

Hudson Pacheco Pinheiro

**Confinamento Topológico em Grafeno Sob
Regime de Novas Estruturas Globais**

Fortaleza

2014

Hudson Pacheco Pinheiro

Confinamento Topológico em Grafeno Sob Regime de Novas Estruturas Globais

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para obtenção do Título de Doutor em Física.

Universidade Federal do Ceará – UFC

Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação

Orientador: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida

Fortaleza

2014

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca do Curso de Física

-
- P719c Pinheiro, Hudson Pacheco
Confinamento topológico em grafeno sob regime de novas estruturas globais / Hudson Pacheco Pinheiro. – Fortaleza, 2014.
70 f.: il. algumas color. enc.; 30 cm.
- Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2014.
Orientação: Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida.
Área de concentração: Física da Matéria Condensada.
1. Teoria quântica de campos. 2. Grafeno. 3. Multikink, modelo de. 4. Defeito topológico.
I. Almeida, Carlos Alberto Santos de. II. Título.

Hudson Pacheco Pinheiro

Confinamento Topológico em Grafeno Sob Regime de Novas Estruturas Globais

Tese submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em Física

Aprovada em 25 de Novembro de 2014

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Carlos Alberto Santos de Almeida
(Orientador)
Universidade Federal do Ceará - UFC

Prof. Dr. Humberto Belich Júnior
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES

Prof^a. Dr^a. Luciana Angélica da Silva Nunes
Universidade Federal Rural do Semi-Árido - UFERSA

Prof. Dr. Luís José Silveira de Sousa
Instituto Federal do Ceará - IFCE

Dr. Victor Pereira do Nascimento Santos
Universidade Federal do Ceará - UFC

Este trabalho é dedicado aos meus primeiros mestres.

Agradecimentos

Muito, mas muito obrigado...

A Deus, por não tirar a mão.

A minha esposa Carol, por todo o seu amor e dedicação para comigo.

A meu pai, Valfredo, meus irmãos, Ronald, Robson e Graziela, minha mãe, Jucinéa, e meus parentes, por serem meus exemplos, por alimentarem meus sonhos e por me apoiarem incondicionalmente.

Ao professor Carlos Alberto, pela orientação sadia, pela amizade, pelos inestimáveis ensinamentos e por nunca perder a fé em mim, mesmo quando eu já tinha perdido.

Aos professores André, Bedê, Cleuton, Diehl, Euclimar, Jayro, Jeanlex, Josué, Marlúcia, Murilo, Nilson, Paulo de Tarso, Raimundo, Ramos, Renan e Valder por contribuírem com minha formação.

Ao meu amigo Victor Perreira Santos, por sua colaboração nos momentos mais difíceis da minha pós-graduação.

Aos companheiros do LASSCO, Davi, Diego, Euclides, Júlio, Luciana, Luis José, Maluf, Samuel, Wagner e Wilami, obrigado pelo companheirismo e pela convivência harmoniosa e saudável.

Aos meus amigos, Acrísio, Andrey, Apiano, Eduardo, Erneson, Franciné, George, Ivan, José Junior, Pablo, Paschoal, Roner, Saulo, Sérgio, Tereza, Zenner, etc. Obrigado pelas mais sinceras demonstrações de amizade.

Aos funcionários e servidores do Departamento de Física da UFC, pelos serviços prestados a todos.

Ao curso de Pós-Graduação em Física da UFC, na pessoa do professor Antonio Gomes de Souza Filho, pela oportunidade oferecida.

A FUNCAP e a CAPES, pelo suporte financeiro.

E, finalmente, a William Shatner, Leonard Nimoy e Paul Zaloon, por darem vida a personagens que despertaram, não só em mim, o gosto pela ciência.

Sou-lhes mais grato do que podem imaginar!

*“I have not failed. I’ve just
found 10,000 ways that won’t work.”*

Thomas A. Edison

Resumo

Neste trabalho revisamos a base teórica do confinamento topológico no grafeno bicamada. Esse confinamento é obtido pela aplicação de um potencial elétrico entre as camadas de grafeno, podendo controlar a largura do gap entre as camadas de condução e de valência definidas pelos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' . Estas estruturas de defeitos são características de uma estrutura de paredes de domínio interpolando regiões com diferentes polaridades. No nosso caso específico, utilizamos um método que recentemente foi introduzido na literatura científica e que já tem gerado resultados interessantes em física de altas energias, principalmente no cenário de branas, o chamado modelo multikink em uma dimensão. As estruturas de defeito produzidas por este método permitiram a análise do confinamento para potenciais com perfil de um kink, 2-kink, 3-kink e 4-kink. Neste contexto, mostramos o aparecimento de modos zero quirais, ou seja, estados topologicamente confinados, no grafeno bicamada, assim como de novos estados de baixa energia além dos estados intragap já conhecidos. Mostramos ainda que o perfil utilizado, seja kink-kink, ou kink-antikink, modifica as curvas que representam os estados quirais nas estruturas dos níveis de energia.

Palavras-chaves: Grafeno. Confinamento Topológico. Multikink.

Abstract

In this paper we review the theoretical basis of the topological confinement in bilayer graphene. This confinement is obtained by applying an electric potential between the layers of graphene and can control the width of the gap between the layers of conduction and valence Dirac defined by points \vec{K} and \vec{K}' . These structures are characteristic of defects of a structure of domain walls interpolating regions with different polarities. In our specific case, we used a method that was recently introduced in the scientific literature and has already generated interesting results in high energy physics, especially in the brane scenario, called multikink model in one dimension. The defect structures produced by this method allowed the analysis of confinement for potential profile with a kink, kink-2, 3-and 4-kink kink. In this context, we show the appearance of chiral modes zero, that is topologically confined states in the bilayer graphene, as well as new low-power states in addition to the already known intragap states. We also show that the profile used is kink-kink or kink-antikink, modifies the curves representing the quiral states in the structures of the energy levels.

Key-words: Graphene. Topological Confinement. Multikink.

Lista de ilustrações

| | |
|--|----|
| Figura 1 – Através do grafeno (2D), pode-se obter o fulereno (0D), o nanotubo (1D) e o grafite (3D).[Imagem: Manchester Centre for Mesoscience and Nanotechnology, University of Manchester[1]] | 18 |
| Figura 2 – Esquema da produção do filme de grafeno. [Imagem retirada da referência [2]] . . . | 20 |
| Figura 3 – Rede hexagonal e sua zona de Brillouin.[Imagem: Referência [3]] | 21 |
| Figura 4 – Dispersão eletrônica da rede hexagonal.[Imagem: Referência [3]] | 22 |
| Figura 5 – A massa efetiva cíclotron dos portadores de carga no grafeno em função de n . [Imagem: Referência [3]] | 23 |
| Figura 6 – A relação entre as bandas condução e valência no grafeno e a quiralidade η . [Imagem: Referência [4]] | 27 |
| Figura 7 – O gráfico da esquerda mostra os níveis de Landau para os elétrons descritos pela equação de Schrödinger. O da direita mostra os níveis de Landau para os elétrons descritos pela equação de Dirac. [Imagem: Referência [5]] | 28 |
| Figura 8 – O efeito Hall quântico no grafeno como uma função da densidade dos portadores de carga n . [Imagem: Referência [??]] | 28 |
| Figura 9 – Comportamento do potencial ϕ^4 | 36 |
| Figura 10 – O perfil do kink e antikink. | 37 |
| Figura 11 – Soluções do Defeito para modelos com $p = 3$ e $p = 5$ | 40 |
| Figura 12 – Soluções do Defeito para modelos com $p = 3$ (linha cheia) e $p = 5$ (linha pontilhada). | 41 |
| Figura 13 – Perfil do potencial $V_2(\phi_2)$. [Imagem: retirada da referência [7]] | 43 |
| Figura 14 – Perfil da solução $\phi_2(x)$. kink e 2-kink [Imagem: retirada da referência [7]] | 44 |
| Figura 15 – Perfil do potencial $V_3(\phi_3)$. [Imagem: retirada da referência [7]] | 45 |
| Figura 16 – Perfil da solução $\phi_3(x)$. 3-kink [Imagem: retirada da referência [7]] | 46 |
| Figura 17 – Perfil do potencial $V_4(\phi_4)$. [Imagem: retirada da referência [7]] | 46 |
| Figura 18 – Perfil da solução $\phi_4(x)$. 4-kink [Imagem: retirada da referência [7]] | 47 |
| Figura 19 – Perfil do potencial $V_2(\phi_2)$. [Imagem: retirada da referência [7]] | 47 |
| Figura 20 – O comportamento da função sinal (3.2). | 51 |

| | |
|--|----|
| Figura 21 – Os espinores de onda e a densidade de probabilidade. Análise numérica das equações (3.6) e (3.7). [Imagem: retirada da referência [8]] | 53 |
| Figura 22 – Os níveis de energia para um kink. [Imagem: retirada da referência [8]] | 54 |
| Figura 23 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo kink descrito por (4.6). . . | 57 |
| Figura 24 – Os espinores de onda e a densidade de probabilidade. Análise numérica das equações (3.6) e (3.7). | 58 |
| Figura 25 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_1(x)$ para $l = 0, 5$. | 58 |
| Figura 26 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_1(x)$ para $l = 4, 0$. | 59 |
| Figura 27 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo 2-kink descrito por (4.7). . | 59 |
| Figura 28 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_2(x)$ para $l = 1, 0$. | 60 |
| Figura 29 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_2(x)$ para $l = 2, 0$. | 60 |
| Figura 30 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo 3-kink descrito por (4.8). . | 61 |
| Figura 31 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_3(x)$ para $l = 1, 0$. | 61 |
| Figura 32 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_3(x)$ para $l = 2, 0$. | 62 |
| Figura 33 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo 4-kink. | 62 |
| Figura 34 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_4(x)$ para $l = 1, 0$. | 63 |
| Figura 35 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_4(x)$ para $l = 2, 0$. | 63 |

Lista de tabelas

Sumário

| | | |
|------------|---|-----------|
| | Introdução | 15 |
| 1 | O GRAFENO | 17 |
| 1.1 | Introdução | 17 |
| 1.1.1 | A Descoberta | 17 |
| 1.1.2 | Para Que Serve? | 18 |
| 1.1.2.1 | Displays Feitos a Base de Grafeno | 19 |
| 1.1.2.2 | Células Solares a Base de Grafeno | 20 |
| 1.1.2.3 | O Grafeno Pode Deixar a Internet Mais Rápida | 20 |
| 1.2 | A Estrutura Cristalina | 20 |
| 1.3 | Os Férmions de Dirac no Grafeno | 24 |
| 1.4 | A Interação Spin-Órbita no Grafeno | 30 |
| 2 | AS ESTRUTURAS DE DEFEITO DO TIPO p E MULTIKINK | 33 |
| 2.1 | O Campo Escalar Real | 33 |
| 2.2 | O Método de Bogomol'nyi | 34 |
| 2.3 | O Potencial Tipo ϕ^4 | 35 |
| 2.4 | O Método de Deformação de Potencial | 38 |
| 2.5 | O Potencial Tipo p | 39 |
| 2.6 | Os Multikinks | 41 |
| 3 | CONFINAMENTO TOPOLÓGICO EM GRAFENO BICAMADA | 49 |
| 3.1 | O Modelo | 49 |
| 3.2 | A Introdução do Kink | 51 |
| 4 | CONFINAMENTO TOPOLÓGICO REFERENTE A ESTRUTURAS MULTIKINK | 56 |
| 4.1 | O Modelo | 56 |

| | | |
|------------|---|-----------|
| 4.2 | A Introdução dos Multikink | 57 |
| | Conclusão | 64 |
| | Referências | 66 |

Introdução

A ficção científica embalou os sonhos de um futuro, no qual, a relação dos humanos com os dispositivos tecnológicos beiraria a magia. Imaginávamos que no século XXI a medicina avançaria a ponto de realizar diagnósticos rápidos e precisos e, ainda, forneceria medicamentos capazes de atacar células específicas; que seria comum seres biônicos. Criávamos um mundo totalmente sustentável, no qual não haveria mais poluição do ar ou das águas, onde haveria baterias muito duráveis e células solares muito eficientes. Idealizávamos instrumentos que poderiam trazer mais segurança para nossos corpos e, com isso, preservar as nossas vidas. Fantasiávamos com a ideia de computadores ultra potentes que poderiam ser dobrados e colocados no bolso. Contudo, o século XXI chegou, e o futuro que parecia ser repleto de expectativas e oportunidades não havia se concretizado.

A tecnologia desenvolvida pela humanidade, apesar de seu enorme avanço, não foi capaz de nos entregar o que o cinema nos prometeu. Os nossos principais componentes eletrônicos são saturações de ideias desenvolvidas nos anos 60. Então, não seria um absurdo imaginar um limite teórico para as aplicações de nossos avanços. Era preciso, na verdade, encontrar um novo material que pudesse ser uma espécie de pedra filosofal capaz de transformar os sonhos de um futuro, como o dos filmes, em realidade.

Em 2004, uma equipe de pesquisadores da universidade de Manchester foi capaz de obter, pela primeira vez, o grafeno. Este novo material e o estudo de nanoestruturas têm provocado uma revolução na física da matéria condensada. Cientistas de todo o mundo vêm desenvolvendo uma enorme variedade de trabalhos sobre o grafeno e as suas promissoras propriedades eletrônicas. Tudo é superlativo no grafeno, ele é cerca de 200 vezes mais forte que o aço, é o material mais fino da Terra, é um condutor extremamente bom, sem falar que é transparente, flexível e impermeável. Desta forma, logo surgiram comentários sobre a sua possível ascensão frente ao silício. Alguns cientistas mais entusiasmados já preveem que todas as maravilhas sonhadas, previstas no parágrafo inicial, serão realizadas graças as portas que estão sendo abertas pelo grafeno.

Contudo, para que o futuro com o grafeno possa se tornar realidade é necessário que se consiga resolver problemas básicos como: abrir mão de toda uma indústria bem estabelecida que produz os chips a base de silício, ou o tempo que levaria e o dinheiro que seria gasto para desenvolver e, com isso, deixar o grafeno competir, nas mesmas condições, com o silício, ou, ainda, o mais fundamental, como parar a condução no grafeno.

O objetivo do nosso estudo é desenvolver um modelo que possa contribuir com a busca por soluções para os problemas da implementação do grafeno em dispositivos eletrônicos.

Este trabalho é organizado da seguinte forma:

No capítulo 1, fizemos uma breve introdução sobre o grafeno. Contamos um pouco da sua história e detalhamos algumas das leis físicas, pelas quais, o grafeno é regido.

O capítulo 2 é dedicado a obtenção dos potenciais que nos permitem trabalhar com as estruturas de defeitos chamadas de multikink. Tomamos como ponto de partida a descrição do modelo ϕ^4 , no qual introduzimos uma função generalizada que o deforma, de maneira tal que podemos obter soluções topológicas do tipo multikink.

No capítulo 3, seguimos a trilha da referência [8] e descrevemos o confinamento topológico em grafeno bicamada provocado por um potencial tipo kink.

No capítulo 4, nós investigamos a presença de modos zero quirais em grafenos bicamadas confinados, topologicamente, por modelos que suportam multikink. Acreditamos que este modelo possa contribuir para o desenvolvimento de dispositivos feitos a base de grafeno.

1 O Grafeno

1.1 Introdução

O carbono é um dos elementos mais abundantes do universo. Inicialmente ele não surgiu no *big bang*, mas sim tempos depois, no interior das estrelas, através do mecanismo chamado de processo alfa, que faz a junção de três núcleos de hélio-4, formando assim o carbono-12[9, 5]. Através das explosões das supernovas, o carbono foi espalhado pelo universo. O elemento se tornou uma das bases para a existência da vida, na forma que a conhecemos, devido a capacidade de seus átomos em formar estruturas orgânicas complicadas[10]. Historicamente, era conhecida duas formas cristalinas alotrópicas bem definidas de carbono elementar: o diamante e o grafite. Entretanto, recentemente foi descoberto o fulereno[11, 12, 13] e o nanotubo[14], o que despertou a atenção dos cientistas (ver figura 1).

O grafite é um material formado puramente por átomos de carbono. Há séculos foi descoberto que ele é estruturado em camadas. O grafeno é o nome dado a uma dessas camadas que possui a espessura de átomo de carbono. Nele, os átomos de carbono estão dispostos em uma estrutura cristalina hexagonal bidimensional (2D), como em um favo de mel.

1.1.1 A Descoberta

Em 2004, um grupo de físicos da Universidade de Manchester, na Inglaterra, liderados por Nostya Novoselov e Andre Geim obtiveram o grafeno. Eles utilizaram uma técnica conhecida como *micromechanical cleavage*[15, 16], que consiste, basicamente, em puxar uma fita adesiva de um pedaço de grafite, como o que reside em qualquer lápis. Em seguida, se repete o processo, várias vezes, com o resíduo do grafite que ficar na fita adesiva. A monocamada de grafeno pode ser observada com a utilização de um microscópio ótico e com o uso da espectroscopia Raman. Tal descoberta rendeu aos líderes do grupo o prêmio Nobel de Física em 2010. O mesmo grupo de Manchester ainda usou a mesma técnica para obter cristais bidimensionais de outros materiais[15], como o nitreto de boro.

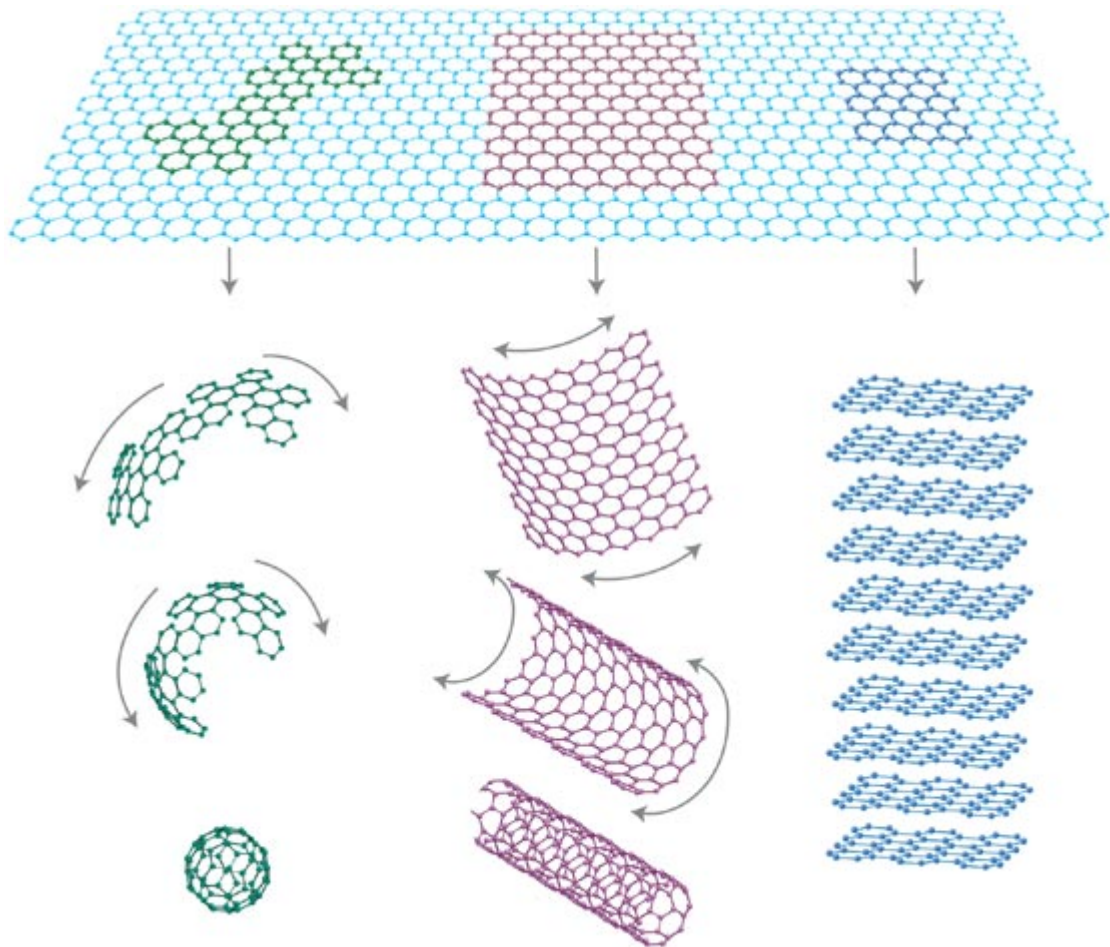


Figura 1 – Através do grafeno (2D), pode-se obter o fulereno (0D), o nanotubo (1D) e o grafite (3D).[Imagem: Manchester Centre for Mesoscience and Nanotechnology, University of Manchester[1]]

Apesar da técnica *micromechanical cleavage* ter sido eficaz na descoberta do grafeno, ela torna-se inviável na produção do grafeno em escala industrial. Isso acontece devido a técnica ser incapaz de produzir uma forma padrão das amostras de grafeno, ou seja, as amostras geradas são diferentes umas das outras. Desta forma, vários cientistas tem procurado formas viáveis de se fabricar o grafeno. Uma das maneiras mais promissoras, por viabilizar a utilização do grafeno na produção de componentes eletrônicos, é o crescimento epitaxial de camadas de grafeno em cristais[1].

1.1.2 Para Que Serve?

Atualmente, os compostos eletrônicos de ponta são feitos a base do silício. O transistor, por exemplo, é um dos dispositivos eletrônicos, feitos a base de silício, que permitiu a revolução

tecnológica dos computadores. Em um microprocessador, componente fundamental de qualquer computador, pode conter milhões de transistores. De acordo com a chamada Lei de Moore, o número de transistores que cabem em um circuito eletrônico dobra a cada 18 meses. Ao mesmo tempo, os microprocessadores terão metade do tamanho e o mesmo desempenho. Os fabricantes de microprocessadores, como a *Intel*, planejam produzir *chips* de 14 nm no ano de 2015. Entretanto, o limite teórico do silício é de cerca de 9 a 11 nm. Tendo isto em vista, os cientistas procuram por candidatos a substituir o silício e, com isso, avançar a evolução dos computadores até o tão sonhado computador quântico.

O grafeno é um dos materiais mais fortes já medidos e um dos mais finos do universo. Seus portadores de carga possuem uma gigantesca mobilidade inerente, tendo massa efetiva nula e, além disso, podem percorrer distâncias micrométricas sem espalhamento a temperatura ambiente[17]. Estudos indicam que o silício pode suportar frequências de até 5 GHz, enquanto que, quando o material utilizado é o grafeno, esse valor pode passar dos 500 GHz, devido às propriedades do derivado do grafite. Tudo isso candidata o grafeno como possível substituto do silício. O problema que o grafeno pode apresentar é que todo componente eletrônico tem que ter a capacidade de hora permitir e hora impedir a condução, o famoso zero e um dos componentes eletrônicos. O grafeno possui uma condução tão boa, que se torna difícil, simplesmente, parar a sua condução. Para tentar resolver isso, os cientistas tem estudado formas de dopar o grafeno e submetê-lo a certos potenciais.

1.1.2.1 Displays Feitos a Base de Grafeno

A indústria de eletrônicos tem procurado novos materiais que possam tornar seus produtos mais inovadores e, energeticamente, mais eficientes. O grafeno por ser um material extremamente fino, flexível, transparente e excelente condutor, torna-se um aspirante desejado para ser o protagonista dessa inovação. Um exemplo disso é a tentativa de se fabricar um diodo emissor de luz orgânico (OLED) utilizando o grafeno[2] (ver a figura 2). O OLED é utilizado em telas de eletrônicos como televisores, computadores e celulares por ter um baixo consumo de energia.

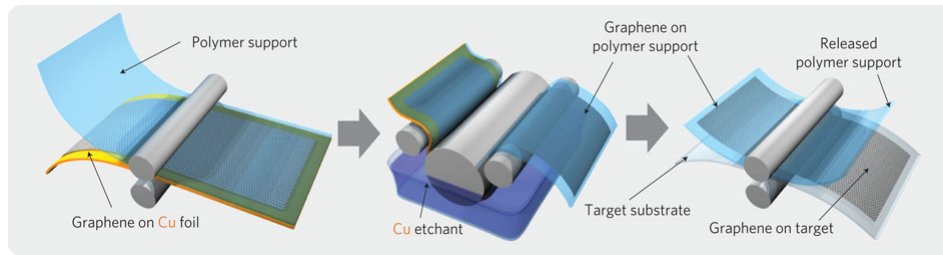


Figura 2 – Esquema da produção do filme de grafeno. [Imagem retirada da referência [2]]

1.1.2.2 Células Solares a Base de Grafeno

Outro exemplo de aplicação versátil para o grafeno é a sua utilização em células solares [18]. As células solares são dispositivos capazes de converter energia solar em energia elétrica, através do efeito fotovoltaico. O que tem sido proposto é a utilização do grafeno como um eletrodo, enquanto que o fulereno e os nanotubos de carbono possam ser usados para absorver a luz e, com isso, gerar elétrons e buracos.

1.1.2.3 O Grafeno Pode Deixar a Internet Mais Rápida

Recentemente, pesquisadores do *Centre of Graphene Science* da *University of Bath*, na Inglaterra, propuseram que o uso do grafeno em telecomunicações poderia acelerar as velocidades de internet, podendo torná-las até 100 vezes mais velozes do que são hoje [19]. Em sua pesquisa, os cientistas demonstraram taxas de resposta óticas extremamente curtas usando o grafeno, o que, num futuro próximo, poderia causar uma revolução nas telecomunicações.

1.2 A Estrutura Cristalina

O grafeno é composto por átomos de carbono organizados em uma rede hexagonal bidimensional (2D), como mostrado na figura 3. Apesar desta rede hexagonal não ser uma rede de Bravais, ela pode ser interpretada como duas subredes triangulares, *A* e *B*, sobrepostas ou como uma rede triangular com dois átomos por célula unitária. Os vetores da rede podem ser escritos na forma:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}); \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}). \quad (1.1)$$

onde $a \approx 1,42 \text{ \AA}$ é a distância interatômica dos átomos de carbono. São estes vetores os responsáveis por gerar as subredes triangulares do grafeno. Os vetores da rede recíproca são

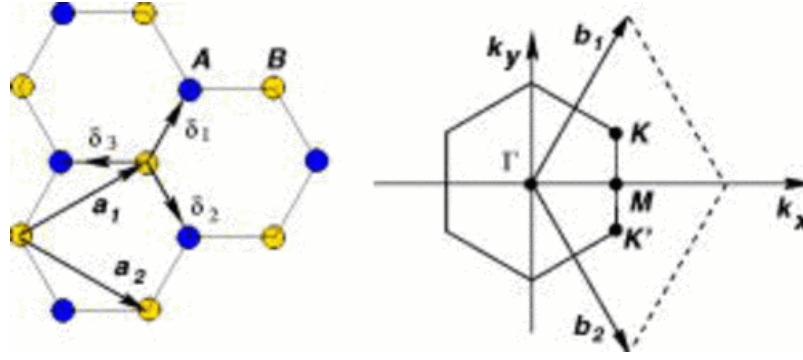


Figura 3 – Rede hexagonal e sua zona de Brillouin.[Imagem: Referência [3]]

dados por:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}); \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}). \quad (1.2)$$

Um dos pontos importantes sobre a física do grafeno reside no fato de que a sua zona de Brillouin possui seis pontos onde a banda de valência e a de condução se tocam. Destes pontos, destacamos os chamados pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' que são independentes. A razão deles serem chamados de pontos de Dirac é que a descrição dos portadores de carga com momento próximo a estes pontos é feita pela equação de Dirac em (2+1) dimensões com massa nula. Os demais pontos podem ser obtidos por operações de simetria. As posições dos pontos \vec{K} e \vec{K}' , no espaço recíproco, são dadas por

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right); \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right). \quad (1.3)$$

No grafeno, podemos tratar a descrição dos elétrons por meio de um hamiltoniano que detalha as ligações químicas presentes no material. Considerando que os elétrons podem transitar, entre os primeiros e segundos átomos vizinhos, o hamiltoniano pode ser escrita como

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j}) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + a_{\sigma,j}^\dagger a_{\sigma,i} + b_{\sigma,j}^\dagger b_{\sigma,i}) \quad (1.4)$$

onde $\hbar = 1$, t é a energia de transição entre diferentes subredes e t' é a energia de salto entre segundos vizinhos. Também temos que $a_{\sigma,i}^\dagger$ cria e $a_{\sigma,j}$ aniquila um elétron com σ *up* e *down*. As bandas de energia obtidas deste hamiltoniano são

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})} - t' f(\vec{k}) \quad (1.5)$$

sendo

$$f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \times \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right) \quad (1.6)$$

onde a banda de condução é representada pelo sinal + e a banda de valência é representada pelo sinal -. Perceba que da equação (1.6), o espectro dos portadores é simétrico em torno da energia zero, se $t' = 0$. Nos casos em que os valores de t' são finitos, a simetria elétron-buraco é quebrada e as bandas π e π^* tornam-se assimétricas. Na figura 4 pode-se observar a estrutura de bandas do grafeno e uma das bandas de energia que se tocam, próximos a um dos pontos de Dirac.

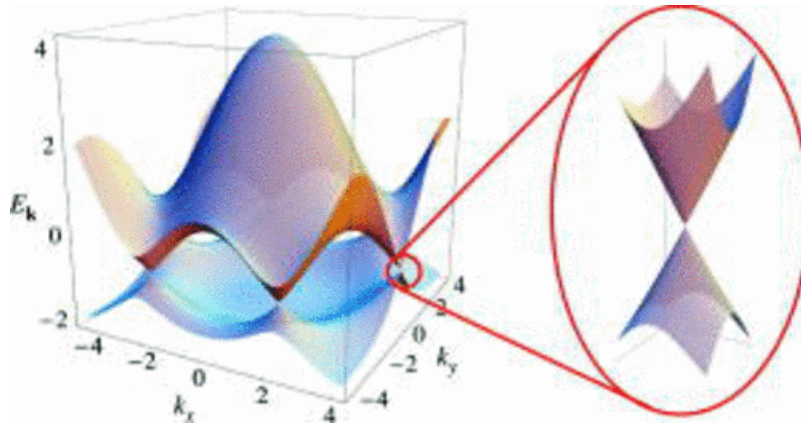


Figura 4 – Dispersão eletrônica da rede hexagonal.[Imagem: Referência [3]]

Expandindo a equação (1.5) em torno de um dos pontos de Dirac K ou K' , temos a dispersão linear da estrutura de bandas. Considerando $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$ com $|\vec{q}| \ll |\vec{K}|$,

$$E_{\pm}(\vec{q}) = \pm v_F |\vec{q}| + \mathcal{O}\left[\left(\frac{q}{K}\right)^2\right] \quad (1.7)$$

sendo \vec{q} o momento eletrônico medido em torno do ponto de Dirac e v_F é a velocidade de Fermi, que é a velocidade média com a qual os portadores que se encontram na borda da superfície de Fermi se deslocam, dada por $v_F = \frac{3ta}{2} \approx c/300$. As flutuações quânticas, térmicas e as interações que há entre os portadores de carga fazem com que a velocidade de Fermi não seja uniforme para todos os portadores.

Uma das impressionantes qualidades que distinguem o grafeno dos demais sistemas de matéria condensada, reside na relação entre energia e momento eletrônico. Em geral, como em cristais, temos que

$$E(\vec{q}) = q^2 / (2m^*) \quad ,$$

onde m^* é a massa efetiva do elétron. Desta forma, a velocidade de Fermi v_F é dependente da

energia dos portadores de carga

$$v_F = \frac{k}{m^*} = \sqrt{\frac{2E}{m^*}} \quad ,$$

ou seja, a velocidade dos elétrons é alterada pela energia. Entretanto, no grafeno não é bem assim que funciona, os níveis de energia ou o momento dos portadores, basicamente, não interferem na velocidade de Fermi dada pela equação (1.7). A massa efetiva cíclotron é definida, com o auxílio de uma aproximação semi-clássica[20], por

$$m^* = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{\partial A(E)}{\partial E} \right]_{E=E_F} \quad (1.8)$$

com $A(E)$ sendo a área do espaço recíproco k , estabelecida pelas órbitas percorridas pelos elétrons em um dado nível de energia E . Desta forma, temos

$$A(E) = \pi q(E)^2 = \pi \frac{E^2}{v_F^2} \quad (1.9)$$

Resolvendo a equação (1.8) por meio da (1.9), obtemos a massa efetiva cíclotron

$$m^* = \frac{E_F}{v_F^2} = \frac{k_F}{v_F} \quad (1.10)$$

A densidade de elétrons n pode ser ligada ao momento de Fermi k_F por $k_F^2/\pi = n$, onde há a

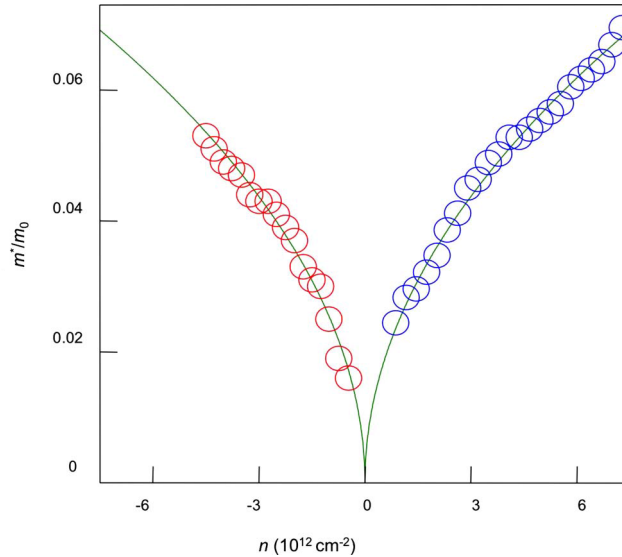


Figura 5 – A massa efetiva cíclotron dos portadores de carga no grafeno em função de n . [Imagem: Referência [3]]

inclução da contribuição do spin dos portadores e dos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' . A massa efetiva pode ser reescrita por

$$m^* = \frac{\sqrt{\pi}}{v_F} \sqrt{n} \quad (1.11)$$

A equação (1.11) pode ser descrita pela figura 5, que demonstra, por meio de um ajuste nos dados experimentais[21], a estimativa da velocidade de Fermi como sendo $v_F \approx 10^6 \text{ m/s}$ e o parâmetro de *hopping* $t \approx 3 \text{ eV}$. A observação experimental da dependência da massa efetiva do ciclotron com \sqrt{n} nos fornece uma evidência da existência de quasi-partículas (os portadores de carga) com massa nula e espectro linear no grafeno[3, 21].

A densidade dos estados eletrônicos no grafeno pode ser descrita quando se admite $t' = 0$ na equação (1.4). Desta forma, nas proximidades dos pontos de Dirac, a dispersão dos estados por célula unitária é descrita por

$$\rho(E) = \frac{2A_c |E|}{\pi v_F^2} \quad (1.12)$$

onde $A_c = 3\sqrt{3}a^2/2$ é a área da célula unitária[22].

1.3 Os Férmions de Dirac no Grafeno

No hamiltoniano da equação (1.4),

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} \right) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left(a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + a_{\sigma,j}^\dagger a_{\sigma,i} + b_{\sigma,j}^\dagger b_{\sigma,i} \right)$$

fazemos $t' = 0$ para ver que a equação de Dirac para partículas com massa nula em $(2+1)D$ é a que descrever o comportamento dos portadores de carga em baixas energias[3, 21, 23]. Seja a transformação de Fourier dos operadores aniquilação dada por

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} a(\vec{k}) \quad (1.13)$$

onde \vec{R}_n é a posição dos átomos da sub-rede A e N_c é o número de células unitárias. Com o auxílio da transformação, o campo pode ser escrito como uma soma de dois termos, provenientes da expansão da soma de Fourier ao redor dos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' . Nesta região podemos encontrar os estados de baixa energia. Desta forma, a expansão gera uma aproximação na representação para o campo a_n como uma soma de dois novos campos, dados por

$$a_n \simeq e^{-i(\vec{K}+\vec{q}) \cdot \vec{R}_n} a_{1n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}'+\vec{q}') \cdot \vec{R}_n} a_{2n}(\vec{q}') \quad (1.14)$$

onde os índices 1 e 2 representam os pontos \vec{K} e \vec{K}' , respectivamente. Vale resaltar que os momentos \vec{q} e \vec{q}' são medidos em relação aos pontos de Dirac.

De forma similar para a sub-rede B :

$$b_n \simeq e^{-i(\vec{K}+\vec{q})\cdot\vec{R}_n} b_{1n}(\vec{q}) + e^{-i(\vec{K}'+\vec{q}')\cdot\vec{R}_n} b_{2n}(\vec{q}') \quad (1.15)$$

Estes novos campos $a_{i,n}$ e $b_{i,n}$ são considerados como se variassem lentamente ao longo das células unitárias. Para termos uma teoria efetiva válida em torno dos pontos de Dirac, devemos substituir as equações (1.14) e (1.15) na equação (1.4), com $t' = 0$ e expandir os operadores para se obter ordens lineares nas posições dos átomos. Levando em consideração o n -ésimo átomo, temos que a expansão de Fourier se dá devido aos vizinhos que se localizam em $\vec{R}_n - \vec{\delta}_i$, tal que $\vec{\delta}_i$, conforme visto na figura 3, é

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}); \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \vec{\delta}_3 = -a(1, 0)$$

Como $\Sigma_{\delta} \exp(\pm i\vec{K} \cdot \vec{\delta}) = \Sigma_{\delta} \exp(\pm i\vec{K}' \cdot \vec{\delta}) = 0$, o Hamiltoniano pode ser descrito por

$$H = -i\hbar v_F \int dx dy \left[\psi_1^{\dagger}(\vec{r}) \vec{\sigma} \cdot \nabla \psi_1(\vec{r}) + \psi_2^{\dagger} \vec{\sigma}^* \cdot \psi_2(\vec{r}) \right] \quad (1.16)$$

onde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ e $\vec{\sigma}^* = (\sigma_x, -\sigma_y)$ são matrizes de Pauli e os espinores $\psi_i^{\dagger} = (a_i^{\dagger}, b_i^{\dagger})$, onde $i = 1, 2$. O hamiltoniano (1.16) é composto por dois hamiltonianos de Dirac em $(2+1)D$ com massa nula, sendo um tomados para os pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' .

Diferentemente dos materiais que se apresentam em física da matéria condensada, o grafeno, em baixas energias, não é descrito pela equação de Schrödinger, mas sim por uma equação de onda relativística, ou seja, pela equação de Dirac em $(2+1)D$ que descreve o comportamento dos férmions[15]. Entretanto, a velocidade dos portadores de carga não é a velocidade da luz, mas sim a velocidade de Fermi $v_F = 3ta/2$.

Podemos descrever os portadores de carga que se encontram ao redor do ponto de Dirac \vec{K} pela equação de Dirac

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E\psi = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \nabla \psi \quad (1.17)$$

onde $H_K = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q}$, $\vec{q} = -i\hbar \nabla$ a as auto energias $E = \pm v_F q$. Na forma matricial

$$-i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

A função de onda, no espaço dos momentos, para o momento próximo ao ponto \vec{K} é dada por:

$$\psi_{\pm K} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta(\vec{q})/2} \\ \pm e^{i\theta(\vec{q})/2} \end{pmatrix} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = u_{\pm}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}, \quad (1.19)$$

onde o sinal + indica a banda de condução (elétrons) e o sinal – indica a banda de valência (buracos). Fizemos $\theta(\vec{q}) = \arctan(q_x/q_y)$.

Os portadores de carga em torno do ponto \vec{K}' são descritos assim

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E\psi = -i\hbar v_F \vec{\sigma}^* \cdot \nabla \psi \quad (1.20)$$

Também podemos descrever com o auxílio de uma matriz por

$$-i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_x + i\partial_y \\ \partial_x - i\partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

sendo $H_{k'} = v_f \vec{\sigma}^* \cdot \vec{q} = H_k^*$. Tendo as mesmas autoenergias E do caso K . A função de onda para os portadores de carga com momento \vec{q}' em torno de \vec{K}' é

$$\psi_{\pm K'} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta(\vec{q}')/2} \\ \pm e^{-i\theta(\vec{q}')/2} \end{pmatrix} e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}} = u_{\pm}(\vec{q}') e^{i\vec{q}'\cdot\vec{r}}. \quad (1.22)$$

No caso da função de onda sofrer uma rotação de 2π , teremos uma mudança no sinal dos espinores, o que indicaria uma fase de Berry de π . Entretanto, esta fase de Berry está ligada ao pseudospin e não ao real spin dos portadores de carga no grafeno.

O grafeno, que é um semicondutor sem *gap* de energia, ou um semimetal, tem o seu nível de Fermi, que separa os estados vazios e ocupados, localizado em $E = 0$, que também é a energia onde as bandas, de condução e valência se tocam (ver figura 4). Os portadores de carga no grafeno (quasipartículas) podem ser interpretadas como elétrons que perderam sua massa ou neutrinos que adquiriram a carga do elétron, mas possuem a massa nula. Esta propriedade só foi observada em cristais bidimensionais organizados em uma rede hexagonal. No grafeno, os pseudospins dos portadores são descrito por meio das componentes do espinor $|\psi\rangle$. Desta forma, os graus de liberdade das subredes podem ser considerados como *spin up*, $|+\rangle$, para a subrede A e *spin down*, $|-\rangle$, para a subrede B. Ou seja,

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.23)$$

As autofunções dos portadores de carga no grafeno podem ser definidas por meio da helicidade que é a projeção do spin ao longo do momento. O operador helicidade é definida por

$$\hat{h} = \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{q}}{|\vec{q}|} \quad (1.24)$$

Quando não há a presença do termo de massa, o operador helicidade e o hamiltoniano de Dirac comutam [3].

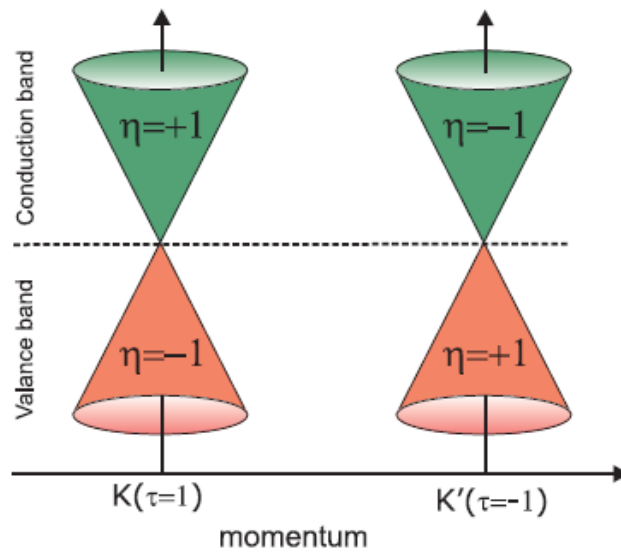


Figura 6 – A relação entre as bandas condução e valência no grafeno e a quiralidade η . [Imagem: Referência [4]]

O operador helicidade ao atuar nas funções de onda para os portadores com momento \vec{q} , próximos ao ponto \vec{K} , e \vec{q}' , próximos ao ponto \vec{K}' , faz com que os autovalores de quiralidade η , que os portadores possuem, se invertam nas bandas de condução e valência, como é mostrado na figura 6. A projeção do spin dos portadores descritos pela matriz de Pauli $\vec{\sigma}$ pode ser: ou paralela com relação a direção do movimento (por exemplo, neutrinos) e, assim, $\eta = +1$; ou antiparalela com relação a direção do movimento (por exemplo, antineutrinos) e, assim, $\eta = -1$ [24]. Desta forma, a quiralidade não é conservada em qualquer momento e, assim, a helicidade \hat{h} só será útil para descrever os portadores enquanto as equações (1.17) e (1.20) forem válidas. Por exemplo, quando temos um *gap* de energia que gera um termo de massa no hamiltoniano, este não comutará com o operador helicidade[4].

Em sistemas bidimensionais na presença de um campo magnético externo, perpendicular ao plano do sistema, o espectro de energia é discreto. No caso do grafeno, os níveis de energia

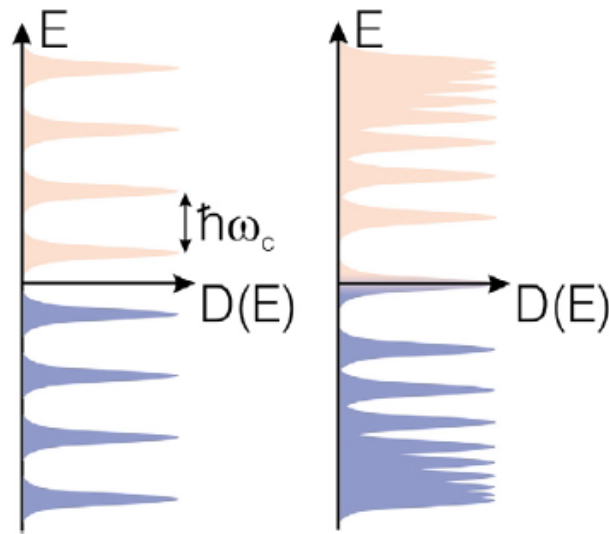


Figura 7 – O gráfico da esquerda mostra os níveis de Landau para os elétrons descritos pela equação de Schrödinger. O da direita mostra os níveis de Landau para os elétrons descritos pela equação de Dirac.[Imagem: Referência [5]]

para os seus portadores de carga são

$$E_n = \sqrt{2eB\hbar v_F^2(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})} \quad (1.25)$$

Estes são os níveis de Landau para os portadores de carga. O número quântico n é dado por $n = 0, 1, 2 \dots$ e o termo com $\pm 1/2$ está ligado a quiralidade dos portadores de carga (figura 7). Quando os elétrons são regidos pela equação de Schrödinger, as bandas apresentam dispersão parabólica e, os níveis de Landau são dados por $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$, com ω_c sendo a frequência cíclotron, ou seja, a frequência de rotação do elétron[20].

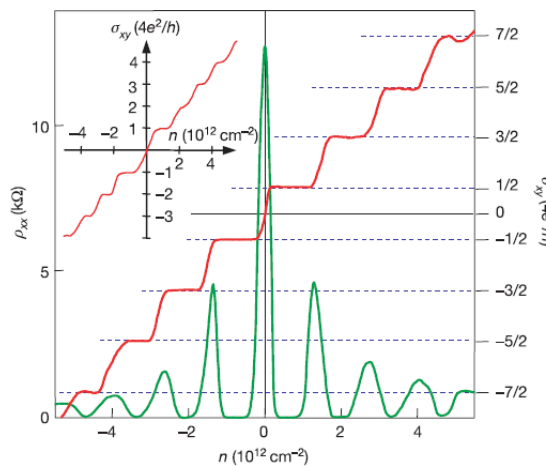


Figura 8 – O efeito Hall quântico no grafeno como uma função da densidade dos portadores de carga n .[Imagem: Referência [??]]

Os níveis de Landau garantem a existência de estados de energia zero para férmions de Dirac não-massivos. Isto difere do que ocorre em um semicondutor que possua bandas parabólicas. A existência destes estados no grafeno levam a um efeito Hall quântico com uma condutividade Hall que tem quantização semi-inteira[6]. A figura 8 nos mostra a resistividade longitudinal ρ_{xx} e a condutividade Hall σ_{xy} no grafeno. Os platôs estabelecidos na condutividade Hall estão separados por unidades de condutância quântica e^2/h . Entretanto, no caso do grafeno, a condutividade deve ser multiplicada por quatro, pois em cada ponto de Dirac \vec{K} e \vec{K}' há dois tipos de férmions interferindo na condução. Os níveis de Landau, geralmente, tem a mesma degenerescência, ou seja o mesmo número de elétrons por estados com a mesma energia. Contudo, no grafeno, o nível de energia zero possui metade dos estados ocupados, de forma que, os platôs são ajustados por $1/2$ levando a uma quantização anômala

$$\sigma_{xy} = \pm 4 \frac{e^2}{h} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (1.26)$$

A existência de um efeito Hall quântico com quantização semi-inteira, nos conduz a crer na presença de férmions de Dirac no grafeno[4, 25, 26]. A equação de Dirac garante que para qualquer estado de partículas com energia E , há um estado de buracos conjugado com energia $-E$. Contudo, estados com energia zero podem ser, geralmente, anômalos. Para um espaço curvo, como uma folha de grafeno deformada, na presença de um campo de gauge, como um campo magnético, a existência de estados com energia zero são assegurados por propriedades topológicas, e esses estados são quirais. No caso do grafeno, os portadores da subrede A e B influenciam estes níveis de Landau de energia zero, de acordo com o campo magnético[5, 6].

Quando queremos fazer uma descrição de um Hamiltoniano para a dinâmica dos portadores de carga do grafeno que contenha os dois pontos de Dirac, precisamos de um espinor ψ . Desta forma, as equações (1.17) e (1.20) podem ser escritas na forma

$$H_{k(k')} = v_F(\sigma^x q_x \pm \sigma^y q_y) \quad (1.27)$$

introduzindo o pseudospin entre os vales no grafeno, a equação (1.27) fica

$$H = v_F(1 \otimes \sigma^x q_x + \tau^z \otimes \sigma^y q_y) \quad (1.28)$$

O espinor ψ contém 4 componentes que relatam a atuação das duas sub-redes e dos dois vales para a dinâmica dos portadores de carga. Como já foi mencionado, o pseudospin associado

as subredes A e B é descrito por $\vec{\sigma}$. Os pseudospins ligados aos pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' são descritos por $\vec{\tau}$.

O problema do autovalor $H\psi = E\psi$, pode ser escrito na forma matricial por

$$v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y & 0 & 0 \\ q_x + iq_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_x + iq_y \\ 0 & 0 & q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi'_A \\ \psi'_B \end{pmatrix}. \quad (1.29)$$

Desra maneira, a teoria fica invariante sob paridade e reversão temporal[3], o que, no grafeno, acarreta em uma troca dos \vec{K} e \vec{K}' .

1.4 A Interação Spin-Órbita no Grafeno

Apesar de ser fraca no grafeno, interação spin-órbita existe e pode ser escrita através do hamiltoniano

$$H_{SO} = \frac{e\hbar}{4m^2c} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}) = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \vec{S} \cdot (\nabla\Phi(x) \times \vec{p}) \quad (1.30)$$

onde $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$ é o operador de spin dos portadores de carga e $\Phi(x)$ o potencial elétrico produzido pelo núcleo na órbita dos portadores. Esta interação se dá entre o campo magnético interno proveniente do átomo e o momento do dipolo magnético gerado pelo spin do elétron. Ela é um efeito relativístico por se tratar do acoplamento do movimento orbital e do spin para o elétron, e é derivada do modelo de Dirac para o elétron. Uma vez que o potencial produzido pelo núcleo atômico é central, a interação spin-órbita pode ser escrita na forma

$$H_{SO} = \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{d\Phi}{dr} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (1.31)$$

onde \vec{L} é o momento angular orbital do elétron. A degenerescência nos spins pode ser eliminada devido a alteração nos níveis de energia causada pela interação spin-órbita.

No grafeno, a hamiltoniana spin-órbita é [27]

$$H_{SO} = \pm\Delta_{SO}\psi^\dagger\sigma_z S_z\psi \quad (1.32)$$

onde Δ_{SO} é a intensidade da interação spin-órbita e, a matriz de Pauli $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ descreve o spin dos elétrons no grafeno. A interação spin-órbita produz um acoplamento entre as componentes

do spin e os estados eletrônicos das diferentes subredes A e B , todos pertencentes ao mesmo ponto de Dirac \vec{K} ou \vec{K}' . Vale resaltar que o hamiltoniano spin-órbita comuta com S_z , ou seja, $[H_{SO}, S_z] = 0$. Isto implica as componentes *up* e *down* do spin são conservadas.

A hamiltoniana para portadores com spin *up* no K é dada por [28]

$$H_+ \psi_k^\uparrow = (H + H_{SO}) \psi_k^\uparrow = (-i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \nabla + \Delta_{SO} \sigma_z) \psi_k^\uparrow = \begin{pmatrix} \Delta_{SO} & -i\hbar v_F \nabla^- \\ -i\hbar v_F \nabla^+ & -\Delta_{SO} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{(K)A}^\uparrow \\ \psi_{(K)B}^\uparrow \end{pmatrix}. \quad (1.33)$$

as matrizes de Pauli $\vec{\sigma}$ estão associadas as pseudospin $\nabla^\pm = \partial_x \pm i\partial_y$. Desta forma, há uma interação entre os portadores que possuem o mesmo spin *up* nas diferentes subredes.

A interação spin-órbita descrita por (1.32) produz uma alteração nas energias dos estados que possuem uma dependência do spin e gera sinais opostos para portadores em subredes distintas. A equação (1.33) expõe bem este fato. Como resultado desta interação, as bandas partícula e buraco são abertas por um *gap* de energia. Sendo assim, os estados eletrônicos com spin *up* e momento eletrônico \vec{q} observados no ponto de Dirac \vec{K} tem a sua energia dada por $E(\vec{q}) = \pm \sqrt{(\delta_{SO}^2 + \hbar v_F q)^2}$ onde os sinais \pm estão relacionados com as bandas de condução e de valência.

O surgimento da interação spin-órbita faz com que o *gap* de energia, provocado por ela, possua sinais distintos nos pontos \vec{K} e \vec{K}' . Como consequência disso, esta fase com *gap* possui uma propriedade topológica diferente de uma fase com *gap* produzido por potenciais devido a campos aplicados, tensões ou a presença de substratos, uma vez que, de forma diferente estes teriam o mesmo sinal nos cones de Dirac.

O hamiltoniano de interação spin-órbita (1.32) faz com que a simetria de reversão temporal seja invariante. Contudo, quando ele for separado em duas partes, uma para cada componente S_z do spin, cada uma dessas partes, separadamente, viola a simetria de reversão temporal [27, 29]. Os hamiltonianos gerados na separação também produzem um *gap* de energia que separa as bandas com sinal diferentes nos pontos \vec{K} e \vec{K}' [29]. A condutância de Hall quantizada que surge para temperaturas abaixo da escala de energia do *gap*, é descrita por

$$\sigma_{xy} = \pm \frac{e^2}{h} \quad (1.34)$$

Quando aplicamos um campo elétrico externo paralelo a folha do grafeno, surgem correntes transversas que se propagam em sentidos contrários, de acordo com o spin. Podemos descrever essa corrente de spin polarizada por

$$J_x^s = \sigma_{xy}^s E_y = \frac{\hbar}{2e} (J_x^\uparrow - J_x^\downarrow), \quad \sigma_{xy}^s = \frac{e}{2\pi} \quad (1.35)$$

ou seja, é a interação spin-órbita que permite uma maneira para se gerar um efeito Hall quântico de spin e, ainda, na ausência de um campo magnético externo. Este efeito é considerado um novo estado topológico e está bem descrito na referência [27].

2 As Estruturas de Defeito do Tipo p e Multikink

Os estudiosos na física de altas energias têm se demonstrado interessados no estudo de estruturas de defeito, o que faz o tema ter um papel importante em várias investigações[30, 31, 32]. O seu sucesso e a abrangência de suas aplicações têm feito com que surja interesse também na física da matéria condensada[33, 34]. Em geral, estruturas de defeito podem ser topológicas (ou não) e serem descritas por campos escalares reais, e são nomeados kinks (ou lumps, no caso dos defeitos não serem topológicos).

Neste capítulo, estudaremos defeitos topológicos em um sistema descrito por um campo escalar real, que suporte defeitos tipo kink. Começaremos pelo estudo do potencial ϕ^4 , no qual aplicaremos um método de deformação que será capaz de nos fornecer uma solução que descreve uma estrutura de defeito tipo 2-kink. Em seguida, investigaremos um método que nos permite a obtenção de soluções capazes de suportar uma quantidade de kinks variada, estas soluções são chamadas de multikinks.

2.1 O Campo Escalar Real

A densidade lagrangeana mais simples que descreve a dinâmica de um campo escalar real ϕ pode ser escrita por

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - V(\phi) \quad (2.1)$$

onde $V(\phi)$ é o potencial que caracteriza o modelo a ser investigado.

Através das equações de Euler-Lagrange, que neste caso estão escritas na forma covariante, sendo válidas sem modificações em qualquer referencial inercial,

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0 \quad (2.2)$$

podemos obter as equações de movimento, que neste caso, podem ser escritas como

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi + \frac{\partial V}{\partial \phi} = 0 \quad (2.3)$$

Quando estamos usando uma teoria no espaço de $(1 + 1)D$, temos que o campo é tomado como sendo $\phi = \phi(x, t)$. Sendo assim, a equação de movimento pode ser

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial V}{\partial \phi} = 0 \quad (2.4)$$

que é uma equação diferencial de segunda ordem. Como queremos encontrar soluções localizadas, o potencial V é tomado de forma que a equação do movimento seja não linear.

Um caso particular de soluções da equação de movimento (2.4) pode ser obtido quando as tomamos independentes do tempo. Essas classes de soluções são chamadas de estáticas. Desta forma, a equação do movimento pode ser reduzida a

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{dV}{d\phi} \quad (2.5)$$

2.2 O Método de Bogomol'nyi

Existe um método que consiste em reduzir as equações do movimento de segunda ordem em equações de primeira ordem, por meio da minimização da energia de uma certa parte topológica do sistema em estudo. Este método, proposto por volta da década de 70, é chamado de método de Bogomol'nyi[35].

Dado um tensor momento-energia $\mathcal{T}_{\mu\nu}$ antissimétrico para o modelo da dinâmica de um campo escalar real

$$\mathcal{T}_{\mu\nu} = \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi - g_{\mu\nu} \left[\frac{1}{2} \partial_\alpha \phi \partial^\alpha \phi - V(\phi) \right] \quad (2.6)$$

A densidade de energia no tensor momento-energia é escrita para a componente \mathcal{T}_{00} , desta forma

$$\mathcal{T}_{00} = \varepsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 + V(\phi) \quad (2.7)$$

Quando trabalhamos com soluções independentes do tempo, podemos, então, utilizar as configurações de campos estáticos. Portanto, a densidade de energia pode ser escrita na forma

$$\varepsilon(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + V(\phi) \quad (2.8)$$

A energia do sistema para o campo estático é escrita como

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + V(\phi) \right] dx \quad (2.9)$$

as soluções com aproveitamento físico são as que possuem energia finita, denominadas de soluções solitônicas, por serem soluções de uma equação diferencial não linear com energia centrada.

Completando o quadrado na expressão do integrando, estaremos utilizando o método de Bogomol'nyi e, com isso, escrevendo a energia em uma forma quadrática, mínima e fechada. A energia ficará escrita na forma

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \pm \sqrt{2V(\phi)} \right)^2 \mp \sqrt{2V(\phi)} \frac{d\phi}{dx} \right] dx \quad (2.10)$$

Dada a impossibilidade do primeiro termo da integral de ser negativo, a energia será minimizada quando ela for igual a energia de Bogomol'nyi E_B , ou seja

$$E_B = \int_{-\infty}^{\infty} \mp \left[\sqrt{2V(\phi)} \frac{d\phi}{dx} \right] dx \quad (2.11)$$

Desta forma, a condição imposta será

$$\frac{d\phi}{dx} \pm \sqrt{2V(\phi)} = 0 \quad (2.12)$$

O interessante desta condição reside no fato de que é uma equação de 1ª ordem e as suas soluções também são soluções da equação de movimento (2.4)[36]. Podemos resolver a equação (2.12) por meio de uma integração, assim

$$x - x_0 = \pm \int \frac{d\phi}{\sqrt{2V(\phi)}} = \pm G(\phi) \quad (2.13)$$

onde x_0 é uma constante de integração. A função G é inversível, de tal forma que

$$\phi(x) = \pm G^{-1}(x - x_0) \quad (2.14)$$

2.3 O Potencial Tipo ϕ^4

Agora iremos investigar o defeito topológico que surge na teoria dos campos escalares reais, o kink. Para tal, utilizaremos um dos potenciais utilizados na teoria quântica de campos, o potencial chamado de ϕ^4 é um dos mais utilizados. Vamos definir um modelo de campo escalar real dado pela densidade lagrangeana

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - V(\phi) \quad (2.15)$$

Introduziremos o potencial ϕ^4 que iremos defini-lo por

$$V(\phi) = \frac{\lambda}{2} (\phi^2 - a^2)^2 \quad (2.16)$$

aqui, estamos considerando os parâmetros a e λ como positivos. Na teoria ϕ^4 , o potencial possui simetria discreta Z_2 sob transformação $\phi \rightarrow -\phi$, como é visto na figura 9.

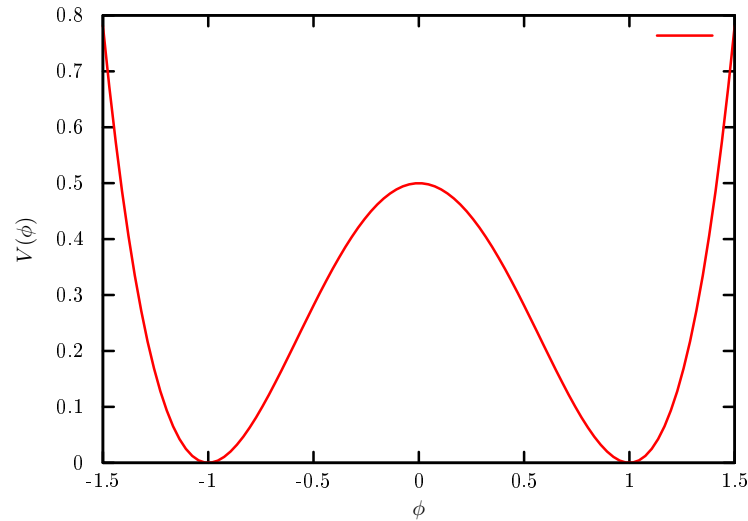


Figura 9 – Comportamento do potencial ϕ^4 .

As equações do movimento para este modelo são obtidas com o auxílio da equação de Euler-Lagrange (2.2). Porém, quando tratamos com soluções estáticas, podemos escrever as equações do movimento como

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{dV}{d\phi} = 2\lambda\phi(\phi^2 - a^2) \quad (2.17)$$

As soluções desta equação de movimento, de 2ª ordem, podem ser encontradas por meio do método de Bogomol'nyi [35], que consiste em utilizar as equações de 1ª ordem que aparecem por meio da minimização da energia. Desta maneira, para o modelo ϕ^4 , temos

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 = V(\phi) = \frac{\lambda}{2} (\phi^2 - a^2)^2 \quad (2.18)$$

Lembrando que estamos lidando com campos escalares reais e, desta forma, o potencial $V(\phi)$ deve ser positivo definido de maneira tal que ϕ possa ser real. Essa equação não é linear e pode ser resolvida por meio da integração. Assim,

$$x - x_0 = \pm \int \frac{d\phi}{\sqrt{\lambda}(\phi^2 - a^2)} = \pm \frac{1}{a\sqrt{\lambda}} \tanh^{-1} \left(\frac{\phi}{a} \right) \quad (2.19)$$

Invertendo a equação (2.19), surge a forma analítica das soluções kink e antikink

$$\phi(x) = \pm a \tanh \left(a\sqrt{\lambda}(x - x_0) \right) \quad (2.20)$$

onde x_0 indica o centro do kink. A solução positiva é chamada de kink e a negativa de

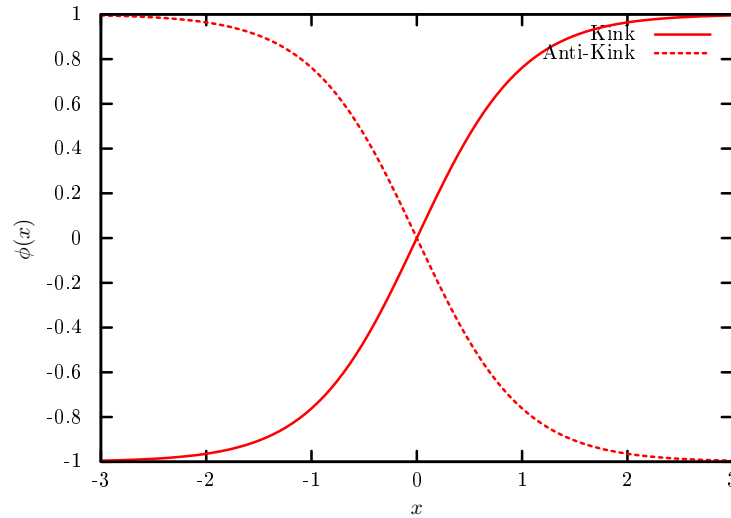


Figura 10 – O perfil do kink e antikink.

antikink, conforme é mostrado na figura 10. Essas soluções são topológicas por possuírem limites assintóticos distintos. Ambas conectam os mínimos diferentes do potencial, que também são soluções triviais $\phi_{\pm} = \pm 1$ com energia zero. Quando as estruturas de defeitos, chamadas de kinks, estão inseridas em duas ou mais dimensões elas são chamadas de paredes de domínio.

A densidade de energia é escrita como

$$\varepsilon(x) = \lambda a^4 \operatorname{sech}^4 \left(a\sqrt{\lambda}(x - x_0) \right) \quad (2.21)$$

A espessura do kink é definida por

$$\delta = \frac{1}{a\sqrt{\lambda}} \quad (2.22)$$

A energia é obtida integrando a densidade de energia, assim

$$E = \frac{4a^3\sqrt{\lambda}}{3} \quad (2.23)$$

esta é a energia mínima de Bogomol'nyi. Ela é finita para o kink como para o antikink. No modelo ϕ^4 , o kink é caracterizado por sua espessura e energia, e esses são tomados de acordo com a escolha dos parâmetros a e λ ,

$$\lambda = \frac{4}{3} \frac{1}{E\delta^3} \quad \text{e} \quad a = \sqrt{\frac{3E\delta}{4}} \quad (2.24)$$

2.4 O Método de Deformação de Potencial

O método de deformação de potencial foi proposto por Bazeia[37] e consiste em obter novas estruturas de defeito a partir de modelos conhecidos. Desta forma, podemos gerar um novo potencial através da introdução de uma função em um dado potencial inicial. Este método é bastante geral e não a restrições quanto a sua aplicabilidade em modelos que suportam defeitos não-topológicos.

Considerando uma função $g(\phi)$ que atua no campo ϕ chamada de função deformadora, podemos escrever um novo potencial $\tilde{V}(\phi)$ que seja dependente desta função e será conhecido como potencial deformado

$$\tilde{V}(\phi) = \frac{V(g(\phi))}{\left(\frac{dg(\phi)}{d\phi}\right)^2} \quad (2.25)$$

A solução do campo deformado será dada pela função inversa g^{-1} , ou seja

$$\tilde{\phi}(x) = g^{-1}(\phi(x)) \quad (2.26)$$

esta solução pode significar que, dependendo da forma de $g(\phi)$, podemos ter soluções localizadas de energia finita. Sendo assim, o campo deformado $\tilde{\phi}$ deve satisfazer a equação de primeira ordem

$$\frac{d\tilde{\phi}}{dx} = \frac{\frac{d\phi}{dx}}{\frac{dg(\phi)}{d\phi}} \quad (2.27)$$

Do método de Bogomol'nyi, no qual se encontra soluções de para uma equação de movimento de uma dada teoria, geralmente de 2ª ordem, através de equações de 1ª ordem que aparecem por meio da minimização da energia, temos que

$$\frac{d\phi}{dx} = \pm\sqrt{2V(\phi)} \quad (2.28)$$

Desta forma, podemos escrever

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\tilde{\phi}}{dx}\right)^2 = \frac{V(g(\phi))}{\left(\frac{dg(\phi)}{d\phi}\right)^2} \quad (2.29)$$

A função deformadora $g(\phi)$ deve ser bem definida e bijetiva[37, 38]. A densidade de energia da solução deformada tem a forma

$$\varepsilon(x) = \left(\frac{d\tilde{\phi}}{dx}\right)^2 = \frac{\left(\frac{d\phi}{dx}\right)^2}{\left(\frac{dg}{d\phi}\right)^2} \quad (2.30)$$

2.5 O Potencial Tipo p

A introdução do potencial tipo p [39] na literatura científica da física de altas energias tem auxiliado a criação de modelos no cenário de branas, assim como, na matéria condensada, onde foi observado que em modelos magnéticos, quando utilizados como vínculos da geometria de um dado material[40], apresentam um comportamento muito similar as soluções do tipo dois-kinks. O potencial tipo p pode ser obtido através da deformação do potencial ϕ^4 , ou seja, fazendo os parâmetros a e λ iguais a 1 na equação (2.16), temos

$$V(\phi) = \frac{1}{2} (1 - \phi^2)^2 \quad (2.31)$$

em seguida, introduzindo uma função deformadora na forma $g(\phi) = \tanh[p \tanh^{-1}(\phi^{1/p})]$ na definição de potencial deformado (2.25), obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\phi) &= \frac{1}{2} \frac{(1-g(\phi))^2}{\left(\frac{dg(\phi)}{d\phi}\right)^2} \\ \tilde{V}(\phi) &= \frac{1}{2} \frac{\left(1 - \left\{\tanh[p \tanh^{-1}(\phi^{1/p})]\right\}^2\right)^2}{\left(\frac{dg(\phi)}{d\phi}\right)^2} \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde

$$\frac{dg(\phi)}{d\phi} = \left(1 - \tanh^2[p \tanh^{-1}(\phi^{1/p})]\right) \frac{\phi^{1/p} \phi^{-1}}{1 - \phi^{2/p}} \quad (2.33)$$

e

$$\left(\frac{dg(\phi)}{d\phi}\right)^2 = \left(1 - \tanh^2[p \tanh^{-1}(\phi^{1/p})]\right)^2 \frac{\phi^{2/p}}{\phi^2 (1 - \phi^{2/p})^2} \quad (2.34)$$

Desta forma, obtemos

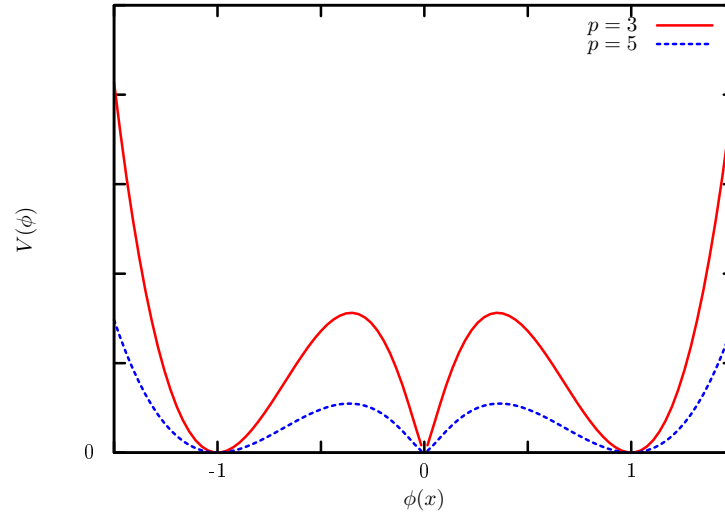
$$V(\phi) = \frac{1}{2} \phi^2 \left(\phi^{1/p} - \phi^{-1/p}\right)^2 \quad (2.35)$$

onde o seu comportamento é mostrado na figura 11

O parâmetro p é um número inteiro ímpar. Para $p = 1$, fazemos o potencial recair na teoria padrão ϕ^4

$$V(\phi) = \frac{1}{2} (\phi^2 - 1)^2 \quad (2.36)$$

onde o ponto máximo do potencial é obtido para $\phi = 0$ e os pontos mínimos do potencial são obtidos para $\phi_{\pm 1} = \pm 1$.


 Figura 11 – Soluções do Defeito para modelos com $p = 3$ e $p = 5$.

Para $p = 3, 5, \dots$, temos o surgimento de novos modelos. O potencial apresenta dois pontos máximos que são simétricos

$$\phi_{max} = \pm \left[\frac{p-1}{p+1} \right]^2 \quad (2.37)$$

Os pontos de mínimo do potencial são obtidos para $\phi = -1, 0, 1$, sendo que a derivada segunda do potencial, para $\phi = 0$, diverge, ou seja, tende ao infinito. Desta forma, este ponto não é adequado a um estado fundamental perturbativo, o que pode acarretar na não existência de uma solução tipo kink que para este mínimo, possua valor assintótico. Logo, da solução, é fácil ver que os dois mínimos não consecutivos, $\phi = -1$ e $\phi = +1$ serem conectados topologicamente através de

$$\phi(x) = \pm \tanh \left(\frac{x}{p} \right)^p \quad (2.38)$$

Como mostra a figura 12, temos um modelo do tipo p , chamado de dois-kinks, no qual o valor de p influencia o comprimento do platô central e não na quantidade de kinks da solução. Diferente do caso de soluções topológicas do tipo kink, as solução tipo 2-kink possuem o centro localizado em dois pontos do espaço. O mesmo é observado quando analisamos a densidade de energia, que neste caso é dada por

$$\varepsilon(x) = \operatorname{sech} \left(\frac{x}{p} \right)^4 \tanh \left(\frac{x}{p} \right)^{2p-2} \quad (2.39)$$

As energias são dadas por

$$E_p = \frac{4p}{4p^2 - 1} \quad (2.40)$$

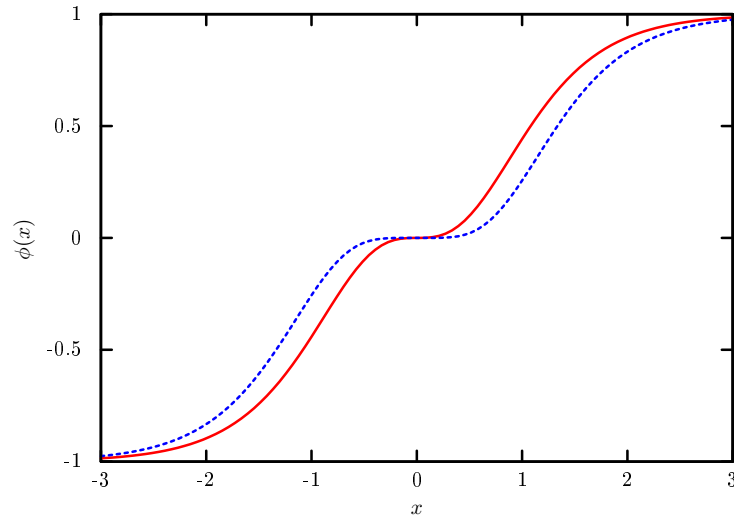


Figura 12 – Soluções do Defeito para modelos com $p = 3$ (linha cheia) e $p = 5$ (linha pontilhada).

Os modos zero são dados por

$$\eta_0 = c_p \tanh^{p-1} \left(\frac{x}{p} \right) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{x}{p} \right) \quad (2.41)$$

onde a constante de normalização c_p é

$$c_p = \left(\frac{4p^2 - 1}{4p} \right) \quad (2.42)$$

Este modelo com um potencial tipo p tem sido bastante usado na física de altas energias, principalmente para se tratar de branas[41, 42, 43]. Por exemplo, quando se estuda a localização de branas[44, 45].

2.6 Os Multikinks

Para obtermos os multikinks procederemos de maneira bastante similar a que foi exposta na seção (2.4), porém, aplicaremos a função deformadora repetidas vezes. Para começar, vamos imaginar dois campos escalares reais representados pelas seguintes densidades lagrangeanas

$$\mathcal{L}_j = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi_j \partial^\mu \phi_j - V_j(\phi_j) \quad \text{e} \quad \mathcal{L}_i = \frac{1}{2} \partial_\mu \phi_i \partial^\mu \phi_i - V_i(\phi_i) \quad (2.43)$$

Por meio das equações de Euler-Lagrange, como as representadas por (2.2), podemos obter as equações de movimento. Utilizando o método de Bogomol'nyi, podemos minimizar as

energias e, com isso, encontraremos as soluções das equações de tal forma que

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi_j}{dx} \right)^2 = V_j(\phi_j) \quad \text{e} \quad \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi_i}{dx} \right)^2 = V_i(\phi_i) \quad (2.44)$$

Devemos procurar algo que permita a ligação entre os campos escalares. Desta forma, utilizaremos algo similar ao que já foi usado no modelo de deformação apresentado na seção [seção 2.4](#), iremos fazer a relação entre os potenciais V_j e V_i , respectivamente o original e o deformado, ser escrita como

$$V_i(\phi_i) = \frac{V_j(g_{ji}(\phi_i))}{\left(\frac{dg_{ji}(\phi_i)}{d\phi_i} \right)^2} \quad (2.45)$$

Por meio desta relação, podemos partir de um certo modelo de campo escalar real, que possui certas soluções topológicas $\phi_j(x)$, e obter um novo campo escalar real, especificado por este novo potencial (2.45), cujas suas soluções $\phi_i(x)$ também são topológicas.

As soluções topológicas $\phi_j(x)$ são conhecidas e estão relacionadas com a função deformadora g_{ji} da seguinte forma

$$\phi_j = g_{ji}(\phi_i) = \frac{1}{1+a_i} \left[\phi_i - b + \sqrt{(\phi_i + a_i b)^2 - (1-a_i^2)(1-b^2)} \right] \quad (2.46)$$

onde a_i e b são parâmetros reais, assim como a função deformadora g_{ji} , que só se torna real pela imposição $|a_i| < 1$ e $|b| \geq 1$. Derivando a equação (2.46) com respeito a ϕ_i , temos

$$\frac{dg_{ji}}{d\phi_i} = \frac{1}{1+a_i} \left[1 + \frac{\phi_i + a_i b}{\sqrt{(\phi_i + a_i b)^2 - (1-a_i^2)(1-b^2)} - b} \right] \quad (2.47)$$

A solução $\phi_i(x)$ pode ser obtida pelo inverso da função deformadora $\phi_i(x) = g_{ji}^{-1}(\phi_j(x))$, ou seja

$$\phi_i = g_{ji}^{-1}(\phi_j) = \frac{1+a_i}{2} (\phi_j + b) + \frac{(1-a_i)(1-b^2)}{2(\phi_j + b)} - a_i b \quad (2.48)$$

Como exemplo da obtenção de soluções do tipo multikink, causaremos uma deformação no modelo ϕ^4 por meio da aplicação da nova função deformadora, dada pela equação (2.46). Redefinindo o potencial ϕ^4 da equação (2.16), temos

$$V_1(\phi_1) = \frac{1}{2} (1 - \phi_1^2)^2 \quad (2.49)$$

A solução usual é o kink

$$\phi_1(x) = \tanh(x - x_0) \quad (2.50)$$

onde o valor da constante de integração x_0 estabelecerá a posição do centro kink. Criaremos uma deformação no nosso modelo ϕ^4 através da introdução de

$$\phi_1 = g_{1,2}(\phi_2) = \frac{1}{1+a_2} \left[\phi_2 - b + \sqrt{(\phi_2 + a_2 b)^2 - (1-a_2^2)(1-b^2)} \right] \quad (2.51)$$

Mas de acordo com a equação (2.45), podemos escrever o potencial deformado $V_2(\phi_2)$ como

$$V_2(\phi_2) = \frac{V_1(g_{1,2}(\phi_2))}{\left(\frac{dg_{1,2}(\phi_2)}{d\phi_2}\right)^2} = \frac{\frac{1}{2}(1-\phi_1^2)^2}{\left(\frac{dg_{1,2}(\phi_2)}{d\phi_2}\right)^2} \quad (2.52)$$

onde derivando a nova função deformadora, equação (2.51), com respeito a ϕ_2 , temos

$$\left(\frac{dg_{1,2}}{d\phi_2}\right)^2 = \frac{1}{(1+a_2)^2} \left[\frac{\left[(\phi_2 + a_2 b) + \sqrt{(\phi_2 + a_2 b)^2 - (1-a_2^2)(1-b^2)} \right]^2}{(\phi_2 + a_2 b)^2 - (1-a_2^2)(1-b^2)} \right] \quad (2.53)$$

Desta forma, o potencial deformado $V_2(\phi_2)$ é escrito como

$$V_2(\phi_2) = \frac{(1+a_2)^2 \left[(\phi_2 + a_2 b)^2 - (1-a_2^2)(1-b^2) \right]}{2 \left[(\phi_2 + a_2 b) + \sqrt{(\phi_2 + a_2 b)^2 - (1-a_2^2)(1-b^2)} \right]^2} \times \left[1 - \left[\frac{1}{1+a_2} \left(\phi_2 - b + \sqrt{(\phi_2 + a_2 b)^2 - (1-a_2^2)(1-b^2)} \right) \right]^2 \right]^2 \quad (2.54)$$

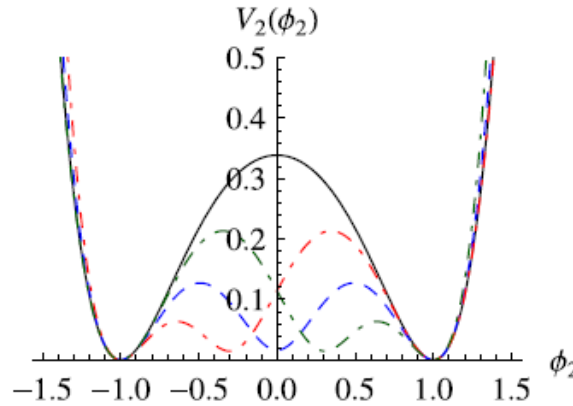


Figura 13 – Perfil do potencial $V_2(\phi_2)$. [Imagem: retirada da referência [7]]

Para ver com mais detalhe o comportamento do potencial deformado $V_2(\phi_2)$, geramos a figura 13. Os pontos de mínimo global estão localizados em $\phi_2 = \pm 1$. Quando tomamos os valores do parâmetro b próximos a 1, há o surgimento de um mínimo local. Os valores do parâmetro a_2 são responsáveis pelo controle da simetria do potencial. Sendo assim, a utilização de valores diferentes de $a_2 = 0$ provoca um comportamento assimétrico no potencial (ver figura 13).

Por meio do inverso da função de deformação, podemos escrever a solução topológica $\phi_2(x)$, como sendo

$$\phi_2(x) = g_{1,2}^{-1}(\phi_1(x)) = \frac{1 + a_2}{2} (\tanh(x - x_0) + b) + \frac{(1 - a_2)(1 - b^2)}{2(\tanh(x - x_0) + b)} - a_2 b \quad (2.55)$$

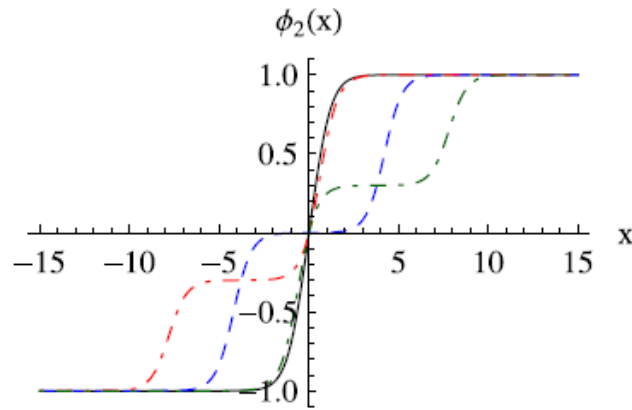


Figura 14 – Perfil da solução $\phi_2(x)$. kink e 2-kink [Imagem: retirada da referência [7]]

A figura 14 mostra o comportamento da solução que pode gerar um kink padrão, quando fazemos os parâmetros $a_2 = 0$ e $b = 1, 4$; uma solução tipo dois-kink simétrica, como mostrada na seção (2.5), quando fazemos os parâmetros $a_2 = 0$ e $b = 1$; e soluções tipo dois-kink assimétricas, quando fazemos os parâmetros $a_2 = \pm 0, 3$ e $b = 1$. Desta análise é fácil ver que o parâmetro a_2 está relacionado com o comportamento assimétrico da solução tipo dois-kink e o parâmetro b é o que controla o comprimento do degrau.

Podemos repetir o procedimento de deformação, mas agora com a intenção de gerar um novo campo escalar real \mathcal{L}_3 a partir do campo escalar real \mathcal{L}_2 , obtido anteriormente. Desta maneira, podemos escrever a função de deformação como sendo

$$\phi_2 = g_{2,3}(\phi_3) = \frac{1}{1 + a_3} \left[\phi_3 - b + \sqrt{(\phi_3 + a_3 b)^2 - (1 - a_3^2)(1 - b^2)} \right] \quad (2.56)$$

Agindo como da forma anterior (equação (2.45)), ou seja, obteremos o novo potencial deformado $V_3(\phi_3)$ a partir do potencial $V_2(\phi_2)$, de tal maneira que

$$V_3(\phi_3) = \frac{V_2(g_{2,3}(\phi_3))}{\left(\frac{dg_{2,3}(\phi_3)}{d\phi_3} \right)^2} \quad (2.57)$$

Assim, o novo potencial deformado $V_3(\phi_3)$ é definido por

$$\begin{aligned}
 V_3(\phi_3) = & \frac{(1 + a_3)^2 \left[(\phi_3 + a_3 b)^2 - (1 - a_3^2)(1 - b^2) \right]}{\left[(\phi_3 + a_3 b) + \sqrt{(\phi_3 + a_3 b)^2 - (1 - a_3^2)(1 - b^2)} \right]} \\
 & \times \frac{(1 + a_2)^2 \left[(g_{2,3}(\phi_3) + a_2 b)^2 - (1 - a_2^2)(1 - b^2) \right]}{2 \left[(g_{2,3}(\phi_3) + a_2 b) + \sqrt{(g_{2,3}(\phi_3) + a_2 b)^2 - (1 - a_2^2)(1 - b^2)} \right]^2} \\
 & \times \left[1 - \left(\frac{1}{1 + a_2} \left(g_{2,3}(\phi_3) + b + \sqrt{(g_{2,3}(\phi_3) + a_2 b)^2 - (1 - a_2^2)(1 - b^2)} \right) \right) \right]^2
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

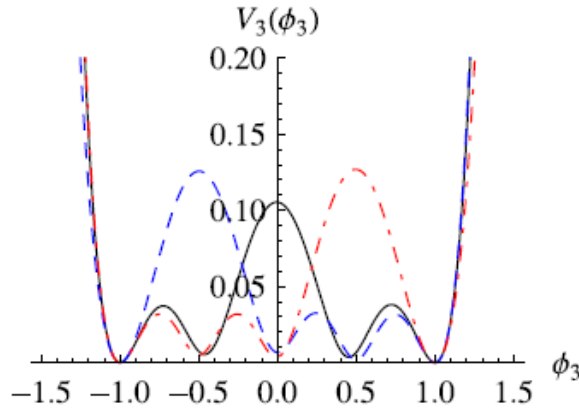


Figura 15 – Perfil do potencial $V_3(\phi_3)$. [Imagem: retirada da referência [7]]

A figura 15 representa o potencial $V_3(\phi_3)$. Este potencial apresenta dois mínimos globais localizados em $\phi_3 = \pm 1$. Para a escolha de valores do parâmetro b próximos ao valor crítico 1, há o aparecimento de dois mínimos locais. A simetria do potencial fica a cargo da escolha dos valores dos parâmetros a_2 e a_3 , ou seja, qualquer manipulação de seus valores produz uma assimetria no potencial.

A solução topológica $\phi_3(x)$ pode ser expressa por meio do inverso da função de deformação $g_{2,3}$, como

$$\begin{aligned}
 \phi_3(x) = & g_{2,3}^{-1}(\phi_2(x)) = \frac{1 + a_3}{2} \left[\frac{1 + a_2}{2} (\tanh(x - x_0) + b) + \frac{(1 - a_2)(1 - b^2)}{2(\tanh(x - x_0) + b)} - a_2 b + b \right] \\
 & + \frac{(1 - a_3)(1 - b^2)}{2} \left[\frac{1 + a_2}{2} (\tanh(x - x_0) + b) + \frac{(1 - a_2)(1 - b^2)}{2(\tanh(x - x_0) + b)} - a_2 b + b \right]^{-1} \\
 & - a_3 b
 \end{aligned} \tag{2.59}$$

A figura 16 nos mostra o comportamento da solução topológica $\phi_3(x)$ que gera um arranjo com 3-kink. Os parâmetros a_2 e a_3 controlam a simetria da solução, enquanto que o parâmetro b está relacionado com o comprimento dos platôs de cada kink.

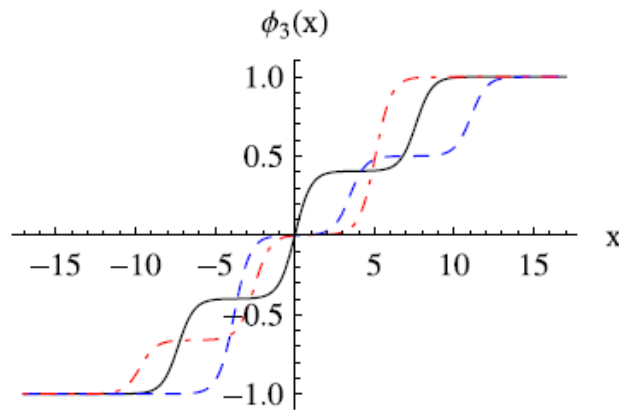


Figura 16 – Perfil da solução $\phi_3(x)$. 3-kink [Imagem: retirada da referência [7]]

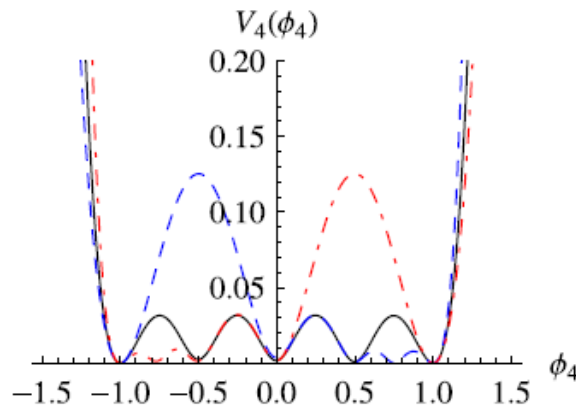


Figura 17 – Perfil do potencial $V_4(\phi_4)$. [Imagem: retirada da referência [7]]

O processo da deformação pode ser aplicado repetidas vezes para obtermos novos modelos de campos escalares reais deformados. Poderíamos escrever novas funções de deformação $\phi_3 = g_{3,4}(\phi_4)$, $\phi_4 = g_{4,5}(\phi_5)$, etc; que nos levaria a construção de novos potenciais $V_4(\phi_4)$, $V_5(\phi_5)$, etc. Na figura 17 podemos observar o perfil do potencial $V_4(\phi_4)$. O potencial apresenta três mínimos locais quando tomamos respostas próximas do valor crítico do parâmetro $b = 1$ e, também, apresenta dois mínimos globais localizados em $\phi_4 = \pm 1$. A simetria do potencial pode ser definida por meio da escolha dos valores dos parâmetros a_2 , a_3 e a_4 .

A solução $\phi_4(x)$ é representada pela figura 18 e representa uma configuração 4-kink. O parâmetro b está relacionado com o comprimento dos platôs de cada kink, enquanto que os parâmetros a_2 , a_3 e a_4 controlam a simetria da solução.

Como os defeitos topológicos, multikinks, possuem energia localizada no espaço, podemos buscar meios de tentar estudá-la. Desta forma, podemos definir a densidade de energia de

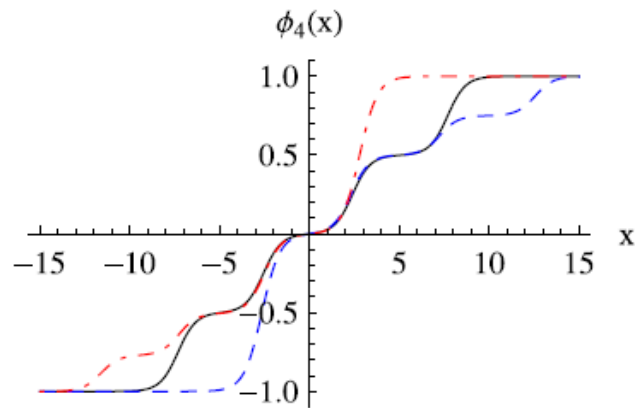


Figura 18 – Perfil da solução $\phi_4(x)$. 4-kink [Imagem: retirada da referência [7]]

um dado defeito $\phi_j(x)$ como sendo escrita por

$$\varepsilon_j(x) = \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi_j}{dx} \right)^2 + V_j(\phi_j(x)) \quad (2.60)$$

Aplicando a técnica da deformação, poderemos obter as densidades de energia associadas aos novos modelos deformados, ou seja, a densidade de energia deformada seria

$$\varepsilon_i(x) = \frac{\varepsilon_j(x)}{\left(\frac{dg(\phi)}{d\phi} \right)^2} \quad (2.61)$$

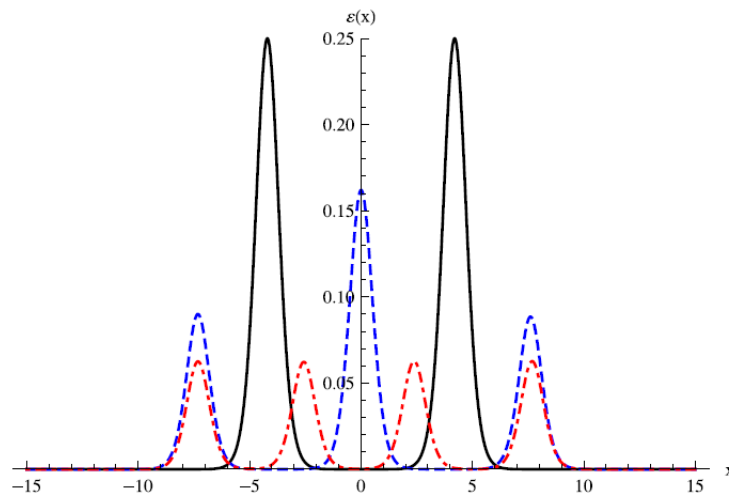


Figura 19 – Perfil do potencial $V_2(\phi_2)$. [Imagem: retirada da referência [7]]

As densidades de energias $\varepsilon_2(x)$, $\varepsilon_3(x)$ e $\varepsilon_4(x)$, que são os modelos apresentados nesta seção, estão representadas na figura 19. É interessante notar que cada kink extra gera um novo pico no gráfico da distribuição de energia.

Um abordagem mais detalhada dos processos de obtenção de modelos de campos escalares que suportam multikink pode ser visto nas referências [[7, 46, 47]], onde também consta

a aplicação da técnica de deformação no modelo sine-Gordon, uma análise da aplicação dos resultados no cenário de branas e no problema da hierarquia.

3 Confinamento Topológico em Grafeno Bicamada

Neste capítulo, faremos uma síntese do modelo de confinamento topológico em grafeno bicamada[8] e, desta forma, demonstraremos que os modos zero podem surgir em grafenos de duas camadas separados por um potencial eletrostático. Esses modos não são provenientes dos férmions de Dirac, mas de modos chirais de baixa energia não usuais, que tem dispersão quadrática e *gap* zero entre as bandas de condução e valência. Quando um potencial eletrostático V é inserido entre as camadas, um *gap* de magnitude $|V|$ abre as bandas de condução e valência.

3.1 O Modelo

Usando um modelo de duas bandas contínuas para descrever o grafeno bicamada, o sistema será descrito em quatro sub-redes: duas na camada inferior e duas na camada superior[48]. O hamiltoniano para o grafeno bicamada de baixa energia, no ponto de Dirac \vec{K} , com o potencial $V(x)$ aplicado entre as camadas é

$$H = \begin{bmatrix} -V(x)/2 & c\pi^\dagger & 0 & 0 \\ c\pi & -V(x)/2 & \gamma & 0 \\ 0 & \gamma & V(x)/2 & c\pi^\dagger \\ 0 & 0 & c\pi & V(x)/2 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

onde c é a velocidade de Fermi, o operador momento é $\pi = p_x + ip_y$ e γ é o acoplamento intercamadas.

O hamiltoniano (3.1) atua no espaço das funções de onda $(\psi_1^{(A)}, \psi_1^{(B)}, \psi_2^{(A)}, \psi_2^{(B)}) \in \mathbb{R}^4$, onde as letras A e B estão relacionadas as sub-redes e os números 1 e 2 estão relacionados as camadas do grafeno. Tomando $V \ll \gamma$, ou seja, baixas energias [49], O hamiltoniano é reduzido a

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} -\frac{V}{2}\left(1 - \frac{c^2 p^2}{\gamma^2}\right) & -\frac{c^2(\pi^\dagger)^2}{\gamma} \\ -\frac{c^2(\pi^\dagger)^2}{\gamma} & \frac{V}{2}\left(1 - \frac{c^2 p^2}{\gamma^2}\right) \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

onde $p^2 = p_x^2 + p_y^2$. As componentes que permanecem da função de onda são, em sua maioria, relacionadas aos átomos (A_1, B_2) (ver figura 3). Desde que $V < \gamma$, a correção p^2 pode ser negligenciada. Isso permite que os termos do potencial V e do momento possam ser desacoplados no hamiltoniano \mathcal{H} . Desta forma, o hamiltoniano em torno do ponto K da primeira zona de brillouin pode ser expresso por

$$\tilde{H} = -\frac{c^2}{\gamma} \begin{bmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -V/2 & 0 \\ 0 & V/2 \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

que pode ser escrito na forma do hamiltoniano quasiclássico adimensional

$$\mathcal{H} = \frac{\gamma}{c^2} \tilde{H} = -(p_x^2 - p_y^2)\sigma_x - 2p_x p_y \sigma_y - \varphi(x)\sigma_z, \quad (3.4)$$

onde $\varphi(x) = \gamma a^2 V(x)/(2c^2)$, $\pm V(x)$ é o potencial eletrostático aplicado nas camadas e a é uma constante da rede.

Para $\varphi(x)$ constante, o espectro tem a forma

$$E = \pm \sqrt{\Delta^2 + \epsilon(p)^2} \quad (3.5)$$

o φ atua como o parâmetro de ordem Δ . Os modos fermiônicos de baixa energia podem surgir em sistemas com uma estrutura topológica não trivial do $\Delta(\mathbf{r})$. Disso, o hamiltoniano quasiclássico (3.4) leva a seguinte equação de onda

$$(\partial_x + p_y)^2 v - \varphi(x)u = \epsilon u \quad (3.6)$$

$$(\partial_x - p_y)^2 u + \varphi(x)v = \epsilon v \quad (3.7)$$

Estas equações possuem simetrias adicionais para um perfil de potencial antisimétrico $\varphi(-x) = -\varphi(x)$. As equações (3.6) e (3.7) pode ser escritas de forma que elas se reduzem uma a outra, assumindo que $v(x) = \pm u(-x)$. Desta forma, escrevendo as funções de onda $\Psi = [u(x), u(-x)]$ e $\Phi = [w(x), -w(-x)]$, podemos resolver os problemas separadamente. Introduzindo-as o termo $(\partial_x \mp p_y)^2 v(x) = \pm u(-x)$, temos

$$\begin{cases} (\partial_x + p_y)^2 v - (\epsilon + \varphi_0)u = 0 & \leftarrow (\partial_x - p_y)^2 \\ (\partial_x - p_y)^2 u - (\epsilon - \varphi_0)v = 0 & \leftarrow (\partial_x + p_y)^2 \end{cases} \quad (3.8)$$

Rearranjando os termos, temos que

$$\begin{cases} (\partial_x^2 - p_y^2)^2 v - (\epsilon^2 - \varphi_0^2)v = 0 \\ (\partial_x^2 - p_y^2)^2 u - (\epsilon^2 - \varphi_0^2)u = 0 \end{cases} \quad (3.9)$$

onde podemos escrever u e v como uma função $f(x)$, assim

$$(\partial_x^2 - p_y^2)^2 f(x) - (\epsilon^2 - \varphi_0^2)f(x) = 0 \quad (3.10)$$

Desenvolvendo a equação (3.10), temos

$$\frac{d^4 f}{dx^4} - 2p_y^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + [p_y^4 - (\epsilon^2 - \varphi_0^2)]f = 0 \quad (3.11)$$

3.2 A Introdução do Kink

Como as equações (3.6) e (3.7) são difíceis de se resolverem analiticamente para um $\varphi(x)$ genérico, iremos realiza um estudo sobre a introdução potencial descrito por uma função sinal $\varphi(x) = \varphi_0 \operatorname{sgn}(x)$ e depois perseguiremos uma solução numérica para as equações (3.6) e (3.7) para um potencial tipo kink.

Fazendo o potencial ser escrito como uma função sinal $\varphi(x) = \varphi_0 \operatorname{sgn}(x)$, onde

$$\operatorname{sgn} x = \begin{cases} -1 & : x < 0 \\ 0 & : x = 0 \\ 1 & : x > 0. \end{cases}$$

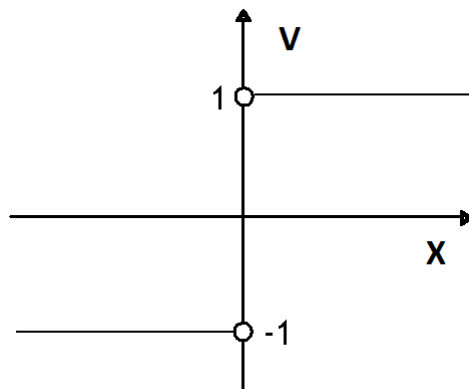


Figura 20 – O comportamento da função sinal (3.2).

O nosso intuito é descrever um potencial que atue como mostrado na figura 20. Neste caso, o potencial é contante para valores positivos e negativos de x , e a solução da equação de onda nestas regiões é $\Psi \propto e^{-\lambda x}$, onde λ pode ser uma quantidade complexa.

Definindo $f(x)$ da equação (3.11) por meio de uma exponencial, obtemos as relações

$$\begin{aligned} f(x) &= e^{-\lambda x} \\ f' &= -\lambda e^{-\lambda x} = -\lambda f \\ f'' &= -\lambda f' = \lambda^2 f \end{aligned}$$

e desta forma, podemos introduzir as relações definidas na equação (3.11), o que resulta em

$$\lambda^4 - 2p_y^2 \lambda^2 + [p_y^4 - (\epsilon^2 - \varphi_0^2)] = 0 \quad (3.12)$$

onde, com o intuito de facilitar na resolução, podemos escrever $\lambda^2 = \xi$. Assim,

$$\xi^2 - 2p_y^2 \xi + [p_y^4 - (\epsilon^2 - \varphi_0^2)] = 0 \quad (3.13)$$

Resolvendo essa equação do 2º grau, temos

$$\xi_{\pm} = p_y^2 \pm i\sqrt{-(\epsilon^2 - \varphi_0^2)} \quad (3.14)$$

Quando tivermos $|\epsilon| < \varphi_0$, ou seja, para estados *intragap*

$$\xi_{\pm} = a \pm ib \quad e \quad \lambda = \pm\alpha \pm i\beta \quad (3.15)$$

o que nos leva a

$$\begin{aligned} \alpha &= \sqrt{\frac{a^2 + b^2 + a}{2}} = 2^{-1/2} [p_y^4 - (\epsilon^2 - \varphi_0^2) + p_y^2]^{1/2} \\ \beta &= \sqrt{\frac{a^2 + b^2 - a}{2}} = 2^{-1/2} [p_y^4 - (\epsilon^2 - \varphi_0^2) - p_y^2]^{1/2} \end{aligned} \quad (3.16)$$

Para a região da figura 20 em $x < 0$, temos

$$\lambda_{1,2}^< = -\alpha \pm i\beta \quad (3.17)$$

E para a região na qual $x > 0$, devemos ter

$$\lambda_{1,2}^> = +\alpha \pm i\beta \quad (3.18)$$

Desta forma as funções de onda podem ser escritas na forma

$$u^{\gtrless}(x) = u^{\gtrless} \exp(-\lambda_1^{\gtrless} x) + u^{\gtrless} \exp(-\lambda_2^{\gtrless} x) \quad (3.19)$$

Para a região em $x = 0$, as soluções devem sofrer adaptações. A função de onda e sua derivada primeira são contínuas em $x = 0$, no entanto, o mesmo não se pode dizer para as derivadas segundas e de ordens maiores. Desta forma, temos as condições

$$\begin{aligned} u^> &= u^< \\ \partial_x u^> &= \partial_x u^< \\ \partial_x^2 u^> &= \partial_x^2 u^< - 2\varphi_0 u \\ \partial_x^3 u^> &= \partial_x^3 u^< + 2p_y(\partial_x^2 u^> - \partial_x^2 u^<) + 2\varphi_0 \partial_x u \end{aligned} \quad (3.20)$$

A terceira equação vem da subtração da equação (3.6), em $x = -0$, por ela mesma, mas com

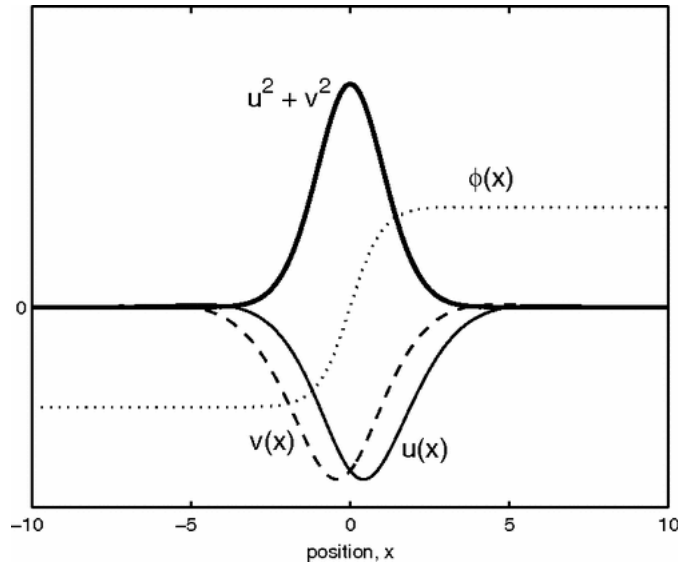


Figura 21 – Os espinores de onda e a densidade de probabilidade. Análise numérica das equações (3.6) e (3.7). [Imagem: retirada da referência [8]]

$x = +0$ e usando $v(0) = u(0)$. Repetindo o procedimento, mas usando $\partial_x v(0) = -\partial_x u(0)$ após derivar a equação de onda (3.6), obtém-se a quarta equação. Aplicando as equações contidas em (3.20) na equação (3.19), surge um sistema homogêneo de quatro equações que deve ter o determinante for nulo, de forma que a sua solução seja não trivial. Dada a equação (3.17), essa condição torna-se similar a

$$4\alpha^2(\alpha^2 + \beta^2) + 4p_y\varphi_0\alpha - \varphi_0^2 = 0 \quad (3.21)$$

Próximo a energia zero, só há solução para $p_y < 0$. A dispersão é obtida para $\varphi_0 > 0$

$$p_y = \frac{-\left(\epsilon + \frac{\varphi_0}{\sqrt{2}}\right)}{\sqrt{\epsilon + \varphi_0\sqrt{2}}} \quad (3.22)$$

A solução zero energia surge em $p_0 = -\sqrt{\varphi_0}/2^{3/4}$. Calculando pela outra função de onda $\Phi = [-u_{-p_y}(-x), u_{-p_y}(x)]$, podemos obter a dispersão inversa sendo dada por

$$p_y = \frac{\left(-\epsilon + \frac{\varphi_0}{\sqrt{2}}\right)}{\sqrt{-\epsilon + \varphi_0\sqrt{2}}} \quad (3.23)$$

Desta forma, as duas soluções possuem velocidades negativas próximas de $\epsilon = 0$. O que poderia implicar em uma quebra de simetria de reversão temporal. Entretanto, quando se analisa o que ocorre no outro ponto de Dirac, o \vec{K}' , temos uma velocidade positiva e, portanto, a preservação da simetria[8]. Os modos zero são quirais, ou seja, quando tomamos o pseudospin-1/2, com S_y ligado a um dos pontos de Dirac, todos os modos zero terão um certo sinal de $p_y S_y$. Para o antikink, teremos $\varphi_0 < 0$ e a dispersão será invertida, ou seja, $\epsilon(p_y) \rightarrow -\epsilon(p_y)$.

Uma solução numérica para as equações de onda (3.6) e (3.7) pode ser obtida, através do método das diferenças finitas, para um potencial $\varphi(x) = \tanh(x/l)$, conforme mostra na figura 21. O estado eletrônico no kink foi obtido fazendo $l = 1$ e $p_y = -1/2^{3/4}$, o que corresponde ao valor de p_y para um estado de energia zero. A função de onda tem um leve comportamento oscilatório, coerente com os valores complexos de λ .

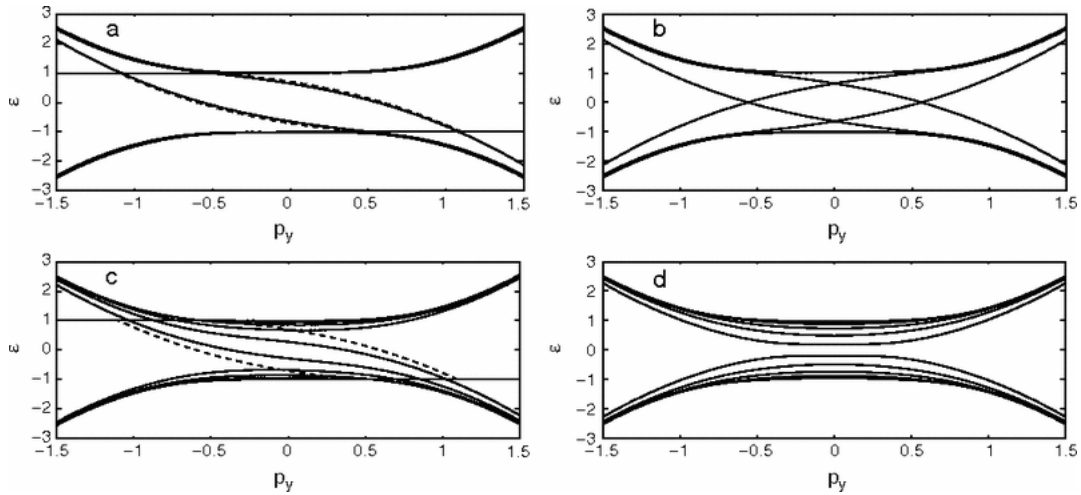


Figura 22 – Os níveis de energia para um kink. [Imagem: retirada da referência [8]]

A figura 22 mostra o espectro de energia na presença de um potencial tipo kink em quatro situações. Na situação [a], os estados de baixa energia são localizados com $l = 0.5$ e há apenas dois estados *intragap*. Já no caso [b], temos as mesmas coisas que no exemplo [a], mas com kink e antikink em $x = \pm 10$. A situação [c] foi obtida usando $l = 4$, e há o surgimento de

mais estados de baixa energia. No caso [d] foi utilizado $\varphi(x) = \tanh^2(x/4)$, o que resultou na ausência de modos zero quirais.

4 Confinamento Topológico Referente a Estruturas Multikink

Este capítulo trata do estudo da criação de estados modo zero quirais em grafeno bicamada devido ao confinamento imposto pela presença de defeitos tipo multikink.

4.1 O Modelo

Iremos seguir os passos do modelo descrito no [Capítulo 3](#), ou seja, iremos estudar o que ocorre com duas folhas de grafeno quando elas estão ligadas a um dispositivo que permite a sintonização de um potencial eletrostático. As bandas de partícula e buraco podem ser separadas por um *gap*, devido a presença do potencial eletrostático[50]. Considere o hamiltoniano de baixa energia, para o grafeno bicamada no qual atua um potencial eletrostático V , expresso por uma matriz 4×4

$$H = \begin{bmatrix} -V(x)/2 & c\pi^\dagger & 0 & 0 \\ c\pi & -V(x)/2 & \gamma & 0 \\ 0 & \gamma & V(x)/2 & c\pi^\dagger \\ 0 & 0 & c\pi & V(x)/2 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

onde estamos no espaço das funções de onda $(\psi_1^{(A)}\psi_1^{(B)}\psi_2^{(A)}\psi_2^{(B)})$, no qual os números representam a folha do grafeno e as letras representam a subrede. Este hamiltoniano pode ser reduzido considerando o potencial $V \ll \gamma$ e as energias [49]. Contudo, podemos desacoplar os termos do momento π e do potencial V , quando negligenciamos o p^2 para valores do potencial devem ser menores do que o acoplamento intercâmara, ou seja $V < \gamma$. Desta forma, temos o hamiltoniano

$$\tilde{H} = -\frac{c^2}{\gamma} \begin{bmatrix} 0 & (\pi^\dagger)^2 \\ (\pi)^2 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -V/2 & 0 \\ 0 & V/2 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

onde $\pi = p_x + ip_y$. Este hamiltoniano pode ser escrito na forma quasiclássica e adimensional como

$$\mathcal{H} = \frac{\gamma}{c^2} \tilde{H} = -(p_x^2 - p_y^2)\sigma_x - 2p_x p_y \sigma_y - \varphi(x)\sigma_z, \quad (4.3)$$

que nos leva para as seguintes funções de onda

$$(\partial_x + p_y)^2 v - \varphi(x)u = \epsilon u \quad (4.4)$$

$$(\partial_x - p_y)^2 u + \varphi(x)v = \epsilon v \quad (4.5)$$

4.2 A Introdução dos Multikink

As funções de onda (4.4) e (4.5) não podem ser resolvidas analiticamente. Então, descrevendo o potencial $\varphi_1(x)$ como uma função degrau

$$\varphi_1(x) = \tanh(x/l) \quad (4.6)$$

podemos encontrar, usando o método das diferenças finitas, soluções numéricas das equações (4.4) e (4.5).

A figura 23 mostra o potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo kink, caracterizado pela função (4.6). Os diferentes valores de δ interferem a suavidade do kink.

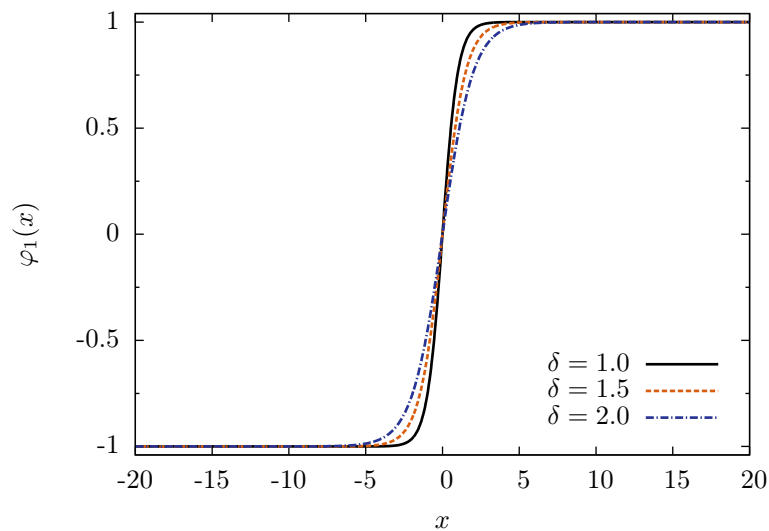


Figura 23 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo kink descrito por (4.6).

A figura 24 mostra as componentes $u(x)$ e $v(x)$ da função de onda. A densidade de probabilidade $|\Psi|^2 = \rho(x) = u^2 + v^2$ também é representada de forma que ela possui um leve comportamento oscilatório. É perceptível que há uma simetria $u(x) = v(-x)$.

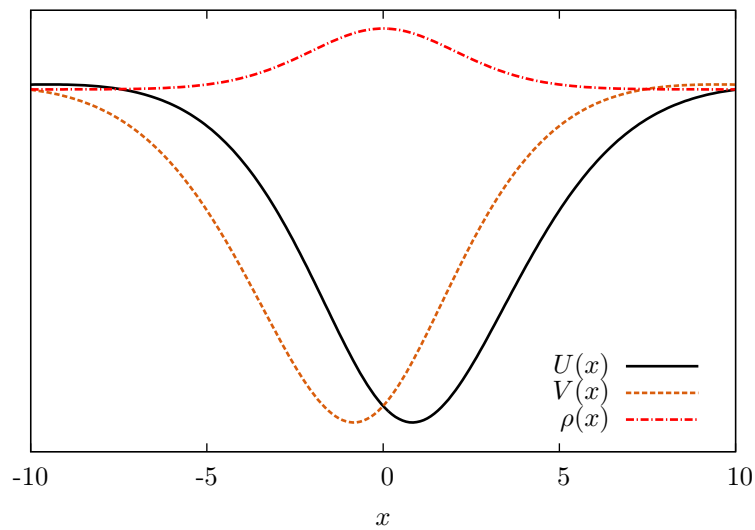


Figura 24 – Os espinores de onda e a densidade de probabilidade. Análise numérica das equações (3.6) e (3.7).

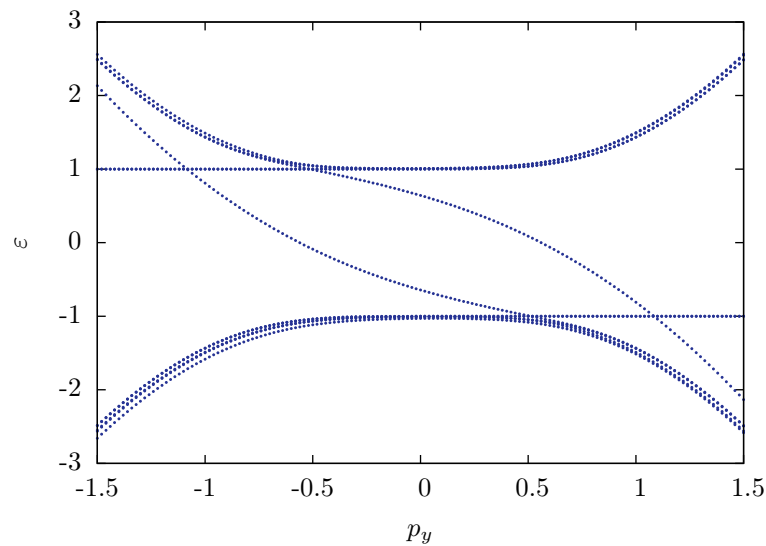


Figura 25 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_1(x)$ para $l = 0, 5$.

As figuras 25 e 26 representa os estados de dispersão por kink, considerando $l = 0, 5$ e $l = 4, 0$ respectivamente. Ambas possuem dois modos zero quirais por kink, mas a figura 26 apresenta o surgimento de mais estados de baixa estados.

Agora, obteremos as soluções numéricas das funções de onda (4.4) e (4.5) com o auxílio de um potencial $\varphi_2(x)$ tipo 2-kink, descrito conforme o que foi mostrado no Capítulo 2

$$\varphi_2(x) = g_{1,2}^{-1}(\varphi_1(x)) = \frac{1 + a_2}{2} (\tanh(x/l) + b) + \frac{(1 - a_2)(1 - b^2)}{2(\tanh(x/l) + b)} - a_2 b \quad (4.7)$$

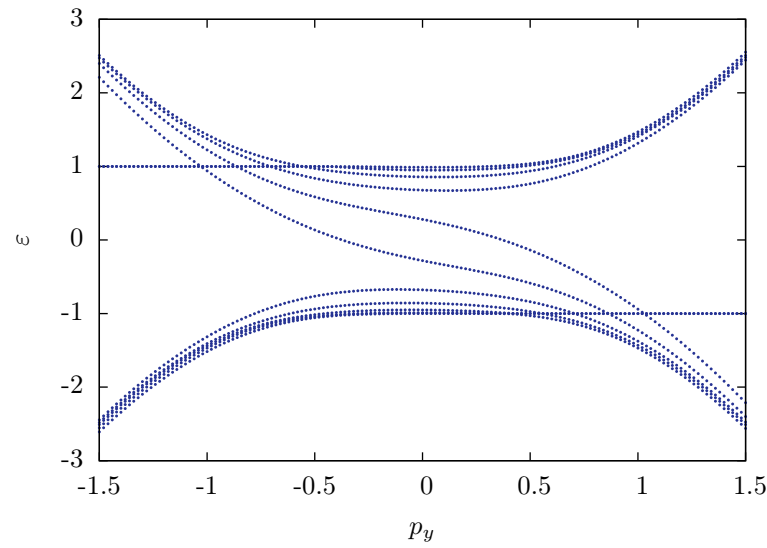


Figura 26 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_1(x)$ para $l = 4, 0$.

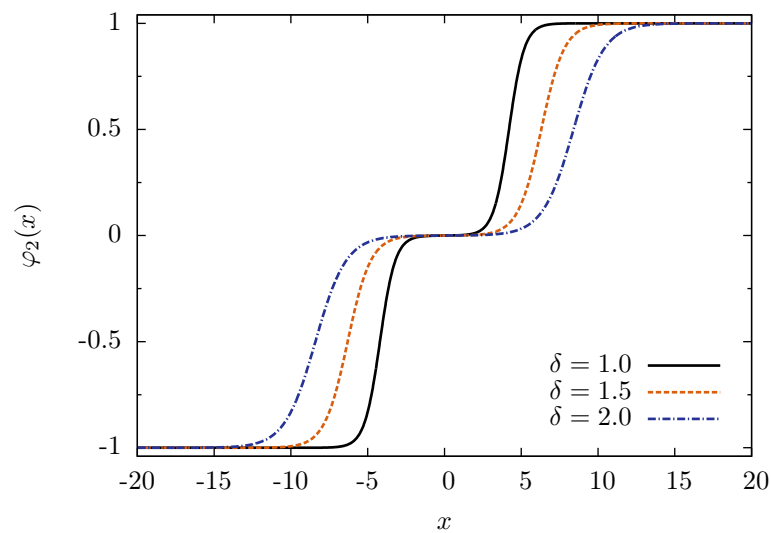
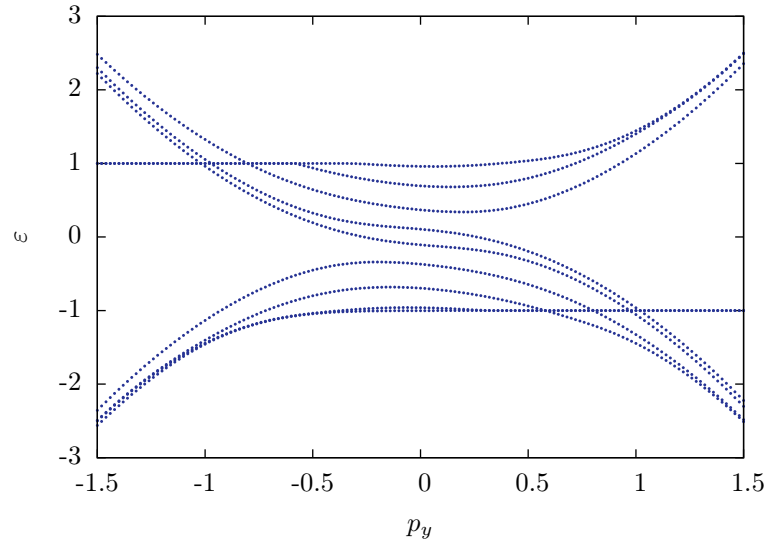
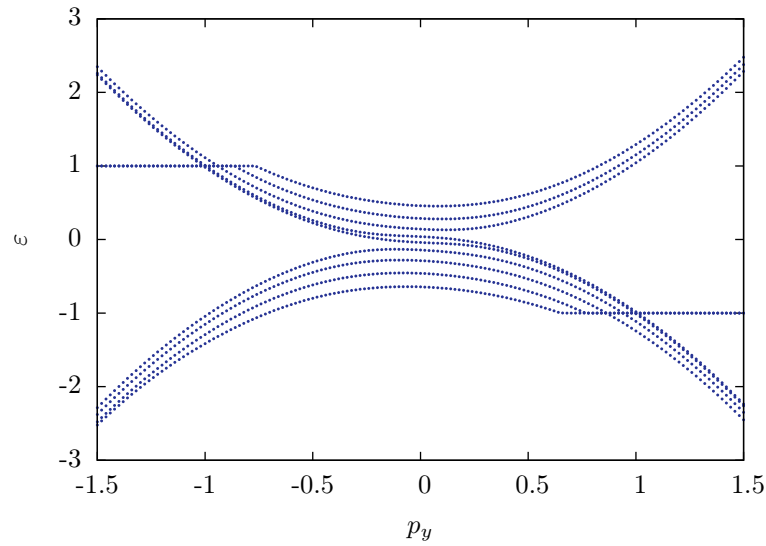


Figura 27 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo 2-kink descrito por (4.7).

onde a_2 e b são parâmetros reais que estão relacionados, respectivamente, com o comportamento simétrico da solução e com o comprimento do degrau. A figura 27 mostra o potencial eletrostático com um comportamento tipo 2-kink. Os valores de l controlam a suavidade dos kinks.

Na figura 28, vemos o aparecimento de novos estados de baixa energia na região entre as bandas e, também, a existência de dois estados de modo zero, ou seja, estados quirais. Todos os estados, quirais ou não, se encontram mais próximos uns dos outros. Tal comportamento se torna mais acentuado quando aumentamos o parâmetro $l = 4, 0$, como mostrado na figura 29.

Utilizando a solução (4.8), temos um potencial eletrostático com o perfil tipo 3-kink


 Figura 28 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_2(x)$ para $l = 1, 0$.

 Figura 29 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_2(x)$ para $l = 2, 0$.

(figura 30).

$$\begin{aligned}
 \phi_3(x) = g_{2,3}^{-1}(\phi_2(x)) = & \frac{1 + a_3}{2} \left[\frac{1 + a_2}{2} (\tanh(x - x_0) + b) + \frac{(1 - a_2)(1 - b^2)}{2(\tanh(x - x_0) + b)} - a_2b + b \right] \\
 & + \frac{(1 - a_3)(1 - b^2)}{2} \left[\frac{1 + a_2}{2} (\tanh(x - x_0) + b) + \frac{(1 - a_2)(1 - b^2)}{2(\tanh(x - x_0) + b)} - a_2b + b \right]^{-1} \\
 & - a_3b
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

As figuras 31 e 32 apresentam as estruturas dos níveis de energia na presença do potencial com 3-kink. Este modelo continua tendo os dois estados confinados topologicamente, ou seja os dois modos zero quirais, e a presença dos estados de baixa energia. O espaçamento entre os

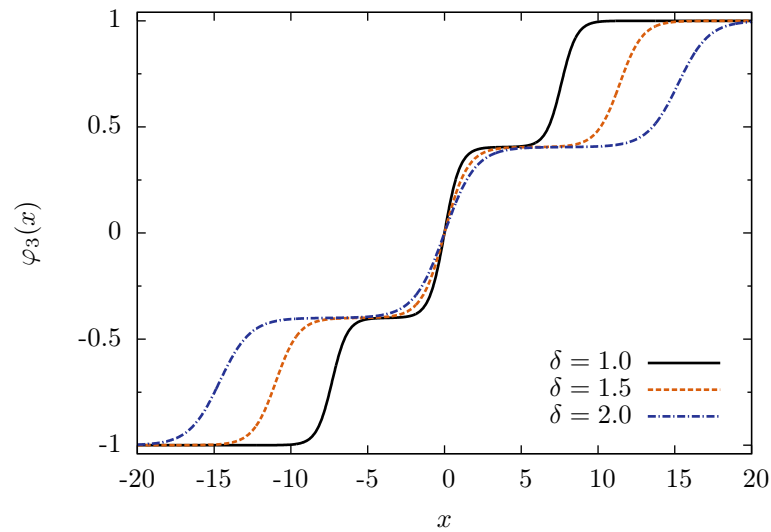


Figura 30 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo 3-kink descrito por (4.8).

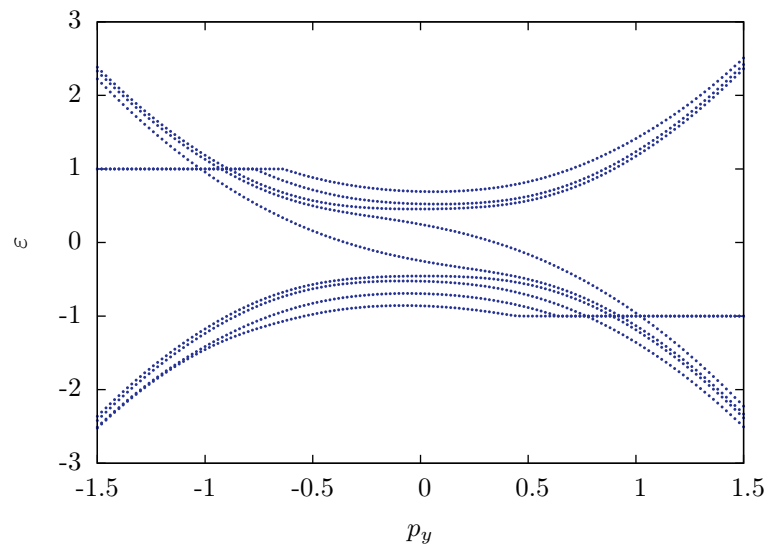


Figura 31 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_3(x)$ para $l = 1, 0$.

estados quirais volta a aumentar.

Incluimos também os gráficos gerados por um potencial eletrostático com uma solução do tipo 4-kink (figuras 33, 34 e 35). Uma análise revela que as estruturas dos níveis de energia (para $l = 1, 0$ e $l = 2, 0$) apresentam, além dos estados quirais e do surgimento de estados de baixa energia *intragap*, uma aproximação entre os estados de energia. Este comportamento não é tão intenso como o que ocorreu no caso com a solução do tipo 2-kink (figuras 28 e 29).

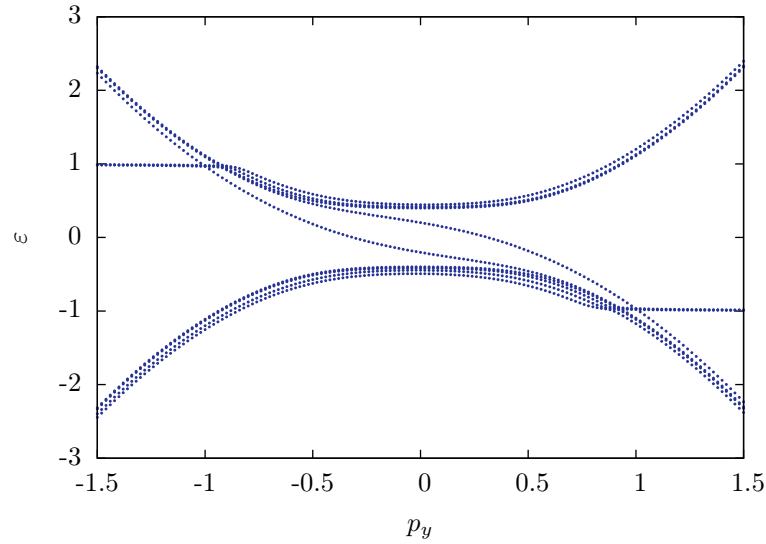


Figura 32 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_3(x)$ para $l = 2, 0$.

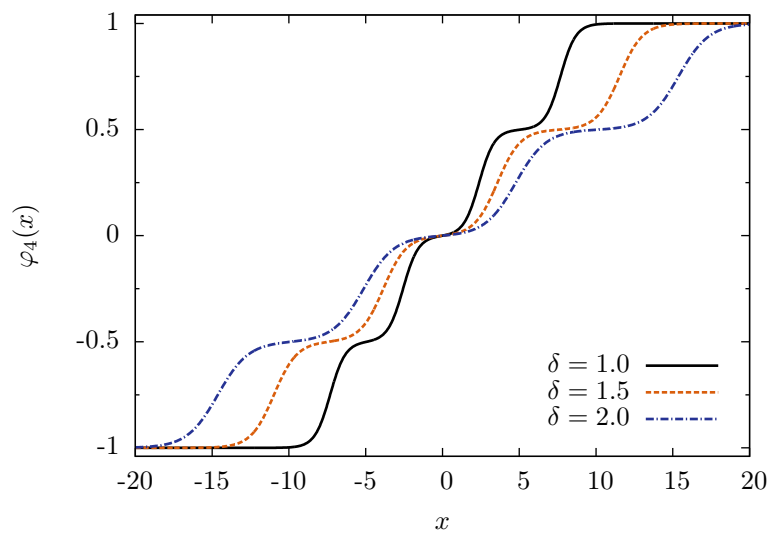


Figura 33 – Potencial eletrostático com o perfil de uma solução tipo 4-kink.

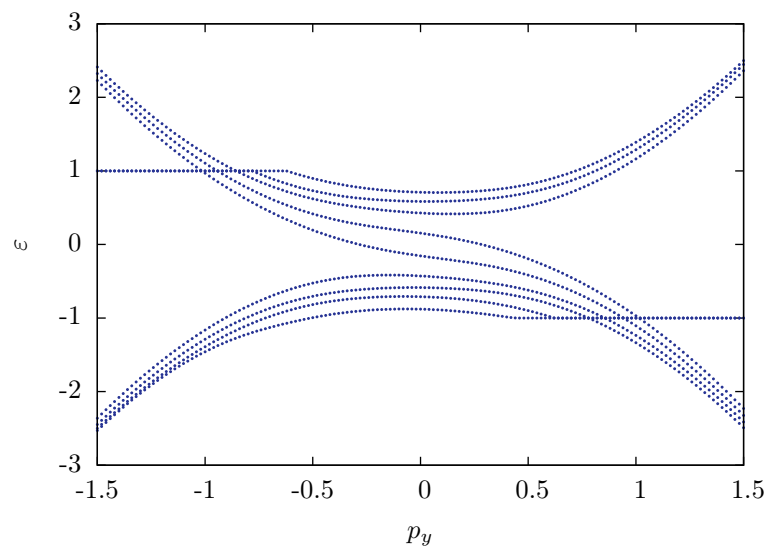


Figura 34 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_4(x)$ para $l = 1, 0$.

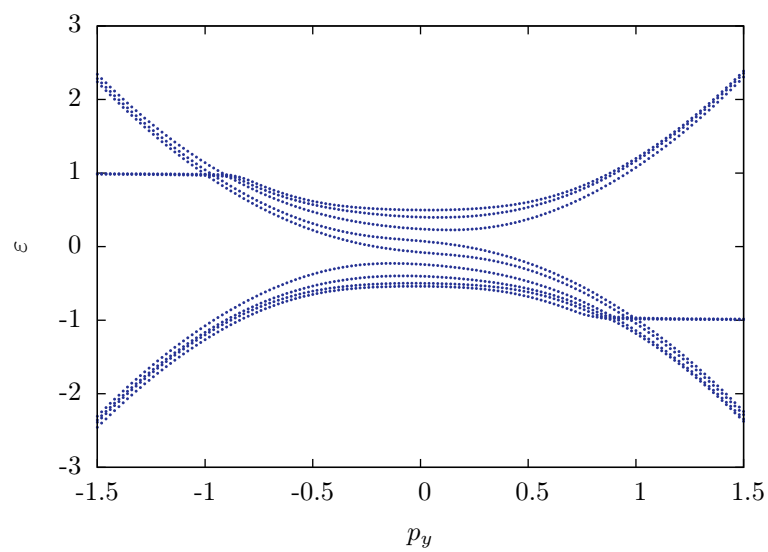


Figura 35 – Estrutura do nível de energia na presença do potencial tipo kink $\varphi_4(x)$ para $l = 2, 0$.

Conclusão

Este trabalho consiste no estudo teórico do confinamento topológico em grafeno bicamada causado por um dispositivo eletrônico, chamado *gate*, que permite aplicar um potencial elétrico entre as camadas do grafeno. Este campo elétrico causa o surgimento de um *gap* entre as camadas de condução e valência dos pontos de Dirac K e, ainda, pode ser sintonizável, de tal forma que podemos controlar largura do *gap*.

Estamos propondo que o potencial elétrico confinante seja descrito pelo modelo de multikink, ou seja, analisamos o confinamento na presença de um potencial com o perfil de um kink, 2-kink, 3-kink e 4-kink. Estamos nos limitando a 4-kinks apenas por questões de praticidade, mas deixamos claro os meios para a obtenção de um perfil com mais kinks.

A análise das estruturas dos níveis de energia na presença dos potenciais com multikink revelou o surgimento de modos zero quirais, ou seja, de estados confinados topologicamente, pelo menos dois por camada. Foi constatada também o aparecimento de estados de baixa energia além dos estados *intragap*. Um outro comportamento observado foi que as curvas que representam os estados quirais nas estruturas dos níveis de energia, apresentam um menor distanciamento entre si quando o perfil utilizado é de um par-kink do que de um ímpar-kink.

Acreditamos que tal modelo apresentado poderia ser utilizado em um sistema que necessite a troca de informação de maneira dinâmica, como por exemplo no fluxo de informação em redes de fibras óticas. Foi mostrado em [19] que folhas de grafeno ligadas a fibra ótica, em sistemas de distribuição de dados, permitiu que a troca de informação ocorresse de forma, absurdamente, mais rápida do que na ausência do grafeno. Quando este sistema for implementado e se tornar o padrão para a internet, pode ser que seja necessário a busca por um modelo que permita a parametrização de um seletor que coordene por qual fibra ótica a informação deve seguir.

Acreditamos que o princípio de incerteza generalizado possa ser implementado no modelo $\lambda\phi^4$, com o intuito de observar a presença do comprimento mínimo e , em seguida,

aplicar o método de função de deformação e tentar observar o comprimento mínimo em vários potenciais que tem como solução os multikinks.

Referências

- 1 GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. *Nature materials*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 3, p. 183–191, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 10 e 18.
- 2 BAE, S. et al. Roll-to-roll production of 30-inch graphene films for transparent electrodes. *Nature nanotechnology*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 8, p. 574–578, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 10, 19 e 20.
- 3 NETO, A. H. C. et al. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 81, p. 109–162, Jan 2009. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.81.109>>. Citado 7 vezes nas páginas 10, 21, 22, 23, 24, 27 e 30.
- 4 GOERBIG, M. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 83, n. 4, p. 1193, 2011. Citado 3 vezes nas páginas 10, 27 e 29.
- 5 KATSNELSON, M. I. Graphene: carbon in two dimensions. *Materials Today*, v. 10, n. 1–2, p. 20 – 27, 2007. ISSN 1369-7021. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369702106717886>>. Citado 4 vezes nas páginas 10, 17, 28 e 29.
- 6 NOVOSELOV, K. et al. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *nature*, Nature Publishing Group, v. 438, n. 7065, p. 197–200, 2005. Citado na página 29.
- 7 BRITO, G. de; DUTRA, A. de S. Multikink solutions and deformed defects. *Annals of Physics*, Elsevier, v. 351, p. 620–633, 2014. Citado 6 vezes nas páginas 10, 43, 44, 45, 46 e 47.
- 8 MARTIN, I.; BLANTER, Y. M.; MORPURGO, A. Topological confinement in bilayer graphene. *Physical review letters*, APS, v. 100, n. 3, p. 036804, 2008. Citado 5 vezes nas páginas 11, 16, 49, 53 e 54.
- 9 FOWLER, W. A. Experimental and theoretical nuclear astrophysics: the quest for the origin of the elements. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 56, p. 149–179, 1984. Citado na página 17.
- 10 PAULING, L. The nature of the chemical bond, 3rd edit. *Cornell University, Press, Ithaca, New York*, 1960. Citado na página 17.
- 11 SMALLEY, R. E. Discovering the fullerenes. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 69, p. 723–730, Jul 1997. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.69.723>>. Citado na página 17.
- 12 KROTO, H. Symmetry, space, stars and c60. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 69, p. 703–722, Jul 1997. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.69.703>>. Citado na página 17.
- 13 CURL, R. F. Dawn of the fullerenes: experiment and conjecture. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 69, p. 691–702, Jul 1997. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.69.691>>. Citado na página 17.

- 14 IJIMA, S. et al. Helical microtubules of graphitic carbon. *nature*, London, v. 354, n. 6348, p. 56–58, 1991. Citado na página 17.
- 15 NOVOSELOV, K. et al. Two-dimensional atomic crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, National Acad Sciences, v. 102, n. 30, p. 10451–10453, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 25.
- 16 NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 2004. Citado na página 17.
- 17 GEIM, A. K. Graphene: status and prospects. *science*, American Association for the Advancement of Science, v. 324, n. 5934, p. 1530–1534, 2009. Citado na página 19.
- 18 RAMUZ, M. P. et al. Evaluation of solution-processable carbon-based electrodes for all-carbon solar cells. *ACS nano*, ACS Publications, v. 6, n. 11, p. 10384–10395, 2012. Citado na página 20.
- 19 LIMMER, T.; FELDMANN, J.; COMO, E. D. Carrier lifetime in exfoliated few-layer graphene determined from intersubband optical transitions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 110, p. 217406, May 2013. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.217406>>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 64.
- 20 ASHCROFT, N. Nd mermin solid state physics. *Saunders College, Philadelphia*, 1976. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 28.
- 21 NOVOSELOV, K. et al. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *nature*, Nature Publishing Group, v. 438, n. 7065, p. 197–200, 2005. Citado na página 24.
- 22 SAITO, R. et al. Electronic structure of chiral graphene tubules. *Applied Physics Letters*, AIP Publishing, v. 60, n. 18, p. 2204–2206, 1992. Citado na página 24.
- 23 RIAZUDDIN. Dirac equation for quasi-particles in graphene and quantum field theory of their coulomb interaction. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 26, n. 21, 2012. Citado na página 24.
- 24 PERES, N. Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 82, n. 3, p. 2673, 2010. Citado na página 27.
- 25 KATSNELSON, M.; NOVOSELOV, K. Graphene: new bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 143, n. 1, p. 3–13, 2007. Citado na página 29.
- 26 ZHANG, Y. et al. Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 438, n. 7065, p. 201–204, 2005. Citado na página 29.
- 27 KANE, C. L.; MELE, E. J. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, APS, v. 95, n. 22, p. 226801, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 30, 31 e 32.
- 28 WANG, X.-F.; CHAKRABORTY, T. Collective excitations of dirac electrons in a graphene layer with spin-orbit interactions. *Physical Review B*, APS, v. 75, n. 3, p. 033408, 2007. Citado na página 31.

- 29 HALDANE, F. D. M. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the " parity anomaly". *Physical Review Letters*, APS, v. 61, n. 18, p. 2015, 1988. Citado na página 31.
- 30 VILENKIN, A.; SHELLARD, E. P. S. *Cosmic strings and other topological defects*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2000. Citado na página 33.
- 31 RAJARAMAN, R. *Solitons and instantons*. [S.l.: s.n.], 1982. Citado na página 33.
- 32 REBBI, C.; SOLIANI, G. *Solitons and particles*. [S.l.]: World Scientific, 1984. Citado na página 33.
- 33 WALGRAEF, D. *Spatio-temporal pattern formation*. [S.l.]: Springer, 1997. Citado na página 33.
- 34 ESCHENFELDER, A. H. *Magnetic bubble technology*. [S.l.]: Springer-Verlag Berlin, 1980. Citado na página 33.
- 35 BOGOMOL'NYI, E. The stability of classical solutions. *Sov. J. Nucl. Phys.(Engl. Transl.);(United States)*, LD Landau Theoretical Physics Institute, USSR Academy of Sciences, Moscow, v. 24, n. 4, 1976. Citado 2 vezes nas páginas 34 e 36.
- 36 BAZEIA, D.; MENEZES, J.; SANTOS, M. Complete factorization of equations of motion in supersymmetric field theories. *Nuclear Physics B*, Elsevier, v. 636, n. 1, p. 132–140, 2002. Citado na página 35.
- 37 BAZEIA, D.; LOSANO, L.; MALBOUISSON, J. M. C. Deformed defects. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 66, p. 101701, 2002. Citado na página 38.
- 38 BAZEIA, D.; LOSANO, L.; MENEZES, R. New results on compact structures. *Physics Letters B*, Elsevier, v. 731, p. 293–297, 2014. Citado na página 38.
- 39 BAZEIA, D.; MENEZES, J.; MENEZES, R. New global defect structures. *Physical review letters*, APS, v. 91, n. 24, p. 241601, 2003. Citado na página 39.
- 40 JUBERT, P.-O.; ALLENSPACH, R.; BISCHOF, A. Magnetic domain walls in constrained geometries. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 69, p. 220410, 2004. Citado na página 39.
- 41 BAZEIA, D.; FURTADO, C.; GOMES, A. Brane structure from a scalar field in warped spacetime. *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics*, IOP Publishing, v. 2004, n. 02, p. 002, 2004. Citado na página 41.
- 42 BAZEIA, D.; GOMES, A. R. Bloch brane. *Journal of High Energy Physics*, IOP Publishing, v. 2004, n. 05, p. 012, 2004. Citado na página 41.
- 43 CRUZ, W.; GOMES, A.; ALMEIDA, C. A. Fermions on deformed thick branes. *The European Physical Journal C-Particles and Fields*, Springer, v. 71, n. 11, p. 1–7, 2011. Citado na página 41.
- 44 CRUZ, W.; TAHIM, M.; ALMEIDA, C. Results in kalb-ramond field localization and resonances on deformed branes. *EPL (Europhysics Letters)*, IOP Publishing, v. 88, n. 4, p. 41001, 2009. Citado na página 41.

- 45 BAZEIA, D.; GOMES, A.; LOSANO, L. Gravity localization on thick branes: a numerical approach. *International Journal of Modern Physics A*, World Scientific, v. 24, n. 06, p. 1135–1160, 2009. Citado na página [41](#).
- 46 BRITO, G. P. de; CORREA, R. A. C.; DUTRA, A. de S. Analytical multikinks in smooth potentials. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 89, p. 065039, 2014. Citado na página [47](#).
- 47 DUTRA, A.; BRITO, G. de; SILVA, J. da. Asymmetrical bloch branes and the hierarchy problem. *arXiv preprint arXiv:1312.0091*, 2013. Citado na página [47](#).
- 48 MCCANN, E.; FAL'KO, V. I. Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer. *Physical Review Letters*, APS, v. 96, n. 8, p. 086805, 2006. Citado na página [49](#).
- 49 NES, J. L. M.; GUINEA, F.; VOZMEDIANO, M. A. H. Existence and topological stability of fermi points in multilayered graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 75, p. 155424, 2007. Citado 2 vezes nas páginas [49](#) e [56](#).
- 50 MCCANN, E. Asymmetry gap in the electronic band structure of bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 74, p. 161403, 2006. Citado na página [56](#).