the maximum deviation from the spin Hall angle and charge conductivity. Finally, we got the mean free path for graphene on our lattice.

**Keywords:** Spintronics, Electronic Transport, Fluctuations, Spin Hall Effect, Graphene.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Breve apresentação dos capítulos . . . . .	9
1.1.1	Capítulo 2 . . . . .	9
1.1.2	Capítulo 3 . . . . .	10
1.1.3	Capítulo 4 . . . . .	10
1.1.4	Capítulo 5 . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Efeito Hall de Spin</b>	<b>12</b>
2.1	Efeito Hall Clássico . . . . .	12
2.1.1	Modelo de Drude . . . . .	12
2.1.2	Formalismo de Landauer- Büttiker . . . . .	15
2.2	O acoplamento Spin-órbita . . . . .	19
2.3	Comprimentos característicos . . . . .	28
2.4	Efeito Hall de Spin . . . . .	31
<b>3</b>	<b>Grafeno</b>	<b>36</b>
3.1	Introdução . . . . .	36
3.2	Hamiltoniano Tight-Binding . . . . .	38
3.2.1	Comportamento próximo aos cones de Dirac . . . . .	42
3.2.2	Estrutura de banda com interação spin-órbita do tipo Rashba . . . . .	44
3.3	Efeito da desordem de Anderson na condutância . . . . .	45

3.4	Simetrias em Grafeno . . . . .	47
3.4.1	Simetria de reversão temporal . . . . .	49
3.4.2	Simetria de rotação do spin . . . . .	50
3.4.3	Simetria partícula-buraco . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>52</b>
4.1	Introdução . . . . .	52
4.2	Corrente Hall de spin $I_{SH}$ em função da desordem . . . . .	53
4.3	Corrente de carga $I_C$ em função da desordem . . . . .	55
4.4	Ângulo spin-Hall $\Theta_{SH}$ em função da desordem . . . . .	58
4.5	Conexão dos resultados numéricos com a hipótese analítica . . . . .	60
<b>5</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>63</b>
	<b>Referências</b>	<b>71</b>

# Lista de Figuras

1.1	No efeito Hall clássico, ao aplicar o campo magnético no condutor, os elétrons serão submetidos a uma força que fará com que sejam defletidos para as bordas da amostra. No efeito Hall de spin, a força experimentada pelos elétrons é devido a interação spin-órbita e os elétrons serão defletidos conforme sua orientação de spin, dando origem a um fluxo perpendicular ao fluxo original. Figura retirada de [1]. . . . .	3
1.2	Na imagem <b>A</b> temos o layout do experimento, utilizando de um filme condutor de GaAs e na imagem <b>B</b> , a medida experimental da acumulação de spin up e down como função do campo magnético. Imagem retirada de [2]. . . . .	5
1.3	A imagem mostra o layout da estrutura utilizada na descrição analítica e o resultado obtido para a média e desvio da condutância spin Hall em função da desordem, para diferentes valores de interação spin-órbita. Imagem retirada de [3]. . . . .	6
1.4	A imagem <b>(a)</b> mostra a imagem tridimensional do dispositivo experimental. A imagem <b>(b)</b> mostra uma imagem ótica de uma matriz 3x3 de um conjunto de dispositivos. Na imagem <b>(c)</b> temos a micrografia eletrônica de varredura do dispositivo. Imagem retirada de [4]. . . . .	8
2.1	Um elétron se movendo livremente em uma placa submetido a um campo elétrico e um magnético, conseqüentemente, este é submetido a uma força. . .	13
2.2	(a)Estrutura com 4 terminais, Probabilidade de transmissão em função do campo magnético perpendicular à amostra (b) do terminal 1 para o 3, (c) do terminal 1 para o 4 e (d) do terminal 1 para o 2. Figura retirada de [5]. . .	16

2.3	A linha contínua representa o resultado numérico e a tracejada, a medida experimental da resistência Hall em função do campo magnético. Figura retirada de [5]. . . . .	19
2.4	(a) Dispersão da energia para o hamiltoniano sem ISO ( $k_{SO} = 0$ ) e (b) Dispersão da energia para o hamiltoniano perturbado com ISO Rashba ( $k_{SO} \neq 0$ ). Figura adaptada da referência [6]. . . . .	26
2.5	A imagem mostra o limite de comprimento de uma amostra mesópica <b>(a)</b> , a dinâmica de um elétron em um condutor balístico <b>(b)</b> e em um condutor desordenado <b>(c)</b> . . . . .	31
2.6	Cavidade caótica balística com quatro terminais. Entre os terminais 1 e 2 existe uma diferença de potencial que proporciona uma corrente de carga entre esses terminais, entre os terminais 3 e 4 não há corrente de carga. Figura retirada da referência [7]. . . . .	32
3.1	Na parte superior está representada uma monocamada de grafeno que dá origem (representado na parte inferior) ao fulereno quase-0D, nanotubo de carbono 1D e grafite 3D (da direita para a esquerda, respectivamente). Figura retirada de [8]. . . . .	37
3.2	Estrutura de rede hexagonal apresentando borda armchair nas laterais e zigzag na parte superior e inferior. Figura gerada pelo pacote Kwant. . . . .	37
3.3	A figura na esquerda mostra a estrutura de rede do grafeno e seus respectivos vetores do espaço real, onde $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ são os vetores da rede unitária e $\delta$ representa os vetores de primeiros vizinhos. À direita temos a zona de Brillouin correspondente, onde os pontos $K$ e $K'$ marcam a localização dos cones de Dirac. Figura retirada de [9]. . . . .	39
3.4	Dispersão eletrônica na rede hexagonal típica do grafeno, com ampliação da dispersão em torno de um dos pontos de Dirac. Figura retirada de [9]. . . .	43
3.5	Estrutura de banda para fita de grafeno com borda zigzag na presença de diferentes valores de interação spin-órbita tipo Rashba, com $\lambda_R = (0, 0.2, 0.4, 0.6)$ . . . . .	46

3.6	A figura mostra uma fita com rede hexagonal(típica do grafeno), conectada a dois terminais. . . . .	47
3.7	Comportamento da condutância em função da energia de Fermi em uma fita de grafeno sem desordem(na esquerda) e com desordem(na direita). . . . .	48
4.1	Estrutura de rede hexagonal conectada a quatro terminais e ao lado uma ampliação da estrutura. A região central(em azul) é a região de espalhamento, onde foi adicionado a desordem e a interação spin-órbita tipo Rashba. A corrente de carga longitudinal é representada pela seta preta e as componentes spin up e down da corrente de spin transversal são representadas pelas setas azul e vermelha. . . . .	53
4.2	As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de spin, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio da corrente de spin em função da desordem $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de $\lambda_R$ com energia fixa $E = 0.8$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de $E$ fixando o valor da interação em $\lambda_R = 0.6$ . Em ambos os casos, o resultado do desvio máximo da corrente Hall de spin é $rms [I_{SH} = 0.18]$ (linha tracejada), assim como reportado na referência [3]. . . . .	55
4.3	As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de carga, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio da corrente de carga em função da desordem $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de $\lambda_R$ com energia fixa $E = 0.8$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de $E$ fixando o valor da interação em $\lambda_R = 0.6$ . Em ambos os casos, o resultado do desvio máximo da corrente de carga é $rms [I_C = 0.52]$ (linha tracejada). . . . .	57
4.4	As figuras (a) e (c) mostram a média do ângulo spin Hall, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio do ângulo spin Hall em função da desordem $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de $\lambda_R$ com energia fixa $E = 0.8$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de $E$ fixando o valor da interação em $\lambda_R = 0.6$ . . . . .	59

4.5 A figura (a) mostra o coeficiente de transmissão  $T_i^\alpha(E)/2 = N$  como função da energia de Fermi. A figura (b) mostra os máximos desvios do ASH obtidos na figura (4.4.d) como função da espessura  $N$ . A linha tracejada é um fit numérico. . . . . 62

# Capítulo 1

## Introdução

A spintrônica utiliza-se do grau de liberdade do elétron como proposta para otimização do transporte de portadores, pois a corrente de spin pode ser transportada sem efeitos dissipativos, possibilitando a criação de dispositivos com baixas perdas de energia e assim abrindo possibilidade para uma maior velocidade no transporte de informações. A primeira descrição de propriedades da corrente de spin foi feita por Silsbee, em 1985 [10], utilizando da junção de um metal ferromagnético com um paramagnético. Em 1988, dois grupos distintos [11, 12] descobriram que a resistência nesse tipo de junção depende da orientação dos spin na camada ferromagnética. Esta descoberta, chamada magnetoresistência gigante, possibilitou a primeira aplicação significativa da spintrônica na eletrônica moderna, que foi o aprimoramento da capacidade de armazenamento de dados de forma não-volátil, a partir da utilização de sensores de campo magnético nas unidades de disco rígido [13, 14].

Em 1990, Datta [15] propôs a utilização de transporte baseado em spin, manipulando o grau de orientação do spin através da magnetização dos contatos de um semiconductor com espessura reduzida. Este trabalho abriu novas possibilidades em transporte eletrônico, sendo seguido por outros trabalhos com propostas de sistemas integrando semicondutores a contatos magnetizados, que levaram a grandes avanços experimentais, como a demonstração da injeção e transporte de spin em metais [16], em 2001.

Em 2007, Lou [17] detectou o transporte de spin em semicondutores. Este trabalho em especial ofereceu uma nova perspectiva sobre a utilização do spin na computação quântica.



Dentro desse contexto, buscou-se estudar mecanismos que oferecessem uma otimização dos materiais quanto a sua capacidade de geração de corrente de spin. Neste sentido, o efeito Hall de spin (EHS) tem sido objeto de estudo em muitos trabalhos da área e figura como uma das mais importantes manifestações da spintrônica, pois permite a conversão de carga para spin, possibilitando a manipulação de correntes puras de spin sem a aplicação de um campo magnético.

Um campo externo aplicado a um material fará com que os elétrons adotem uma direção preferencial, dando origem a uma corrente. Desde a década de 60, já era observado que esse feixe de elétrons polarizado será espalhado ao passar por um alvo, adotando uma direção preferencial conforme a direção do spin devido a interação spin-órbita. A interação spin-órbita (ISO) é um efeito relativístico que se manifesta em muitas áreas em física da matéria condensada. Este efeito é visto desde o início da mecânica quântica, devido a suas manifestações e aplicações em temas como estrutura hiperfina e espectroscopia. Mais recentemente a ISO tem sido abordada em trabalhos na área de spintrônica, como sendo responsável por processos de manipulação da corrente de spin, sem a necessidade de um campo magnético. Pois a interação spin-órbita é a responsável pela orientação dos spins em uma direção preferencial, sendo imprescindível sua presença para observação do EHS. Isto permite utilizá-la como mais uma ferramenta para conhecer e controlar as propriedades de transporte eletrônico do spin.

Em 1971, Dyakonov e Perel propuseram que os múltiplos espalhamentos sofridos pelos portadores de carga dentro de um condutor poderiam dar origem a um fluxo de spin perpendicular à corrente e direcionado a borda do material [18]. Diferentemente do até então conhecido efeito Hall, neste fenômeno não só era desnecessária a aplicação de um campo magnético, como a presença deste destruiria a orientação do spin [19]. Esta proposta trata da primeira descrição do efeito Hall de spin, que só foi nomeado assim em 1999, por Hirsch [1], ao propor um experimento para gerar e detectar corrente de spin em um paramagnético. Este termo foi usado devido a semelhança com o efeito Hall clássico, com a diferença de que no EHS a polarização do spin é dominada pela interação spin-órbita e não pelo campo magnético. A diferença entre os dois efeitos foi ilustrada no trabalho de Hirsch, como se segue na figura 1.1. Podemos ver na primeira imagem que no efeito Hall clássico, o campo

magnético será o responsável pela deflexão dos elétrons, que se acumularão nas bordas da amostra. Na segunda imagem, está ilustrado o efeito Hall de spin, onde vemos os elétrons sendo defletidos de acordo com o spin, sendo essa deflexão causada pelo desequilíbrio no nível de Fermi entre os spin up e down, o que foi proposto experimentalmente por Hirsch como mecanismo de geração de corrente de spin. No entanto, devido a limitação experimental que não permitia a detecção da polarização do spin, o EHS demorou décadas para ser explorado.

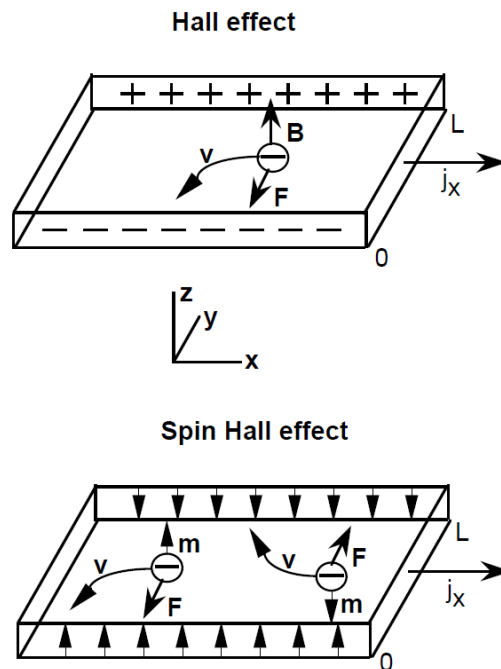


Figura 1.1: No efeito Hall clássico, ao aplicar o campo magnético no condutor, os elétrons serão submetidos a uma força que fará com que sejam defletidos para as bordas da amostra. No efeito Hall de spin, a força experimentada pelos elétrons é devido a interação spin-órbita e os elétrons serão defletidos conforme sua orientação de spin, dando origem a um fluxo perpendicular ao fluxo original. Figura retirada de [1].

O EHS consiste na geração de uma corrente pura de spin transversal a um campo elétrico aplicado e é resultado da interação spin-órbita. Teremos uma corrente spin up em uma direção e uma corrente spin down na direção oposta, resultando em um fluxo de spin sem qualquer corrente de carga. Assim como o efeito Hall clássico, é previsto que haja uma acumulação de cargas opostas nas bordas da amostra. Com o desenvolvimento de

dispositivos cada vez mais sensíveis, em 2004 a polarização da corrente de spin induzida foi observada experimentalmente pela primeira vez por Awschalom [2]. Este trabalho reportou a detecção de uma corrente de spin em filmes semicondutores. A medida foi feita através da detecção da acumulação de spin nas bordas das amostras como resposta a um campo elétrico aplicado, o que indica a presença da corrente de spin, conforme foi antecipado. Neste trabalho, também foi comprovada a previsão de que um campo magnético destruiria a polarização do spin, sendo necessário a ausência deste para a ocorrência do EHS. Na imagem 1.2, podemos ver a ilustração do experimento com a amostra de GaAs sendo submetida a aplicação de um campo elétrico, com uma ampliação mostrando a acumulação dos spins em bordas opostas (A). Também é mostrada a medida experimental realizada da detecção da polarização dos spins up e down (gráficos em vermelho e azul, respectivamente) em bordas opostas da amostra, com a acumulação decaindo com o aumento do campo magnético (B).

A partir daí, centenas de publicações teóricas e experimentais foram dedicadas a explorar as potencialidades e aplicações do efeito Hall de spin. A capacidade de manipulação do spin proporcionada por este efeito abre um leque de possibilidades teóricas e experimentais, desde a aplicação na indústria de tecnologia até a compreensão da natureza da interação do spin em sólidos. Como forma de quantificar a eficiência da conversão da corrente de carga em corrente de spin, é frequentemente usado o ângulo spin Hall (ASH), que é definido como a razão entre a corrente de spin transversal e a corrente de carga longitudinal. Neste sentido, o ASH está diretamente relacionado com a condutividade spin Hall gerada pelo EHS. No entanto, a presença de desordem e interação spin-órbita interfere no comportamento da condutância spin Hall ( $G_{SH}$ ) gerada pelo efeito Hall de spin. Essa interferência é refletida em flutuações nas medidas experimentais, que são de natureza diferente das observadas na corrente de carga. Os valores experimentais do ASH podem variar desde 0,01% até 58% para diferentes materiais em regime desordenado. Devido à importância da geração da corrente de spin, fez-se necessário investigações acerca do papel das flutuações na condutividade spin Hall.

A flutuação universal da condutância foi investigada teoricamente em 2006 por Ren[3], que realizou uma descrição analítica utilizando o modelo tight-binding em um dispositivo desordenado conectado a quatro terminais e com a presença de interação spin-órbita. O

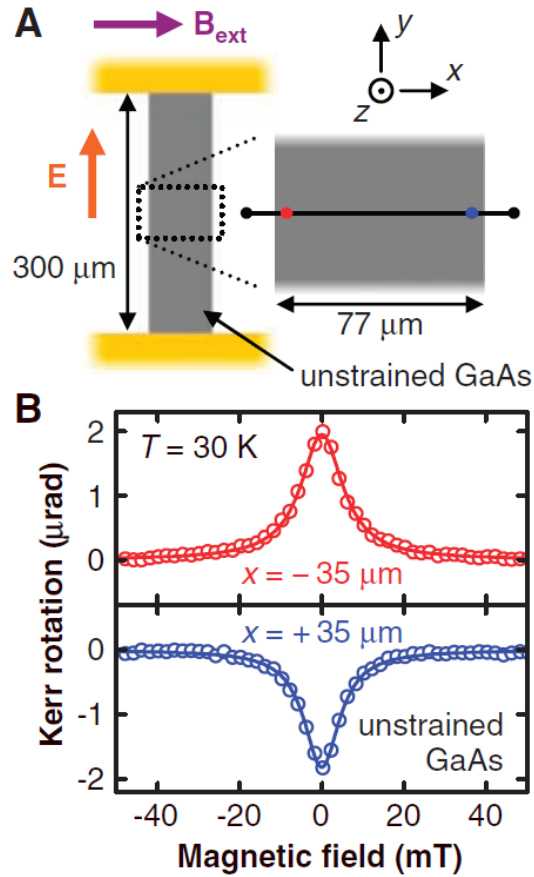


Figura 1.2: Na imagem **A** temos o layout do experimento, utilizando de um filme condutor de GaAs e na imagem **B**, a medida experimental da acumulação de spin up e down como função do campo magnético. Imagem retirada de [2].

resultado obtido foi que as flutuações da condutância spin Hall apresenta um valor universal de  $\text{rms}[G_{SH}] = 0.18e/4\pi$ , que na presença de forte ISO, independe de outros parâmetros do sistema. Na figura 1.3 temos o design da estrutura utilizada no trabalho e o resultado numérico obtido da média e desvio da condutância spin Hall em função da desordem, para diferentes valores de interação spin-órbita (representada pelos símbolos diferentes nas curvas). A figura mostra que a média de  $G_{SH}$  localiza à medida que a desordem aumenta. Contudo, as flutuações tendem a aumentar até um valor universal ( $\text{rms}[G_{SH}] = 0.18$ ). Em seguida, as flutuações começam a diminuir indicando que o sistema está indo para o regime isolante. Note, que o valor máximo da flutuação independe do valor da ISO e de outras características do sistema.

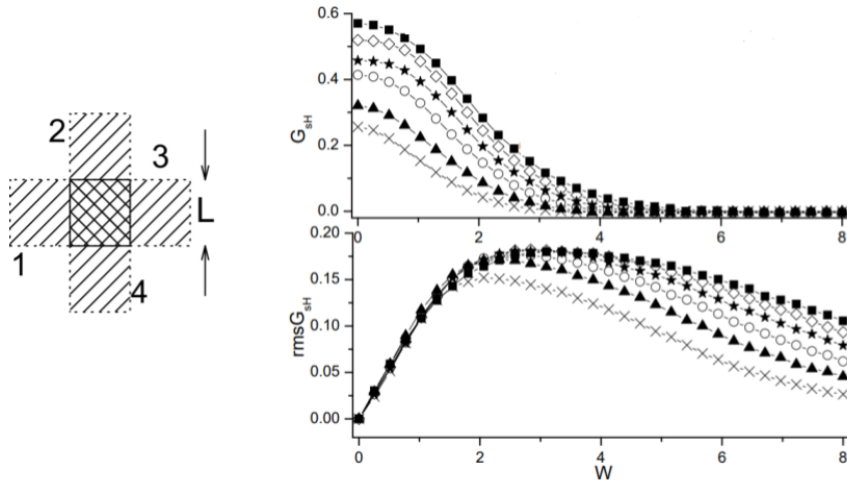


Figura 1.3: A imagem mostra o layout da estrutura utilizada na descrição analítica e o resultado obtido para a média e desvio da condutância spin Hall em função da desordem, para diferentes valores de interação spin-órbita. Imagem retirada de [3].

Este resultado foi recuperado em 2007 por Bardarson [20]. Este trabalho recuperou o valor da flutuação universal de  $G_{SH}$  utilizando do formalismo de Landauer-Büttiker e da teoria de matrizes aleatórias, demonstrando que este comportamento universal pode ser descrito através do ensemble circular simplético.

Como foi antecipado anteriormente, o AHS desempenha um papel importante no transporte de spin, neste sentido se torna relevante o estudo de suas flutuações. Na literatura existem muitos estudos teóricos acerca da eficiência de conversão, no entanto estava em aberto a resposta para a questão acerca das informações sobre o transporte eletrônico que as flutuações do ASH nos fornecem. Esta questão foi respondida por nós na referência [21], onde conectamos a hipótese analítica existente na literatura com os nossos resultados numéricos. No nosso trabalho, recuperamos o resultado numérico obtido por [3] para o valor universal da flutuação da condutância spin Hall em um dispositivo desordenado com quatro terminais, através das nossas simulações numéricas para a corrente spin Hall. Estendemos o resultado para diferentes valores de energia, investigamos as flutuações da corrente de carga e obtivemos o comportamento das flutuações do ângulo spin Hall. A partir disso, conectamos nossos resultados com a hipótese analítica, onde obtivemos como resultado principal que o

desvio do ASH depende apenas de três variáveis relevantes para o transporte eletrônico e que no limite de grandes comprimentos da amostra, o produto entre o máximo desvio do ASH e a condutividade fornece um número universal, independente do material ou qualquer outra característica do sistema. Os resultados obtidos neste trabalho mostram a importância da investigação das flutuações da conversão da corrente de carga para spin na spintrônica.

Todos os trabalhos vistos até este ponto consistiram nas aplicações da spintrônica em metais ou semicondutores, que serviram como base para o desenvolvimento teórico e aplicações experimentais do transporte de spin. No entanto, muitas aplicações da spintrônica esbarram em limitações experimentais. Por décadas, muitas propriedades do transporte de spin foram sequer detectadas, devido a falta de materiais capazes de transportar informação de spin por longas distâncias em temperatura ambiente. O isolamento do grafeno em 2004 [22], apresentando um longo comprimento de relaxação do spin em temperatura ambiente, medido em 2015 [23], mostra um novo caminho para aplicações na indústria. A sua descoberta foi seguida por um grande número de pesquisas acerca das propriedades físicas deste material, colocando o grafeno em posição de material promissor na spintrônica. Devido ao fato do grafeno apresentar uma fraca ISO, são utilizados mecanismos que melhoram a sua capacidade de geração de corrente de spin. Em sistemas bidimensionais com a presença de acoplamento Rashba, correntes de spin sempre acompanham correntes de carga [24], este tipo de acoplamento é observado no grafeno ao aplicar um campo elétrico na amostra. O campo fará com que a corrente de spin seja orientada em direção perpendicular à corrente de carga, este é o efeito Hall de spin, que foi observado no grafeno em 2005 [25].

Em 2013 os autores Balakrishnan *et al.* obtiveram experimentalmente pela primeira vez o valor do ângulo spin Hall ( $\theta_{SH}$ ) em grafeno na temperatura ambiente [26]. Neste trabalho foi feita uma hidrogenação controlada do grafeno como forma de melhorar sua ISO e observar o EHS. Esse processo permitiu que as medidas fossem feitas em baixas temperaturas e à temperatura ambiente. Com isso, obtiveram o ASH e observaram o efeito de um campo magnético sobre a medida. A primeira medida foi realizada na presença de um campo magnético, onde foi obtido um valor de  $\theta_{SH} = 0.18$ . Na segunda medida, que foi realizada no ponto de Dirac e na ausência de campo apresentou um valor de  $\theta_{SH} = 0.58$ , o que mostra que a presença do campo magnético de fato desfavorece a eficiência da

conversão. Em 2014 este grupo estendeu os resultados com a publicação da referência [4]. Neste trabalho, obtiveram que a deposição de átomos metálicos no grafeno leva a um maior valor de ISO e um maior valor do AHS. Foram realizadas medidas em bicamadas de cobre com grafeno sintetizado quimicamente através da deposição química do vapor de cobre, cobre com grafeno esfoliado e ouro com grafeno esfoliado. Na figura (1.4.a), temos uma imagem tridimensional do dispositivo experimental utilizado, na figura (1.4.b) temos uma imagem ótica de uma matriz 3x3 de um conjunto de dispositivos, onde temos o cobre esfoliado sobre uma bicamada de silício e dióxido de silício e na figura (1.4.c), temos a micrografia eletrônica de varredura do dispositivo. A corrente de carga é acionada através dos contatos C1/C2 e é registrada uma tensão entre os contatos C3/C4, os contatos usados são de ouro e crômio. Nas medidas realizadas neste segundo trabalho, obtiveram que a maior ISO ocorre nas camadas que utilizam o grafeno sintetizado quimicamente e um valor de  $\theta_{SH} \sim 0.2$  à temperatura ambiente. Estes trabalhos representam um importante passo para a aplicação do grafeno, pois mostra que a interação desse material com metais produz propriedades igualmente fortes, tais como as observadas no grafeno primário.

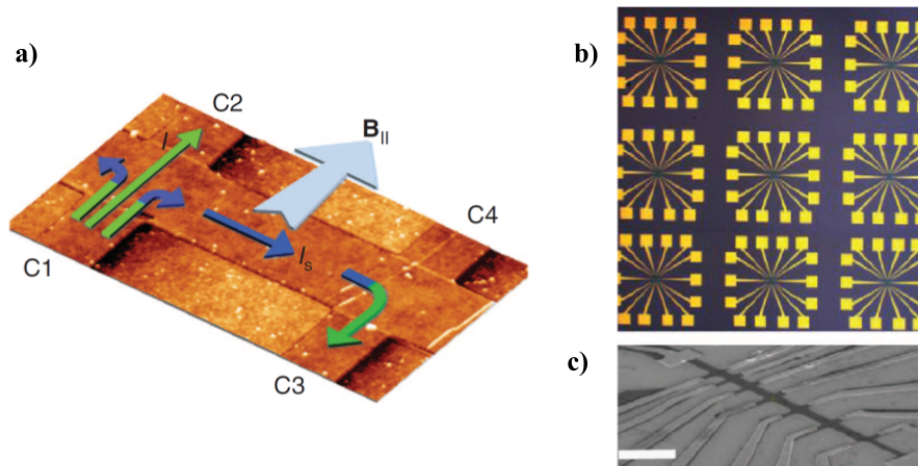


Figura 1.4: A imagem (a) mostra a imagem tridimensional do dispositivo experimental. A imagem (b) mostra uma imagem ótica de uma matriz 3x3 de um conjunto de dispositivos. Na imagem (c) temos a micrografia eletrônica de varredura do dispositivo. Imagem retirada de [4].

Dado as potencialidades do grafeno, necessita-se responder como as flutuações do ângulo

spin Hall se comportam neste material. Motivados pelos trabalhos apresentados aqui, buscamos nessa dissertação responder essa pergunta e extrair as informações que as flutuações do ângulo spin Hall nos fornecem no grafeno.

## 1.1 Breve apresentação dos capítulos

O principal objetivo desta dissertação consiste em investigar as informações fornecidas pelas flutuações do ângulo spin Hall e conectar os resultados numéricos e analíticos encontrados na literatura acerca destas flutuações, quando ocorrem no grafeno. Para execução e construção do nosso problema, foi necessário conhecer os fenômenos de transporte envolvidos e sobretudo o material, assim como foi apresentado anteriormente. A seguir, teremos uma breve apresentação de como está organizado e um resumo do que será apresentado neste trabalho.

### 1.1.1 Capítulo 2

No capítulo 2 será apresentada uma revisão sobre o efeito Hall de spin. Para tal, inicialmente faremos uma revisão sobre o efeito Hall clássico através do modelo de Drude para metais, apresentando seu resultado bem conhecido do coeficiente Hall. Em seguida, iremos revisar a abordagem microscópica do formalismo de Landauer-Büttiker, revisitando seu resultado experimental obtido em 1992 para uma estrutura de 4 terminais. Na seção seguinte, revisaremos como ocorre a introdução do spin no modelo hamiltoniano, mostrando como ocorre o efeito do acoplamento spin-órbita, inserindo uma interação spin-órbita do tipo Rashba na descrição da dinâmica de uma partícula livre. Por fim, aplicaremos as ferramentas apresentadas e mostraremos como ocorre o efeito Hall de spin em uma cavidade caótica de 4 terminais, através da revisão do artigo do Bardarson [20], resgatando o resultado obtido para a flutuação universal da condutância spin Hall.



### 1.1.2 Capítulo 3

O capítulo 3 é dedicado ao grafeno e como suas propriedades de transporte são afetadas na presença de impurezas ou quebra de simetria espacial. Primeiro, revisaremos o trabalho de Wallace de 1946, apresentando a descrição Tight-Binding para este material, mostrando sua estrutura de rede, revisitando o conceito da rede de Bravais e obtendo através deste modelo a expressão para a dispersão da energia. Ainda acerca do modelo tight-binding, faremos a descrição matemática do comportamento próximo aos cones de Dirac e mostraremos o efeito da interação spin-órbita do tipo Rashba, que foi apresentada no capítulo anterior, sobre a estrutura de banda do grafeno. Seguindo, faremos uma breve revisão sobre a desordem de Anderson e apresentaremos o efeito da desordem na condutância, que passa a apresentar flutuações, que serão estudadas no capítulo seguinte. Para finalizar, faremos uma revisão das simetrias envolvidas no caso simplético dos essembles de Wigner-Dyson no grafeno, discutindo as implicações da desordem de Anderson e da interação spin-órbita do tipo Rashba, que são utilizadas nas nossas simulações, sobre essas simetrias.

### 1.1.3 Capítulo 4

O capítulo 4 apresenta os resultados obtidos na dissertação. Este capítulo une os conceitos mostrados no capítulos anteriores. Simulamos numericamente o efeito Hall de spin em uma rede hexagonal com 4 guias, com a presença da desordem de Anderson e da interação spin-órbita do tipo Rashba. Aplicando nossas simulações numéricas, resgatamos o resultado numérico obtido por Ren [3], para a flutuação universal da corrente spin Hall e obtivemos também um valor universal para as flutuações da corrente de carga. Como produtos principais dessa dissertação, obtivemos o comportamento do ângulo spin Hall como função da desordem, sua amplitude máxima no grafeno e por fim, conectamos os nossos resultados numéricos com a hipótese analítica.

### 1.1.4 Capítulo 5

O capítulo 5 finaliza nossa dissertação, onde enfatizaremos os principais resultados e apresentaremos as conclusões deste trabalho. Apresentaremos também perspectivas acerca

---

de trabalhos futuros, estendendo nossos resultados ou ainda os utilizando para descrição de outros problemas.

# Capítulo 2

## Efeito Hall de Spin

Neste capítulo faremos uma revisão sobre o efeito Hall clássico (EHC) e o efeito Hall de spin (EHS). O primeiro é observado a partir do acúmulo de cargas nas bordas de uma determinada amostra devido a aplicação de um campo magnético, gerando um campo elétrico transversal à direção da corrente aplicada. Faremos inicialmente a demonstração do EHC a partir do modelo de Drude e resgataremos o resultado a partir do formalismo de Landauer-Büttiker. O EHS foi relatado pela primeira vez em 1971 por Dyakonov e Perel [18, 19]. Eles mostraram teoricamente que devido a interação spin-órbita, os portadores spin-up e spin-down se acumulam em lados opostos de uma determinada amostra, dando origem a uma corrente de spin transversal à corrente de carga aplicada a amostra. Neste trabalho, estudaremos o EHS em uma estrutura desordenada de quatro terminais de grafeno, semelhante a estruturas utilizadas experimentalmente em física mesoscópica aplicada a dispositivos bidimensionais. Seguindo a tendência de recentes trabalhos, adotaremos o ângulo spin Hall como a medida da eficiência da conversão de corrente de carga em corrente de spin.

### 2.1 Efeito Hall Clássico

#### 2.1.1 Modelo de Drude

Vamos supor uma placa metálica paralela ao eixo  $xy$  submetida a um campo elétrico  $\mathbf{E}$  e um campo magnético  $\mathbf{B}$ , conforme descrito na figura 2.1.

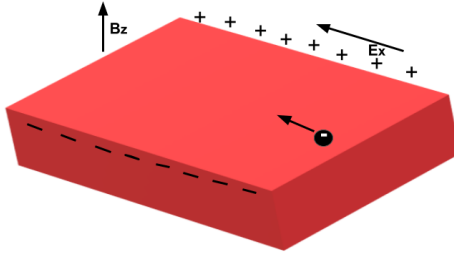


Figura 2.1: Um elétron se movendo livremente em uma placa submetido a um campo elétrico e um magnético, conseqüentemente, este é submetido a uma força.

O elétron estará submetido então a uma força composta por dois termos, dados pela força elétrica e a força de Lorentz, teremos que:

$$\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.1)$$

De acordo com a referência [27], é conveniente formular o problema usando álgebra matricial, que nos permite obter soluções mais generalizadas e facilitando assim o cálculo da densidade de corrente  $J$ . Para tal, devemos escrever primeiro a equação de movimento de forma vetorial, como se segue

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} + \frac{\mathbf{J} - \sigma_0 \mathbf{E}}{\tau} + \frac{-e}{m} (\mathbf{B} \times \mathbf{J}) = 0, \quad (2.2)$$

onde  $\sigma_0 = ne^2\tau/m$  é a condutividade elétrica,  $\tau$  é o termo de relaxação proposto por Drude, que descreve o tempo médio entre duas colisões sucessivas sofridas por um elétron e  $n$  é a densidade eletrônica. A equação 2.2 pode ser escrita como uma equação matricial definindo uma matriz  $\tilde{\beta}$ , cujo efeito é realizar a operação  $\gamma \mathbf{B} \times$ , com  $\gamma = -e/m$ . Teremos

$$\tilde{\beta} \equiv \gamma \mathbf{B} \times = \gamma \begin{pmatrix} 0 & -B_z & B_y \\ B_z & 0 & -B_x \\ -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Onde podemos observar que a estrutura de  $\tilde{\beta}$  é devida ao fato de não termos corrente na direção  $z$ , tornando necessário que os elementos na diagonal sejam nulos. Podemos escrever agora a equação 2.2 como

$$\frac{d\mathbf{J}}{dt} + \left[ \frac{1}{\tau} + \beta \right] \mathbf{J} = \sigma_0 \frac{\mathbf{E}(t)}{\tau}, \quad (2.4)$$

quando  $\mathbf{E}$  e  $\mathbf{B}$  forem independentes do tempo e tivermos um tempo suficientemente longo, teremos como solução da equação 2.4 uma função estacionária dada por

$$\mathbf{J}(t) = \frac{\sigma_0}{\tau} \left( \frac{1}{\tau} + \beta \right)^{-1} \mathbf{E}, \quad (2.5)$$

onde  $(1/\tau + \beta)$  é dado pela matriz

$$\left( \frac{1}{\tau} + \beta \right) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\tau} & -\gamma B_z & \gamma B_y \\ \gamma B_z & \frac{1}{\tau} & -\gamma B_x \\ -\gamma B_y & \gamma B_x & \frac{1}{\tau} \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Na configuração apresentada da figura 2.1, temos um campo magnético com apenas uma componente perpendicular à placa, onde age um campo elétrico na direção  $x$  e  $y$ . Assim teremos  $\mathbf{B} = (0, 0, B_0)$  e  $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ . Calculando a inversa de 2.6 e aplicando essas informações na solução estacionária da densidade de corrente, dada pela equação 2.5, obtemos

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \frac{\sigma_0 \tau^2}{1 + \gamma^2 \tau^2 B_0^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\tau^2} & \gamma B_0 / \tau & 0 \\ -\gamma B_0 / \tau & \frac{1}{\tau^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\tau^2} + \gamma^2 B_0^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Conforme o tempo for passando, teremos um acúmulo de cargas cada vez maior nas bordas da amostra, tornando o fluxo de corrente nessa direção nulo em um tempo suficientemente longo. Quando isto ocorre,  $J_y = 0$  e podemos obter a partir da equação 2.7, o valor do chamado campo Hall

$$E_y = -\frac{B_0}{ne} J_x. \quad (2.8)$$

Devido ao acúmulo de cargas, será observado também uma resistência entre as bordas opostas da amostra, que é o chamado coeficiente Hall, definido como

$$R_H \equiv \frac{E_y}{B_0 J_x} = -\frac{1}{ne}. \quad (2.9)$$

O resultado mostra que o coeficiente Hall depende apenas do valor da densidade eletrônica, o que demonstra que  $R_H$  é uma propriedade intrínseca do material, podendo assim ser calculado experimentalmente. Isto mostra que o modelo de Drude é útil em situações que a utilização de uma abordagem simples é suficiente.

Na próxima seção faremos uma revisão sobre o Formalismo de Landauer-Buttiker, que nos fornece um formalismo mais abrangente para abordar situações nas escalas microscópicas, incorporando correções necessárias a lei de Ohm.

### 2.1.2 Formalismo de Landauer- Büttiker

Nesta seção iremos novamente obter uma expressão para o coeficiente Hall usando o formalismo de Landauer-Büttiker. Revisaremos o resultado experimental obtido em 1992 [5], em que foram inicialmente realizadas as medidas das probabilidades de transmissão  $T$  em função do campo magnético perpendicular em uma estrutura com quatro terminais, de acordo com a figura (2.2 a).

Para obter o resultado numérico desejado, iniciaremos novamente por escrever uma expressão para a corrente. Segundo a referência [28], temos que a corrente medida em um determinado terminal  $p$  proveniente de um terminal  $q$  em um dado circuito fechado é dada por

$$I_p = \sum_q [G_{qp} V_p - G_{pq} V_q], \quad (2.10)$$

onde  $G_{qp}$  ( $G_{pq}$ ) é a condutância medida no terminal  $q$  proveniente de um terminal  $p$ . Teremos

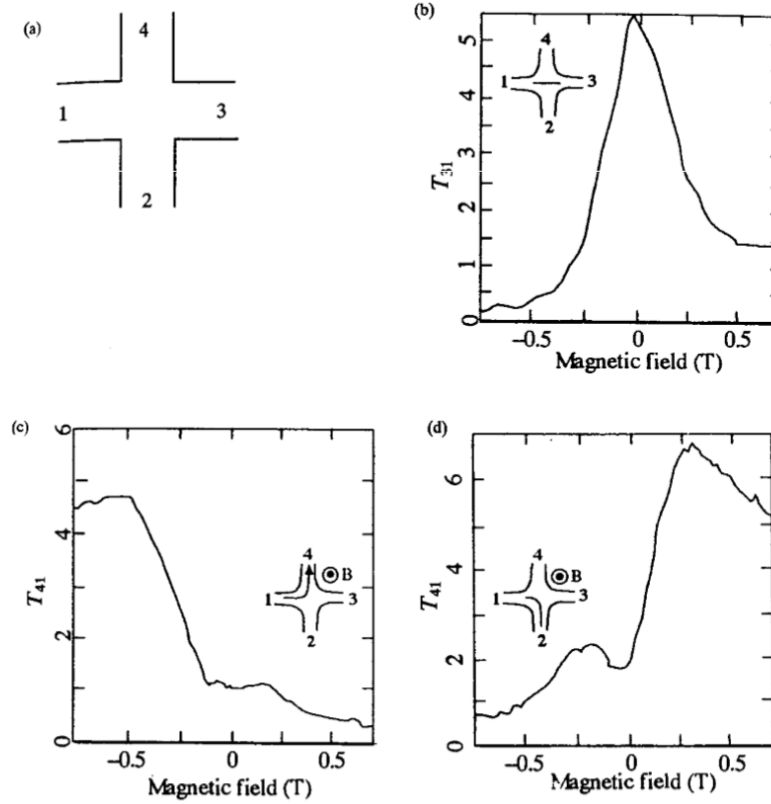


Figura 2.2: (a) Estrutura com 4 terminais, Probabilidade de transmissão em função do campo magnético perpendicular à amostra (b) do terminal 1 para o 3, (c) do terminal 1 para o 4 e (d) do terminal 1 para o 2. Figura retirada de [5].

que a corrente será zero quando todos os potenciais forem iguais, o que nos leva a

$$\sum_q G_{qp} = \sum_q G_{pq}. \quad (2.11)$$

Desta forma, a equação 2.10 será dada por

$$I_p = \sum_q G_{pq} [V_p - V_q]. \quad (2.12)$$

Essa equação pode ser aplicada a condutores multi-terminais. Aqui será aplicada a um condutor com quatro voltagens de prova. A soma das correntes ( $\sum_{i=1}^{n=4} I_i = 0$ ), que é devida a conservação da carga, garante que a Lei de Kirchoff é satisfeita. Também desde que as

correntes dependam exclusivamente das diferenças de voltagem entre os terminais, podemos, sem perda de generalidade, definir uma das voltagens sendo 0. Fixando  $V_4 = 0$ , teremos da equação 2.12

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} G_{12} + G_{13} + G_{14} & -G_{12} & -G_{13} \\ -G_{21} & G_{21} + G_{23} + G_{24} & -G_{23} \\ -G_{31} & -G_{32} & G_{31} + G_{32} + G_{34} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Temos da fórmula de Landauer que a condutância pode ser escrita como

$$G = \frac{2e^2}{h} \bar{T}, \quad (2.14)$$

onde  $\bar{T}$  é o produto do número de modos transversos  $N$  e a probabilidade de transmissão em cada modo  $T$ ,  $\bar{T} = NT$ . Temos ainda da equação 2.14, que  $2e^2/h$  é o valor mínimo de condutância.

Definindo

$$\bar{T}_{13} = \bar{T}_{31} = \bar{T}_{42} = \bar{T}_{24} \equiv T_F,$$

$$\bar{T}_{21} = \bar{T}_{32} = \bar{T}_{43} = \bar{T}_{14} \equiv T_R,$$

$$\bar{T}_{41} = \bar{T}_{12} = \bar{T}_{23} = \bar{T}_{34} \equiv T_L.$$

A medida experimental destes coeficientes em função do campo magnético, pode ser vista na figura (2.2b, c e d). Usando as definições e substituindo a equação 2.14 na equação 2.13, teremos

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix} = \frac{2e^2}{h} \begin{bmatrix} T_0 & -T_L & -T_F \\ -T_R & T_0 & -T_L \\ -T_F & -T_R & T_0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Assim

$$I_1 = \frac{2e^2}{h} [T_0 V_1 - T_L V_2 - T_F V_3], \quad (2.16)$$

$$I_2 = \frac{2e^2}{h} [-T_R V_1 + T_0 V_2 - T_L V_3], \quad (2.17)$$

$$I_3 = \frac{2e^2}{h} [-T_F V_1 - T_R V_2 + T_0 V_3]. \quad (2.18)$$



Estamos interessados na resistência Hall, que nessa configuração representa a resistência dada pela razão entre a tensão no terminal 2 e a corrente proveniente no terminal 1. Temos que

$$\begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ V_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

o que nos fornece

$$V_1 = [R_{11}I_1 + R_{12}I_2 + R_{13}I_3], \quad (2.20)$$

$$V_2 = [R_{21}I_1 + R_{22}I_2 + R_{23}I_3], \quad (2.21)$$

$$V_3 = [R_{31}I_1 + R_{32}I_2 + R_{33}I_3]. \quad (2.22)$$

Temos que  $I_1 = -I_3$  e  $I_2 = 0$ . Substituindo na equação 2.22, teremos

$$V_2 = I_1 [R_{21} - R_{23}]. \quad (2.23)$$

Resolvendo as equações, teremos

$$R_{21} = \frac{h}{2e^2\Delta} [T_L T_0 + T_F T_R], \quad (2.24)$$

$$R_{23} = \frac{h}{2e^2\Delta} [T_R T_0 + T_F T_L], \quad (2.25)$$

com  $\Delta = [T_L + T_R] [T_L^2 + T_R^2 + 2T_F^2 + 2T_F T_L + 2T_F T_R]$ .

Finalmente, temos uma expressão para a resistência Hall, que será dada por

$$R_H = \frac{V_2}{I_1} = \frac{h}{2e^2\Delta} \frac{T_L - T_R}{T_L^2 + T_R^2 + 2T_F^2 + 2T_F T_L + 2T_F T_R}. \quad (2.26)$$

Na figura 2.3 temos o resultado experimental citado no início da seção, que mostra a comparação entre o resultado numérico e o experimental da medida da resistência Hall em função do campo magnético. A linha contínua mostra o resultado obtido numericamente e a linha tracejada o valor medido experimentalmente.

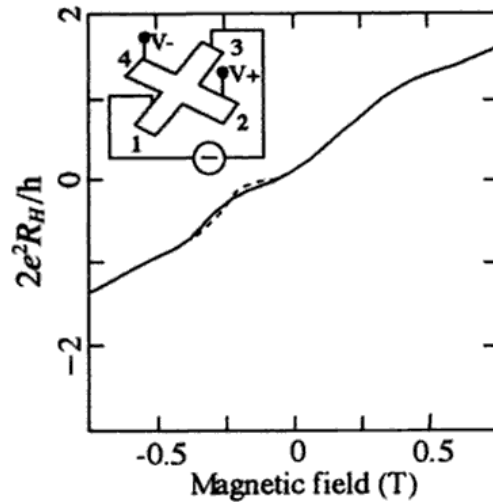


Figura 2.3: A linha contínua representa o resultado numérico e a tracejada, a medida experimental da resistência Hall em função do campo magnético. Figura retirada de [5].

O resultado experimental e numérico são bem próximos, podemos ver que existe uma dependência com as probabilidades de transmissão, o que demonstra a eficácia na utilização do formalismo de Landauer-Büttiker no estudo de estruturas multi-terminais.

Recentes trabalhos têm demonstrado que ao aplicar um campo elétrico em sistemas semicondutores com interações spin-órbita, será induzido um fluxo de corrente de spin perpendicular ao campo aplicado, o que vai gerar uma acumulação de spin e conseqüentemente o efeito Hall de spin será produzido. Mais adiante iremos tratar sobre o efeito que aparece quando um elétron em movimento nesse tipo de sistema é submetido a aplicação de interação spin-órbita, antes faremos uma introdução à interação spin-órbita na próxima seção.

## 2.2 O acoplamento Spin-órbita

Materiais bidimensionais(2D) têm se mostrado de grande interesse dentro da spintrônica devido a possibilidade de utilização em sistemas com propriedades eletrônicas que podem otimizar o transporte de informação. Para tal, é necessário conhecer e controlar as propriedades de transporte eletrônico do spin, o acoplamento spin-órbita (SOC) se mostra como uma alternativa para a manipulação do spin sem a necessidade da aplicação de um campo

magnético externo. O acoplamento spin-órbita é um efeito relativístico, que aparece quando um elétron se movimenta em um sólido (por exemplo), submetido a aplicação de um potencial, o acoplamento do movimento do elétron com o spin intrínseco é chamado de SOC [29, 30]. Um elétron que se move com momento  $\mathbf{p}$  em um campo elétrico

$$\mathbf{E} = -\nabla V, \quad (2.27)$$

do ponto de vista relativístico, estará submetido a um campo magnético efetivo proporcional a velocidade do elétron. Este campo magnético é sentido no referencial do elétron, devido ao campo elétrico ser externo é permitida a coexistência dos dois e a preservação do acoplamento. Teremos assim, que

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{p}}{mc^2} \times \mathbf{E}. \quad (2.28)$$

Podemos reescrever como

$$\mathbf{B} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \cdot \mathbf{p} \times \nabla \left( \frac{1}{r} \right), \quad (2.29)$$

como  $\nabla (1/r) = -\hat{r}/r^2$ , teremos

$$\mathbf{B} = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mc^2} \mathbf{p} \times \frac{\hat{r}}{r^2}. \quad (2.30)$$

O elétron possui um momento angular orbital da forma

$$\vec{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -\mathbf{p} \times \mathbf{r}, \quad (2.31)$$

o que nos permite escrever a equação 2.30 na forma

$$\mathbf{B} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mc^2} \frac{1}{r^2} \mathbf{L}. \quad (2.32)$$

Levando em consideração o momento de spin do elétron, teremos um hamiltoniano da forma

$$H = -\left( \frac{e}{mc} \right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}. \quad (2.33)$$

Substituindo a equação 2.32 na equação 2.33, podemos perceber o acoplamento do momento angular orbital com o spin. Teremos

$$H = - \left( \frac{e}{m^2 c^3} \right) \left( \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{r^2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (2.34)$$

O SOC pode ser dependente ou independente de simetria. A independência é característica de quase todos os tipos de estruturas cristalinas. A dependência de simetria vem da interação spin-órbita e requer quebra da simetria de inversão espacial e como essa simetria é quebrada divide o acoplamento em dois tipos. Quando a assimetria é causada por um fator externo, é chamada de Dresselhaus [31], quando é uma assimetria devido a uma interação com a superfície(ou rede), é chamada de Rashba [32, 33]. Se o campo elétrico citado inicialmente surge intrinsecamente do sistema ou é externamente aplicado, leva a um acoplamento tipo Rashba. Com  $\mathbf{E} = E\hat{z}$ , teremos um hamiltoniano da forma

$$H_R = \frac{\lambda_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (2.35)$$

onde  $\lambda_R$  é o parâmetro Rashba e  $\sigma$  são as matrizes de spin de Pauli.

Vamos analisar como o SOC afeta uma partícula livre. Sem a presença de interação spin-órbita (ISO), teremos um hamiltoniano em duas dimensões (2D) dado por

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m}. \quad (2.36)$$

É conhecido que a função de onda para uma partícula livre em 2D  $\psi(x, y)$  é dada por ondas planas, na forma

$$\psi(x, y) \propto \exp[i(k_x x + k_y y)], \quad (2.37)$$

de forma que a equação de autovalor  $H\psi(x, y) = E\psi(x, y)$ , fornece para a dispersão de energia

$$E = \frac{\hbar|k|^2}{2m} \therefore |k|^2 = k_x^2 + k_y^2. \quad (2.38)$$

Ao inserir o spin no sistema, encontramos agora estados degenerados, dados por

$$\psi(x, y) \propto \psi_{\uparrow} + \psi_{\downarrow}, \quad (2.39)$$

onde

$$\psi_{\uparrow}(x, y) = e^{i(k_x x + k_y y)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

$$\psi_{\downarrow}(x, y) = e^{i(k_x x + k_y y)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

A equação de autovalor agora nos fornecerá

$$E_{\uparrow, \downarrow} = \frac{\hbar^2}{2m} |k_{\uparrow, \downarrow}|^2, \quad (2.42)$$

o que mostra a presença de degenerescência no espectro. É interessante observar o que acontece com a relação de dispersão quando adicionamos um acoplamento spin-órbita do tipo Rashba, que é descrito pelo hamiltoniano da equação 2.35. Para tal, é necessário escrever um novo hamiltoniano que vai incorporar o termo do hamiltoniano Rashba. Esse termo é visto como uma perturbação no hamiltoniano da partícula livre, levando o novo hamiltoniano  $H'$  a ser descrito como uma soma do hamiltoniano original com a perturbação. Assim

$$H' = H^0 + H_R, \quad (2.43)$$

onde  $H^0$  corresponde ao hamiltoniano da equação 2.36, o sobrescrito 0 é utilizado para indicar a quantidade não perturbada. Logo, o novo hamiltoniano será escrito como

$$H' = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{\lambda_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (2.44)$$

Considerando o novo hamiltoniano, implica que devemos encontrar também novas autofunções e novos autovalores. Temos da equação 2.42, que os estados não perturbados são

degenerados, para resolver esse problema e encontrar a correção das energias, devemos usar a teoria da perturbação degenerada [34]. A perturbação quebrará a degenerescência e a energia não-perturbada se dividirá em duas. Os estados serão então escritos como uma combinação linear em relação as funções de onda não-perturbadas, teremos

$$\psi_{\uparrow}(x, y) = \alpha\psi_{\uparrow}^0 + \beta\psi_{\downarrow}^0, \quad (2.45)$$

$$\psi_{\downarrow}(x, y) = \alpha\psi_{\downarrow}^0 + \beta\psi_{\uparrow}^0. \quad (2.46)$$

Definimos então

$$W_{\uparrow\uparrow} \equiv \langle \psi_{\uparrow}^0 | H_R | \psi_{\uparrow}^0 \rangle, \quad (2.47)$$

$$W_{\downarrow\downarrow} \equiv \langle \psi_{\downarrow}^0 | H_R | \psi_{\downarrow}^0 \rangle, \quad (2.48)$$

$$W_{\uparrow\downarrow} \equiv \langle \psi_{\uparrow}^0 | H_R | \psi_{\downarrow}^0 \rangle, \quad (2.49)$$

$$W_{\downarrow\uparrow} \equiv \langle \psi_{\downarrow}^0 | H_R | \psi_{\uparrow}^0 \rangle, \quad (2.50)$$

que nos fornecem os elementos da matriz de  $H_R$  em relação às funções de onda não-perturbadas. Primeiro, vamos escrever a equação 2.47 como

$$W_{\uparrow\uparrow} = \int \int d\vec{x}' d\vec{x} \langle \psi_{\uparrow}^0 | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | H_R | \vec{x} \rangle \langle \vec{x} | \psi_{\uparrow}^0 \rangle. \quad (2.51)$$

Temos que

$$\langle \vec{x}' | H_R | \vec{x} \rangle = H_R = \frac{\lambda_R}{\hbar} \left( \sigma_x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_y \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \delta(\vec{x}' - \vec{x}), \quad (2.52)$$

o que nos fornece

$$H_R = -i\lambda_R \left( \sigma_x \frac{\partial}{\partial y} - \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (2.53)$$

As derivadas parciais da equação 2.53 aplicadas à função de onda, serão

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{\uparrow}^0(x, y) = ik_x \psi_{\uparrow}^0(x, y), \quad (2.54)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \psi_{\uparrow}^0(x, y) = ik_y \psi_{\uparrow}^0(x, y), \quad (2.55)$$

substituindo em  $W_{\uparrow\uparrow}$ , teremos

$$W_{\uparrow\uparrow} = \psi_{\uparrow}^{0*} \lambda_R (k_y \sigma_x \psi_{\uparrow}^0 - k_x \sigma_y \psi_{\uparrow}^0), \quad (2.56)$$

onde

$$\sigma_x \psi_{\uparrow}^0 = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.57)$$

$$\sigma_y \psi_{\uparrow}^0 = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

Logo, teremos que  $W_{\uparrow\uparrow}$  é

$$W_{\uparrow\uparrow} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \lambda_R \left[ k_y e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - k_x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} \right] = 0. \quad (2.59)$$

Replicando os cálculos para  $W_{\downarrow\downarrow}$ , obtemos que

$$W_{\downarrow\downarrow} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \lambda_R \left[ k_y e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - k_x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} \right] = 0. \quad (2.60)$$

As equações 2.59 e 2.60 mostram que os elementos diagonais da matriz de  $H_R$  são nulos, isto se deve ao fato de que a ISO tipo Rashba é assimétrica. Os elementos fora da diagonal serão dados por

$$W_{\uparrow\downarrow} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \lambda_R \left[ k_y e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - k_x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} \right], \quad (2.61)$$

$$W_{\downarrow\uparrow} = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \lambda_R \left[ k_y e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} - k_x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix} \right], \quad (2.62)$$

logo,

$$W_{\uparrow\downarrow} = \lambda_R [k_y + ik_x], \quad (2.63)$$

$$W_{\downarrow\uparrow} = \lambda_R [k_y - ik_x]. \quad (2.64)$$

A matriz  $\mathbf{W}$  satisfaz a relação

$$\begin{pmatrix} W_{\uparrow\uparrow} & W_{\uparrow\downarrow} \\ W_{\downarrow\uparrow} & W_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (2.65)$$

como  $\det|\mathbf{W} - E^1| = 0$ , teremos

$$\det \begin{pmatrix} -E & W_{\uparrow\downarrow} \\ W_{\downarrow\uparrow} & -E \end{pmatrix} = 0, \quad (2.66)$$

que nos fornece a equação a seguir

$$E^2 - \lambda_R^2 (k_y + ik_x)(k_y - ik_x) = 0, \quad (2.67)$$

resolvendo a equação, obtemos a dispersão da energia para o hamiltoniano Rashba, teremos

$$E_{\pm} = \pm \lambda_R k. \quad (2.68)$$

As duas raízes da equação 2.68 correspondem às duas energias perturbadas. A dispersão da energia para o hamiltoniano total agora será dada por

$$E_{\uparrow,\downarrow} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \pm \lambda_R k. \quad (2.69)$$

Podemos reescrever a equação 2.69 como



$$E_{\uparrow,\downarrow} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( k^2 \pm \frac{2m}{\hbar^2} \lambda_R k \right), \quad (2.70)$$

definindo  $k_{SO} \equiv (m\lambda_R/\hbar^2)$ , teremos a relação de dispersão escrita como

$$E_{\uparrow,\downarrow} = \frac{\hbar^2}{2m} [(k \pm k_{SO})^2 - k_{SO}^2]. \quad (2.71)$$

A correção para a energia, dada pela dispersão do hamiltoniano Rashba, dará origem a um deslocamento das bandas na energia de dispersão. Na figura 2.4, podemos ver como acontece esse efeito. Na imagem (a) as bandas de energia estão sobrepostas, devido a degenerescência ( $k_{SO} = 0$ ), na imagem (b) a degenerescência é quebrada pela presença da interação Rashba ( $k_{SO} \neq 0$ ) e as bandas são deslocadas em direções opostas.

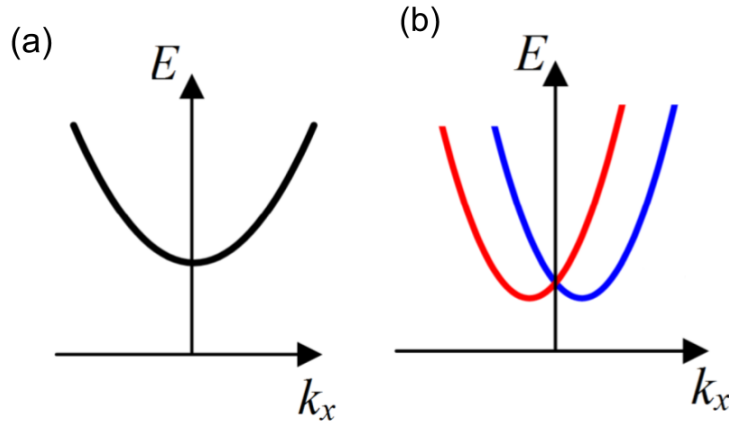


Figura 2.4: (a) Dispersão da energia para o hamiltoniano sem ISO ( $k_{SO} = 0$ ) e (b) Dispersão da energia para o hamiltoniano perturbado com ISO Rashba ( $k_{SO} \neq 0$ ). Figura adaptada da referência [6].

Com a relação da dispersão podemos agora substituir na equação 2.65 para encontrar os coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$ , teremos

$$\begin{pmatrix} 0 & \lambda_R(k_y + ik_x) \\ \lambda_R(k_y - ik_x) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E_{\pm} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad (2.72)$$

o que nos fornece

$$\lambda_R \beta (k_y + ik_x) = E_{\pm} \alpha, \quad (2.73)$$

$$\lambda_R \alpha (k_y - ik_x) = E_{\pm} \beta. \quad (2.74)$$

Substituindo a equação 2.68 nas equações acima, teremos que para o  $E_+$

$$\alpha = e^{i\theta} \beta, \quad (2.75)$$

para o  $E_-$ , teremos

$$\beta = -e^{i\theta} \alpha, \quad (2.76)$$

onde  $e^{i\theta} = (k_y + ik_x)/k$ . De posse desse resultado, podemos obter uma expressão para as funções de onda  $\psi_{\uparrow,\downarrow}$ , teremos

$$\psi_{\uparrow}(x, y) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \left[ e^{i\theta} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right], \quad (2.77)$$

agrupando os termos e reproduzindo para  $\psi_{\downarrow}(x, y)$ , finalmente obtemos as expressões para os autoestados, teremos

$$\psi_{\uparrow}(x, y) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.78)$$

$$\psi_{\downarrow}(x, y) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (2.79)$$

É possível ver que a função de onda adquire uma fase após a perturbação, levando a efeitos de espalhamento que são relevantes com objetivo de manipulação do elétron.

Interações spin-órbita do tipo Rashba levam a uma condutividade spin-Hall, sem a necessidade da aplicação de um campo magnético externo, o que torna o acoplamento spin-órbita um importante mecanismo para manipulação do spin. Um dos parâmetros utilizados para identificar materiais sujeitos a manipulação através do spin é o ângulo spin Hall, que é utilizado a partir do efeito Hall de spin para quantificar a eficiência da conversão da corrente de carga para corrente de spin. Sendo o grafeno um material bastante utilizado na spintrônica, isso o torna um candidato para a utilização em estudos do efeito Hall de spin, no entanto, possui um fraco acoplamento spin-órbita. Para melhorar o SOC em grafeno tem sido proposto diferentes técnicas, como a indução de impurezas, o que torna necessário a observação do ângulo spin Hall nesse tipo de material para qualificar sua utilização. Neste trabalho, foi realizado a observação do ângulo spin Hall para uma estrutura de grafeno com quatro terminais, resultados que serão apresentados nos próximos capítulos. Para tal, se faz necessário uma revisão sobre o efeito Hall de spin e sobre as escalas de comprimento do sistema em que são válidos os fenômenos mostrados neste trabalho, o que será feito nas seções a seguir.

## 2.3 Comprimentos característicos

A física mesoscópica baseia-se em um regime específico, onde acontecem fenômenos que podem ser descritos em uma interface entre a física clássica e quântica. À medida que diminuimos as dimensões de um condutor, as leis que regem o mundo macroscópico passam a não ser mais válidas e o sistema passa a obedecer as leis da mecânica quântica. Neste contexto, torna-se necessário conhecer as escalas de comprimento em que os temas abordados aqui são válidos. Veremos a seguir as escalas de comprimento mais relevantes, assim como apresentado na referência [28].

- **Comprimento de onda de Fermi ( $\lambda_f$ )**

Os elétrons que contribuem para a condutância do sistema tem energia próxima ao nível de Fermi, esses elétrons mais energéticos tem um comprimento de onda característico inversamente proporcional a densidade eletrônica  $n_s$ , e é chamado de comprimento

de onda de Fermi. Por esta razão conhecer este comprimento é relevante no contexto de amostras mesoscópicas, teremos que

$$\lambda_f = \frac{2\pi}{k_f} = \frac{2\pi}{n_s}, \quad (2.80)$$

onde  $k_f$  é o número de onda de Fermi.

- **Livre caminho médio ( $l_e$ )**

O livre caminho médio é a distância percorrida pelo elétrons entre duas colisões sucessivas. Em um cenário real, o elétron na amostra mesoscópica está sujeito a colisões com impurezas que levam à modificação do momento inicial. Este processo de espalhamento pode refletir na condutância da amostra, o que justifica a necessidade de conhecer este comprimento, definido como

$$l_e = v_f \tau_m, \quad (2.81)$$

onde  $v_f$  é a velocidade de Fermi e  $\tau_m$  é o tempo de relaxação do momento. A velocidade de Fermi, por sua vez, é dada por

$$v_f = \frac{\hbar k_f}{m}. \quad (2.82)$$

Colisões entre elétrons não estão dentro do limite do livre caminho médio, pois não modificam o módulo do momento, apenas sua direção.

- **Comprimento de coerência de fase ( $l_\varphi$ )**

A função de onda que descreve os elétrons carrega uma fase associada, sensível aos efeitos de interferência que são causados nos processos de espalhamento. O comprimento de coerência de fase é a distância que os elétrons percorrem antes de perderem a coerência de fase, isto é, antes da fase inicial ser modificada. A fase é sensível também

a processos de espalhamento decorrentes de colisões entre elétrons. Isto leva à relevância desse comprimento, que nos permite caracterizar processos de transporte como mesoscópicos a partir de seu comprimento. Sua definição é dada por

$$l_\varphi = \sqrt{D\tau_\varphi}, \quad (2.83)$$

onde  $D$  é chamado de coeficiente de difusão e  $\tau_\varphi$  é o tempo de relaxação de fase, que descreve o tempo que o elétron mantém sua coerência de fase.

- **Comprimento de localização ( $\xi$ )**

O comprimento de localização nos permite caracterizar um sistema quanto à sua condutividade a partir da extensão da função de onda. Em sistema bom condutor, a função de onda se estenderá por toda a amostra. Já em um mal condutor, a função de onda apresentará um pico e logo em seguida um decaimento exponencial. Este pico representa onde o elétron está localizado, em um mal condutor o elétron consegue se mover por um curto comprimento, permanecendo confinado. Na presença de desordem, um sistema pode se comportar como condutor ou isolante, a depender do material. Observando a localização dos elétrons na amostra, este comprimento nos permite especular sobre o efeito da presença da desordem sobre o sistema.

Uma amostra considerada mesoscópica deve ter o comprimento  $L$  que se enquadre entre o comprimento de onda de Fermi e o comprimento de coerência de fase ( $\lambda_f < L < l_\varphi$ ), se enquadrando entre o regime quântico e clássico. De acordo ainda com o comprimento do condutor, podemos classificar os tipos de regime de transporte como

- **Balístico:** O regime balístico é definido quando o comprimento da amostra mesoscópica é menor que o livre caminho médio, ( $\lambda_f < L \ll l_e$ ).
- **Difusivo:** O regime difusivo é definido quando o comprimento da amostra mesoscópica está entre o livre caminho médio e o comprimento de localização, ( $l_e \ll L < \xi$ ).
- **Localizado:** O regime localizado é observado se o comprimento  $L$  for maior que o comprimento de localização e menor que o comprimento de coerência de fase, ( $\xi \ll L < l_\varphi$ ).

Temos na figura (2.5.a) uma ilustração do limite de comprimento do regime mesoscópico e nas figuras (2.5.b) e (2.5.c) como ocorre o transporte de elétrons em um condutor em regime balístico e difusivo, respectivamente. As simulações utilizadas neste trabalho se encontram no regime difusivo, devido a presença de desordem no nosso sistema, que submete os elétrons à colisões.

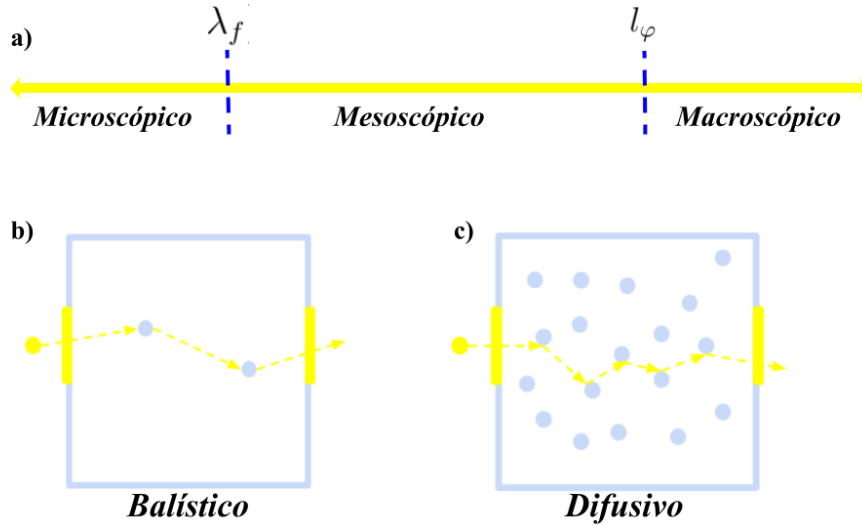


Figura 2.5: A imagem mostra o limite de comprimento de uma amostra mesoscópica (a), a dinâmica de um elétron em um condutor balístico (b) e em um condutor desordenado (c).

## 2.4 Efeito Hall de Spin

O efeito Hall de Spin(EHS) é originado devido ao bombeamento de uma corrente polarizada de spin dentro de um condutor com uma forte interação spin-órbita. A corrente elétrica aplicada através da amostra dará origem a uma acumulação de spin com polarizações opostas na borda da amostra [2]. O termo EHS foi introduzido em 1999 [35] devido a semelhança com o efeito Hall clássico, com a diferença que não é necessário a aplicação de um campo magnético para ocorrer a acumulação de spin. Nesta seção, iremos utilizar uma estrutura conforme a figura 2.6.

Teremos uma tensão  $V$  aplicada entre os terminais 1 e 2, se faz necessário ajustar as tensões nos terminais 3 e 4 de modo que a corrente identificada nesses terminais seja puramente de spin, sem corrente de carga. De acordo com a referência [20, 36], iremos

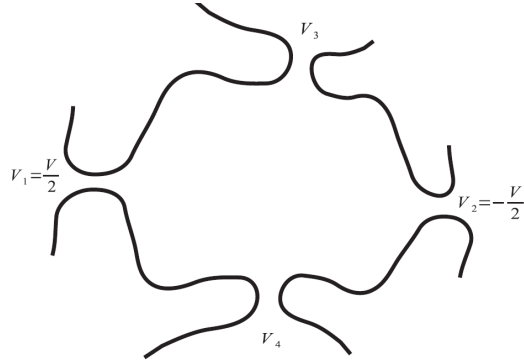


Figura 2.6: Cavidade caótica balística com quatro terminais. Entre os terminais 1 e 2 existe uma diferença de potencial que proporciona uma corrente de carga entre esses terminais, entre os terminais 3 e 4 não há corrente de carga. Figura retirada da referência [7].

novamente recorrer ao formalismo de Landauer-Büttiker, incluindo na equação 2.10 o grau de liberdade de spin. Teremos

$$I_i^\alpha = \frac{e^2}{h} \sum_{j,\alpha'} T_{i,j}^{\alpha\alpha'} (V_i - V_j), \quad (2.84)$$

os coeficientes  $T_{i,j}^{\alpha\alpha'}$  representam a soma das amplitudes das probabilidades de transmissão de um elétron com um estado de spin  $\alpha$  no terminal  $i$  passar para um estado de spin  $\alpha'$  no terminal  $j$ . Com  $\alpha = 0, x, y, z$  sendo as direções de orientação do spin e com apenas um dos reservatórios polarizados, teremos  $\alpha' = 0$ , adotaremos então  $T^{\alpha 0} = T^\alpha$ . Chegaremos assim às expressões para as correntes de carga e de spin, listadas a seguir

$$I_1^\alpha = \frac{e^2}{h} [T_{1,2}^\alpha (V_1 - V_2) + T_{1,3}^\alpha (V_1 - V_3) + T_{1,4}^\alpha (V_1 - V_4)], \quad (2.85)$$

$$I_2^\alpha = \frac{e^2}{h} [T_{2,1}^\alpha (V_2 - V_1) + T_{2,3}^\alpha (V_2 - V_3) + T_{2,4}^\alpha (V_2 - V_4)], \quad (2.86)$$

$$I_3^\alpha = \frac{e^2}{h} [T_{3,1}^\alpha (V_3 - V_1) + T_{3,2}^\alpha (V_3 - V_2) + T_{3,4}^\alpha (V_3 - V_4)], \quad (2.87)$$

$$I_4^\alpha = \frac{e^2}{h} [T_{4,1}^\alpha (V_4 - V_1) + T_{4,2}^\alpha (V_4 - V_2) + T_{4,3}^\alpha (V_4 - V_3)]. \quad (2.88)$$

Como colocado anteriormente, não temos corrente de carga entre os terminais 3 e 4, então  $I_3^0 = I_4^0 = 0$ , podemos então utilizar as equações para  $I_3^\alpha$  e  $I_4^\alpha$  como expressões para

a corrente de spin que flui nesses terminais. A lei de conservação de carga nos fornece que  $I_1^0 = -I_2^0 = I$  e da tensão aplicada, temos que  $V_1 = V/2$  e  $V_2 = -V/2$ . Assim, realizando as substituições necessárias e subtraindo a equação 2.86 pela equação 2.87, teremos como expressão para a corrente de carga

$$2I = \frac{e^2}{h} \left[ \frac{V}{2} (T_{12}^0 + T_{13}^0 + T_{14}^0 + T_{21}^0 + T_{23}^0 + T_{24}^0 + T_{12}^0 + T_{21}^0) + V_3 (T_{23}^0 - T_{13}^0) + V_4 (T_{24}^0 - T_{14}^0) \right]. \quad (2.89)$$

Seguindo o que foi feito nas referências [7, 20], iremos agora normalizar as equações para a corrente por  $V$  e utilizar a definição da conservação de probabilidade de transmissão  $2N_i \delta_{\alpha 0} = \sum_{j=1}^4 T_{ij}^\alpha$  para construir a matriz densidade de corrente, temos da definição da densidade de corrente adimensional que

$$J_i^\alpha = \frac{h}{e^2} \frac{I_i^\alpha}{V}. \quad (2.90)$$

Assim

$$\begin{bmatrix} 2J \\ J_3^\alpha \\ J_4^\alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (2N_1 - T_{11}^0 + 2N_2 - T_{22}^0 + T_{12}^0 + T_{21}^0) & (T_{23}^0 - T_{13}^0) & (T_{24}^0 - T_{14}^0) \\ (T_{32}^\alpha - T_{31}^\alpha) & (2N_3 - T_{33}^\alpha) & (-T_{34}^\alpha) \\ (T_{42}^\alpha - T_{41}^\alpha) & (-T_{43}^\alpha) & (2N_4 - T_{44}^\alpha) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 \\ \bar{V}_3 \\ \bar{V}_4 \end{bmatrix} \quad (2.91)$$

onde  $\bar{V}_i = V_i/V$ .

Satisfazendo a condição de que as correntes transversais de carga sejam nulas ( $J_3^0 = J_4^0 = 0$ ), a equação 2.91 nos fornece

$$-\bar{V}_3 (2N_3 - T_{33}^0) + \bar{V}_4 (T_{34}^0) = \frac{1}{2} (T_{32}^0 - T_{31}^0) \quad (2.92)$$

$$\bar{V}_3 (T_{43}^0) + \bar{V}_4 (2N_4 - T_{44}^0) = \frac{1}{2} (T_{42}^0 - T_{41}^0) \quad (2.93)$$

Multiplicando a equação 2.92 por  $\frac{2N_4 - T_{44}^0}{T_{34}^0}$ , teremos

$$\frac{-\bar{V}_3 (2N_3 - T_{33}^0) (2N_4 - T_{44}^0)}{T_{34}^0} + \bar{V}_4 (2N_4 - T_{44}^0) = \frac{1}{2} \frac{(T_{32}^0 - T_{31}^0) (2N_4 - T_{44}^0)}{T_{34}^0}, \quad (2.94)$$

somando 2.93 e 2.94, teremos

$$\bar{V}_3 \left( \frac{(T_{43}^0 T_{34}^0) - (2N_3 - T_{33}^0) (2N_4 - T_{44}^0)}{T_{34}^0} \right) = \frac{1}{2} \left( \frac{T_{34}^0 (T_{42}^0 - T_{41}^0) + (T_{32}^0 - T_{31}^0) (2N_4 - T_{44}^0)}{T_{34}^0} \right). \quad (2.95)$$



Isolando  $\bar{V}_3$ , obteremos uma expressão para a tensão no terminal 3:

$$\bar{V}_3 = \frac{1}{2} \frac{T_{34}^0 (T_{42}^0 - T_{41}^0) + (T_{32}^0 - T_{31}^0) (2N_4 - T_{44}^0)}{(T_{43}^0 T_{34}^0) - (2N_3 - T_{33}^0) (2N_4 - T_{44}^0)}, \quad (2.96)$$

substituindo a equação 2.96 na equação 2.93, obtemos uma expressão para  $\bar{V}_4$ :

$$\bar{V}_4 = \frac{1}{2} \frac{T_{43}^0 (T_{32}^0 - T_{31}^0) + (T_{42}^0 - T_{41}^0) (2N_3 - T_{33}^0)}{(T_{43}^0 T_{34}^0) - (2N_3 - T_{33}^0) (2N_4 - T_{44}^0)}. \quad (2.97)$$

Temos que a densidade de corrente de spin que flui no guia 3 é dada por

$$J_3^\alpha = \frac{\bar{V}}{2} (T_{32}^\alpha - T_{31}^\alpha) - \bar{V}_3 (T_{33}^\alpha) - \bar{V}_4 (T_{34}^\alpha) \quad (2.98)$$

e no guia 4

$$J_4^\alpha = \frac{\bar{V}}{2} (T_{42}^\alpha - T_{41}^\alpha) - \bar{V}_3 (T_{43}^\alpha) - \bar{V}_4 (T_{44}^\alpha). \quad (2.99)$$

Logo, substituindo as equações 2.96 e 2.97, encontraremos uma expressão para o cálculo da densidade de corrente de spin que flui nos guias 3 e 4. Utilizando do método diagramático [37], podemos obter medidas estatísticas acerca da corrente de spin. Ao calcular a média da corrente de spin obteremos

$$\langle J_{3,4}^\alpha \rangle = 0. \quad (2.100)$$

Mesmo a média da corrente de spin sendo nula, ainda existirão flutuações acerca da média, tornando necessário quantificar essas medidas. Calculando a variância da corrente de spin nos guias transversais, conforme a referência [20], obtemos

$$var [J_3^\alpha] = \frac{4 (N_T - 1) N_1 N_2 N_3}{(N_T) (2N_T - 1) (2N_T - 3) (N_1 + N_2)}, \quad (2.101)$$

$$var [J_4^\alpha] = \frac{4 (N_T - 1) N_1 N_2 N_4}{(N_T) (2N_T - 1) (2N_T - 3) (N_1 + N_2)}, \quad (2.102)$$

onde  $N_T$  é o número total de canais abertos. Como não existe corrente de spin nos guias longitudinais, podemos generalizar as equações 2.101 e 2.102 como

$$var [J_j^\alpha] = \frac{4 (N_T - 1) N_1 N_2 N_j}{(N_T) (2N_T - 1) (2N_T - 3) (N_1 + N_2)}, \quad (2.103)$$

para  $j = 3, 4$ . No caso simétrico, onde todos os guias tem o mesmo número de canais abertos, temos que  $N_1 = N_2 = N_3 = N_4 = N$  e  $N_T = 4N$ . Substituindo em 2.103, teremos

$$\text{var} [J_j^\alpha] = \frac{1}{2} \frac{(4N - 1) N}{(8N - 1)(8N - 3)}. \quad (2.104)$$

O regime semiclássico (altas energias) acontece quando  $N \gg 1$ , para este caso, teremos que o desvio padrão será

$$\text{rms} [J_j^\alpha] \approx 0.18. \quad (2.105)$$

A partir da dispersão da corrente de spin, podemos obter uma expressão para a flutuação universal da condutância. Para isso, voltaremos a definição da corrente de spin adimensional, teremos

$$I^\alpha = \frac{\hbar e^2 V}{2 h} J^\alpha = \frac{e}{4\pi} \times \mu J^\alpha, \quad (2.106)$$

onde  $\mu$  é a acumulação de spin, por fim teremos a relação entre a condutância de spin e a corrente de spin, dada por

$$G^\alpha = \frac{I^\alpha}{\mu^\alpha} = J^\alpha \times \frac{e}{4\pi}. \quad (2.107)$$

Utilizando o resultado da equação 2.105, podemos obter a amplitude da flutuação universal da condutância spin-Hall, encontraremos que

$$\text{rms} [G_{SH}] \approx 0.18 \times \frac{e}{4\pi}. \quad (2.108)$$

Os valores encontrados para a dispersão da corrente de spin e para a flutuação universal da condutância são o principal resultado analítico obtido por Bardarson [20]. Estes valores também foram encontrados através de uma simulação numérica por Ren[3]. Motivados por esses resultados, realizamos uma simulação computacional do efeito Hall de spin em grafeno, resgatando os resultados obtidos, conforme será demonstrado nos próximos capítulos.

# Capítulo 3

## Grafeno

O nosso trabalho consiste em uma rede típica de grafeno, que é uma rede hexagonal bidimensional de átomos de carbono. Neste capítulo faremos a descrição tight-binding para uma monocamada de grafeno com interação entre primeiros vizinhos, então obteremos a relação de dispersão da energia e apresentaremos os efeitos da interação spin-órbita e desordem nesse tipo de estrutura. Além disso, será feita uma breve revisão sobre as classes de simetrias presentes na classe simplética, que refletem em importantes propriedades de transporte.

### 3.1 Introdução

Grafeno é o nome dado a uma monocamada plana de átomos de carbonos dispostos em uma rede do tipo favo de mel bidimensional(2D). Devido a flexibilidade de sua ligação, sistemas baseados em carbono se desenvolvem em um número ilimitado de estruturas e com uma variedade igualmente grande de propriedades físicas, que são em grande parte resultado da dimensionalidade dessas estruturas [9]. O grafeno serve de base para materiais de grafite com outras dimensionalidades, como fulerenos quase-0D, nanotubos de carbono 1D ou mesmo empilhado formando grafite 3D, conforme ilustrado na figura 3.1. Por esta razão, o grafeno é amplamente utilizado para descrever propriedades de vários materiais à base de carbono [8]. Embora o grafite seja usado desde 1564 [38], o grafeno só foi isolado 440 anos depois [22], pois além de se acreditar que não existia em estado livre na natureza, não existiam ferramentas experimentais para mapear os detritos microscópicos deixados por um lápis.

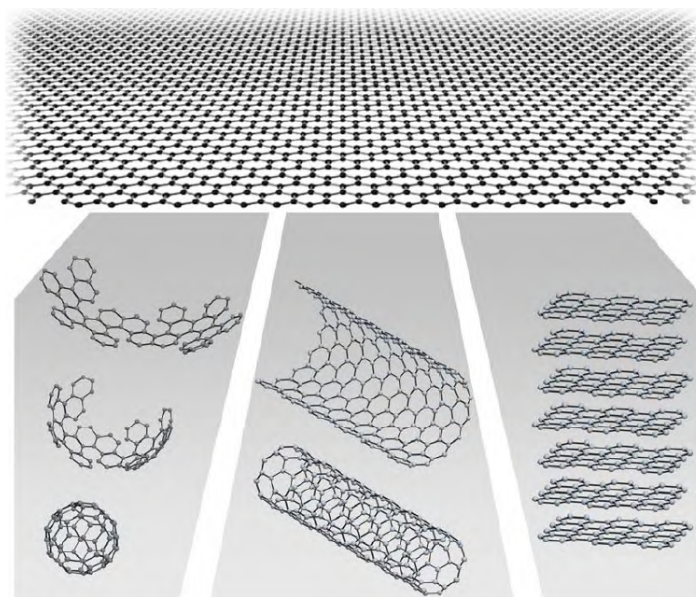


Figura 3.1: Na parte superior está representada uma monocamada de grafeno que dá origem (representado na parte inferior) ao fulereno quase-0D, nanotubo de carbono 1D e grafite 3D (da direita para a esquerda, respectivamente). Figura retirada de [8].

O grafeno apresenta efeitos mesoscópicos incomuns[39], que tem origem nas condições de contorno exigidas para as funções de onda nas amostras mesoscópicas com os vários tipos de borda que o grafeno pode ter[40, 41]. As mais estudadas são as armchair e zigzag, que possuem diferentes propriedades eletrônicas entre si. O espectro de uma nanofita de grafeno, por exemplo, depende da natureza de suas bordas, de acordo com a forma da sua terminação atômica[42]. Na figura 3.2, temos uma nanofita que apresenta rede hexagonal com borda zigzag na direção  $x$  e borda armchair na direção  $y$ , também é possível observar que a rede de grafeno é formada por duas subredes, apresentadas nas cores azul e laranja.

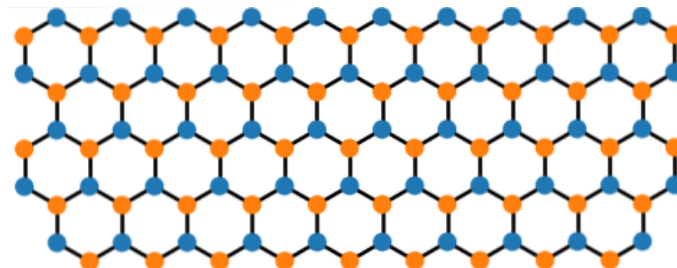


Figura 3.2: Estrutura de rede hexagonal apresentando borda armchair nas laterais e zigzag na parte superior e inferior. Figura gerada pelo pacote Kwant.

A equação de Schrodinger reproduz bem propriedades dos materiais estudados em física, no entanto no grafeno seus portadores de carga se comportam de maneira relativística devido a sua estrutura de rede hexagonal, fazendo-se necessário descrever a sua dinâmica através da equação de Dirac. Elétrons de Dirac podem ser controlados através da aplicação de um campo elétrico externo ou magnético ou mesmo alterações geométricas na amostra. Além disso, diferentes tipos de desordem podem modificar a equação de Dirac levando a propriedades de transporte incomuns [9] .

## 3.2 Hamiltoniano Tight-Binding

O modelo Tight-Binding é frequentemente utilizado para modelar transferência eletrônica em física do estado sólido, pois consegue capturar muitos conceitos físicos relevantes. Neste modelo, as funções de onda são expressas em termos de orbitais atômicos, um para cada átomo, que se conectam entre si por meio de um *hopping* ( $t$ ), que indica quanto rapidamente o elétron irá atravessar de um determinado orbital (ou site) para o mais próximo em uma rede específica, acredita-se que no grafeno o hopping tem valor numérico de aproximadamente  $2.8eV$ . A primeira descrição Tight-Binding para o grafeno foi feita por P.R Wallace em 1946 [43], aqui faremos uma revisão da descrição usando o formalismo da segunda quantização [44]. O hamiltoniano tight-binding usado para descrever o grafeno permite saltos entre os átomos vizinhos. No grafeno, a magnitude da interação entre os primeiros vizinhos é ordens de magnitude mais alta que entre segundos vizinhos, de forma que, aqui iremos nos ater ao hamiltoniano tight-binding para primeiros vizinhos, que é dado por

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left( a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i \right), \quad (3.1)$$

onde  $a$  e  $b$  são os vetores de subrede, o que mostra que no grafeno os primeiros vizinhos estão em subredes distintas.

Dada a estrutura de rede do grafeno, é conveniente encontrar uma representação do hamiltoniano no espaço dos momentos, a fim de obter a relação da dispersão de energia do sistema. A rede pode ser vista como uma rede triangular com a base de dois átomos por

célula unitária, na figura 3.3, está ilustrada a estrutura hexagonal e sua correspondente zona de Brillouin.

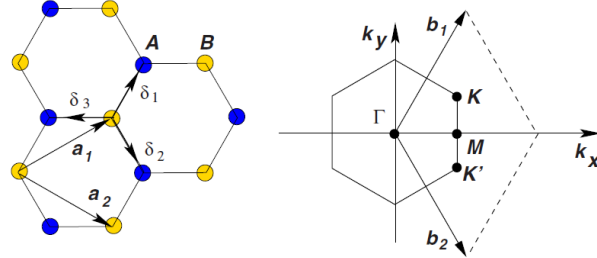


Figura 3.3: A figura na esquerda mostra a estrutura de rede do grafeno e seus respectivos vetores do espaço real, onde  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  são os vetores da rede unitária e  $\delta$  representa os vetores de primeiros vizinhos. À direita temos a zona de Brillouin correspondente, onde os pontos  $K$  e  $K'$  marcam a localização dos cones de Dirac. Figura retirada de [9].

Na equação 3.1, a soma é sobre todos os primeiros vizinhos, onde  $i$  e  $j$  são os sites nas subredes  $A$  e  $B$ , podemos então reescrever o hamiltoniano como

$$\sum_{i,j} a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i = \sum_i \sum_{\delta} a_i^\dagger b_{i+\delta} + b_{i+\delta}^\dagger a_i, \quad (3.2)$$

Onde a soma sobre  $\delta$  ( $\delta_i, i = 1, \dots, 3$ ) é feita sobre o vetor de primeiro vizinho no espaço real. Temos também que  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ) cria(aniquila) um elétron no site  $A$  na posição  $\mathbf{r}_i$  e  $b_{i+\delta}^\dagger$  ( $b_{i+\delta}$ ) cria(aniquila) um elétron no site  $B$  com posição  $\mathbf{r}_{i+\delta}$ . Podemos obter uma expressão para os operadores de aniquilação e criação no espaço das posições em termos do espaço dos momentos. Teremos assim

$$b_{i+\delta}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\mathbf{r}_{i+\delta}} b_{\vec{k}}^\dagger, \quad (3.3)$$

$$b_{i+\delta} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\mathbf{r}_{i+\delta}} b_{\vec{k}}, \quad (3.4)$$

$$a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\mathbf{r}_i} a_{\vec{k}}^\dagger, \quad (3.5)$$

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\mathbf{r}_i} a_{\vec{k}}. \quad (3.6)$$

Substituindo os operadores na equação 3.1, teremos

$$H = \frac{-t}{\sqrt{N}} \sum_i \sum_{\delta, \vec{k}, \vec{k}'} \left[ e^{i\vec{k}\mathbf{r}_i} e^{-i\vec{k}'\mathbf{r}_{i+\delta}} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} + e^{i\vec{k}'\mathbf{r}_{i+\delta}} e^{-i\vec{k}\mathbf{r}_i} a_{\vec{k}'} b_{\vec{k}}^\dagger \right] \quad (3.7)$$

$$= \frac{-t}{\sqrt{N}} \sum_i \sum_{\delta, \vec{k}, \vec{k}'} \left[ \left( e^{i\mathbf{r}_i(\vec{k}-\vec{k}')} e^{-i\vec{k}\delta} \right) a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}'} + \left( e^{i\mathbf{r}_i(\vec{k}-\vec{k}')} e^{i\vec{k}\delta} \right) b_{\vec{k}'}^\dagger a_{\vec{k}} \right]. \quad (3.8)$$

Podemos usar a relação de ortogonalidade a seguir

$$\sum_r e^{i(k-k')\mathbf{r}} = \sum_i e^{i(k-k')\mathbf{r}_i} = N\delta_{kk'}, \quad (3.9)$$

finalmente, teremos um hamiltoniano no espaço recíproco da forma

$$H = -t \sum_{\delta\vec{k}} \left( e^{-i\vec{k}\delta} a_{\vec{k}}^\dagger b_{\vec{k}} + e^{i\vec{k}\delta} a_{\vec{k}} b_{\vec{k}}^\dagger \right). \quad (3.10)$$

O hamiltoniano pode ser expresso como

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^\dagger H(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}}, \quad (3.11)$$

onde,

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\delta}, \quad (3.12)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* \equiv \sum_{\delta} e^{-i\mathbf{k}\delta}, \quad (3.13)$$

descrevem as interações entre os primeiros vizinhos no espaço recíproco. Teremos então como representação matricial do hamiltoniano no espaço recíproco

$$H(\mathbf{k}) = -t \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

O resultado da equação de autovalor  $Det | H(k) - IE | = 0$  nos fornecerá a relação de dispersão procurada. Teremos

$$Det | H(k) - IE | = 0 \Rightarrow Det \begin{pmatrix} -E & -t\Delta_{\mathbf{k}} \\ -t\Delta_{\mathbf{k}}^* & -E \end{pmatrix} = 0, \quad (3.15)$$

Assim,

$$E_{\pm(\mathbf{k})} = \pm t \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^* \Delta_{\mathbf{k}}}. \quad (3.16)$$

É conveniente expressar  $\Delta_{\mathbf{k}}$  em termos dos três primeiros vizinhos do espaço real, teremos

$$\Delta_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\vec{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\vec{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\vec{\delta}_3} \quad (3.17)$$

$$= e^{i\mathbf{k}\vec{\delta}_3} \left[ 1 + e^{i\mathbf{k}(\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_3)} + e^{i\mathbf{k}(\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3)} \right]. \quad (3.18)$$

Os vetores do espaço real são escritos em coordenadas cartesianas como

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \sqrt{3}\hat{y}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2} (\hat{x} - \sqrt{3}\hat{y}), \quad \vec{\delta}_3 = -a\hat{x}, \quad (3.19)$$

onde  $a \cong 1,42 \text{ \AA}$  é a distância atômica entre os carbonos, teremos

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= e^{-ik_x a} \left[ 1 + e^{ik_x a \frac{3}{2}} \cdot e^{ik_y a \frac{\sqrt{3}}{2}} + e^{ik_x a \frac{3}{2}} \cdot e^{-ik_y a \frac{\sqrt{3}}{2}} \right] \\ &= e^{-ik_x a} \left[ 1 + e^{ik_x a \frac{3}{2}} \left( e^{iak_y \frac{\sqrt{3}}{2}} + e^{-iak_y \frac{\sqrt{3}}{2}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.20)$$

assim,

$$\Delta_{\mathbf{k}} = e^{-ik_x a} \left[ 1 + 2e^{ik_x a \frac{3}{2}} \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a \right) \right], \quad (3.21)$$

logo, o conjugado nos fornece

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* = e^{ik_x a} \left[ 1 + 2e^{-ik_x a \frac{3}{2}} \cos \left( \frac{\sqrt{3}}{2} k_y a \right) \right]. \quad (3.22)$$



O produto entre  $\Delta_{\mathbf{k}}$  e  $\Delta_{\mathbf{k}}^*$  será

$$\Delta_{\mathbf{k}}\Delta_{\mathbf{k}}^* = 1 + 4\cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right). \quad (3.23)$$

Teremos então que as bandas de energia serão dadas por

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) + 4\cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right)}. \quad (3.24)$$

A equação 3.24 apresenta-se de forma assimétrica devido a estrutura de rede do grafeno, fazendo com que exista uma direção preferencial adotada pelos elétrons.

Definindo

$$f(\mathbf{k}) \equiv 2\cos\left(\sqrt{3}k_y a\right) + 4\cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right), \quad (3.25)$$

podemos escrever a equação 3.24 como

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})}. \quad (3.26)$$

Na figura 3.4, podemos ver a forma da dispersão da energia no grafeno e a estrutura de banda próximo a um dos pontos de Dirac, onde é possível observar que as bandas de energia formam um cone com vértice nesse ponto, conhecido como cone de Dirac. A descrição matemática do comportamento próximo aos pontos de Dirac será feita adiante.

### 3.2.1 Comportamento próximo aos cones de Dirac

Os pontos de Dirac são os pontos no espaço dos momentos onde  $E_{\pm}(\mathbf{k}) = 0$ . A dispersão de energia para esses pontos pode ser obtida expandindo a estrutura de banda obtida para o grafeno. Inicialmente, iremos definir o vetor de onda relativo  $q \equiv \mathbf{k} - \mathbf{K}$ , onde  $\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right)$ . Reescrevendo  $\Delta_{\mathbf{k}}$  em termos de  $q$ , teremos

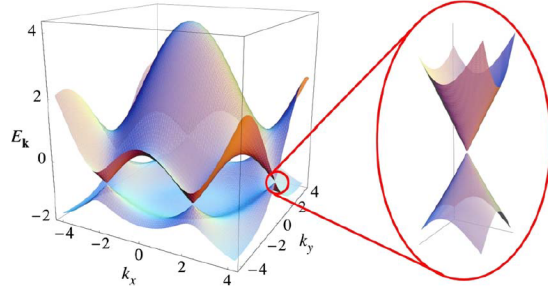


Figura 3.4: Dispersão eletrônica na rede hexagonal típica do grafeno, com ampliação da dispersão em torno de um dos pontos de Dirac. Figura retirada de [9].

$$\Delta_{K+q} = e^{-iK_x a} e^{-iq_x a} \left[ 1 + 2e^{ia(K_x+q_x)3/2} \cos \left( \frac{\sqrt{3}a}{2} (K_y + q_y) \right) \right] \quad (3.27)$$

$$= e^{-iK_x a} e^{-iq_x a} \left[ 1 - 2e^{iaq_x 3/2} \cos \left( \frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}a}{2} q_y \right) \right]. \quad (3.28)$$

Expandindo a expressão obtida em série de Taylor e utilizando apenas os termos de primeira ordem, teremos para as exponenciais

$$e^{-iq_x a} = 1 - iaq_x, \quad e^{iaq_x 3/2} = 1 + iaq_x 3/2 \quad (3.29)$$

para os cossenos usaremos a identidade  $\cos(a+b) = \cos a \cos b - \sin a \sin b$ , teremos assim

$$\cos \left( \frac{\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}a}{2} q_y \right) = \frac{1}{2} \cos \left( \frac{\sqrt{3}a}{2} q_y \right) - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \left( \frac{\sqrt{3}a}{2} q_y \right), \quad (3.30)$$

expandindo o seno em torno de  $q = 0$  e substituído na equação 3.27, teremos

$$\Delta_{K+q} = -ie^{-iK_x a} \frac{3a}{2} (q_x + iq_y), \quad (3.31)$$

podemos omitir a fase sem afetar nenhum resultado físico, assim

$$\Delta_{K+q} = -\frac{3a}{2} (q_x + iq_y). \quad (3.32)$$

A forma matricial do hamiltoniano sobre o ponto de Dirac será dada por

$$H(K + q) = v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

onde

$$v_F = \frac{3at}{2}, \quad (3.34)$$

é a velocidade de Fermi. De tal forma que, utilizando  $\hbar = 1$ , a dispersão será da forma

$$E(\mathbf{q}) = v_F |\mathbf{q}|. \quad (3.35)$$

Podemos ver que a relação de dispersão perto do ponto de Dirac é então linear no momento, o que gera a forma cônica apresentada anteriormente, em contraste com o que acontece na maioria dos semicondutores, onde a relação é quadrática com o momento, o que leva os portadores de carga no grafeno se moverem com uma velocidade fixa nas bandas de condução. Esse comportamento se assemelha ao de uma partícula relativística descrita por um hamiltoniano de Dirac, o que sugere que podemos usá-lo para descrever os portadores no grafeno [45].

### 3.2.2 Estrutura de banda com interação spin-órbita do tipo Rashba

A interação spin-órbita (ISO) tipo Rashba no grafeno surge ao quebrar a simetria de inversão espacial da rede hexagonal, que pode ocorrer devido a curvatura da camada de grafeno ou pela aplicação de um campo elétrico externo [46], o que induzirá termos adicionais de primeiro vizinho, que modulam o hopping [9, 47]. Na presença desse tipo de interação, devemos adicionar um termo ao hamiltoniano tight-binding do grafeno, que foi descrito na equação 3.1. O termo adicional é referente ao hamiltoniano Rashba [25, 48], descrito como

$$H_R = \frac{\lambda_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (3.36)$$

por conseguinte, o hamiltoniano total na presença de ISO será dado por

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i) + \frac{\lambda_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (3.37)$$

Na ausência da interação spin-órbita, os orbitais serão degenerados. Mas ao inserir a ISO no sistema, a degenerescência é quebrada, por consequência o acoplamento spin-órbita permitirá transições entre os orbitais, causando uma mistura das bandas no grafeno dependente da intensidade da interação. Para interação do tipo Rashba variando sua intensidade de  $\lambda_R = 0$  (caso sem ISO) até  $\lambda_R = 0.6$ , teremos as estruturas descritas na figura 3.5, onde podemos observar esta mistura entre os orbitais conforme o aumento da intensidade da interação.

### 3.3 Efeito da desordem de Anderson na condutância

Um dos motivos que torna o grafeno um material de grande interesse é o livre caminho médio do elétron na rede hexagonal, longo se comparado a outros materiais. No entanto o material está sujeito a impurezas das mais diversas origens, o que insere uma desordem nesse sistema [49]. Na presença de desordem é adicionado um termo adicional perturbativo no hamiltoniano da equação 3.1, sem levar em consideração termos de interação spin-órbita, teremos

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i) + \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i, \quad (3.38)$$

na ausência de desordem teremos  $\epsilon_i = 0$ .

Um dos modelos de desordem mais utilizados para estudar transporte quântico em diferentes materiais é a desordem de Anderson [50], que fornece resultados analíticos obtidos no limite de desordem fraca com base na teoria da perturbação. Anderson descreveu em 1958 o fenômeno de localização em um potencial aleatório [51]. A desordem pode ser adicionada introduzindo variáveis aleatórias  $\epsilon_i$ , satisfazendo uma distribuição de probabilidade  $P(\epsilon_i)$ ,

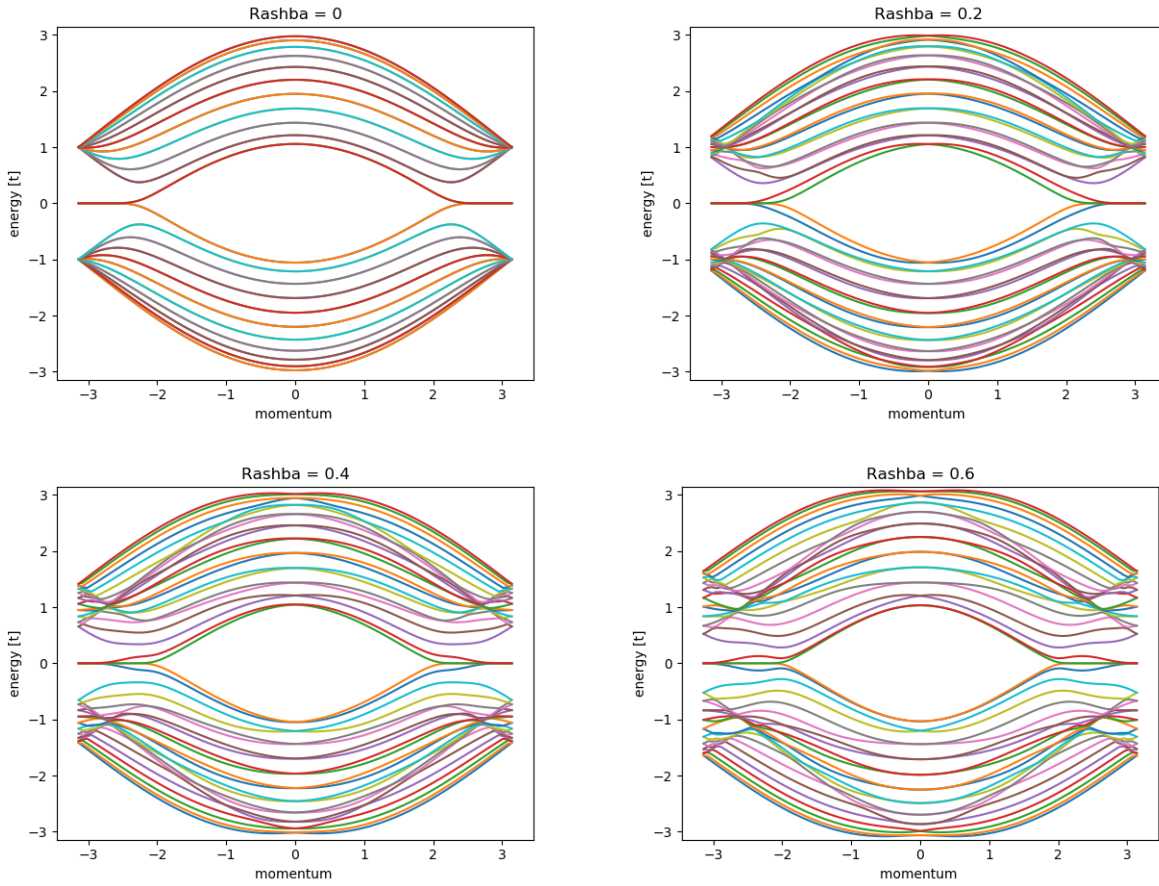


Figura 3.5: Estrutura de banda para fita de grafeno com borda zigzag na presença de diferentes valores de interação spin-órbita tipo Rashba, com  $\lambda_R = (0, 0.2, 0.4, 0.6)$ .

que define a intensidade e o tipo da desordem no sistema [52], onde

$$P_{\epsilon_i} = \begin{cases} 1/U, \text{ para } -U/2 \leq \epsilon_i \leq U/2, \\ 0 \end{cases} \quad (3.39)$$

onde  $U$  é a intensidade da desordem.

É possível observar como a desordem afeta o transporte através da observação da condutância em uma fita com rede hexagonal conectada a dois guias, mostrada na figura 3.6, pois a condutância no grafeno sem qualquer tipo de desordem exibe um comportamento quantizado [39]. Na figura 3.7, temos o comportamento da condutância em função da energia de Fermi através da fita em duas situações. Na imagem da esquerda, temos uma situação em que a fita está sem desordem ( $W = 0$ ), então observamos que a condutância apresenta

degraus de valores inteiros múltiplos de  $2e^2/h$ , conforme esperado. Na imagem da direita, vemos o comportamento da condutância ao adicionar uma desordem de valor fixo no sistema ( $W = 2.8$ ), apresentando agora flutuações mesoscópicas, que são provenientes do aumento dos espalhamentos sofridos pelo elétron em sua trajetória dentro da amostra, configuração mais próxima de uma amostra real.

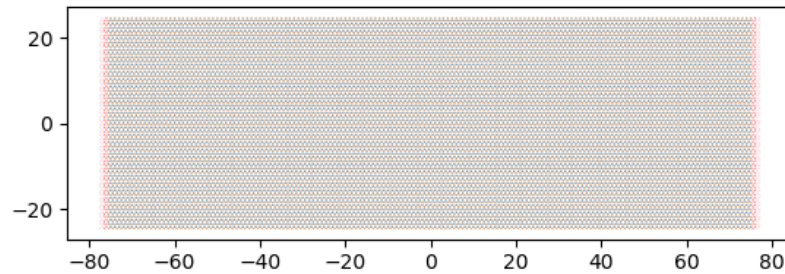


Figura 3.6: A figura mostra uma fita com rede hexagonal(típica do grafeno), conectada a dois terminais.

### 3.4 Simetrias em Grafeno

A dinâmica de transporte em uma amostra mesoscópica está frequentemente sujeita a efeitos de interferência, o que nos permite interpretar essa dinâmica como a de uma cavidade quântica caótica. Em sistemas caóticos se faz necessário o uso de um tratamento estatístico, devido a sua complexidade [53]. Este tratamento ganhou destaque a partir de 1950 com Wigner [54–56], que descreveu através de uma distribuição estatística os níveis de energia de núcleos de átomos pesados, modelando o hamiltoniano do núcleo como uma matriz aleatória. Em 1962, Dyson [57, 58] introduziu a classificação dos ensembles de matrizes aleatórias

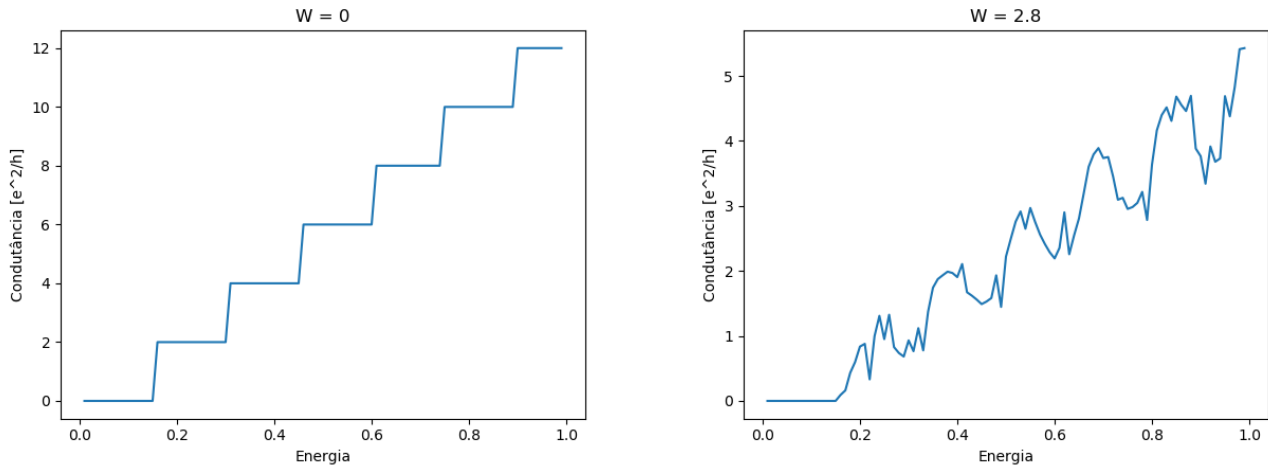


Figura 3.7: Comportamento da condutância em função da energia de Fermi em uma fita de grafeno sem desordem (na esquerda) e com desordem (na direita).

usando a mecânica quântica como base [59–61].

De acordo com a teoria de matrizes aleatórias (TMA), sistemas quânticos caóticos são classificados dentro de um padrão de classes de universalidades, que refletem as simetrias do sistema em questão e descrevem propriedades de transporte independentes de detalhes microscópicos do material. Uma simetria pode ser vista como uma transformação que leva de uma solução do sistema a outra, ajustando propriedades fundamentais, de forma que as leis de conservação da física estão intimamente ligadas à existência de simetrias no sistema. Segundo o teorema de Wigner, as simetrias são representadas por operadores unitários ou anti-unitários.

As classes podem ser especificadas de acordo com a simetria de reversão temporal e de rotação de spin. A classe ortogonal consiste de sistemas que possuem simetria de reversão temporal e de rotação de spin, já a classe unitária é caracterizada por possuir apenas simetria de rotação de spin. Os sistemas que possuem apenas simetria de reversão temporal caracterizam a classe simplética [62]. As classes de simetria existentes em um sistema refletem em suas propriedades macroscópicas, gerando frequentemente propriedades universais que podem ser estudados através da TMA, de acordo com a presença (ou ausência) de determinadas simetrias neste sistema. A estrutura de grafeno estudada neste trabalho consiste do caso simplético, serão apresentados a seguir os tipos de simetria envolvidos.

### 3.4.1 Simetria de reversão temporal

A simetria de reversão temporal [63] está presente em diversos sistemas dinâmicos físicos, o que a torna uma das simetrias mais discutidas na física [64], desde a sua primeira descrição por Wigner. A reversão temporal pode ser entendida como uma transformação na dinâmica de trajetórias, que reverte a ordem dos estados, mas que ajusta apropriadamente propriedades instantâneas como momento e spin. Por exemplo em uma situação clássica, ao trocar o sentido da trajetória de um objeto, este terá a direção do momento trocada, mas a reversão temporal irá garantir que as grandezas envolvidas sejam preservadas, havendo apenas uma mudança de sentido na dinâmica do objeto.

Na mecânica quântica, ser invariante na reversão temporal significa que, se  $\psi(t)$  descreve uma solução unitária da equação de Schrodinger para um hamiltoniano  $H$ , em que  $\psi(t) = e^{-itH/\hbar}\psi$ , a trajetória revertida no tempo também é uma solução unitária [65]. Para tal, definimos um operador de reversão temporal  $T$ , onde a reversão temporal da trajetória é dado pela aplicação desse operador a  $\psi(-t)$ , que nos fornece  $T\psi(t) = e^{-itH/\hbar}\psi$ , dado que  $T$  é antiunitário, a nossa solução é unitária, isto é equivalente a dizer que o operador de reversão temporal comuta com o hamiltoniano [66]. A utilidade desse tratamento é que o uso desse operador nos permite garantir um hamiltoniano invariante no tempo, o que facilita a descrição de problemas não triviais que exigem uma transformação de reversão no tempo.

Em materiais como o grafeno, em que o termo de massa da equação de Dirac é zero, o acoplamento spin-órbita do tipo Rashba não quebra a simetria de reversão temporal. Na prática, isso significa que não teremos um deslocamento dos pontos de Dirac devido a termos de spin-órbita, devido a invariância do momento orbital sobre o operador  $T$ . E principalmente devido ao acoplamento intrínseco do grafeno ser extremamente menor que o acoplamento extrínseco tipo Rashba [67].

O operador de reversão temporal inverte a direção do spin. Se aplicarmos alguma perturbação externa, como um campo magnético, o fluxo de corrente associado ao spin será induzido a uma direção bem definida, quebrando a simetria de reversão temporal [68].



### 3.4.2 Simetria de rotação do spin

Os elétrons apresentam-se de forma desordenada na ausência de qualquer perturbação externa, de forma que os spin up e down podem rotacionar livremente em direções arbitrárias [69, 70]. Considerando uma rotação  $\hat{S}$ , teremos

$$[\nabla^2 + V(\mathbf{r})] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3.40)$$

$$[\nabla^2 + V(\hat{S}\mathbf{r})] \psi(\hat{S}\mathbf{r}) = E\psi(\hat{S}\mathbf{r}). \quad (3.41)$$

Dado que  $\nabla^2$  é invariante, se  $V(\mathbf{r})$  for invariante sob o operador de simetria de rotação, teremos

$$[\nabla^2 + V(\mathbf{r})] \psi(\hat{S}\mathbf{r}) = E\psi(\hat{S}\mathbf{r}). \quad (3.42)$$

A equação 3.42 mostra que na presença da simetria de rotação de spin, o hamiltoniano permanece invariante mesmo após uma rotação e também nos fornece que  $\psi(\hat{S}\mathbf{r})$  é solução, tal como  $\psi(\mathbf{r})$ , possuindo assim os mesmos autovalores. Isto mostra que a rotação produz um conjunto de estados degenerados, mas com contribuição total para a densidade de carga invariante. Esta situação é alterada quando modificamos condições macroscópicas do sistema, como a aplicação de um campo externo. Este fator externo irá adicionar termos ao hamiltoniano e assim um novo estado no sistema, quebrando a simetria de rotação do spin.

Na nossa amostra, a interação spin-órbita do tipo Rashba é adicionada através da aplicação de um campo elétrico. Os efeitos de interação spin-órbita (ISO) requerem que a corrente de carga, corrente de spin e a orientação do spin sejam ortogonais entre si [71], o que faz com que os spin adotem uma direção preferencial ( $\pm\pi/2$ ) [72].

### 3.4.3 Simetria partícula-buraco

Em grafeno a falta de um gap nas bandas de energia permite que elétrons se movam com facilidade da banda de valência para a banda de condução. Ao sair de uma banda pra outra, os elétrons deixam "buracos" na banda de valência, formando um padrão de orbitais

cheios e vazios. A simetria partícula-buraco (PB) permite que os buracos se comportem como partículas de carga oposta aos elétrons. O operador  $C$  [73] transforma um setor de partícula em buraco e mantém o hamiltoniano invariante, de forma que

$$HC = -CH. \quad (3.43)$$

Atuando na função de onda, teremos

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (3.44)$$

$$HC|\psi\rangle = -CH|\psi\rangle = -CE|\psi\rangle = -EC|\psi\rangle. \quad (3.45)$$

A equação 3.45 nos fornece que  $C|\psi\rangle$  é autoestado com autovalor  $-E$ .

A simetria leva a criação de pares de autoestados simétricos entre si, cada nível com energia  $E$  será emparelhado a outro com energia  $-E$  [74, 75]. No grafeno, a dispersão linear e sua característica bidimensional, aumentam as escalas de energia do emparelhamento de elétrons e buracos [76], assim a simetria localiza os estados e os mantém na energia de Fermi. Na ausência da simetria, o estado localizado se tornará ressonante e deslocado da energia de Fermi [77]. Quanto menos simétrico é o sistema, mais fraco é o efeito de localização. Na presença de uma desordem estatisticamente simétrica em PB, como a de Anderson, a simetria irá determinar os efeitos da desordem sobre as propriedades de transporte do sistema.

# Capítulo 4

## Resultados

Neste capítulo, serão apresentados os resultados numéricos obtidos a partir das simulações computacionais feitas com o pacote Kwant [78], que é um pacote muito versátil e bastante utilizado em simulações de transporte quântico. Utilizamos o pacote para construir uma estrutura de rede favo de mel com quatro terminais, conforme apresentado anteriormente. Então simulamos o efeito Hall de spin, com o objetivo de reproduzir os resultados já existentes acerca da condutância spin Hall e analisar a eficiência da conversão da corrente de carga em corrente de spin.

### 4.1 Introdução

O design da estrutura em que estamos trabalhando consiste em quatro guias semi-infinitos conectados a um centro espalhador de comprimento  $L = 40a$ , onde  $a$  é o espaçamento de rede, a estrutura está descrita na figura 4.1. A região de espalhamento foi submetida a uma interação spin-órbita do tipo Rashba e também a uma desordem de Anderson. A desordem é adicionada inserindo um potencial que varia aleatoriamente entre os sites da rede, de acordo com uma distribuição uniforme no intervalo  $(-U/2, U/2)$ , onde  $U$  é a intensidade da desordem, simulando assim as impurezas que existem em um cenário real de amostras mesoscópicas.

Para observar o efeito Hall de spin nessa estrutura, inicialmente faz-se necessário gerar

uma corrente longitudinal, o que é feito aplicando uma diferença de potencial de valor fixo entre os terminais 1 e 2, que dará origem a uma corrente de carga na direção longitudinal. Ao passar pelo centro espalhador, a interação SO que foi adicionada fará os portadores spin-up e spin-down serem defletidos em direções opostas, dando origem a um fluxo de corrente de spin entre os guias 3 e 4, na direção transversal à corrente de carga. A eficiência da conversão da corrente de carga em corrente de spin é quantificada pelo ângulo spin-Hall, que é definido como a razão entre a corrente de carga longitudinal e a corrente Hall de spin transversal. A seguir, serão discutidos os resultados acerca do comportamento dos dados obtidos através da simulação do efeito Hall de spin.

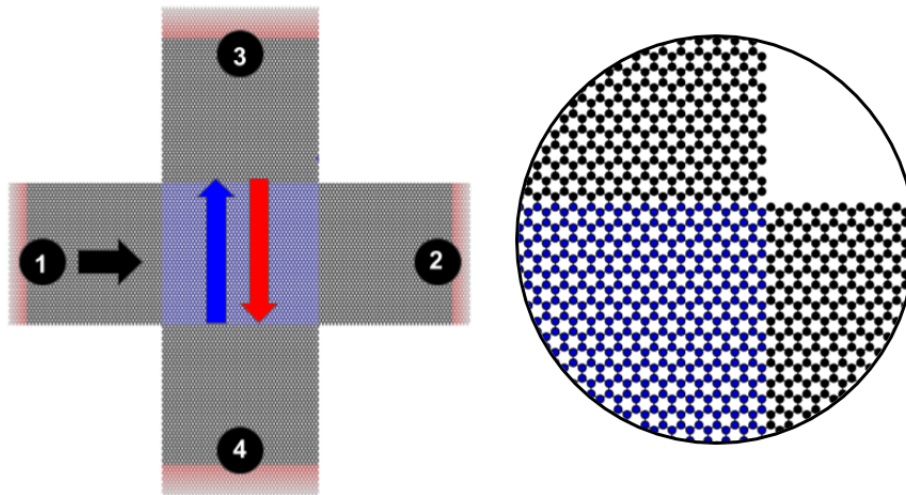


Figura 4.1: Estrutura de rede hexagonal conectada a quatro terminais e ao lado uma ampliação da estrutura. A região central(em azul) é a região de espalhamento, onde foi adicionado a desordem e a interação spin-órbita tipo Rashba. A corrente de carga longitudinal é representada pela seta preta e as componentes spin up e down da corrente de spin transversal são representadas pelas setas azul e vermelha.

## 4.2 Corrente Hall de spin $I_{SH}$ em função da desordem

O fluxo de corrente de spin está entre os terminais 3 e 4, que são acoplados à região de espalhamento por funções obtidas através do método da matriz de espalhamento [79], o que

é feito pelo pacote Kwant.

Na figura 4.2 podemos ver os resultados obtidos para a corrente Hall de spin em função da desordem  $U$ . O resultado obtido mostra a concordância com os resultados numérico [3] e analítico [20] encontrados na literatura. Nas figuras (a) e (b) temos respectivamente a média e o desvio padrão acerca da corrente, com a energia ( $E = 0.8$ ) fixa de modo a facilitar as análises. Os dados foram obtidos para valores da intensidade da interação Rashba ( $\lambda_R$ ) variando de 0.3 até 0.8. Nas figuras (c) e (d) temos respectivamente a média e a flutuação acerca da corrente, fixando o valor da interação como  $\lambda_R = 0.6$  e variando os valores de energia entre 0.3 e 0.9. Todos os resultados numéricos foram obtidos a partir de 15 mil realizações de desordem.

A média da corrente Hall de spin, mostrada nas figuras (a) e (c), decresce com o aumento da desordem, como esperado. É possível observar que a corrente decresce de maneira diferente em cada curva, quanto maior é a intensidade da interação ou energia, mais lentamente a corrente é dissipada no sistema com desordem. As oscilações na cauda da média são devidas as flutuações nos potenciais  $V_{3,4}$ .

O comportamento da flutuação da corrente de spin, nas figuras (b) e (d), mostra que inicialmente as flutuações crescem com o aumento da desordem, até atingir um pico máximo de flutuação com a desordem entre [1 – 3]. Podemos observar na imagem (b) que as flutuações atingem um valor máximo mais rapidamente para menores valores de interações spin-órbita e conforme a desordem cresce, as flutuações se tornam independentes da desordem para cada interação. Na imagem (d) vemos que a flutuação atinge o valor máximo mais rapidamente para valores maiores de energia, com o aumento da desordem as flutuações são independentes do valor de energia. Observamos nos dois casos encontramos a flutuação universal da corrente Hall de spin, com o valor médio de  $rms [I_{SH} = e^2V/h \times 0.18]$ , que é representada na figura como a linha tracejada, como esperado. Observamos também na figura (d) que o valor da flutuação universal é obtido com maior proximidade em energias mais altas.

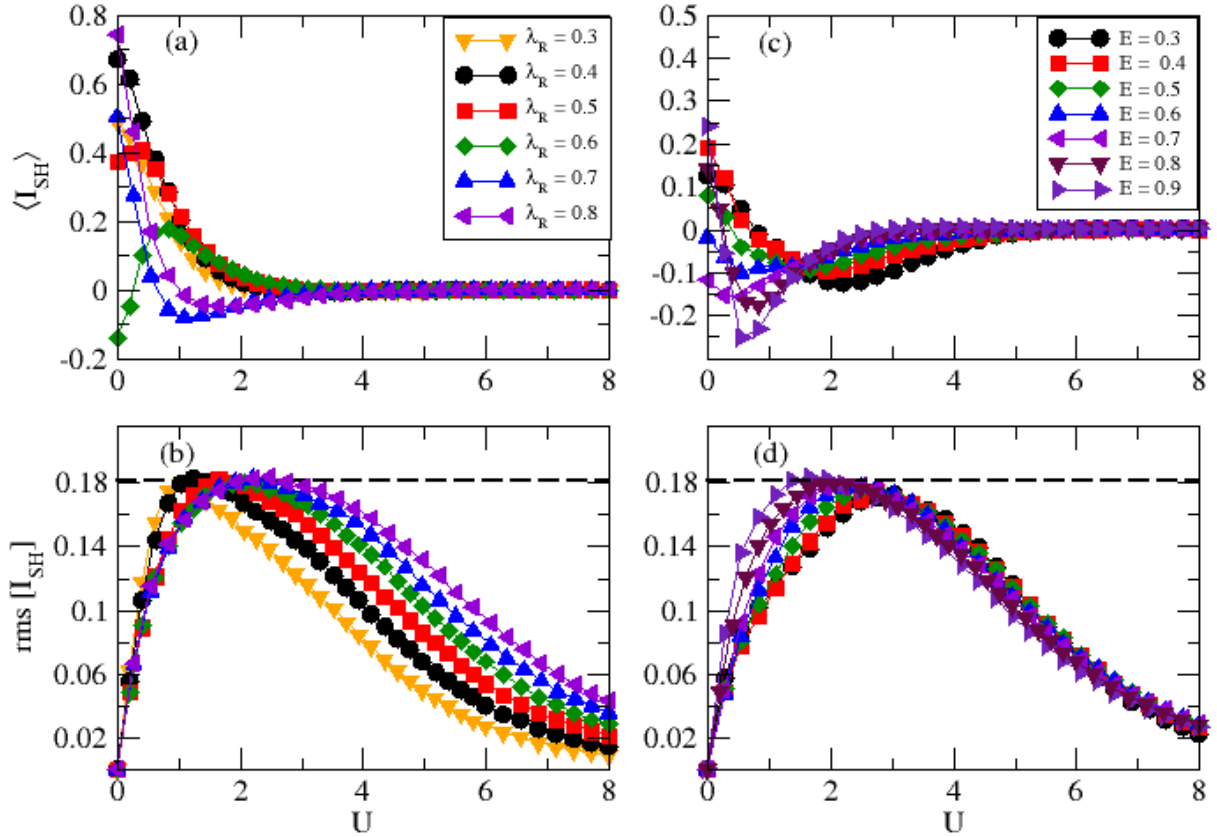


Figura 4.2: As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de spin, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio da corrente de spin em função da desordem  $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de  $\lambda_R$  com energia fixa  $E = 0.8$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de  $E$  fixando o valor da interação em  $\lambda_R = 0.6$ . Em ambos os casos, o resultado do desvio máximo da corrente Hall de spin é  $rms[I_{SH} = 0.18]$  (linha tracejada), assim como reportado na referência [3].

### 4.3 Corrente de carga $I_C$ em função da desordem

O fluxo de corrente de carga ocorre entre os terminais 1 e 2, passando pelo centro espalhador que adiciona desordem na dinâmica dos portadores de carga. Na figura 4.3 podemos ver os resultados obtidos para a corrente de carga em função da desordem  $U$ .

Nas figuras (a) e (b) temos respectivamente a média e o desvio padrão acerca da corrente para diferentes valores de  $\lambda_R$ , com a energia fixa em  $E = 0.8$ . Nas figuras (c) e (d) temos respectivamente a média e a flutuação acerca da corrente para diferentes valores de  $E$ , fixando o valor da interação como  $\lambda_R = 0.6$ . Todos os resultados numéricos foram obtidos a partir de 15 mil realizações de desordem.

Na figura (a), a média da corrente de carga apresenta inicialmente uma amplitude máxima inversamente proporcional ao valor de interação spin-órbita para baixas desordens. Conforme a desordem aumenta, logo as curvas com diferentes ISO convergem e a corrente de carga desaparece em um limite de altas desordens ( $U > 6$ ), independente da intensidade da interação spin-órbita. Diferentemente da média da corrente Hall de spin, mostrada na figura (4.2.a), que é dissipada em valores menores de desordem. Na figura (c), a média da corrente de carga apresenta inicialmente uma amplitude máxima diretamente proporcional a intensidade da energia. Conforme a desordem aumenta, as curvas com diferentes ISO convergem de forma mais lenta que na figura (4.3.a), porém a corrente de carga ainda desaparece em um limite de altas desordens ( $U > 6$ ), independente do valor de energia, de forma análoga a (4.3.a). Diferentemente da figura (4.2.a,c), a média da corrente de carga não apresenta oscilações nas figuras (4.3.a,c). O desvio da corrente de carga na figura (b) mostra que as flutuações da corrente de carga aumentam com o valor da desordem até atingir um valor máximo, que acontece mais rapidamente quanto menor a intensidade do  $\lambda_R$ . Diferentemente da (4.2.b), o pico da flutuação ocorre para desordem mais altas com  $U$  em torno de  $[4 - 6]$ , a corrente então decresce de forma independente da desordem para cada interação. Na figura (d), temos que as flutuações aumentam com a desordem atingindo amplitudes mais altas para os maiores valores de energia. Assim como na imagem (b), o pico das flutuações ocorre em desordem mais altas do que na corrente de spin, no entanto temos um intervalo menor de desordem em que acontecem os picos máximos, com  $U \approx 5$ . Encontramos nos dois casos um pico de flutuação máxima no valor de  $rms [I_C] = 0.52$ , valor que é resgatado para todas os valores de interação na figura (b) e atingido com maior precisão para os maiores valores de energia na figura (d).

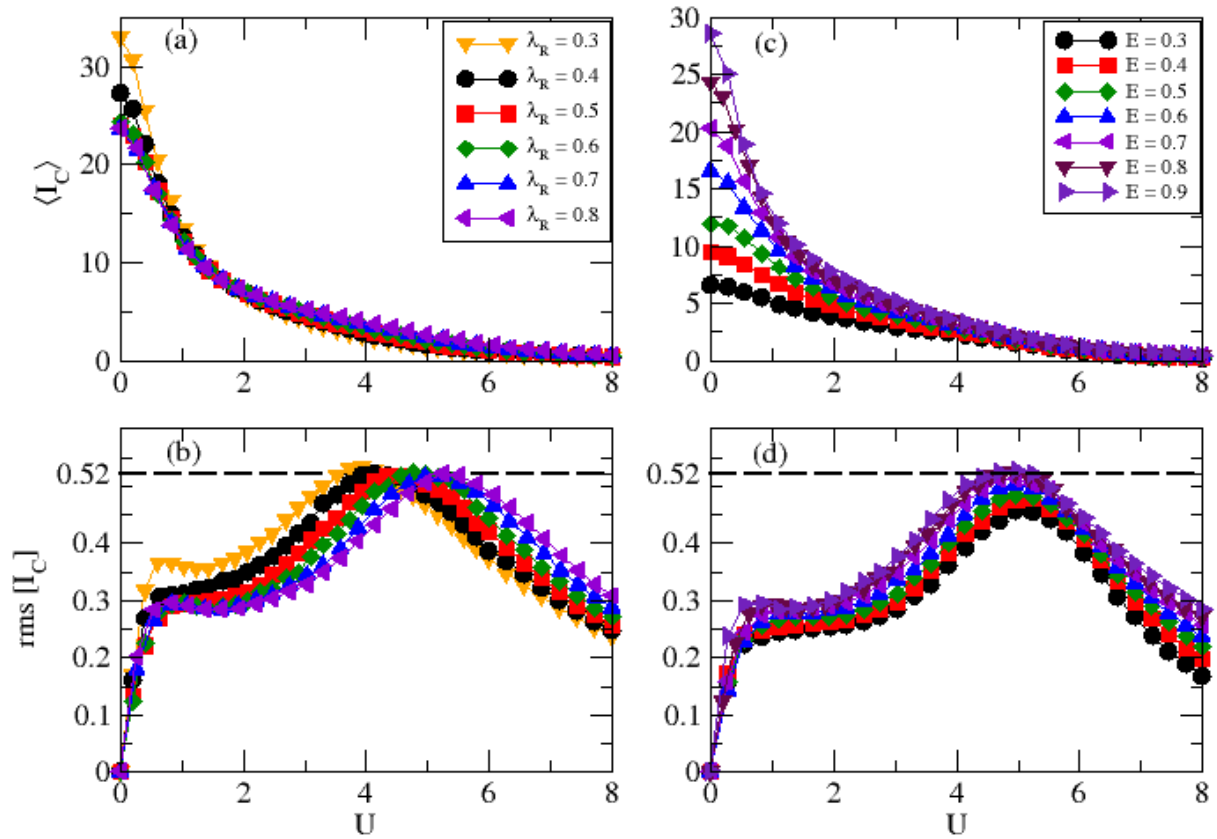


Figura 4.3: As figuras (a) e (c) mostram a média da corrente de carga, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio da corrente de carga em função da desordem  $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de  $\lambda_R$  com energia fixa  $E = 0.8$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de  $E$  fixando o valor da interação em  $\lambda_R = 0.6$ . Em ambos os casos, o resultado do desvio máximo da corrente de carga é  $rms[I_C = 0.52]$  (linha tracejada).



## 4.4 Ângulo spin-Hall $\Theta_{SH}$ em função da desordem

O ângulo spin Hall  $\Theta_{SH}$  (ASH) é obtido através da razão entre a corrente de spin e a corrente de carga

$$\Theta_{SH} = \frac{I_{SH}}{I_C}. \quad (4.1)$$

Como mede a eficiência da conversão de corrente de carga em corrente de spin, é conveniente observar como a desordem afeta essa eficiência. Assim como feito anteriormente, foram simuladas 15 mil realizações para cada realização de desordem e com os dados obtidos, calculamos sua média e desvio padrão pra diferentes valores de ISO e energia em função da desordem. Os resultados obtidos estão mostrados na figura 4.4. Nas figuras (a) e (b) temos respectivamente a média e a flutuação acerca do ASH para diferentes valores de  $\lambda_R$ , com a energia fixa em  $E = 0.8$ . Nas figuras (c) e (d) temos respectivamente a média e a flutuação acerca do ASH para diferentes valores de  $E$ , fixando o valor da interação como  $\lambda_R = 0.6$ .

Na figura (a), vemos que a média da eficiência desaparece mais rapidamente para menores valores de ISO com o aumento da desordem. Já na figura (c), vemos que a média da eficiência desaparece mais rapidamente para os maiores valores de energia. Podemos observar que na curva das médias das figuras (4.4.a,c) estão presentes oscilações, capturando as oscilações presentes na média da corrente Hall de spin, vista na figura (4.2.a,c). A figura (b) apresenta um crescimento das flutuações com o aumento da desordem, crescimento esse que se mostra independente da intensidade da interação spin-órbita para baixas desordens ( $U < 2$ ), conforme o crescimento da desordem, a interação passa a ser relevante, atingindo um valor máximo para  $\lambda_R = 0.8$ , onde  $rms[\Theta_{SH}] = 0.05$ . O que mostra que temos uma amplitude máxima das flutuações do ASH para maiores valores de  $\lambda_R$ , o valor máximo é atingindo em altas desordens, com  $U \geq 6$ , assim como acontece com as flutuações da corrente de carga da figura (4.3.b). Isto significa que o aumento da eficiência não está relacionado com o aumento das flutuações da corrente Hall de spin, mas com o aumento das flutuações da corrente de carga. Quanto mais a corrente de carga flutua, maior é a eficiência da conversão de carga para spin. Nas figuras (4.2.d) e (4.3.d) observamos um aumento das flutuações com a energia, convergindo para um valor finito. No entanto a figura (4.4.d) mostra que os

desvios máximos do ASH diminuem com a energia, sem convergência. Teremos um valor máximo de desvio para  $E = 0.3$ , com uma eficiência máxima de  $\Theta_{SH} \approx 7\%$ , o que significa que a diminuição da energia favorece o ângulo spin Hall.

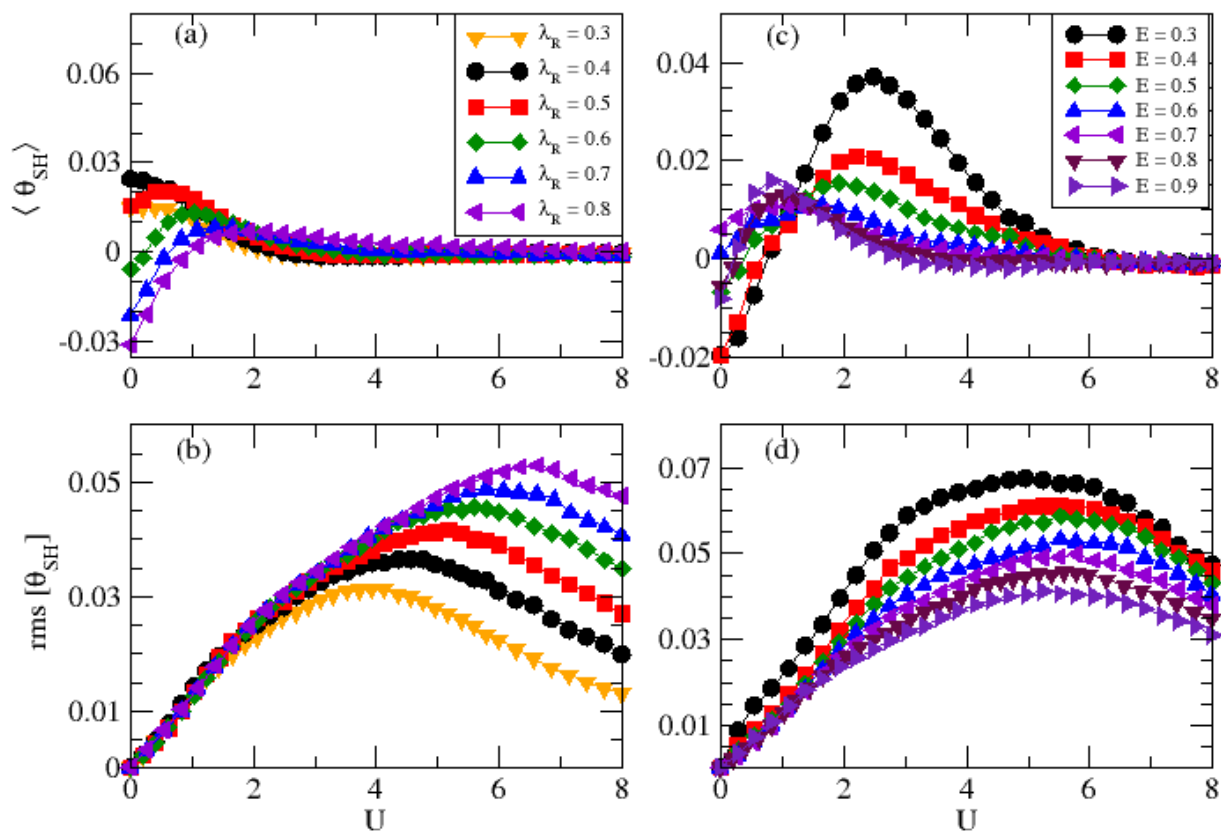


Figura 4.4: As figuras (a) e (c) mostram a média do ângulo spin Hall, enquanto as figuras (b) e (d) mostram o desvio do ângulo spin Hall em função da desordem  $U$ . As medidas (a) e (b) são para diferentes valores de  $\lambda_R$  com energia fixa  $E = 0.8$ , em (c) e (d) temos diferentes valores de  $E$  fixando o valor da interação em  $\lambda_R = 0.6$ .

## 4.5 Conexão dos resultados numéricos com a hipótese analítica

Na literatura existem muitos estudos teóricos acerca do ângulo spin Hall, contudo uma investigação teórica das flutuações do ASH conectando resultados numéricos com os analíticos se encontra completamente ausente. Motivados por este fato, buscamos obter as informações sobre o transporte eletrônico que as flutuações do ASH em grafeno nos fornece. Através dos cálculos analíticos apresentados na seção 2.4 e da equação 4.1, obteremos que as flutuações do ângulo spin Hall são dadas pela expressão descrita na referência [21], teremos

$$rms[\theta_{SH}] = \sqrt{\frac{\langle \delta I_{SH}^2 \rangle}{\langle I_C \rangle^2}}. \quad (4.2)$$

Através do método diagramático, podemos obter a expressão para as flutuações da corrente Hall de spin, que é encontrada nas referências [20, 80], teremos

$$\langle \delta I_{SH}^2 \rangle = \left( \frac{e^2 V}{h} \right)^2 \left[ \frac{1}{32} + O(N^{-1}) \right]. \quad (4.3)$$

A expressão para a média da corrente de carga incorpora escalas de comprimento e é descrita adequadamente pelo resultado fornecido na referência [81], teremos

$$\langle I_C \rangle^2 = \frac{e^2 V}{h} \left[ \frac{N}{1 + \frac{L}{l_e}} + O(N^{-1}) \right], \quad (4.4)$$

onde  $N$  é o número de canais abertos,  $L$  é comprimento longitudinal da amostra e  $l_e$  o livre caminho médio. Substituindo as equações 4.3 e 4.4 na equação 4.2, encontraremos que

$$rms[\theta_{SH}] = \frac{0.18}{N} \left( 1 + \frac{L}{l_e} \right). \quad (4.5)$$

A equação 4.5 é muito importante, pois expressa a flutuação universal como função de três variáveis importantes para o transporte eletrônico. A expressão para o desvio do ASH

também nos fornece duas informações, a primeira é que a desordem favorece a conversão de carga para spin, quanto mais espalhamentos o elétron sofrer, maior será a conversão. Além disso, a expressão também nos fornece que diminuindo a espessura da amostra ( $N$ ), favoreceremos o ASH. Esta última informação está em concordância com a referência [82], que através do modelo de Drude obteve um aumento da conversão diminuindo a espessura da amostra.

Temos que a condutividade adimensional da amostra é dada por

$$\sigma = N \frac{l_e}{L}. \quad (4.6)$$

Tomando o limite em que  $L/l_e \gg 1$  na equação 4.5, podemos então relacionar o ângulo spin Hall com a condutividade, dada pela equação 4.6, teremos assim

$$\theta_{SH} \times \sigma = 0.18. \quad (4.7)$$

A equação 4.5 nos indica uma diminuição do ângulo spin Hall como uma lei de potência em função da condutividade para sistemas desordenados com forte ISO. Além disso, a equação nos fornece que, no limite em que o comprimento da amostra é longo, o produto entre  $\theta_{SH}$  e  $\sigma$  tem um valor universal de 0.18, independente do material ou qualquer outra especificidade.

Conectando agora a equação 4.5 com os resultados numéricos obtidos na figura 4.4, obtemos a figura 4.5. A figura (a) mostra o coeficiente de transmissão  $T_i^\alpha(E) = 2N$  como função da energia de Fermi, que relaciona  $E = 0.3, 0.4, \dots$  com  $N = 8, 12, \dots$ . A figura (b) mostra os máximos desvios do ASH como função de  $N$ . A linha tracejada é um ajuste numérico dos dados, dado por

$$\theta_{SH} = (11.69 + 0.40N)^{-1}. \quad (4.8)$$

A equação 4.7 é válida no limite de grandes valores de  $N$ , aplicando este limite no ajuste da curva na figura 4.5, teremos que para o grafeno esse valor é de  $\theta_{SH} = 2.5/N$ . Comparando

com a equação 4.7, chegamos a conclusão que  $\sigma = 0.072N$ , mostrando que o grafeno segue a relação universal apresentada.

Utilizando o valor obtido para a condutividade e o tamanho da nossa estrutura ( $L = 40a$ ) na equação 4.7, encontramos que o caminho livre médio na nossa estrutura é  $l_e = 2.88a$ , onde  $a$  é o espaçamento da rede. Isto significa que mesmo na presença de desordem, a partícula em uma rede de grafeno consegue percorrer aproximadamente 3 sítios sem sofrer espalhamento.

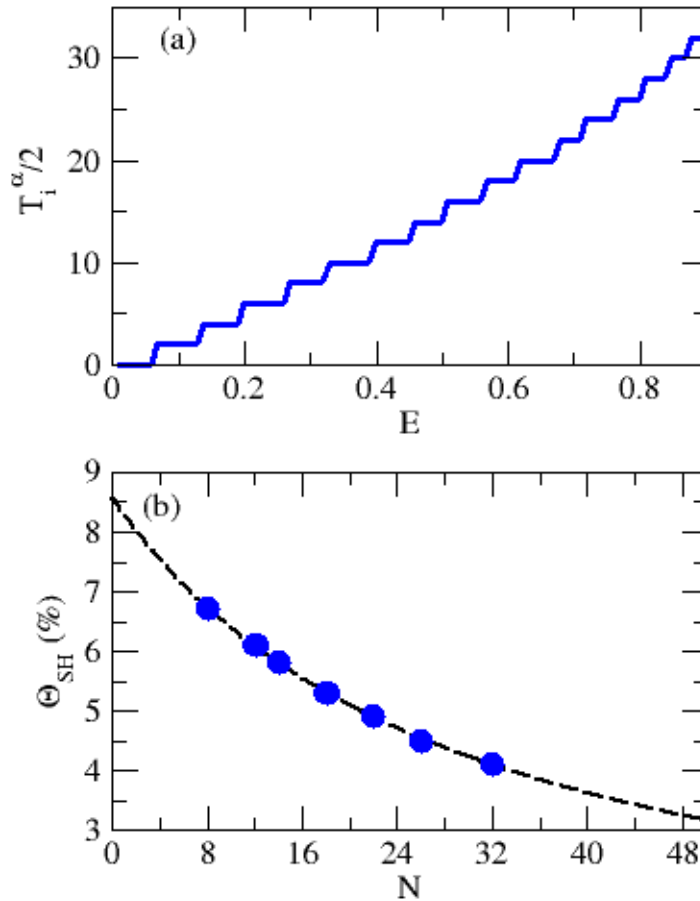


Figura 4.5: A figura (a) mostra o coeficiente de transmissão  $T_i^\alpha(E)/2 = N$  como função da energia de Fermi. A figura (b) mostra os máximos desvios do ASH obtidos na figura (4.4.d) como função da espessura  $N$ . A linha tracejada é um fit numérico.

# Capítulo 5

## Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho apresentamos um estudo numérico das flutuações do ângulo spin Hall em uma estrutura desordenada de grafeno com interação spin-órbita do tipo Rashba. Obtivemos que as flutuações do ASH estão relacionadas com as flutuações da corrente de carga e não com as flutuações da corrente Hall de spin. Este é um fato muito importante, pois recuperamos o resultado analítico obtido, que mostra que no limite em que o comprimento da amostra é longo, o desvio do ângulo é uma função de três variáveis relevantes no transporte eletrônico e que são provenientes da corrente de carga. Além disso, mostramos que o produto do máximo desvio do ASH com a condutividade também nos fornece um valor universal em grafeno, independente das propriedades do material, assim como mostramos na referência [21].

Com base no trabalho feito, podemos estender os resultados obtidos em trabalhos futuros, através de um estudo sobre o papel da ISO de natureza intrínseca em grafeno, o que não foi abordado neste trabalho. Se faz necessário estudar as flutuações do ângulo spin Hall na estrutura desordenada quando presente a interação intrínseca. Ainda como perspectiva futura, as investigações poderão incluir uma análise acerca de qual tipo de interação domina os processos de espalhamento e conseqüentemente a eficiência da conversão no grafeno. Por fim, acreditamos que nosso trabalho contribui com novas informações sobre as flutuações do ângulo spin Hall no grafeno, mostrando a importância de seu estudo na spintrônica.

# Referências Bibliográficas

- [1] J. E. Hirsch. Spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1834–1837, Aug 1999.
- [2] Yuichiro Kato, Roberto Myers, AC Gossard, and D Awschalom. Observation of the spin hall effect in semiconductors. *Science (New York, N.Y.)*, 306:1910–3, 12 2004.
- [3] Wei Ren, Zhenhua Qiao, Jian Wang, Qingfeng Sun, and Hong Guo. Universal spin-hall conductance fluctuations in two dimensions. *Physical review letters*, 97:066603, 09 2006.
- [4] Koon G. Avsar A. Balakrishnan, J. et al. Giant spin hall effect in graphene grown by chemical vapour deposition. *Nat Commun*, 5:4748, 09 2014.
- [5] K. L. Shepard, M. L. Roukes, and B. P. van der Gaag. Experimental measurement of scattering coefficients in mesoscopic conductors. *Phys. Rev. B*, 46:9648–9666, Oct 1992.
- [6] Kobi Frischwasser, Igor Yulevich, Vladimir Kleiner, and Erez Hasman. Rashba-like spin degeneracy breaking in coupled thermal antenna lattices. *Optics express*, 19:23475–82, 11 2011.
- [7] T. C. Vasconcelos, J. G. G. S. Ramos, and A. L. R. Barbosa. Universal spin hall conductance fluctuations in chaotic dirac quantum dots. *Phys. Rev. B*, 93:115120, Mar 2016.
- [8] A. Geim and K.S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature materials*, 6:183–91, 04 2007.
- [9] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81:109–162, Jan 2009.

- 
- [10] Mark Johnson and R. H. Silsbee. Interfacial charge-spin coupling: Injection and detection of spin magnetization in metals. *Phys. Rev. Lett.*, 55:1790–1793, Oct 1985.
- [11] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas. Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2472–2475, Nov 1988.
- [12] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Phys. Rev. B*, 39:4828–4830, Mar 1989.
- [13] C. H. Tsang, R. E. Fontana, T. Lin, D. E. Heim, B. A. Gurney, and M. L. Williams. Design, fabrication, and performance of spin-valve read heads for magnetic recording applications. *IBM Journal of Research and Development*, 42(1):103–116, 1998.
- [14] A. Avsar, H. Ochoa, F. Guinea, B. Özyilmaz, B. J. van Wees, and I. J. Vera-Marun. Colloquium: Spintronics in graphene and other two-dimensional materials. *Rev. Mod. Phys.*, 92:021003, Jun 2020.
- [15] Supriyo Datta and Biswajit Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, 56(7):665–667, February 1990.
- [16] F. J. Jedema, M. S. Nijboer, A. T. Filip, and B. J. van Wees. Spin injection and spin accumulation in all-metal mesoscopic spin valves. *Phys. Rev. B*, 67:085319, Feb 2003.
- [17] Xiaohua Lou, Christoph Adelman, Scott Crooker, Eric Garlid, Jianjie Zhang, S. Reddy, Soren Flexner, Chris Palmstrøm, and P. Crowell. Electrical detection of spin transport in lateral ferromagnet-semiconductor devices. *Nature Physics*, 3:197, 02 2007.
- [18] Michel Dyakonov and V. Perel. Possibility of orienting electron spins with current. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 13:467, 05 1971.
- [19] Michel Dyakonov and V.I. Perel. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, A 35:459–460, 07 1971.



- [20] J. H. Bardarson, Í. Adagideli, and Ph. Jacquod. Mesoscopic spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 98:196601, May 2007.
- [21] F. A. F. Santana, J. M. da Silva, T. C. Vasconcelos, J. G. G. S. Ramos, and A. L. R. Barbosa. Spin hall angle fluctuations in a device with disorder. *Phys. Rev. B*, 102:041107, Jul 2020.
- [22] K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, Da Jiang, Yanshui Zhang, S. Dubonos, Irina Grigorieva, and A. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Nat. Mater.*, 6, 01 2004.
- [23] J. Ingla-Aynés, M. H. D. Guimarães, R. J. Meijerink, P. J. Zomer, and B. J. van Wees. 24 –  $\mu\text{m}$  spin relaxation length in boron nitride encapsulated bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 92:201410, Nov 2015.
- [24] Jairo Sinova, Dimitrie Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald. Universal intrinsic spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 92:126603, Mar 2004.
- [25] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95:226801, Nov 2005.
- [26] Jayakumar Balakrishnan, Gavin Koon, Manu Jaiswal, Antonio Castro Neto, and Barbaros Özyilmaz. Colossal enhancement of spin-orbit coupling in weakly hydrogenated graphene. *Nature Physics*, 9:284–287, 05 2013.
- [27] I.S. OLIVEIRA and V.L.B. DE JESUS. *Introdução a Física do Estado Sólido*. LIVRARIA DA FÍSICA, 2005.
- [28] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge University Press, 1997.
- [29] Kasun Premasiri and Xuan Gao. Tuning spin-orbit coupling in 2d materials for spintronics: A topical review. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 31, 02 2019.
- [30] Anton Nalitov, G. Malpuech, H. Terças, and Dmitry Solnyshkov. Spin-orbit coupling and optical spin hall effect in photonic graphene. *Physical review letters*, 114, 03 2014.

- 
- [31] G. Dresselhaus. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Phys. Rev.*, 100:580–586, Oct 1955.
- [32] Xiaojing Li, Zhenhua Wu, and Jiang-Tao Liu. Rashba spin-orbit coupling in graphene monolayer coated by periodic magnetic stripes. *Scientific Reports*, 7, 07 2017.
- [33] Hongki Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, Leonard Kleinman, and A. H. MacDonald. Intrinsic and rashba spin-orbit interactions in graphene sheets. *Phys. Rev. B*, 74:165310, Oct 2006.
- [34] D.J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2017.
- [35] J. E. Hirsch. Spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1834–1837, Aug 1999.
- [36] M. Büttiker. Four-terminal phase-coherent conductance. *Phys. Rev. Lett.*, 57:1761–1764, Oct 1986.
- [37] P W Brouwer and C W Beenakker. Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems. *Journal of Mathematical Physics*, 37(10), 10 1996.
- [38] H. Petroski. *The Pencil: A History of Design and Circumstance*. Borzoi books. Knopf, 1992.
- [39] N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea. Conductance quantization in mesoscopic graphene. *Phys. Rev. B*, 73:195411, May 2006.
- [40] Kyoko Nakada, Mitsutaka Fujita, Gene Dresselhaus, and Mildred S. Dresselhaus. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence. *Phys. Rev. B*, 54:17954–17961, Dec 1996.
- [41] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker. Boundary conditions for dirac fermions on a terminated honeycomb lattice. *Phys. Rev. B*, 77:085423, Feb 2008.
- [42] L. Brey and H. A. Fertig. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the dirac equation. *Phys. Rev. B*, 73:235411, Jun 2006.

- [43] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, 71:622–634, May 1947.
- [44] Cristina Bena and Gilles Montambaux. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics*, 11(9):095003, Sep 2009.
- [45] Juan D. Lejarreta, C Fuentevilla, Enrique Diez, and Jose Cervero. An exact transmission coefficient with one and two barriers in graphene. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 46:155304, 04 2013.
- [46] Mohsen Modarresi, Aybey Mogulkoc, Mahmood Rezaee Roknabadi, and Nasser Shah-tahmassebi. Possible polaron formation of zigzag graphene nano-ribbon in the presence of rashba spin-orbit coupling. *Physica E Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 66, 11 2014.
- [47] Tsuneya Ando. Spin-orbit interaction in carbon nanotubes. *Journal of The Physical Society of Japan - J PHYS SOC JPN*, 69:1757–1763, 06 2000.
- [48] Hongki Min, J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, Leonard Kleinman, and A. H. MacDonald. Intrinsic and rashba spin-orbit interactions in graphene sheets. *Phys. Rev. B*, 74:165310, Oct 2006.
- [49] Yi-Xiang Wang and Ya-Min Wu. Disorder enhanced conductance in graphene. *Physica B: Condensed Matter*, 478, 11 2015.
- [50] Gerald Schubert, Jens Schleede, and Holger Fehske. Anderson disorder in graphene nanoribbons: A local distribution approach. *Phys. Rev. B*, 79:235116, Jun 2009.
- [51] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.
- [52] Shi-Jie Xiong and Ye Xiong. Anderson localization of electron states in graphene in different types of disorder. *Phys. Rev. B*, 76:214204, Dec 2007.
- [53] P.A. Mello, N.K.N.K.K. Pier A. Mello, P.A. Mello, N. Kumar, D. Narendra Kumar, and Oxford University Press. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity*

- and Statistical Fluctuations : a Maximum-entropy Viewpoint*. Mesoscopic physics and nanotechnology. Oxford University Press, 2004.
- [54] J. Mehra, B.R. Judd, and G.W. Mackey. *The Collected Works of Eugene Paul Wigner: Part A: The Scientific Papers*. The Collected Works. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [55] E. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Phys. Rev.*, 40:749–759, Jun 1932.
- [56] E. Wigner. *Group Theory: And its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*. Pure and applied physics. Elsevier Science, 2012.
- [57] Freeman J. Dyson. The Threefold Way. Algebraic Structure of Symmetry Groups and Ensembles in Quantum Mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, 3(6):1199–1215, November 1962.
- [58] Freeman J. Dyson. Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1):140–156, January 1962.
- [59] Martin Zirnbauer. Symmetry classes. 01 2010.
- [60] C. W. J. Beenakker. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, 69:731–808, Jul 1997.
- [61] Martin Zirnbauer. Symmetry classes in random matrix theory. *Encyclopedia of Mathematical Physics*, 05 2004.
- [62] H. Raza. *Graphene Nanoelectronics: Metrology, Synthesis, Properties and Applications*. NanoScience and Technology. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [63] Jeroen S.W. Lamb and John A.G. Roberts. Time-reversal symmetry in dynamical systems: A survey. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 112(1):1 – 39, 1998. Proceedings of the Workshop on Time-Reversal Symmetry in Dynamical Systems.
- [64] P. K. Kabir. The physics of time reversal. robert g. sachs. university of chicago press, chicago, 1987. xvi, 309 pp., illus. 55; paper, 23. *Science*, 240(4855):1068–1069, 1988.

- [65] Bryan W. Roberts. Time reversal, 2019. Prepared for the Routledge Handbook of Philosophy of Physics, Eleanor Knox and Alistair Wilson (Eds).
- [66] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and A. Jorio. *Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter*. Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [67] Jérôme Cayssol. Various probes of dirac matter: from graphene to topological insulators. 2013.
- [68] Shunsuke A. Sato. Photovoltaic effect from the viewpoint of time-reversal symmetry. *Journal of the Physical Society of Japan*, 88(11):115003, 2019.
- [69] A.L. Fetter, J.D. Walecka, B. Banes, and M. Eakens. *Quantum Theory of Many-particle Systems*. International series in pure and applied physics. McGraw-Hill, 1971.
- [70] P.M. Chaikin and T.C. Lubensky. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [71] Alisha Humphries, Tao Wang, Eric Edwards, Shane Allen, Justin Shaw, Hans Nembach, J.Q. Xiao, Tom Silva, and Xin Fan. Observation of spin-orbit effects with spin rotation symmetry. *Nature Communications*, 8, 10 2017.
- [72] W.M. Liu and E. Kengne. *Schrödinger Equations in Nonlinear Systems*. Springer Singapore, 2019.
- [73] Romain Vasseur, Aaron J. Friedman, S. A. Parameswaran, and Andrew C. Potter. Particle-hole symmetry, many-body localization, and topological edge modes. *Phys. Rev. B*, 93:134207, Apr 2016.
- [74] Jing He, Ying-Xue Zhu, Ya-Jie Wu, Lan-Feng Liu, Ying Liang, and Su-Peng Kou. Particle-hole symmetry protected zero modes on vacancies in the topological insulators and topological superconductors on the honeycomb lattice. *Physical Review B*, 87, 09 2012.
- [75] Masatoshi Sato and Yoichi Ando. Topological superconductors: A review. *Reports on progress in physics. Physical Society (Great Britain)*, 80, 04 2017.

- 
- [76] R. Bistritzer and A. H. MacDonald. Influence of disorder on electron-hole pair condensation in graphene bilayers. *Phys. Rev. Lett.*, 101:256406, Dec 2008.
- [77] Vitor M. Pereira, F. Guinea, J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto. Disorder induced localized states in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 96:036801, Jan 2006.
- [78] Christoph W Groth, Michael Wimmer, Anton R Akhmerov, and Xavier Waintal. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics*, 16(6):063065, June 2014.
- [79] M. López-Sancho, Jose Lopez Sancho, and Jessy Rubio. Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: Application to mo (100). *Journal of Physics F: Metal Physics*, 14:1205, 11 2000.
- [80] J. G. G. S. Ramos, A. L. R. Barbosa, D. Bazeia, M. S. Hussein, and C. H. Lewenkopf. Generalized correlation functions for conductance fluctuations and the mesoscopic spin hall effect. *Phys. Rev. B*, 86:235112, Dec 2012.
- [81] P. W. Brouwer and C. W. J. Beenakker. Diagrammatic method of integration over the unitary group, with applications to quantum transport in mesoscopic systems. *Journal of Mathematical Physics*, 37(10):4904–4934, Oct 1996.
- [82] Lingjun Zhou, Vahram L. Grigoryan, Sadamichi Maekawa, Xuhui Wang, and Jiang Xiao. Spin hall effect by surface roughness. *Phys. Rev. B*, 91:045407, Jan 2015.