

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
MESTRADO EM FÍSICA**

**LEANDRO JADER PITOMBEIRA XAVIER**

**CONFINAMENTO ELETRÔNICO EM BICAMADAS DE  
GRAFENO**

FORTALEZA

2011

**Leandro Jader Pitombeira Xavier**

***Confinamento eletrônico em bicamadas de grafeno***

Dissertação apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. João Milton Pereira Junior

MESTRADO EM FÍSICA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Fortaleza – CE

26 de Janeiro de 2011

Dissertação de Mestrado sob o título “*Confinamento eletrônico em bicamadas de grafeno*”, defendida por Leandro Jader Pitombeira Xavier e aprovada em 26 de janeiro de 2011, em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

---

Prof. Dr. João Milton Pereira Junior  
Departamento de Física - UFC  
Orientador

---

Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida  
Instituto de Ciências Exatas e Naturais - UERN

---

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias  
Departamento de Física - UFC

*Dedico esta dissertação a meus pais,  
cujo exemplo de honestidade e trabalho  
tem sido um norteador para a minha vida.*

# *Agradecimentos*

- Primeiramente aos meus pais *Leudo* e *Socorro*, pelos ensinamentos que me foram transmitidos, pela ininterrupta e altruística ajuda durante toda a minha vida e por nem sempre terem me apoiado.
- Aos meus irmãos *Leudo Jr.*, *Leydson*, *Leydiane* e *Leyziane Nara* pela amizade, companheirismo, compreensão e apoio igualmente importantes.
- Ao meu orientador Prof. João Milton Pereira Júnior sem o qual este trabalho não seria possível, pelos conhecimentos transmitidos e por ser um modelo de professor, orientador e pesquisador.
- Aos membros da banca: Prof. Gil de Aquino Farias, não apenas pela leitura e crítica deste trabalho mas também pelo apoio e confiança depositada em mim desde o meu ingresso no grupo; do mesmo modo ao Prof. Nilson Sena de Almeida, por contribuições fundamentais na minha formação acadêmica.
- Aos demais professores do grupo de pesquisa Prof. Wandemberg Paiva Ferreira e Prof. Jeanlex Soares de Sousa, pelos vários auxílios prestados.
- A todos os professores com quem tive aula na graduação e na pós-graduação, aos quais devo o profissional que sou hoje.
- A todos os meus amigos, em especial aos que tive mais contato durante a minha formação acadêmica, dos quais devo citar: *Daniel Gomes*, *Daniel Marchesi*, *Davi Dantas*, *Diego Lucena*, *Diego Rabelo*, *Diego Ximenes*, *Hygor Piaget*, *Joari Santiago*, *João Paulo Pitombeira*, *Kauã Monteiro*, *Levi Leite*, *Rafael Alencar*, *Saulo Dantas*, *Vagner Bessa*. Pelas valiosas discussões e pelos indispensáveis momentos de descontração.
- Aos colegas do grupo também por discussões igualmente importantes e pelo companheirismo.
- Aos professores Josué Mendes Filho e Paulo de Tarso Cavalcante Freire e a todo o grupo administrativo do Departamento de Física da UFC, pelo esforço incansável para o desenvolvimento do nosso departamento.

- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo suporte financeiro.

*“The world ain’t all sunshine and rainbows.  
It’s a very mean and nasty place and I don’t care how tough you are  
it will beat you to your knees and keep you there permanently if you let it.  
You, me, or nobody is gonna hit as hard as life. But it ain’t about how hard you hit.  
It’s about how hard you can get hit and keep moving forward.  
How much you can take and keep moving forward. That’s how winning is done!  
Now if you know what you’re worth then go out and get what you’re worth.  
But you gotta be willing to take the hits, and not pointing fingers saying  
you ain’t where you wanna be because of him, or her, or anybody!  
Cowards do that and that ain’t you! You’re better than that!”*

**Rocky Balboa**

# *Resumo*

Nesse trabalho calculamos o espectro próximo dos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  da primeira zona de Brillouin em uma bicamada de grafeno para um tipo particular de confinamento, conhecido como confinamento topológico, o qual é obtido aplicando-se um potencial eletrostático sobre a bicamada de forma que este muda de sinal na região de confinamento (potencial *kink*). Para isso, partimos do modelo *tight-binding* e deduzimos a “equação de Dirac” que descreve os portadores de carga próximo dos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ .

Finalmente resolvemos a “equação de Dirac” para sistemas nos quais a mudança de sinal se dá na direção radial. Primeiramente tratamos com um sistema em que o potencial apenas muda uma única vez de sinal dando origem a um anel quântico. Em seguida tratamos com outro sistema no qual o potencial muda de sinal duas vezes o que gera dois anéis quânticos concêntricos. Mostramos que para potenciais com *kink* abrupto a equação de Dirac pode ser resolvida analiticamente e mostramos como o espectro de energia comportam-se em função dos parâmetros que definem o potencial. Incluímos efeitos de um *kink* gradual utilizando cálculos numéricos e mostramos os efeitos adicionados pelo mesmo. Nossos resultados mostram ser possível o confinamento espacial dos portadores de carga em tais sistemas e são coerente com resultados da literatura.

# *Abstract*

In this work we calculated the energy levels around the  $\mathbf{K}$  and the  $\mathbf{K}'$  points of the first Brillouin zone in a bilayer graphene when a electrostatic bias is applied between the layers, such that the sign of the confining potential changes across a channel. Such potential is known as topological confinement. Starting of tight-binding description of graphene, we derived the “Dirac equation” which governs the behavior of charge carriers around the  $\mathbf{K}$  and  $\mathbf{K}'$  points.

We solved the “Dirac equation” with the potential bias applied changing along the radial direction. Firstly, we considered that the potential bias changes its sign once. That forms a quantum ring. Secondly, we considered that the potential bias changes its sign twice. That forms two quantum rings concentric. We show that for potential step kink the Dirac equation can be solved analytically. For each potential we show how the energy levels depend of the potential parameters. We include the effect of a smooth kink using numerical methods and we show how the energy levels change. Our results show that it’s possible to confine the charge carriers in such potentials and are in agreement with the literature ones.

# *Sumário*

## **Lista de Figuras**

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 17
1.1	Grafeno . . . . .	p. 18
1.2	Bicamada de Grafeno . . . . .	p. 21
1.3	Fabricação de folhas de grafeno . . . . .	p. 22
1.4	Sumário . . . . .	p. 24
<b>2</b>	<b>Modelo Teórico</b>	p. 25
2.1	Modelo Tight-Binding no Grafeno . . . . .	p. 25
2.1.1	Modelo Contínuo . . . . .	p. 30
2.1.2	Inclusão de Potenciais Externo . . . . .	p. 31
2.2	Modelo Tight-Binding para a Bicamada de Grafeno . . . . .	p. 32
2.2.1	Diferença de Potencial Homogênea e Gap controlável . . . . .	p. 34
<b>3</b>	<b>Confinamento topológico em bicamada de grafeno</b>	p. 38
3.1	Diferença de Potencial Homogênea em Coordenadas Polares . . . . .	p. 40
3.2	Anel Quântico . . . . .	p. 44
3.3	Anel Quântico Duplo . . . . .	p. 48
3.4	Interfaces Graduais . . . . .	p. 51
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	p. 56
4.1	Anel Simples . . . . .	p. 58

4.2	Anel Duplo . . . . .	p. 64
4.3	Interfaces Graduais . . . . .	p. 70
4.3.1	Interface Linear . . . . .	p. 71
4.3.2	Interface Não-Linear . . . . .	p. 72
	<b>Conclusões</b>	p. 79
	<b>Apêndice A – Soluções linearmente independentes</b>	p. 81
	<b>Apêndice B – Matriz dos elementos</b>	p. 86
	<b>Apêndice C – Artigos publicados relacionados à tese</b>	p. 89
	<b>Referências Bibliográficas</b>	p. 90

# *Lista de Figuras*

- 1.1 Formas alotrópicas do carbono. No canto superior esquerdo, uma folha de grafeno; no sentido horário grafite (múltiplas folhas de grafeno), fulereno e nanotubo de carbono. . . . . p. 17
- 1.2 A esquerda, dispersão do grafeno. A direita, dispersão aproximadamente linear próximo do ponto de Dirac. . . . . p. 19
- 1.3 Efeito Hall quântico anômalo no grafeno a temperatura de 4 K e campo magnético de 14 T como função da concentração dos portadores de carga. (inserção)  $\sigma_{xy}$  para uma bicamada de grafeno, onde a usual quantização ocorre em valores inteiros de  $4e^2/h$ . Figura adaptada de [9]. . . . . p. 21
- 1.4 A) Dispersão linear sem *gap* do grafeno para energias próximas do nível de Fermi. B) Dispersão aproximadamente parabólica sem *gap* para uma bicamada para energias próximas do nível de Fermi. C) Surgimento de em *gap*  $\Delta$  na dispersão da BG ao se aplicar um campo eletrostático perpendicular as camadas. . . . . p. 22
- 1.5 Foto de filmes de grafite (azul) com várias espessuras,  $d$ , depositados em um substrato de  $\text{SiO}_3$  (violeta). Os valores indicados das espessuras foram medidos através de microscopia de força atômica. Observe que a área em que  $d \approx 2nm$  no canto superior esquerdo a mudança na coloração é extremamente tênue. Figura adaptada de [21]. . . . . p. 23
- 2.1 Dispersão do grafeno obtida através dos modelos *tight-binding* e *AB initio*. a) A dispersão obtida através de calculos *AB initio* é mostrada em linhas cheias, e a obtida pelo *tight-binding* é mostrado em linhas pontilhadas. A dispersão do *tight-binding* é calculada para os melhores valores dos parâmetros do *tight-binding* que interpolam a dispersão do *AB initio* . b) Diferença entre as dispersões. Figura adaptada de [23]. . . . . p. 26

- 2.2 Rede hexagonal do grafeno. Esquerda: a rede do grafeno representada como duas redes triangulares cujos os vetores primitivos são  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$ . Os vetores  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  e  $\delta_3$  localizam os primeiros vizinhos para os átomos que pertencem à subrede B. Para os átomos que pertencem à subrede A os primeiros vizinhos estão nas posições  $-\delta_1$ ,  $-\delta_2$  e  $-\delta_3$ . Direita: zona de Brillouin. Figura adaptada de [1]. . . . . p. 27
- 2.3 Bicamada de grafeno com empilhamento AB vista de cima. Os carbonos em vermelho formam a subrede triangular B da camada inferior. Os carbonos em azul formam a subrede A' da camada superior. Os carbonos em preto são as subredes B' e A que coincidem pois a coordenada z é ignorada pela perspectiva. p. 33
- 2.4 a) Rede cristalina de uma BG. Os átomos em verde formam, na folha inferior, a subrede A e na folha superior a subrede B'. Os parâmetros de *hopping* entre os respectivos pontos são mostrados. No presente modelo consideramos  $\gamma_3 = \gamma_4 = 0$ . b) Primeira zona de Brillouin. Figura adaptada de [1]. . . . . p. 33
- 2.5 Esquema de uma bicamada de grafeno submetida a um campo elétrico uniforme induzido através de um capacitor. As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e o capacitor em cinza. . . . . p. 35
- 2.6 Dispersão para uma bicamada de grafeno submetida à uma ddp constante  $2V = t$  para  $t = 400$  meV. Em preto são as energias da banda de valências e em vermelho as energias da banda de condução. Observe um aparecimento de um gap  $\Delta$ . . . . . p. 36
- 2.7 Dispersão na ausência de campo elétrico para uma bicamada de grafeno. Em preto são as energias da banda de valências e em vermelho as energias da banda de condução. . . . . p. 37
- 2.8 Dependência do gap  $\Delta$  em função da metade da ddp entre as camadas  $V$ . . . . p. 37
- 3.1 Esquema de um potencial *kink* induzido em uma BG através de dois capacitores. As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e os capacitores em cinza. Em linha pontilhada mostra um esboço dos estados confinado na direção perpendicular a direção em que há a troca de sinal. Figura adaptada de [15]. . . . . p. 39

- 3.2 Espectro de energia como função do momento na direção  $y$ . O estado é confinado espacialmente na direção  $x$ . (a) O espectro obtido para um potencial *kink* abrupto (linha pontilhada) o obtido com um potencial *kink* suave proporcional a  $V \tanh(x/l)$  para  $l = 0,5$ . (b) O espectro para um potencial *kink* abrupto e um *antikink*, o qual é o simétrico aditivo do potencial *kink*. (c) Mesmo que em (a) para  $l = 4$ , o qual torna a troca de sinal mais lenta. (d) É apresentado o espectro de um confinamento convencional (não topológico). Figura adaptada de [15]. . . . . p. 40
- 3.3 Esquema de um anel quântico eletrostático em um BG. Na região do disco, devido a um capacitor, atravessa um campo elétrico uniforme e perpendicular as camadas, o qual induz um potencial de  $+V$  (azul) no disco da camada superior e  $-V$  (vermelho) no disco da camada inferior. Na região fora do disco, devido a um segundo capacitor, um campo elétrico oposto ao primeiro induz um potencial de  $-V$  (vermelho) na região complementar do disco da camada superior e  $+V$  (azul) na respectiva região da camada inferior. . . . . p. 45
- 3.4 Gráfico do potencial  $U_1$  (em preto) e  $U_2$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico em uma bicamada de grafeno. . . . . p. 46
- 3.5 Gráfico dos potenciais  $U_1$  (em preto) e  $U_2$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico duplo em uma bicamada de grafeno. p. 48
- 3.6 Gráfico dos potenciais  $U_1$  (em preto) e  $U_2$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico em uma bicamada de grafeno com interfaces graduais. . . . . p. 52
- 4.1 Espectro próximo do ponto  $K$  como função do raio do anel para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e para o valor de  $V$  indicado no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixos das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior. . . . . p. 59
- 4.2 Espectro próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e para valor de  $R$  indicado no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixos das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior. . . . . p. 60

4.3	Espectro próximo do ponto $K$ como função da amplitude do potencial para $m = 0, 1, \dots, 12$ e para $R = 50$ nm. Observa-se um maior número de estados com energia nula do que o mesmo espectro para $R = 20$ nm. . . . .	p. 61
4.4	Visão geométrica da coordenada $y'$ . . . . .	p. 62
4.5	Espectro próximo do ponto $K$ como função do raio do anel para $m = 0, 1, \dots, 7$ e para o valor de $V$ indicado no gráfico. O espectro para $m = -1, -2, \dots, -7$ pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixos das abscissas o espectro mostrado. Observe que devido ao alto valor de $V$ , os zeros acontecem antes dos valores previstos. . . . .	p. 64
4.6	Espectro de um anel duplo próximo do ponto $K$ como função do raio médio para $m = 0, 1, \dots, 7$ e para valores de $V$ e $L$ indicados no gráfico. O espectro para $m = -1, -2, \dots, -7$ pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixos das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior. . . . .	p. 65
4.7	Espectro de um anel duplo próximo do ponto $K$ como função da amplitude do potencial para $m = 0, 1, \dots, 7$ e valores de $R$ e $L$ indicados no gráfico. O espectro para $m = -1, -2, \dots, -7$ pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixos das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior. . . . .	p. 66
4.8	Comparação entre as energias do anel duplo e as energias dos anéis simples que formam o anel duplo. Em preto as energias com índice $m = 3$ de um anel simples com um raio igual ao raio menor do anel duplo $R_1 = 15$ nm. Em vermelho as energias com índice $m = 3$ do anel duplo. Em azul as energias com índice $m = -3$ de um anel simples com raio igual ao raio maior do anel duplo $R_2 = 25$ nm. Utilizamos o índice $m = -3$ , pois no raio $R_2$ , temos um potencial <i>antikink</i> . . . . .	p. 67
4.9	Esboço do cruzamento de dois níveis de energia. . . . .	p. 68
4.10	Espectro de um anel duplo próximo do ponto $K$ como função do raio médio para $m = 0, 1, \dots, 7$ e para valores de $V$ e $L$ que realçam o <i>gap</i> entre as energias com o mesmo índice $m$ . . . . .	p. 71



4.20 Espectro de um anel com interfaces graduais não lineares próximo do ponto  $K$  como função da espessura,  $w$ , da interface para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $V$  e  $R$  indicados no gráfico. . . . . p. 78

# 1 Introdução

É um fato bem conhecido que o carbono é uma das matérias-primas para a vida e é base para toda a química orgânica – o seu pequeno raio atômico permite-lhe formar grandes cadeias com a complexidade necessária para gerar a vida como a conhecemos. Porém, nos últimos vinte e cinco anos uma nova promessa surgiu a partir da descoberta de novas formas alotrópicas do carbono. Além da grafite e do diamante observou-se inúmeras estruturas baseadas em carbono que exibem propriedades físicas singulares possibilitando um vasto número de aplicações tecnológicas, algumas já no mercado. Essas propriedades físicas são, em grande parte, devido à dimensionalidade efetiva dessas estruturas as quais podem ser caracterizadas como estruturas desde 0D, até 3D. Tal diversidade, por sua vez, decorre da flexibilidade das ligações químicas em sistemas baseados em carbono [1].

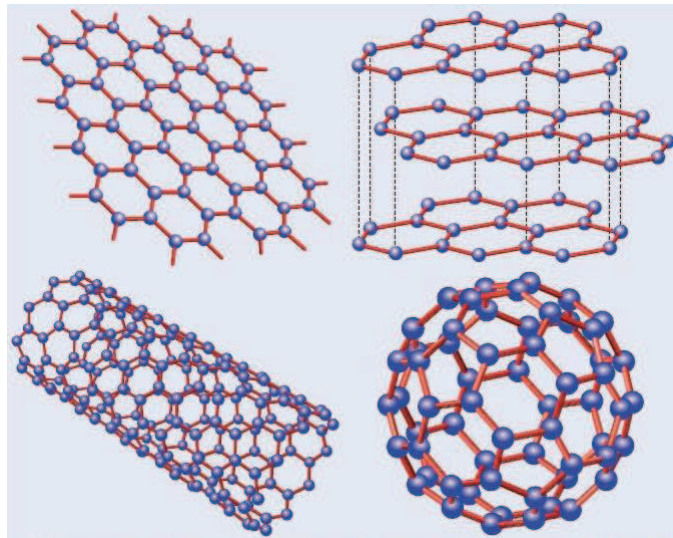


Figura 1.1: Formas alotrópicas do carbono. No canto superior esquerdo, uma folha de grafeno; no sentido horário grafite (múltiplas folhas de grafeno), fulereno e nanotubo de carbono.

O interesse no estudo das formas alotrópicas do carbono recebeu um grande impulso a partir da década de 1980, quando os fulerenos foram descobertos e fabricados [2]. O componente mais famoso dessa família é o  $C_{60}$ , uma molécula formada por 60 átomos de carbono em uma

estrutura semelhante à de uma bola de futebol (ver Figura 1.1). Do ponto de vista físico, os fulerenos podem ser descritos como estruturas efetivamente 0-dimensionais (0D) e portanto possuem estados com níveis de energia discretos. A química dos fulerenos continua uma área bastante ativa, por exemplo, possíveis aplicações em nanotecnologia e nanotribologia<sup>1</sup> têm sido consideradas [3]. Em 1996 H. W. Kroto, R. E. Curl e R. E. Smalley foram agraciados com Prêmio Nobel de Química pela descoberta dos fulerenos. Na década 1990, observou-se a existência de estruturas tubulares constituídas apenas de carbono, chamadas de nanotubos de carbono [4]. Nanotubos de carbonos, estruturas efetivamente unidimensionais (1D), são dotados de propriedades excepcionais, por exemplo, dependendo da disposição dos átomos de carbono, podem ser metais ou semicondutores. Suas propriedades eletrônicas, mecânicas e de transporte de calor têm atraído a atenção dos pesquisadores para possíveis aplicações em microeletrônica e em engenharia [5]. Finalmente em 2004 produziu-se a que talvez seja a mais promissora das estruturas aqui citadas: o grafeno [6]. O grafeno é constituído por átomos de carbono dispostos em uma rede planar - portanto uma estrutura efetivamente 2D, do tipo favo-de-mel formada por hexágonos justapostos, onde cada átomo ocupa um vértice do hexágono. Andre Geim e Konstantin Novoselov em colaboração com pesquisadores da Universidade de Manchester e do Institute for Microelectronics Technology em Chernogolovka, Russia, foram os primeiros a sintetizar o grafeno em laboratório e foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física de 2010 por “experiências inovadoras quanto ao material bidimensional grafeno”.

## 1.1 Grafeno

Através do grafeno podemos entender as propriedades eletrônicas de outras formas alotrópicas do carbono, por isso o grafeno já vêm sendo estudado teoricamente desde 1946. A grafite - uma estrutura 3D - nada mais é do que várias folhas de grafeno ligadas entre si por fracas ligações de Van-der-Waals (daí sua propriedade de lubrificador), portanto quando escrevemos com um lápis em uma folha de papel, deixamos um grande número de camadas de grafeno depositadas na folha e ao retirar algumas camadas (passando uma borracha por exemplo) é possível que exista uma região com uma única camada. O nanotubo de carbono é tratado teoricamente como uma folha de grafeno enrolada e os fulerenos podem ser obtidos adicionando-se pentágonos à estrutura do grafeno gerando uma curvatura positiva na estrutura. Foi P. R. Wallace quem primeiro escreveu a estrutura de banda do grafeno como um ponto de partida para um estudo da grafite [7], um importante material para reatores nucleares na era pós Segunda Guerra Mundial.

Embora o grafeno seja estudado teoricamente há mais de 60 anos e possivelmente produzido

---

<sup>1</sup>Ramo da tribologia que estuda fenômenos de fricção em escala nanométrica.

desde 1564 (ano da invenção do lápis), apenas em 2004 é que ele foi sintetizado em laboratório! Isso ocorreu em primeiro lugar porque vários físicos, incluindo nomes famosos, como o do soviético Lev Landau (1908-1968), não acreditavam ser possível obter um cristal bidimensional estável. Em segundo lugar, não existiam ferramentas experimentais para se procurar um cristal da espessura de um átomo dentre os detritos de grafite cobrindo áreas macroscópicas. O grafeno apenas pôde ser observado através do fenômeno de interferência da luz visível (ver seção 1.3).

O carbono possui quatro elétrons de valência os quais são responsáveis pelas ligações inter-átomos. No grafeno, três desses elétrons participam de ligações  $\sigma$  no plano do grafeno com outros três carbonos (os primeiros vizinhos) os quais se ligam formando um ângulo de  $120^\circ$  entre si (por isso a rede hexagonal). Essas ligações são relativamente fortes, o que garante a estabilidade do grafeno. O quarto elétron ocupa um orbital perpendicular ao plano das ligações  $\sigma$  e dão origem a ligações  $\pi$  fracas. Esses elétrons quase livres (um por átomo), chamados de elétrons  $\pi$ , podem ser tratados como independentes dos outros elétrons de valência[4]. Os elétrons  $\pi$  são os principais responsáveis pelas propriedades de transporte no grafeno [8].

A estrutura de banda do grafeno obtido através do Hamiltoniano *tight-binding* considerando apenas transições entre primeiros vizinhos, é dado por [7]:

$$E(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_y a/2) \cos(3k_x a/2)},$$

onde  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  é o vetor posição no espaço recíproco,  $a$  o parâmetro da rede e  $t$  é parâmetro *tight-binding* de correlação entre os primeiros vizinhos.

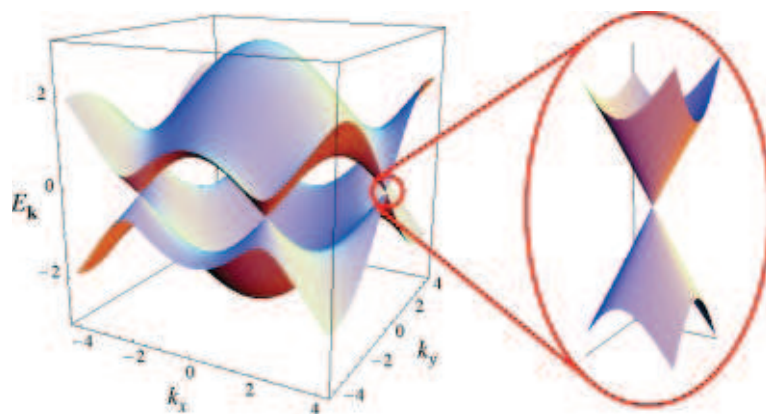


Figura 1.2: A esquerda, dispersão do grafeno. A direita, dispersão aproximadamente linear próximo do ponto de Dirac.

Dos pontos em que  $E = 0$  (ver Figura 1.2) apenas dois não são equivalentes, chamados de

pontos de Dirac. Suas posições no espaço recíproco são

$$\mathbf{K} = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \text{ e } \mathbf{K}' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right).$$

Para valores de energia próximo de zero, isto é, para valores de  $\mathbf{k}$  próximos de  $\mathbf{K}$  ou  $\mathbf{K}'$ , a dispersão é aproximadamente linear semelhante à dispersão obtida para um fermion de massa zero a partir da equação de Dirac. De fato, os portadores de carga próximo dos pontos de Dirac comportam-se como fermions de Dirac sem massa, exceto pelo fato que eles se movem com velocidade  $v_F$  trezentas vezes menor que a da luz [1]. No grafeno neutro o nível de Fermi cruza exatamente os pontos de Dirac, o que significa que para energias próximas ao nível de Fermi os portadores exibem tal comportamento pseudo-relativístico. A priori isso possibilita que experimentos relativístico sejam feitos em uma escala de energia bem menor, porém a aplicabilidade do grafeno vai muito além disso. Fermions de Dirac comportam-se completamente diferente quando comparados a elétrons ordinários conduzindo assim a novos fenômenos físicos.

Quando sujeitos a campos magnéticos, fermions de Dirac exibem um efeito Hall quântico (EHQ) anômalo, sendo este qualitativamente diferente do EHQ observado em dispositivos a base de semicondutores. Medidas experimentais comprovam tal efeito, o que confirma o comportamento relativísticos dos portadores de carga no grafeno. O efeito EHQ descreve a quantização da condutividade Hall  $\sigma_{xy}$ , condutividade medida perpendicular à corrente, em platôs de valores inteiros de  $4e^2/h$ . No entanto, no grafeno, os platôs são deslocados de  $1/2$  do valor esperado, já que  $\sigma_{xy} = \pm 4e^2/h(N + 1/2)$  onde  $N$  é o nível de Landau [9]. Esse comportamento é explicado pela presença de um nível de Landau em  $N = 0$  no espectro de energia  $E = \pm \sqrt{2e\hbar BN}$  do grafeno em um campo magnético  $B$ , onde  $E$  é positivo para elétrons e negativo para buracos. A Figura 1.3 mostra a condutividade Hall  $\sigma_{xy}$  e a condutividade longitudinal  $\rho_{xx}$  como função da concentração dos portadores de carga para uma folha de grafeno sujeita a um campo magnético  $B = 14$  T e temperatura de 4 K. Por causa da grande energia de ciclotron exibidas por elétrons “relativísticos”, o EHQ no grafeno pode ser observado em temperatura ambiente, mesmo que sendo necessário campos magnéticos elevados.

Outra característica dos fermions de Dirac é sua insensibilidade a potenciais eletrostáticos externos. Isso é devido ao chamado paradoxo de Klein: fermions de Dirac podem ser transmitidos com probabilidade unitária através de uma região classicamente proibida. No grafeno potenciais eletrostáticos podem ser facilmente gerados devido a desordens como ondulações na superfície, presença de impurezas ionizadas no substrato ou mesmo adátomos ou moléculas adsorvidos. Isso significa que os portadores de carga no grafeno são praticamente insensíveis

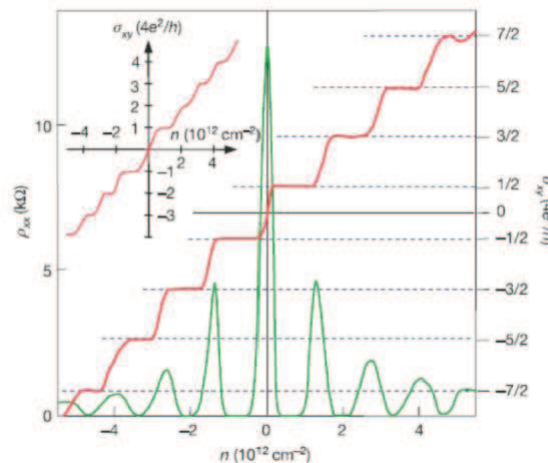


Figura 1.3: Efeito Hall quântico anômalo no grafeno a temperatura de 4 K e campo magnético de 14 T como função da concentração dos portadores de carga. (inserção)  $\sigma_{xy}$  para uma bicamada de grafeno, onde a usual quantização ocorre em valores inteiros de  $4e^2/h$ . Figura adaptada de [9].

a desordem e são, sob certas circunstâncias, imunes a efeitos de localização observados em elétrons ordinários [1]. Medidas nesse material revelam uma alta mobilidade mesmo em temperatura ambiente. Materiais de largo emprego na indústria de semicondutores, como silício (Si) e o arseneto de gálio (GaAs), têm mobilidade à temperatura ambiente aproximadamente 130 e 25 vezes menores, respectivamente, que a do grafeno. Isso torna o grafeno um material muito promissor para a construção de dispositivos eletrônicos.

O leque das propriedades e das aplicações do grafeno é extenso e aqui apenas citamos superficialmente algumas (para mais detalhes ver [1]). Devido a isso existe hoje um grande ânimo no estudo desse material.

## 1.2 Bicamada de Grafeno

Não só a monocamada de grafeno apresenta extraordinárias características, multicamadas de grafeno, que consistem de poucas camadas de grafenos acopladas por ligações de Van-der-Waals, apresentam novas e interessantes propriedades não observadas em monocamadas. Em particular, a bicamada de grafeno (BG) exibe um espectro aproximadamente parabólico, ainda que sem gap, nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ . Isso é uma consequência da interação inter-camadas e das simetrias do sistema.

Estudos recentes mostraram que o espectro da BG é fortemente modificado por dopagem química ou pela aplicação de um campo elétrico externo de forma que o espectro adquire um

*gap* devido à quebra de simetria de inversão das camadas. Tal *gap* pode ser controlado através do nível de dopagem ou da intensidade do campo elétrico aplicado [10]. Em uma monocamada também se observa o aparecimento de um *gap*, porém este surge devido a efeitos das bordas em nanofitas de carbono (grafeno com uma das dimensões do plano de átomos muito menor do que a outra). Porém tal *gap* depende fortemente do tipo da borda da nanofita, podendo ser *armchair* ou *zigzag*. A dificuldade no controle das desordens nas bordas de nanofitas torna difícil o controle de tal *gap*, fato que não é observado em BG devido à origem do *gap*. Além disso, também foi mostrado que é possível confinamento eletrostático dos portadores de cargas em dispositivos quânticos como pontos [11, 12] e anéis [13, 14]. Em uma monocamada tal confinamento mostra-se impossível devido ao tunelamento Klein. Recentemente foi mostrado que, em uma BG, além do confinamento convencional há a possibilidade de um confinamento topológico, no qual o potencial de confinamento muda de sinal na região de confinamento [15, 16, 17, 18]. Os estados provenientes do confinamento topológico possuem similaridades com estados superficiais de isolantes topológicos [19, 20]. Tais resultados mostram a possibilidade da fabricação de nanoestruturas eletrostáticas controláveis a base de bicamadas de grafeno.

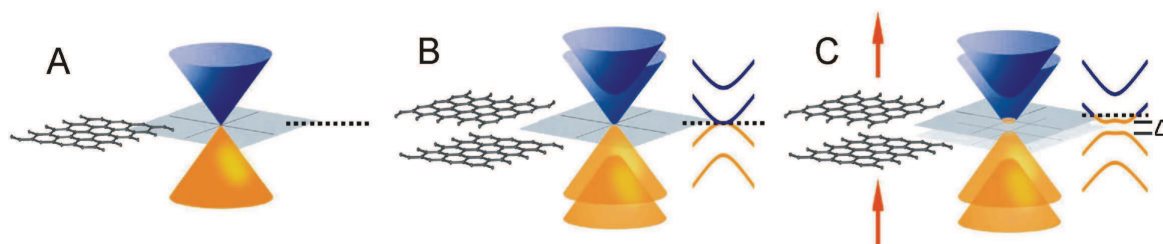


Figura 1.4: A) Dispersão linear sem *gap* do grafeno para energias próximas do nível de Fermi. B) Dispersão aproximadamente parabólica sem *gap* para uma bicamada para energias próximas do nível de Fermi. C) Surgimento de um *gap*  $\Delta$  na dispersão da BG ao se aplicar um campo elétrico perpendicular às camadas.

### 1.3 Fabricação de folhas de grafeno

Grande parte da pesquisa experimental acadêmica feita sobre grafeno utiliza amostras obtidas por meio de clivagem micromecânica do cristal de grafite, a mesma técnica utilizada para isolar a primeira folha de grafeno observada em laboratório [6]. Esse método é semelhante a escrever com o lápis em uma folha. Ressalva: não se utiliza um lápis, mas, sim, grafite de alta qualidade, da qual se extrai planos de grafeno com uma fita adesiva. Posteriormente, passa-se a friccionar a amostra de grafeno no substrato de óxido de silício. No substrato de silício os filmes de grafite ficam depositados em diferentes números de camadas de grafeno (ou seja, em diferentes espessuras) em uma macroregião. Filmes de grafite com espessura menor que

50nm são transparentes à luz visível, porém sobre a superfície de silício eles são facilmente observados devido a um fenômeno de interferência semelhante ao que acontece em uma bolha de sabão. O substrato de  $\text{SiO}_3$  com uma espessura de 300 nm possui uma coloração violeta quando observado pelo microscópio ótico. Com o acréscimo da espessura proveniente dos filmes de grafite observa-se uma mudança na coloração para azul na região onde esses filmes se localizam. Quanto mais finos são os filmes mais tênue é a mudança na coloração, até que filmes com espessuras menores que 1,5 nm não são mais observados por esse método. Através da microscopia eletrônica de varredura de alta resolução esses filmes podem ser claramente identificados. Então, nas regiões em que os filmes de grafite possuem espessura menor que 1,5 nm aplica-se microscopia eletrônica de varredura para localizar uma camada de grafeno isolada [21].

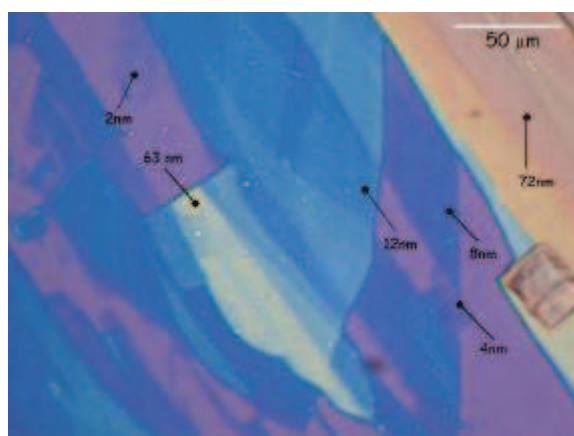


Figura 1.5: Foto de filmes de grafite (azul) com várias espessuras,  $d$ , depositados em um substrato de  $\text{SiO}_3$  (violeta). Os valores indicados das espessuras foram medidos através de microscopia de força atômica. Observe que a área em que  $d \approx 2\text{nm}$  no canto superior esquerdo a mudança na coloração é extremamente tênue. Figura adaptada de [21].

Apesar de simples e de ser largamente utilizado, o processo de fabricação de grafeno através da clivagem micromecânica é ineficiente e portanto inadequado para a produção em larga escala. Por essa razão, surgiu um grande interesse em novas formas de fabricação. Outra maneira de produzir grafeno – no caso, utilizando carbeto de silício ( $\text{SiC}$ ) – foi realizada pelo grupo do físico Walter de Heer, do Instituto de Tecnologia da Geórgia (Estados Unidos). A equipe partiu de um cristal de  $\text{SiC}$ , esquentando-o a altas temperaturas. Nesse processo, átomos de silício são removidos do cristal e, na superfície deste último são criadas camadas de grafeno. Esse procedimento abre a perspectiva de produção do grafeno em maior escala, fundamental para avanços tecnológicos e aplicações. Existem atualmente um grande esforço para o desenvolvimento de métodos de produção de grafeno em grandes quantidades e espera-se que esses métodos levem à produção de forma barata e em escala industrial nos próximos anos.

## 1.4 Sumário

No capítulo subsequente desenvolveremos o modelo matemático que descreve o comportamento dos portadores de carga no grafeno e na BG através do Hamiltoniano *tight-binding* considerando apenas transições entre primeiros vizinhos. Aplicaremos tal modelo ao caso em que apenas existe a BG pura, mostrando o comportamento aproximadamente parabólico nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ , assim como aplicaremos ao caso em que existe um campo elétrico uniforme externo perpendicular à BG, mostrando o aparecimento de um *gap* controlável.

No capítulo 3, aplicaremos o modelo desenvolvido no capítulo 2 aos sistemas de interesses deste trabalho, resolvendo analiticamente a equação de autovalor do Hamiltoniano. Demonstramos a existência de estados ligados dos portadores de carga para um potencial *kink* de forma circular (anel) em uma bicamada de grafeno. Semelhantemente também demonstramos a existência de tais estados para um potencial consistindo de dois anéis concêntricos, ao qual denominamos por anel duplo. Incluímos ainda através do cálculo numérico efeitos de uma interface gradual entre os *kink's*

No capítulo 4 apresentaremos e discutiremos os resultados obtidos com o espectro de energia como função dos parâmetros geométricos dos potenciais eletrostáticos ou da amplitude do potencial degrau.

E finalmente no último capítulo serão apresentadas as conclusões deste trabalho, bem como algumas perspectivas para trabalhos futuros.

## 2 *Modelo Teórico*

Neste capítulo desenvolveremos uma teoria capaz de calcular a estrutura de bandas ou as sub-bandas em um cristal de grafeno e uma bicamada de grafeno para energias próximas do nível de Fermi. Para fazer isso trataremos os cristais usando o modelo *tight-binding*. Nesse modelo considera-se que o espectro de energia do átomo é apenas alterado devido à superposição entre as funções de onda atômicas mais energéticas do átomo e seus primeiros vizinhos.

Essa aproximação é mais utilizada para descrever as bandas de energias de cristais dos metais de transição ou para descrever a estrutura eletrônica de isolantes. De fato o modelo *tight-binding* possui uma precisão inferior a modelos que utilizam primeiros princípios como o DFT [22]. Porém para o grafeno o modelo *tight-binding* exibe uma favorável descrição da estrutura de banda para certos pontos relevantes da zona de Brillouin em que estamos mais interessados [23]. Observe na Figura 2.1, onde o modelo *tight-binding* e um modelo *AB initio* são comparados, próximo ao ponto de Dirac  $\mathbf{K}$  os modelos exibem uma excelente concordância.

### 2.1 Modelo Tight-Binding no Grafeno

No grafeno, se tomarmos a base da rede como sendo apenas um átomo de carbono, obtemos uma rede planar hexagonal. Essa rede não é uma rede de Bravais. Porém podemos obter uma rede de Bravais triangular tomando a base sendo formada por dois átomos de carbono. Os vetores primitivos dessa rede são dados por,

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}) \text{ e } \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}),$$

onde  $a \approx 1,42 \text{ \AA}$  é a distância entre dois átomos de carbono. Na base constituída por dois átomos, um ocupa um ponto da rede e o outro átomo é deslocado do primeiro pelo vetor  $-\delta_3 = a(1, 0)$ . A rede recíproca é formada pelos vetores,

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}) \text{ e } \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}).$$

Os átomos que ocupam os pontos da rede triangular dizemos que são átomos pertencentes

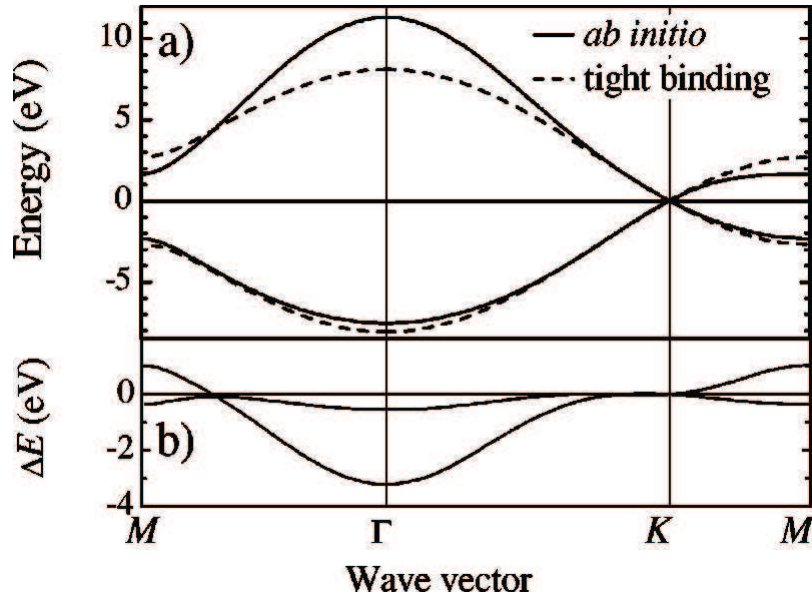


Figura 2.1: Dispersão do grafeno obtida através dos modelos *tight-binding* e *AB initio*. a) A dispersão obtida através de cálculos *AB initio* é mostrada em linhas cheias, e a obtida pelo *tight-binding* é mostrada em linhas pontilhadas. A dispersão do *tight-binding* é calculada para os melhores valores dos parâmetros do *tight-binding* que interpolam a dispersão do *AB initio*. b) Diferença entre as dispersões. Figura adaptada de [23].

a subrede A, pois eles constituem a mesma rede triangular com a base possuindo apenas um átomo. Os demais átomos também constituem uma rede triangular, com um átomo por base, deslocada da primeira pelo vetor  $-\delta_3$ . Dizemos que tais átomos pertencem à subrede B.

Consideraremos que apenas os elétrons  $\pi$  são responsáveis pelas propriedades eletrônicas do grafeno e não levaremos em conta interações elétron-elétron ou spin-órbita. O Hamiltoniano *tight-binding* para um elétron  $\pi$  no grafeno escrito no formalismo de segunda quantização, incluindo apenas o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos, é escrito como [24]:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} t(a_i^\dagger b_j + b_i^\dagger a_j), \quad (2.1)$$

onde  $i$  percorre todos os pontos da rede e  $j$  apenas os primeiros vizinhos do ponto  $i$ ;  $t$  ( $\approx 2,8$  eV) é o parâmetro de *hopping* entre os primeiros vizinhos; o operador  $a_i$  ( $a_i^\dagger$ ) destrói (cria) um elétron no estado  $2p_z$  (estado dos elétrons  $\pi$ ) no ponto  $i$  da subrede A (uma análoga definição para os operadores  $b_i$  e  $b_i^\dagger$  é usada para a subrede B). Excluímos do Hamiltoniano termos como  $\sum_i \epsilon_A a_i^\dagger a_i$  ou  $\sum_i \epsilon_B b_i^\dagger b_i$ , pois para o grafeno  $\epsilon_A = \epsilon_B$ , portanto apenas contribuem deslocando o espectro como um todo para energias mais altas [8].

No modelo *tight-binding*, supomos que os autoestados da energia são combinações lineares

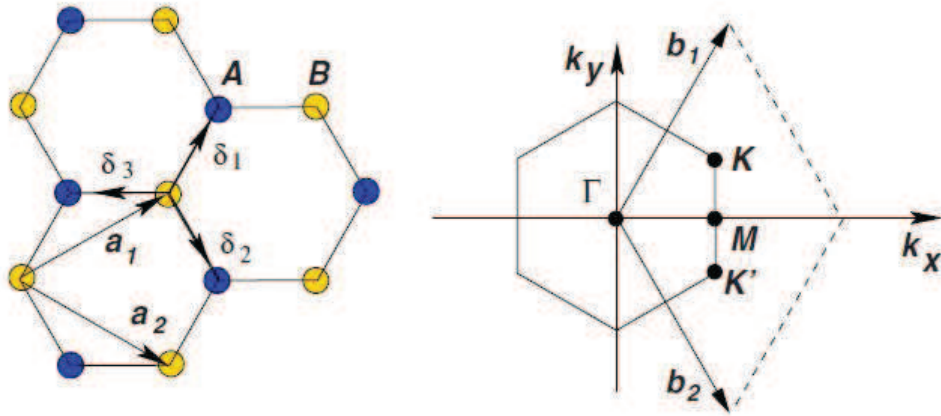


Figura 2.2: Rede hexagonal do grafeno. Esquerda: a rede do grafeno representada como duas redes triangulares cujos os vetores primitivos são  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$ . Os vetores  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  e  $\delta_3$  localizam os primeiros vizinhos para os átomos que pertencem à subrede B. Para os átomos que pertencem à subrede A os primeiros vizinhos estão nas posições  $-\delta_1$ ,  $-\delta_2$  e  $-\delta_3$ . Direita: zona de Brillouin. Figura adaptada de [1].

dos estados orbitais,

$$\Phi = \sum_{\vec{R}} d_{\vec{R}} \chi(\vec{r} - \vec{R}),$$

onde a soma é feita sobre todos os vetores da rede  $\vec{R}$  e  $\chi(\vec{r})$  são os estados  $2p_z$  do carbono. Porém sabemos que um autoestado do Hamiltoniano deve satisfazer o teorema de Bloch, isto é,

$$\Phi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \Phi(\vec{r}).$$

Satisfazendo o teorema de Bloch e a condição de normalização [25], obtemos que,

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \chi(\vec{r} - \vec{R}).$$

No caso do grafeno trataremos com a função tentativa [5],

$$\Psi = A(\vec{k}) \Phi_A + B(\vec{k}) \Phi_B, \quad (2.2)$$

onde,

$$\Phi_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \chi(\vec{r} - \vec{R}_i)$$

onde a soma é feita sobre todos os vetores  $R_i$  que pertencem à subrede  $i$  ( $= A, B$ ). No formalismo de segunda quantização, os estados orbitais são tratados como estados de Fock, isto é, para cada átomo da rede cristalina associamos um espaço de Fock,

$$|\chi(\vec{r} - \vec{R}_A)\rangle = |0, 0, \dots, 1, \dots, 0\rangle_A \otimes |0, 0, \dots, 0\rangle_B,$$

onde o ket  $|\ \rangle_A$  ( $|\ \rangle_B$ ) é o estado de Fock associado a subrede A (B) o qual é obtido fazendo o produto vetorial entre todos os estados de Fock de cada sítio da subrede A (B) e  $\vec{R}_A$  é um vetor arbitrário da subrede A associado a posição em que está o 1 no ket.

Substituindo o estado (2.2) no Hamiltoniano, multiplicando por  $\Phi_i$  e integrando, obtemos que,

$$\begin{bmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A(\vec{k}) \\ B(\vec{k}) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A(\vec{k}) \\ B(\vec{k}) \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

onde,

$$H_{i,j} = \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle \quad \text{e} \quad S_{i,j} = \langle \Phi_i | \Phi_j \rangle.$$

Para calcularmos os elementos  $H_{i,j}$  e  $S_{i,j}$ , devemos calcular as integrais de superposição  $\langle \chi(\vec{r} - \vec{R}) | \chi(\vec{r} - \vec{R}') \rangle$ . Na aproximação *tight-binding* diremos que,

$$\langle \chi(\vec{r} - \vec{R}) | \chi(\vec{r} - \vec{R}') \rangle = \int \chi(\vec{r} - \vec{R}) \chi(\vec{r} - \vec{R}') d^3x = \begin{cases} 1 & \text{se } \vec{R} = \vec{R}' \\ 0 & \text{qualquer outro caso,} \end{cases} \quad (2.4)$$

onde  $\vec{R}$  e  $\vec{R}'$  são quaisquer vetores das subredes. A condição (2.4) estabelece que a superposição entre dois estados  $2p_z$  entre dois carbonos diferentes quaisquer do cristal sempre é nula. Apesar dessa condição ser demasiadamente restritiva, verifica-se que o método ainda é aplicável com satisfatoriedade pois as funções de onda do estado  $2p_z$  decrescem rapidamente quando distanciamos do núcleo. Através de (2.4) acha-se que,

$$S_{i,j} = \delta_{i,j}.$$

Agora calcularemos os elementos  $H_{i,j}$ . Em primeiro lugar, por simetria devemos ter que  $H_{AA} = H_{BB}$ , pois os resultados não podem depender de qual subrede chamamos de A ou B. Observe ainda que como o Hamiltoniano é hermitiano, então  $H_{AB} = \overline{H_{BA}}^1$ . Isto é, apenas precisamos calcular os elementos  $H_{AA}$  e  $H_{AB}$ :

$$\begin{aligned} H_{AA} &= \frac{-t}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( \sum_{\vec{R}_A} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_A} \langle \chi(\vec{r} - \vec{R}_A) | \right) (a_i^\dagger b_j + b_i^\dagger a_j) \left( \sum_{\vec{R}'_A} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'_A} | \chi(\vec{r} - \vec{R}'_A) \rangle \right) \right] \\ &= \frac{-t}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\vec{R}_A, \vec{R}'_A} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_A} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}'_A} \left( \langle \chi(\vec{r} - \vec{R}_A) | a_i^\dagger b_j | \chi(\vec{r} - \vec{R}'_A) \rangle + \langle \chi(\vec{r} - \vec{R}_A) | b_i^\dagger a_j | \chi(\vec{r} - \vec{R}'_A) \rangle \right), \end{aligned}$$

observe que o primeiro termo do parêntese anula-se pois,

$$b_j | \chi(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle \equiv 0,$$

<sup>1</sup>  $\bar{z}$  é o complexo conjugado de  $z$ .

qualquer que seja  $j$  ou o vetor  $\vec{R}_A$  da subrede A. O segundo termo do parêntese também se anulará, pois o operador  $b_j^\dagger a_i$  “destruirá” o elétron nos estado da subrede A e criará nos estados da subrede B, então obteremos um somatório de integrais de superposição entre estados de subredes distintas que são, devido a condição (2.4), todos nulos. Logo,

$$H_{AA} = H_{BB} = 0.$$

Do mesmo modo temos que,

$$H_{AB} = \frac{-t}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( \sum_{\vec{R}_A} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_A} \langle \chi(\vec{r} - \vec{R}_A) | \right) (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i) \left( \sum_{\vec{R}_B} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_B} | \chi(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \right) \right],$$

o segundo termo da somatório anula-se pois,

$$a_j | \chi(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \equiv 0,$$

então,

$$H_{AB} = \frac{-t}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \left( \sum_{\vec{R}_A} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_A} \langle \chi(\vec{r} - \vec{R}_A) | \right) a_i^\dagger b_j \left( \sum_{\vec{R}_B} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_B} | \chi(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle \right) \right]. \quad (2.5)$$

Para os átomos que pertencem à subrede A os primeiros vizinhos são localizados pelos vetores,

$$-\delta_1 = -\frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad -\delta_2 = -\frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad -\delta_3 = a(1, 0).$$

Explicitando o somatório em  $j$  na equação (2.5), obtemos,

$$H_{AB} = \frac{-t}{N} \sum_i \left[ \left( \sum_{\vec{R}_A} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_A} \langle \chi(\vec{r} - \vec{R}_A) | \right) a_i^\dagger \left( e^{-i\vec{k}\cdot\delta_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\delta_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\delta_3} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} | 0 \rangle \right],$$

onde  $|0\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle_A \otimes |0, 0, \dots, 0\rangle_B$  é o estado de vácuo. Observe que,

$$a_i |0\rangle = \chi(\vec{r} - \vec{R}_i),$$

logo,

$$\begin{aligned} H_{AB} &= \frac{-t}{N} \sum_i \left[ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \left( e^{-ik_x a/2} e^{-ik_y \sqrt{3}a/2} + e^{-ik_x a/2} e^{ik_y \sqrt{3}a/2} + e^{ik_x a} \right) \langle \chi(\vec{r} - \vec{R}_i) | \chi(\vec{r} - \vec{R}_i) \rangle \right] \\ &= \frac{-t}{N} \sum_i g(\vec{k}), \end{aligned}$$

onde

$$g(\vec{k}) = e^{ik_x a} + 2e^{-ik_x a/2} \cos(k_y \sqrt{3}a/2). \quad (2.6)$$

Finalmente achamos que,

$$H_{AB} = -tg(k).$$

Então, substituindo  $H_{i,j}$  na equação (2.3) obtemos o sistema,

$$\begin{bmatrix} 0 & -tg(\vec{k}) \\ -tg^*(\vec{k}) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A(\vec{k}) \\ B(\vec{k}) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} A(\vec{k}) \\ B(\vec{k}) \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Para obtermos soluções não triviais ( $A(\vec{k}) = B(\vec{k}) = 0$ ) a condição

$$\det(H - E) = 0, \quad (2.8)$$

deve ser satisfeita. A condição (2.8) é conhecida como equação secular e através dela obtemos o espectro mostrado no primeiro capítulo,

$$E(\mathbf{k}) = \pm t |g(\vec{k})| = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_y a / 2) \cos(3k_x a / 2)}.$$

### 2.1.1 Modelo Contínuo

A abordagem que nos conduziu a equação secular (2.8) mostra-se demasiadamente complicada quando incluímos potenciais eletrostáticos externos. Então podemos simplificar o modelo se considerarmos apenas a vizinhança dos pontos  $\mathbf{K}$  ou  $\mathbf{K}'$ . A aproximação é conhecida como modelo contínuo. Para isso, expandiremos a função  $g(\vec{k})$  em torno do ponto  $\mathbf{K}$ :

$$g(\vec{k}) \approx g(\vec{K}) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_x} \right|_{\vec{k}=\vec{K}} (k_x - K_x) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_y} \right|_{\vec{k}=\vec{K}} (k_y - K_y) + O(\Delta k^2).$$

Calculando as derivadas de  $g(\vec{k})$  e lembrando que  $g(\vec{K}) = 0$ , obtemos,

$$g(\vec{k}) \approx -\frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) e^{i\pi/6}, \quad (2.9)$$

onde  $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{K}$ . Substituindo (2.9) em (2.7) obtemos que,

$$\begin{bmatrix} 0 & \hbar v_F (k'_x - ik'_y) \\ \hbar v_F (k'_x + ik'_y) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-i\pi/12} A(\vec{k}' + \vec{K}) \\ e^{i\pi/12} B(\vec{k}' + \vec{K}) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} e^{-i\pi/12} A(\vec{k}' + \vec{K}) \\ e^{i\pi/12} B(\vec{k}' + \vec{K}) \end{bmatrix}, \quad (2.10)$$

onde  $\hbar v_F = 3at/2$ . Definiremos uma transformada de Fourier inversa bidimensional como,

$$f(\vec{r}) = \mathbb{F}^{-1}[f'(\vec{k})] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} f'(\vec{k}') d^2 k'.$$

Pode-se mostrar que essa transformada possui a seguinte propriedade [26],

$$-i \frac{\partial}{\partial x_i} f(\vec{r}) = \mathbb{F}^{-1} [k'_i f'(\vec{k}')].$$

Aplicando a transformada inversa as equações derivadas de (2.10), obtemos que,

$$\begin{bmatrix} 0 & v_F \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) - i \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \\ v_F \left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + i \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

onde

$$\psi_A(\vec{r}) = \mathbb{F}^{-1} [e^{-i\pi/12} A(\vec{k}' + \vec{K})] \quad \text{e} \quad \psi_B(\vec{r}) = \mathbb{F}^{-1} [e^{i\pi/12} B(\vec{k}' + \vec{K})].$$

O modelo contínuo consiste em resolvermos o sistema de equações diferenciais definidos por (2.11) ao invés de resolvermos a equação secular (2.8).

Observe que podemos escrever a equação (2.11) como,

$$H [\Psi] = E [\Psi],$$

onde,

$$[\Psi] = \begin{bmatrix} |\psi_A\rangle \\ |\psi_B\rangle \end{bmatrix},$$

onde  $|\psi_A\rangle$  ( $|\psi_B\rangle$ ) é o ket associado a função  $\psi_A(\vec{r})$  ( $\psi_B(\vec{r})$ ), e,

$$H = v_F \begin{bmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{bmatrix} = v_F \sigma \cdot \mathbf{p},$$

onde  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  são as matrizes de Pauli. Observe que o formalismo é o mesmo de um férmion relativístico com massa nula, em duas dimensões e com a velocidade da luz  $c$  substituída pela velocidade de fermi  $v_F \approx 10^6$  m/s. Por esse motivo é dito frequentemente que os elétrons no grafeno comportam-se como férmions ultrarelativísticos sem massa. O grau de liberdade de spin, descrito pelas matrizes de Pauli,  $\sigma_i$ , é chamado de *pseudospin* para distingui-lo do spin real do elétron que não está sendo considerado nessa abordagem e o estado  $[\Psi]$ , é chamada de *pseudospinor*. Para aproximarmos em torno de  $\mathbf{K}'$  ou invés do ponto  $\mathbf{K}$ , basta substituir  $k_y \rightarrow -k_y$ .

### 2.1.2 Inclusão de Potenciais Externo

Nos últimos cálculos desconsideramos potenciais eletrostáticos externos e tratamos apenas com Hamiltoniano do cristal. A inclusão de potenciais eletrostáticos externos exige cálculos

bem mais sofisticados e portanto nos limitaremos em apresentar o resultado. O Hamiltoniano do grafeno sujeito a um potencial eletrostático, considerando apenas interações entre primeiros vizinhos e sobre o modelo contínuo nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$  é dado por [27],

$$H = \begin{bmatrix} U & \pi^\dagger \\ \pi & U \end{bmatrix}, \quad (2.12)$$

onde  $U = U(x, y)$  é o potencial externo sobre a folha de grafeno, e o operador  $\pi$  é dado por,

$$\pi = v_F(p_x + ip_y),$$

o qual na representação das posições fica,

$$\pi = -iv_F\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y} \right).$$

O Hamiltoniano opera sobre um *pseudospinor* que, na representação das posições, é dado por,

$$\Psi(x, y) = \begin{bmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \end{bmatrix}, \quad (2.13)$$

onde  $\psi_A(x, y)$  ( $\psi_B(x, y)$ ) é a função envelope das amplitudes de probabilidade associadas à sub-rede A (B). As autoenergias do sistema são encontradas pela equação de autovalor:

$$H\Psi = E\Psi.$$

## 2.2 Modelo Tight-Binding para a Bicamada de Grafeno

Uma bicamada de grafeno (BG) é formada por duas folhas de grafeno acopladas por ligações de Van-der-Waals. Assim como no grafeno dividimos a rede do cristal em subredes. No caso da bicamada de grafeno, dividimos em quatro subredes: duas subredes triangulares para cada folha de grafeno que chamaremos de subredes A e B para uma das folhas e subredes A' e B' para a outra. As duas folhas de grafeno podem ser empilhadas de várias formas, sendo duas mais importantes: AA e AB (também conhecido como empilhamento de Bernal). No empilhamento AA a subrede A' da folha superior se encontra exatamente sobre a subrede A da folha inferior. No caso do empilhamento AB a subrede B' da rede superior se encontra exatamente sobre a rede A da folha inferior. Entretanto, obtém-se uma boa concordância ao se comparar dados experimentais em bicamadas de grafeno produzidas por clivagem micromecânica com os dados teóricos com empilhamento AB [28]. Por isso aqui trataremos com o empilhamento de Bernal.

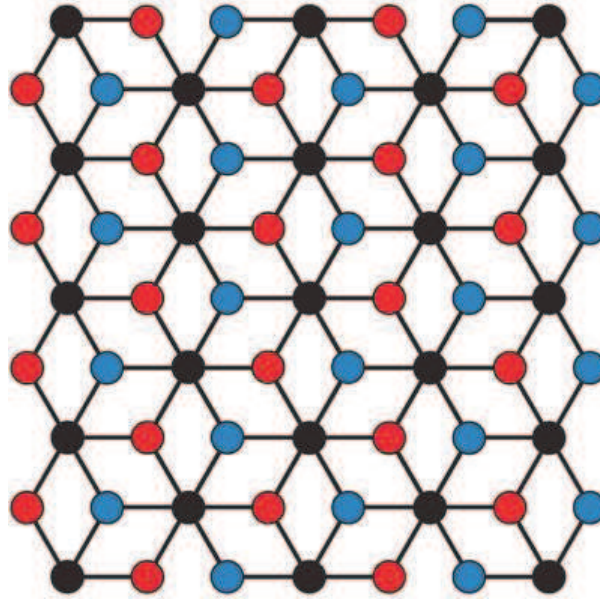


Figura 2.3: Bicamada de grafeno com empilhamento AB vista de cima. Os carbonos em vermelho formam a subrede triangular B da camada inferior. Os carbonos em azul formam a subrede A' da camada superior. Os carbonos em preto são as subredes B' e A que coincidem pois a coordenada  $z$  é ignorada pela perspectiva.

O Hamiltoniano *tight-binding* para um elétron  $\pi$  na BG escrito no formalismo de segunda quantização, incluindo apenas o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos, é escrito como [1]:

$$H = -\gamma_0 \sum_{\langle i,j \rangle, m} (a_{m,i}^\dagger b_{m,j} + b_{m,i}^\dagger a_{m,j}) - \gamma_1 \sum_i (a_{1,i}^\dagger b_{2,i} + b_{2,i}^\dagger a_{1,i}), \quad (2.14)$$

onde  $i$  percorre todos os pontos da rede e  $j$  apenas os primeiros vizinhos do ponto  $i$ ;  $m$  representa os planos (1 para um plano e 2 para o outro);  $\gamma_0 = t$  é o parâmetro de *hopping* entre os primeiros vizinhos do mesmo plano e  $\gamma_1 = t_\perp$  ( $\approx 0,4$  eV) é o parâmetro de *hopping* entre os primeiros vizinhos entre planos diferentes;  $a_{m,i}$  ( $b_{m,i}$ ) destrói (cria) um elétron no estado  $2p_z$  (estado dos elétrons  $\pi$ ) no ponto  $i$  da subrede A (B) do plano  $m$ .

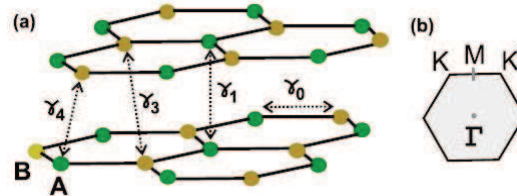


Figura 2.4: a) Rede cristalina de uma BG. Os átomos em verde formam, na folha inferior, a subrede A e na folha superior a subrede B'. Os parâmetros de *hopping* entre os respectivos pontos são mostrados. No presente modelo consideramos  $\gamma_3 = \gamma_4 = 0$ . b) Primeira zona de Brillouin. Figura adaptada de [1].

Seguindo um processo inteiramente análogo ao que foi feito para o grafeno podemos obter o Hamiltoniano para a bicamada considerando apenas interação entre primeiros vizinhos e sobre o modelo contínuo nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$ . O Hamiltoniano é dado por [14]:

$$H = \begin{bmatrix} U_1 & \pi & t_{\perp} & 0 \\ \pi^{\dagger} & U_1 & 0 & 0 \\ t_{\perp} & 0 & U_2 & \pi^{\dagger} \\ 0 & 0 & \pi & U_2 \end{bmatrix}, \quad (2.15)$$

onde  $U_1(x, y)$  e  $U_2(x, y)$  são os potenciais externos sobre as duas camadas de grafeno. O operador  $\pi$  é dado por,

$$\pi = v_F(p_x + ip_y),$$

o qual na representação das posições fica,

$$\pi = -iv_F\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right).$$

Observe ainda que,

$$\pi\pi^{\dagger} = \pi^{\dagger}\pi = -(\hbar v_F)^2 \nabla^2.$$

O Hamiltoniano opera sobre um *pseudospinor* que, na representação das posições, é dado por,

$$\Psi(x, y) = \begin{bmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \\ \psi_{B'}(x, y) \\ \psi_{A'}(x, y) \end{bmatrix}, \quad (2.16)$$

onde  $\psi_A(x, y)$  e  $\psi_B(x, y)$  ( $\psi_{A'}(x, y)$  e  $\psi_{B'}(x, y)$ ) são, respectivamente, às funções envelope das amplitudes de probabilidade associadas as subredes A e B (A' e B') da camada que está submetida ao potencial  $U_1$  ( $U_2$ ). As autoenergias do sistema são encontradas pela equação de autovalor:

$$H\Psi = E\Psi. \quad (2.17)$$

Recentes experimentos mostram que esse Hamiltoniano fornece uma boa descrição de um BG [29].

### 2.2.1 Diferença de Potencial Homogênea e Gap controlável

Suponha que a BG é colocada entre um capacitor de placas paralelas submetidos à uma diferença de potencial (ddp) constante igual  $2V$  (ver Figura 2.5). Um campo elétrico uniforme

atravessas perpendicularmente as camadas e portanto os potenciais são das por,  $U_1(\vec{r}) = V$  e  $U_2(\vec{r}) = -V$ .

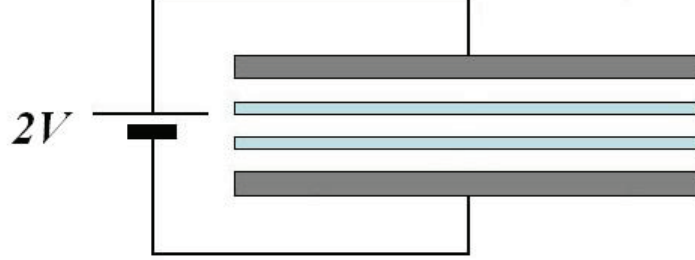


Figura 2.5: Esquema de uma bicamada de grafeno submetida a um campo elétrico uniforme induzido através de um capacitor. As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e o capacitor em cinza.

A equação (2.17) nos conduz ao sistema de equações diferenciais,

$$\pi\psi_B + (U_1 - E)\psi_A + t_{\perp}\psi_{B'} = 0 \quad (2.18)$$

$$\pi^{\dagger}\psi_A + (U_1 - E)\psi_B = 0 \quad (2.19)$$

$$\pi^{\dagger}\psi_{A'} + (U_2 - E)\psi_{B'} + t_{\perp}\psi_A = 0 \quad (2.20)$$

$$\pi\psi_{B'} + (U_2 - E)\psi_{A'} = 0 \quad (2.21)$$

desacoplando tal sistema para  $U_1(\vec{r}) = -U_2(\vec{r}) = V$  constantes, obtemos a seguinte equação diferencial,

$$\nabla^2\nabla^2\psi_A + 2(V^2 + E^2)\nabla^2\psi_A + [(V^2 - E^2)^2 + t^2(V^2 - E^2)]\psi_A = 0, \quad (2.22)$$

onde cometemos um abuso de notação expressando as grandezas  $E/\hbar v_F$  e  $V/\hbar v_F$  simplesmente por  $E$  e  $V$  respectivamente (tal notação será adotada no resto do capítulo) e  $t = t_{\perp}/\hbar v_F$ . A equação (2.22) apesar de válida apenas para potenciais constantes, veremos que ela será de grande utilidade no próximo capítulo. As soluções são do tipo,

$$\psi_A = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad (2.23)$$

onde  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  é real. Substituindo (4.1) na equação diferencial (2.22) obtemos quatro bandas de energias:

$$E = \pm\sqrt{V^2 + k^2 + \frac{t^2}{2}} \pm \sqrt{(4V^2 + t^2)k^2 + \frac{t^4}{4}}.$$

Das quatro bandas obtidas estudaremos detalhadamente as que fornecem os menores valores

absolutos das energias. Estas são,

$$E = \pm \sqrt{V^2 + k^2 + \frac{t^2}{2}} - \sqrt{(4V^2 + t^2)k^2 + \frac{t^4}{4}}.$$

Na Figura (2.6) traçamos a dispersão obtida para  $t = 400$  meV e  $V = t/2$ . Observa-se o surgimento de um *gap*  $\Delta$ . Traçamos ainda na Figura (2.7) a mesma dispersão para  $V = 0$  onde o *gap* torna-se nulo. O *gap* é exatamente igual duas vezes o valor mínimo da energia da banda superior, isto é,

$$\Delta = 2 \frac{|V|t}{\sqrt{(4V^2 + t^2)}}, \quad (2.24)$$

onde vemos que o *gap* pode ser controlado, controlando a ddp aplicada sobre a bicamada,  $2V$ . Na Figura (2.8) traçamos o gráfico do *gap* como função da metade do potencial aplicado entre as camadas,  $V$ . Observa-se o surgimento de um *gap* para  $V \neq 0$ .

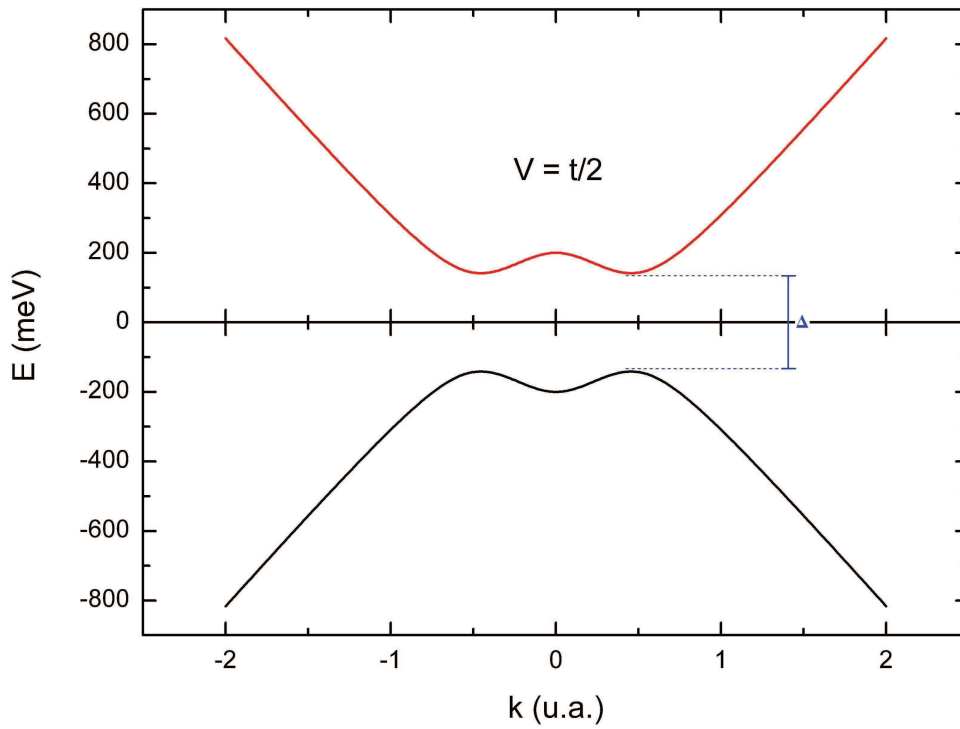


Figura 2.6: Dispersão para uma bicamada de grafeno submetida à uma ddp constante  $2V = t$  para  $t = 400$  meV. Em preto são as energias da banda de valências e em vermelho as energias da banda de condução. Observe um aparecimento de um *gap*  $\Delta$ .

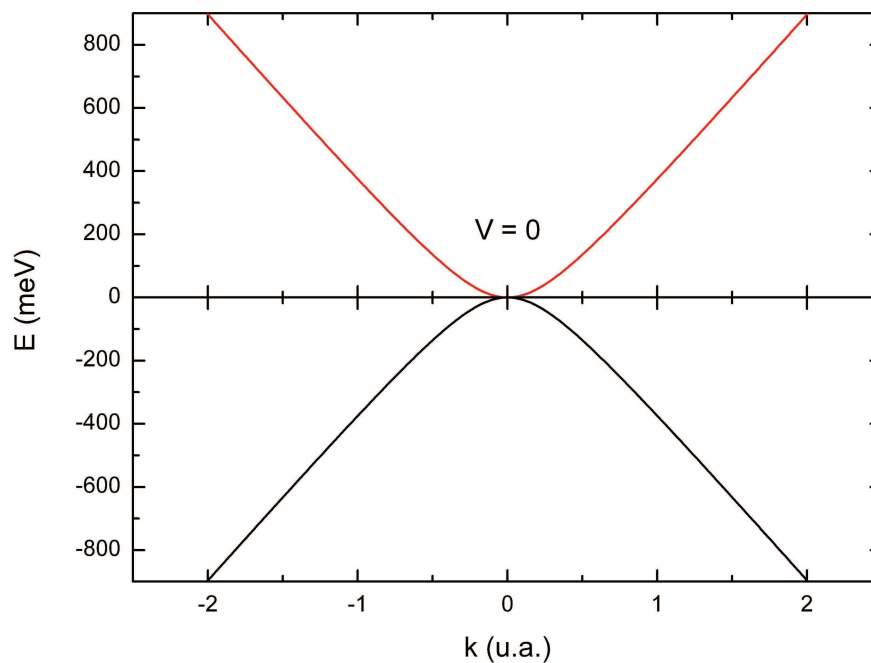


Figura 2.7: Dispersão na ausência de campo elétrico para uma bicamada de grafeno. Em preto são as energias da banda de valências e em vermelho as energias da banda de condução.

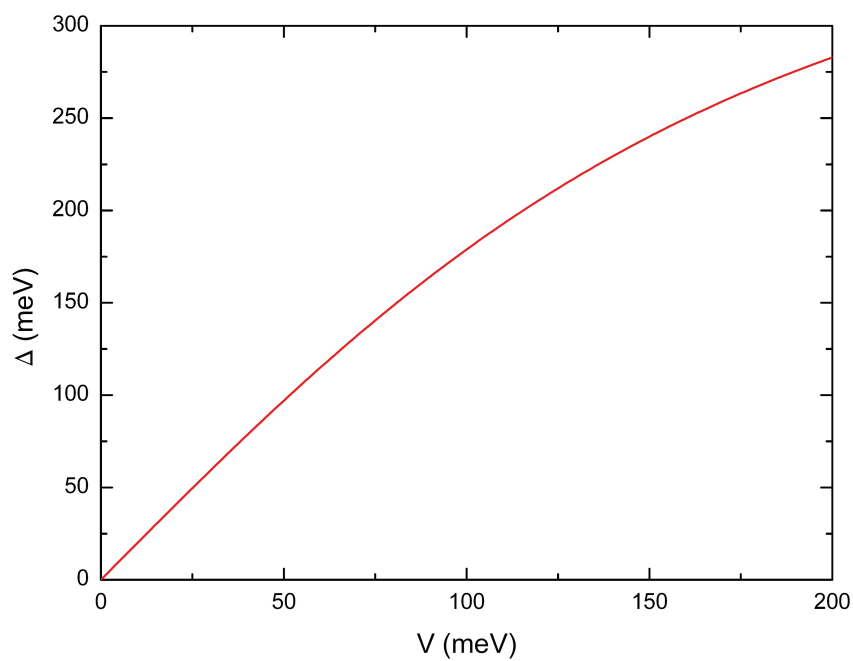


Figura 2.8: Dependência do gap  $\Delta$  em função da metade da ddp entre as camadas  $V$ .

### 3 *Confinamento topológico em bicamada de grafeno*

Nos últimos anos, dispositivos e estruturas quânticas, tais como poços, fios e pontos quânticos, vêm sendo extensivamente estudadas tanto teoricamente quanto experimentalmente pela comunidade científica [30, 31]. Tais estudos são estimulados pela vasta demanda por dispositivos eletrônicos mais eficientes, rápidos e miniaturizados. Dentre estes, os anéis quânticos constituem uma importante classe de dispositivos. Eles permitem a observação de efeitos de coerência de fase quântica no transporte de carga, tais como o efeito Aharonov-Bohm e Aharonov-Casher [13]. Muitos estudos foram feitos em anéis quânticos constituído por semicondutores e espera-se sua aplicação em futuros dispositivos eletrônicos quânticos.

Aplicando uma diferença de potencial (ddp) inhomogênea em uma bicamada de grafeno, pode-se confinar espacialmente os portadores de carga para energias próximas do nível de Fermi [12, 13, 14]. No entanto, além de um confinamento convencional, há a possibilidade de um confinamento *topológico*, no qual a ddp aplicada sobre a bicamada muda de sinal na região de confinamento [15, 16, 17, 18] gerando um potencial sobre as camadas que denominamos potencial *kink*. Um exemplo de tal potencial foi estudado por I. Martín *et al.*: foi estudado uma ddp gerada por um campo elétrico o qual era uniforme, perpendicular a BG em um semiplano e no semiplano complementar o campo era oposto ao primeiro (ver Figura 3.1). Martín tratou com vários potenciais gerados por tal configuração: primeiramente, analiticamente com um potencial *kink* que mudava abruptamente de sinal (potencial *kink* abrupto) e em seguida, numericamente com potenciais em que a mudança de sinal acontecia suavemente (potencial *kink* suave). Em seus resultados, os autores estudaram um novo tipo de estados quirais unidimensionais com energia nula (1D *chiral zero modes*) que são criados por tal configuração. O espectro próximo do ponto **K** obtido é mostrado na Figura 3.2.

Os gráficos (a) e (c) da Figura 3.2 mostram o espectro para um potencial *kink* abrupto (linha pontilhada) e um potencial *kink* suave (linha sólida). No gráfico (c) a mudança do sinal do *kink* suave se dá de forma mais lenta do que no gráfico (a), por isso, em (a), as curvas

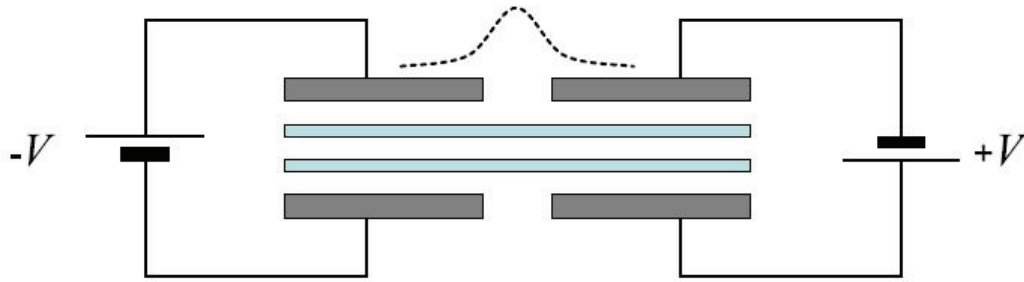


Figura 3.1: Esquema de um potencial *kink* induzido em uma BG através de dois capacitores.

As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e os capacitores em cinza. Em linha pontilhada mostra um esboço dos estados confinado na direção perpendicular a direção em que há a troca de sinal. Figura adaptada de [15].

do *kink* abrupto e suave se assemelham mais do que as curvas em (c). Em (c) observa-se ainda o surgimento de novas subbandas no espectro do *kink* suave. O gráfico (b) mostra o espectro para um potencial *kink* e um *antikink*, o qual é o simétrico aditivo do potencial *kink*. Observe que, para os confinamentos topológicos, gráficos (a),(b) e (c), o espectro é ímpar, isto é,  $E(p_y) = -E(-p_y)$  e possuem dois 1D *chiral zero modes*, ambos com velocidade de propagação negativa. Tais estados surgem devido a natureza topológica do confinamento. Em (d) é mostrado o espectro de um confinamento convencional (não topológico) onde não se observa tais estados. Para se obter o espectro próximo do ponto  $\mathbf{K}'$  basta substituir  $p_y$  por  $-p_y$ . Nos gráficos da Figura 3.2 tal substituição é equivalente a refletir as curvas em relação ao eixo das ordenadas, portanto, do gráfico (b), vemos que o espectro nas proximidades ponto  $\mathbf{K}'$  é igual ao espectro do potencial *antikink* nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$ . Isso mostra que tal sistema possui dois 1D *chiral zero modes* por vale (pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ ) que se propagando na mesma direção e sentido, porém, estados de vales diferentes se propagam em sentidos contrários. Esses estados possuem implicações na *vallleytronics*<sup>1</sup> [32]: como esses estados possuem direção de propagação determinadas pelo vale que se encontram, então um “filtro de vale” pode ser feito aplicando uma diferença de potencial ao longo do *kink*, apenas elétrons de um dos vales vão se propagar, os elétrons do outro vale serão “filtrados”.

Em nossos trabalho tratamos com potenciais de confinamento topológico que possuem simetria polar, isto é, a mudança de sinal no potencial se dá na direção radial e não na direção axial como nos trabalhos do I. Martin. Esse potenciais dão origem a anéis quânticos na BG.

<sup>1</sup>Proposta de utilização dos graus de liberdade dos vales para funcionalidades eletrônicas

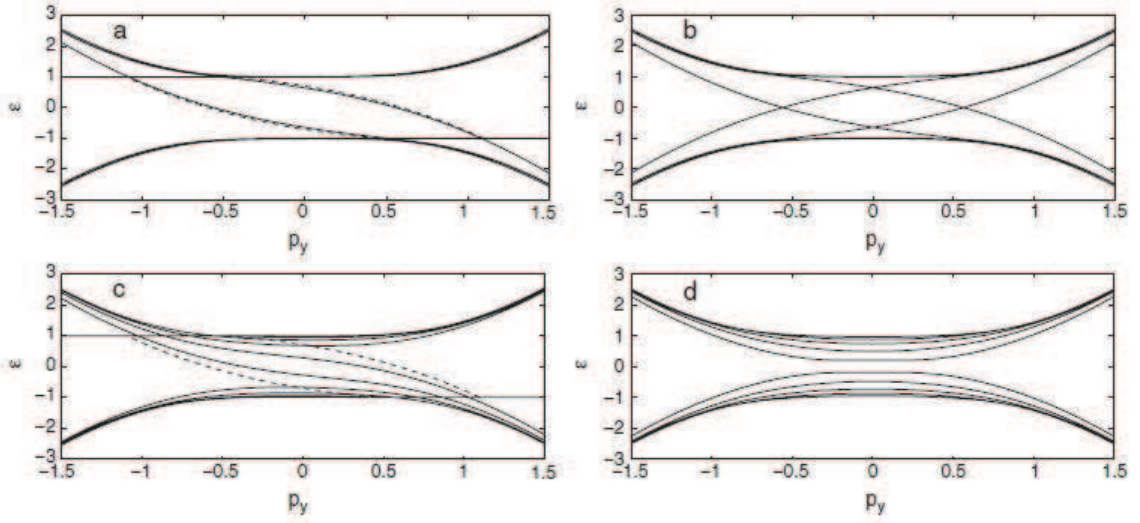


Figura 3.2: Espectro de energia como função do momento na direção  $y$ . O estado é confinado espacialmente na direção  $x$ . (a) O espectro obtido para um potencial *kink* abrupto (linha pontilhada) o obtido com um potencial *kink* suave proporcional a  $V \tanh(x/l)$  para  $l = 0, 5$ . (b) O espectro para um potencial *kink* abrupto e um *antikink*, o qual é o simétrico aditivo do potencial *kink*. (c) Mesmo que em (a) para  $l = 4$ , o qual torna a troca de sinal mais lenta. (d) É apresentado o espectro de um confinamento convencional (não topológico). Figura adaptada de [15].

### 3.1 Diferença de Potencial Homogênea em Coordenadas Polares

Na Seção 2.2.1 resolvemos a equação de autovalor do Hamiltoniano para potenciais dados por  $U_1(\vec{r}) = -U_2(\vec{r}) = V$  constantes (ddp homogênea) em coordenadas cartesianas. Nesta seção faremos o mesmo, porém, como os sistemas físicos que estudaremos em seguida possuem simetria polar, resolveremos a mesma equação de autovalor em coordenadas polares. O Hamiltoniano próximo do ponto  $\mathbf{K}$  da primeira zona de Brillouin considerando apenas transição entre primeiros vizinhos pode ser escrito como:

$$H = \begin{bmatrix} \widetilde{U}_1 & \pi & \tilde{t} & 0 \\ \pi^\dagger & \widetilde{U}_1 & 0 & 0 \\ \tilde{t} & 0 & \widetilde{U}_2 & \pi^\dagger \\ 0 & 0 & \pi & \widetilde{U}_2 \end{bmatrix}, \quad (3.1)$$

onde  $\widetilde{U}_1(x, y)$  e  $\widetilde{U}_2(x, y)$  são os potenciais externos sobre as duas camadas de grafeno. Utilizamos as grandezas com um til em cima para diferenciar das grandezas mais convenientes que serão definidas a seguir. Em coordenadas polares os operadores  $\pi$  e  $\pi^\dagger$  podem ser escritos

como:

$$\pi = -i\hbar v_F e^{i\theta} \left( \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

$$\pi^\dagger = -i\hbar v_F e^{-i\theta} \left( \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \right).$$

Demonstra-se que

$$\pi\pi^\dagger = \pi^\dagger\pi = -(\hbar v_F)^2 \nabla^2 = -(\hbar v_F)^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right).$$

A equação de autovalor da Hamiltoniana,  $H\Psi = \tilde{E}\Psi$ , conduz ao seguinte sistema de equações diferenciais acopladas:

$$\pi\psi_B + (\tilde{U}_1 - \tilde{E})\psi_A + \tilde{t}\psi_{B'} = 0 \quad (3.2)$$

$$\pi^\dagger\psi_A + (\tilde{U}_1 - \tilde{E})\psi_B = 0 \quad (3.3)$$

$$\pi^\dagger\psi_{A'} + (\tilde{U}_2 - \tilde{E})\psi_{B'} + \tilde{t}\psi_A = 0 \quad (3.4)$$

$$\pi\psi_{B'} + (\tilde{U}_2 - \tilde{E})\psi_{A'} = 0 \quad (3.5)$$

desacoplando tal sistema supondo  $\tilde{U}_1(\vec{r}) = -\tilde{U}_2(\vec{r}) = \tilde{V}$  constantes obtém-se a seguinte equação diferencial,

$$\nabla^2 \nabla^2 \psi_A + 2(V^2 + E^2) \nabla^2 \psi_A + [(V^2 - E^2)^2 + t^2(V^2 - E^2)] \psi_A = 0. \quad (3.6)$$

onde utilizamos as grandezas  $V = \tilde{V}/\hbar v_F$ ,  $E = \tilde{E}/\hbar v_F$  e  $t = \tilde{t}/\hbar v_F$ . A equação (3.6) pode ser facilmente resolvida através da equação de autovalor do laplaciano: sabemos que

$$\nabla^2 F_m(\alpha\rho) e^{im\theta} = \pm \alpha^2 F_m(\alpha\rho) e^{im\theta},$$

onde  $F_m$  denota, para o autovalor  $-\alpha^2$ , as funções de Bessel do primeiro e segundo tipo,  $J_m$  e  $Y_m$ , e, para o autovalor  $\alpha^2$ , as funções de Bessel modificada do primeiro e segundo tipo,  $I_m$  e  $K_m$  [33, 34]. Substituindo esses autovetores na equação (3.6) obtemos uma equação polinomial do quarto grau para  $\alpha$ ,

$$\alpha^4 \pm 2(V^2 + E^2)\alpha^2 + (V^2 - E^2)^2 + t^2(V^2 - E^2) = 0, \quad (3.7)$$

onde o sinal menos é usado para as funções de Bessel e o sinal mais, para as funções de Bessel modificadas. Os autovetores do laplaciano serão solução da equação (3.6), se e somente se,  $\alpha$  for solução da equação (3.7). Dado um  $\alpha$  solução da equação (3.7) com o sinal negativo, então  $i\alpha$  será solução dessa equação com o sinal positivo, isto é, para cada raiz da equação polinomial (3.7) com o sinal negativo temos quatro soluções (não necessariamente linearmente

independentes) da equação diferencial (3.6), a saber,  $J_m(\alpha\rho)e^{im\theta}$ ,  $Y_m(\alpha\rho)e^{im\theta}$ ,  $I_m(i\alpha\rho)e^{im\theta}$  e  $K_m(i\alpha\rho)e^{im\theta}$ . Então apenas analisaremos as soluções da equação (3.7) com o sinal negativo. As soluções são dadas por:

$$\alpha = \pm \sqrt{V^2 + E^2 \pm \sqrt{4V^2E^2 - t^2(V^2 - E^2)}}.$$

Observa-se que se  $4V^2E^2 - t^2(V^2 - E^2) < 0$  então  $\alpha$  é um número complexo completo isto é, possui parte real e imaginária diferentes de zero. Isso apenas ocorre se, e somente se,

$$|E| < \frac{|V|t}{\sqrt{4V^2 + t^2}}. \quad (3.8)$$

Esse é exatamente o intervalo de *gap* obtido na equação (2.24), ou seja, esse é o intervalo entre as bandas de valência e condução e portanto, fora dele, as energias são contínuas. Limitaremos o estudo a esse intervalo, pois estamos apenas interessados em estudar as subbandas que surgem entre as bandas de valência e condução.

Suporemos que  $\psi_A$  pode ser escrito como

$$\psi_A = \phi_A(\rho)T(\theta).$$

Comparando com as soluções que são autovetores do laplaciano, vemos que,

$$\psi_A = \phi_A(\rho)e^{im\theta}, \quad (3.9)$$

onde  $\phi_A(\rho)$  é uma combinação linear de quatro funções (devido a ordem da equação diferencial) linearmente independentes (LI). A função  $\psi_A$  (assim como as outras componentes do *pseudospinor*) deve ser periódica com período  $2\pi$  na coordenada angular. Então concluímos que  $m$  apenas pode assumir valores inteiros:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Através de uma análise conclui-se que as soluções LI da parte radial podem ser escolhidas como sendo (ver Apêndice A):

$$\phi_A(\rho) = C_1\Re[J_m(\alpha\rho)] + C_2\Im[J_m(\alpha\rho)] + C_3\Re[K_m(i\alpha\rho)] + C_4\Im[K_m(i\alpha\rho)], \quad (3.10)$$

onde  $\alpha$  é dado por

$$\alpha = \sqrt{V^2 + E^2 - \sqrt{4V^2E^2 - t^2(V^2 - E^2)}}. \quad (3.11)$$

Na equação (3.11),  $\alpha$  deve possuir parte imaginária negativa para garantir a independência linear das soluções escolhidas.

Dentro do intervalo de energias que estamos estudando, as funções  $\Re[J_m(\alpha\rho)]$  e  $\Im[J_m(\alpha\rho)]$ , para todo  $m$ , são finitas na origem, porém divergem quando  $\rho$  cresce indefinidamente. Por outro lado, a função  $\Re[K_m(i\alpha\rho)]$ , para todo  $m$ , diverge para  $\rho = 0$  e converge para zero quando  $\rho$  cresce indefinidamente. A função  $\Im[K_m(i\alpha\rho)]$  tem o mesmo comportamento de função  $\Re[K_m(i\alpha\rho)]$  para  $m \neq 0$ , porém para  $m = 0$  ela é finita na origem e converge para zero quando  $\rho$  cresce indefinidamente (ver Apêndice A).

Dado  $\psi_A$  pelas equações (3.9) e (3.10) pode-se obter as demais componentes do *pseudospinor* através das equações do sistema de equações diferenciais acopladas: a componente  $\psi_B$  pode ser obtida da componente  $\psi_A$  a partir da equação (3.3):

$$\psi_B = -\frac{\pi^\dagger \psi_A}{\hbar v_F (U_1 - E)}. \quad (3.12)$$

Para efetuar esse calculo devemos saber como o operador  $\pi^\dagger$  age sobre as soluções LI,

$$\begin{aligned} \pi^\dagger \Re[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta} &= -i\hbar v_F \Re \left[ \alpha \left( \frac{mJ_m(\alpha\rho)}{\alpha\rho} + J'_m(\alpha\rho) \right) \right] e^{i(m-1)\theta} \\ &= -i\hbar v_F \Re[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)]e^{i(m-1)\theta}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde usamos uma das relações de recorrência da função de Bessel [35]. A mesma equação também é válida se a parte real for substituída pela parte imaginária. Pode-se verificar ainda que

$$\begin{aligned} \pi^\dagger \Re[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta} &= i\hbar v_F \Re \left[ i\alpha \left( -\frac{mK_m(i\alpha\rho)}{i\alpha\rho} - K'_m(i\alpha\rho) \right) \right] e^{i(m-1)\theta} \\ &= i\hbar v_F \Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)]e^{i(m-1)\theta}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Naturalmente, a mesma equação é válida para a parte imaginária. Usando as equações (3.12), (3.13) e (3.14) acha-se que:

$$\begin{aligned} \psi_B &= -\frac{i}{V-E} \{ -C_1 \Re[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)] - C_2 \Im[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)] + \\ &\quad + C_3 \Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] + C_4 \Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] \} e^{i(m-1)\theta}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde  $U_1$  foi substituído por  $V$ .

A componente  $\psi_{B'}$  é obtida a partir das equações (3.2) e (3.3), as quais fornecem

$$\psi_{B'} = \frac{-1}{(\hbar v_F)^2 t (U_1 - E)} \left[ -\pi \pi^\dagger + (\hbar v_F)^2 (U_1 - E)^2 \right] \psi_A. \quad (3.16)$$

Verifica-se que

$$\pi \pi^\dagger \Re[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta} = -(\hbar v_F)^2 \Re[-\alpha^2 J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta}, \quad (3.17)$$

$$\pi\pi^\dagger \Re[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta} = -(\hbar v_F)^2 \Re[-\alpha^2 K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}. \quad (3.18)$$

As mesmas equações são válidas para a parte imaginária de cada função. Usando as equações (3.16), (3.17) e (3.18) obtemos a componente  $\psi_{B'}$ ,

$$\begin{aligned} \psi_{B'} = & -\frac{1}{t(V-E)} \{C_1 \Re[\tau J_m(\alpha\rho)] + C_2 \Im[\tau J_m(\alpha\rho)] + \\ & + C_3 \Re[\tau K_m(i\alpha\rho)] + C_4 \Im[\tau K_m(i\alpha\rho)]\} e^{im\theta}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde  $\tau = -\alpha^2 + (V-E)^2$ .

Por último, pode-se obter  $\psi_{A'}$  partindo das equações (3.2), (3.3) e (3.5):

$$\psi_{A'} = \frac{-\pi\pi^\dagger + (\hbar v_F)^2 (U_1 - E)^2}{(\hbar v_F)^3 t (U_1 - E)(U_2 - E)} \pi \psi_A. \quad (3.20)$$

Verifica-se que

$$\begin{aligned} \pi \Re[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta} &= i\hbar v_F \Re \left[ \alpha \left( \frac{mJ_m(\alpha\rho)}{\alpha\rho} - J'_m(\alpha\rho) \right) \right] e^{i(m+1)\theta} \\ &= i\hbar v_F \Re[\alpha J_{m+1}(\alpha\rho)]e^{i(m+1)\theta}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \pi \Re[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta} &= i\hbar v_F \Re \left[ i\alpha \left( \frac{mK_m(i\alpha\rho)}{i\alpha\rho} - K'_m(i\alpha\rho) \right) \right] e^{i(m+1)\theta} \\ &= i\hbar v_F \Re[i\alpha K_{m+1}(i\alpha\rho)]e^{i(m+1)\theta}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\pi\pi^* \pi \Re[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta} = -i(\hbar v_F)^3 \Re[-\alpha^3 J_{m+1}(\alpha\rho)]e^{i(m+1)\theta}, \quad (3.23)$$

$$\pi\pi^* \pi \Re[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta} = -i(\hbar v_F)^3 \Re[-i\alpha^3 K_{m+1}(i\alpha\rho)]e^{i(m+1)\theta}. \quad (3.24)$$

As mesmas equações são válidas para a parte imaginária de cada função. Usando as equações (3.20), (3.21), (3.22), (3.23) e (3.24), obtemos a última componente,

$$\begin{aligned} \psi_{A'} = & -\frac{i}{t(V^2 - E^2)} \{C_1 \Re[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)] + C_2 \Im[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)] + \\ & + C_3 \Re[i\alpha\tau K_{m+1}(i\alpha\rho)] + C_4 \Im[i\alpha\tau K_{m+1}(i\alpha\rho)]\} e^{i(m+1)\theta}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

## 3.2 Anel Quântico

Suponha que a BG – a qual trataremos infinita – é colocada entre placas paralelas circulares com raio  $R$  de um capacitor<sup>2</sup> submetido á uma ddp igual a  $2V$ . Suponha ainda que existe outro capacitor de placas paralelas vazadas, submetido à uma ddp inversa ao do primeiro capacitor,

<sup>2</sup>O modelo limite de uma BG infinita é aplicável a um sistema em que as dimensões das camadas são muito maiores que o raio do capacitor,  $R$ .

de forma que a região da BG que não está entre as placas do primeiro capacitor, estará entre as placas vazadas do segundo capacitor<sup>3</sup> (ver Figura 3.3). Então os potenciais induzido sobre as camadas são dados por (ver Figura 3.4),

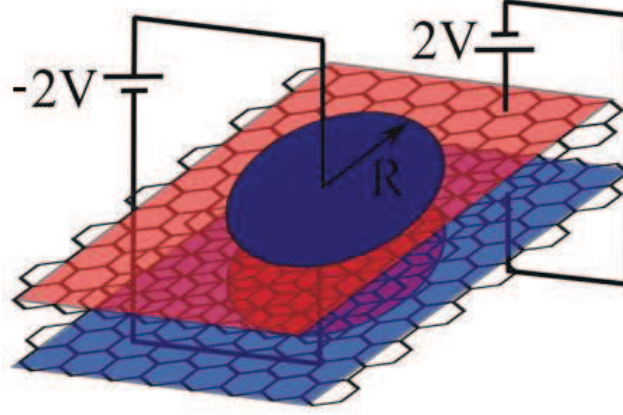


Figura 3.3: Esquema de um anel quântico eletrostático em um BG. Na região do disco, devido a um capacitor, atravessa um campo elétrico uniforme e perpendicular as camadas, o qual induz um potencial de  $+V$  (azul) no disco da camada superior e  $-V$  (vermelho) no disco da camada inferior. Na região fora do disco, devido a um segundo capacitor, um campo elétrico oposto ao primeiro induz um potencial de  $-V$  (vermelho) na região complementar do disco da camada superior e  $+V$  (azul) na respectiva região da camada inferior.

$$U_1(\rho) = \begin{cases} V, & \text{se } 0 \leq \rho < R \\ -V, & \text{se } R < \rho, \end{cases}$$

$$U_2(\rho) = \begin{cases} -V, & \text{se } 0 \leq \rho < R \\ V, & \text{se } R < \rho. \end{cases}$$

Chamamos tal sistema de anel quântico, pois a região de confinamento (a região onde os potenciais mudam de sinal) possui uma forma anelar.

Podemos sem perda de generalidade supor que as componentes do *pseudospinor* podem ser escritas como

$$\psi_i(\rho, \theta) = \begin{cases} \psi_i^<(\rho, \theta), & \text{se } 0 \leq \rho \leq R \\ \psi_i^>(\rho, \theta), & \text{se } R \leq \rho \end{cases}$$

onde  $i$  denota  $A$ ,  $B$ ,  $B'$  e  $A'$  e devemos impor a condição de continuidade das componentes para todo  $\rho$ . A equação de autovalor para  $0 \leq \rho < R$  é dada por:

$$\begin{aligned} \pi \psi_B^< + (\hbar v_F U_1 - \hbar v_F E) \psi_A^< + \hbar v_F t \psi_{B'}^< &= 0, \\ \pi^\dagger \psi_A^< + (\hbar v_F U_1 - \hbar v_F E) \psi_B^< &= 0, \end{aligned}$$

<sup>3</sup>A parte vazada deve ser em forma de disco das placas do primeiro capacitor para que os eles possam ser encaixados.

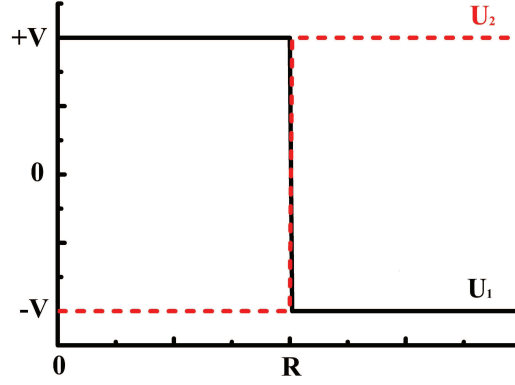


Figura 3.4: Gráfico do potencial  $U_1$  (em preto) e  $U_2$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico em uma bicamada de grafeno.

$$\begin{aligned}\pi^\dagger \psi_{A'}^< + (\hbar v_F U_2 - \hbar v_F E) \psi_{B'}^< + \hbar v_F t \psi_A^< &= 0, \\ \pi \psi_{B'}^< + (\hbar v_F U_2 - \hbar v_F E) \psi_{A'}^< &= 0.\end{aligned}$$

Neste caso, temos que  $U_1 = -U_2 = V$ , isso significa que quando desacoplarmos os sistema obteremos a mesma equação (3.6), ou seja, as soluções nessa região serão da forma daquelas achadas na Seção 3.1. Porém como foi dito, as funções  $\Re[K_m(i\alpha\rho)]$  e  $\Im[K_m(i\alpha\rho)]$  – esta apenas quando  $m \neq 0$  – divergem na origem, como as componentes do *pseudospinor* devem ser contínuas e finitas em todo ponto, então deve-se impor que as constantes que multiplicam tais funções sejam iguais a zero<sup>4</sup>. Conclui-se então que as componentes do *pseudospinor* para  $0 \leq \rho < R$  são dadas por:

$$\begin{aligned}\psi_A^< &= \{C_1^< \Re[J_m(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[J_m(\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_A^<(\rho) e^{im\theta}, \\ \psi_B^< &= \frac{i}{V-E} \{C_1^< \Re[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)]\} e^{i(m-1)\theta} \\ &= i\phi_B^<(\rho) e^{i(m-1)\theta}, \\ \psi_{B'}^< &= -\frac{1}{t(V-E)} \{C_1^< \Re[\tau J_m(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[\tau J_m(\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_{B'}^<(\rho) e^{im\theta}, \\ \psi_{A'}^< &= -\frac{i}{t(V^2-E^2)} \{C_1^< \Re[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)]\} e^{i(m+1)\theta}\end{aligned}$$

<sup>4</sup>A constante que multiplica  $\Im[K_0(i\alpha\rho)]$ , para  $m = 0$ , ainda deve ser anulada pois, apesar de que  $\Im[K_0(i\alpha\rho)]$  não divergir na origem, essa mesma constante multiplica  $\Im[K_1(i\alpha\rho)]$  e  $\Im[K_{-1}(i\alpha\rho)]$  em outras duas componentes e tais funções divergem na origem.

$$= i\phi_{A'}^<(\rho)e^{i(m+1)\theta},$$

onde,  $\tau = -\alpha^2 + (V - E)^2$ .

Para a região  $R < \rho$ , o problema é equivalente. Nesta região, temos que  $U_1 = -U_2 = -V$ , isto é, as soluções serão da forma daquelas achadas na seção anterior exceto que deve-se substituir  $V$  por  $-V$ . As funções  $\Re[J_m(\alpha\rho)]$  e  $\Im[J_m(\alpha\rho)]$  divergem quando  $\rho$  cresce indefinidamente, então para que o *pseudospinor* seja finito em todos os pontos (inclusive no ponto no infinito) deve-se anular as constantes que multiplicam tais funções. Então, para essa região, a solução será dada como:

$$\begin{aligned}\psi_A^> &= \{C_3^>\Re[K_m(i\alpha\rho)] + C_4^>\Im[K_m(i\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_A^>(\rho)e^{im\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_B^> &= \frac{i}{V+E} \{C_3^>\Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] + C_4^>\Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)]\} e^{i(m-1)\theta} \\ &= i\phi_B^>(\rho)e^{i(m-1)\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{B'}^> &= \frac{1}{t(V+E)} \{C_3^>\Re[\tau' K_m(i\alpha\rho)] + C_4^>\Im[\tau' K_m(i\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_{B'}^>(\rho)e^{im\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{A'}^> &= -\frac{i}{t(V^2-E^2)} \{C_3^>\Re[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha\rho)] + C_4^>\Im[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha\rho)]\} e^{i(m+1)\theta} \\ &= i\phi_{A'}^>(\rho)e^{i(m+1)\theta},\end{aligned}$$

onde  $\tau' = -\alpha^2 + (V + E)^2$ .

Devemos aplicar a condição de que  $\Psi$  deve ser contínuo em  $\rho = R$ , isto é,

$$\begin{aligned}\phi_A^<(R) &= \phi_A^>(R), \\ \phi_B^<(R) &= \phi_B^>(R), \\ \phi_{B'}^<(R) &= \phi_{B'}^>(R), \\ \phi_{A'}^<(R) &= \phi_{A'}^>(R).\end{aligned}$$

Essas últimas equações nos conduzem a um sistema homogêneo nas constantes  $C_1^<$ ,  $C_2^<$ ,  $C_3^>$  e  $C_4^>$ . Para que esse sistema admita solução não trivial, então, pela regra de Cramer, o determi-

nante da matriz formadas pelos coeficientes deve ser nulo:

$$T(E) = \begin{vmatrix} \Re[J_m(\alpha R)] & \Im[J_m(\alpha R)] & -\Re[K_m(i\alpha R)] & -\Im[K_m(i\alpha R)] \\ \frac{\Re[\alpha J_{m-1}(\alpha R)]}{V-E} & \frac{\Im[\alpha J_{m-1}(\alpha R)]}{V-E} & -\frac{\Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R)]}{V+E} & -\frac{\Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R)]}{V+E} \\ \frac{\Re[\tau J_m(\alpha R)]}{V-E} & \frac{\Im[\tau J_m(\alpha R)]}{V-E} & \frac{\Re[\tau' K_m(i\alpha R)]}{V+E} & \frac{\Im[\tau' K_m(i\alpha R)]}{V+E} \\ \Re[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha R)] & \Im[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha R)] & -\Re[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha R)] & -\Im[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha R)] \end{vmatrix} = 0,$$

ou seja, para se achar os níveis de energia deve-se achar os zeros da função  $T(E)$ . Tal condição nos conduz a níveis de energias discretos, pois apenas para certos valores de energia ela é satisfeita.

Foi analisado o comportamento dos níveis de energia em relação ao raio do anel,  $R$ , e em relação a intensidade do potencial eletrostático,  $V$ . Os resultados são mostrados e discutidos no próximo capítulo.

### 3.3 Anel Quântico Duplo

Outro sistema proposto ao estudo é o denominado de anel duplo, o qual trata-se de dois anéis como estudados na seção anterior concêntricos. Tal sistema nos fornecerá informações de como os anéis irão interagir um com o outro, podendo através disso analisar o quão localizados é os estados desses anéis. Os potenciais eletrostático aplicado sobre as camadas são dados por (ver Figura 3.5),

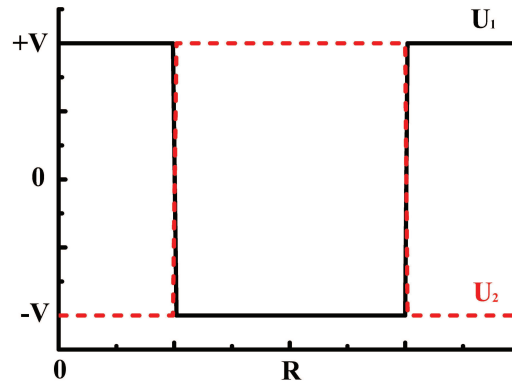


Figura 3.5: Gráfico dos potenciais  $U_1$  (em preto) e  $U_2$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico duplo em uma bicamada de grafeno.

$$U_1(\rho) = \begin{cases} V, & \text{se } 0 \leq \rho < R_1 \\ -V, & \text{se } R_1 < \rho < R_2 \\ V, & \text{se } R_2 < \rho, \end{cases}$$

$$U_2(\rho) = \begin{cases} -V, & \text{se } 0 \leq \rho < R_1 \\ V, & \text{se } R_1 < \rho < R_2 \\ -V, & \text{se } R_2 < \rho. \end{cases}$$

A solução da equação de autovalor do Hamiltoniano desse sistema é achada de forma análoga ao anel quântico: divide-se o *pseudospinor* nas três regiões,

$$\psi_i(\rho, \theta) = \begin{cases} \psi_i^<(\rho, \theta), & \text{se } 0 \leq \rho \leq R_1 \\ \psi_i^=(\rho, \theta), & \text{se } R_1 \leq \rho \leq R_2 \\ \psi_i^>(\rho, \theta), & \text{se } R_2 \leq \rho \end{cases}$$

onde  $i$  denota  $A, B, B'$  e  $A'$ .

Para  $0 \leq \rho < R_1$ , tem-se que  $U_1 = -U_2 = V$  que é equivalente a região  $0 \leq \rho < R$  no anel simples, portanto as soluções são dadas por:

$$\begin{aligned} \psi_A^< &= \{C_1^<\Re[J_m(\alpha\rho)] + C_2^<\Im[J_m(\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_A^<(\rho) e^{im\theta}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_B^< &= \frac{i}{V-E} \{C_1^<\Re[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)] + C_2^<\Im[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)]\} e^{i(m-1)\theta} \\ &= i\phi_B^<(\rho) e^{i(m-1)\theta}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{B'}^< &= -\frac{1}{t(V-E)} \{C_1^<\Re[\tau J_m(\alpha\rho)] + C_2^<\Im[\tau J_m(\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_{B'}^<(\rho) e^{im\theta}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{A'}^< &= -\frac{i}{t(V^2-E^2)} \{C_1^<\Re[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)] + C_2^<\Im[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)]\} e^{i(m+1)\theta} \\ &= i\phi_{A'}^<(\rho) e^{i(m+1)\theta}, \end{aligned}$$

onde  $\tau = -\alpha^2 + (V-E)^2$ .

Para  $R_1 \leq \rho \leq R_2$ , tem-se que  $U_1 = -U_2 = -V$ , então as soluções serão como as achadas na primeira seção, porém substituindo  $V$  por  $-V$ . Nesta região, como não contém a origem e é limitada, então nenhuma das funções de Bessel divergem no intervalo, ou seja, todas as quatro funções estão presentes na parte radial:

$$\begin{aligned} \psi_A^= &= \{C_1^=\Re[J_m(\alpha\rho)] + C_2^=\Im[J_m(\alpha\rho)] + C_3^=\Re[K_m(i\alpha\rho)] + C_4^=\Im[K_m(i\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_A^=(\rho) e^{im\theta}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{B^-} &= \frac{i}{V+E} \{-C_1^- \Re[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)] - C_2^- \Im[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)] + \\ &\quad + C_3^- \Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] + C_4^- \Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)]\} e^{i(m-1)\theta} \\ &= i\phi_{B^-}(\rho) e^{i(m-1)\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{B'}^- &= \frac{1}{t(V+E)} \{C_1^- \Re[\tau' J_m(\alpha\rho)] + C_2^- \Im[\tau' J_m(\alpha\rho)] + \\ &\quad + C_3^- \Re[\tau' K_m(i\alpha\rho)] + C_4^- \Im[\tau' K_m(i\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_{B'}^-(\rho) e^{im\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{A'}^- &= -\frac{i}{t(V^2-E^2)} \{C_1^- \Re[\alpha\tau' J_{m+1}(\alpha\rho)] + C_2^- \Im[\alpha\tau' J_{m+1}(\alpha\rho)] + \\ &\quad + C_3^- \Re[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha\rho)] + C_4^- \Im[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha\rho)]\} e^{i(m+1)\theta} \\ &= i\phi_{A'}^-(\rho) e^{i(m+1)\theta},\end{aligned}$$

onde  $\tau' = -\alpha^2 + (V+E)^2$ .

Para  $R_2 \leq \rho$ , tem-se novamente que  $U_1 = -U_2 = V$ , então a solução será como aquela achada na primeira seção. Como as funções  $\Re[J_m(\alpha\rho)]$  e  $\Im[J_m(\alpha\rho)]$  divergem quando  $\rho$  cresce indefinidamente, então deve-se anular as constantes que multiplicam tais funções. As soluções serão dadas por,

$$\begin{aligned}\psi_A^> &= \{C_3^> \Re[K_m(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[K_m(i\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_A^>(\rho) e^{im\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_B^> &= -\frac{i}{V-E} \{C_3^> \Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)]\} e^{i(m-1)\theta} \\ &= i\phi_B^>(\rho) e^{i(m-1)\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{B'}^> &= -\frac{1}{t(V-E)} \{C_3^> \Re[\tau K_m(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[\tau K_m(i\alpha\rho)]\} e^{im\theta} \\ &= \phi_{B'}^>(\rho) e^{im\theta},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_{A'}^> &= -\frac{i}{t(V^2-E^2)} \{C_3^> \Re[i\alpha\tau K_{m+1}(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[i\alpha\tau K_{m+1}(i\alpha\rho)]\} e^{i(m+1)\theta} \\ &= i\phi_{A'}^>(\rho) e^{i(m+1)\theta},\end{aligned}$$

Devemos aplicar a condição de continuidade para  $\rho = R_1$  e  $\rho = R_2$ ,

$$\begin{aligned}\phi_A^<(R_1) &= \phi_A^{\bar{}}(R_1), \\ \phi_B^<(R_1) &= \phi_B^{\bar{}}(R_1), \\ \phi_{B'}^<(R_1) &= \phi_{B'}^{\bar{}}(R_1), \\ \phi_{A'}^<(R_1) &= \phi_{A'}^{\bar{}}(R_1), \\ \phi_A^{\bar{}}(R_2) &= \phi_A^>(R_2), \\ \phi_B^{\bar{}}(R_2) &= \phi_B^>(R_2), \\ \phi_{A'}^{\bar{}}(R_2) &= \phi_{A'}^>(R_2), \\ \phi_{B'}^{\bar{}}(R_2) &= \phi_{B'}^>(R_2).\end{aligned}$$

Essas últimas equações nos conduzem a um sistema homogêneo nas constantes  $C_1^<, C_2^<, C_1^{\bar{}}, C_2^{\bar{}}, C_3^{\bar{}}$  e  $C_4^{\bar{}}, C_3^>$  e  $C_4^>$ . Para que esse sistema admita solução não trivial, então o determinante da matriz formada pelos coeficientes deve ser nulo. Os elementos da matriz dos coeficientes são dados no Apêndice B.

Foi analisado o comportamento dos níveis de energia em relação ao raio médio do anel duplo,  $R = (R_1 + R_2)/2$ , em relação a largura,  $L = R_2 - R_1$ , e em relação a intensidade do potencial eletrostático,  $V$ . Os resultados são mostrados e discutidos no próximo capítulo.

### 3.4 Interfaces Graduais

Até agora apenas consideramos potenciais *kink* que mudavam abruptamente de sinal. Em experimentos reais é impossível se obter uma mudança abrupta como as estudadas. Devido a isso, nesta seção estamos interessados em estudar os efeitos causados por uma mudança gradual do sinal dos potenciais (ver Figura 3.6). Trataremos com os seguintes potencial eletrostático:

$$U_1(\rho) = \begin{cases} V_0, & \text{se } 0 \leq \rho \leq R - w/2 \\ V(\rho), & \text{se } R - w/2 \leq \rho \leq R + w/2, \\ -V_0, & \text{se } R + w/2 \leq \rho, \end{cases}$$

$$U_2(\rho) = -U_1(\rho), \forall \rho,$$

onde  $R$  é o raio médio,  $w$  a espessura da interface gradual e  $V(\rho)$  é uma função contínua tal que  $V(R - w/2) = V_0$  e  $V(R + w/2) = -V_0$ . Devido à complexidade do problema resolveremos a equação de autovalor por um método numérico que será desenvolvido.

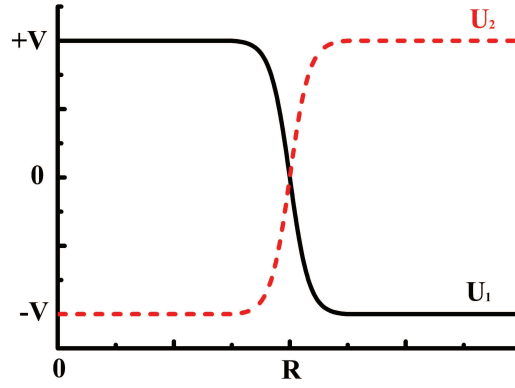


Figura 3.6: Gráfico dos potenciais  $U_1$  (em preto) e  $U_2$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico em uma bicamada de grafeno com interfaces graduais.

Primeiramente é conveniente separarmos as variáveis no sistema de equações diferenciais proveniente da equação de autovalor do Hamiltoniano. Podemos separar as variáveis escolhendo:

$$\psi_A = \phi_A e^{im\theta}, \quad (3.26)$$

$$\psi_B = i\phi_B e^{i(m-1)\theta}, \quad (3.27)$$

$$\psi_{B'} = \phi_{B'} e^{im\theta}, \quad (3.28)$$

$$\psi_{A'} = i\phi_{A'} e^{i(m+1)\theta}, \quad (3.29)$$

então obtemos o seguinte sistema:

$$\frac{d\phi_B}{d\rho} - \frac{m-1}{\rho}\phi_B = (E - U_1)\phi_A - t\phi_{B'} \quad (3.30)$$

$$\frac{d\phi_A}{d\rho} + \frac{m}{\rho}\phi_A = -(E - U_1)\phi_B \quad (3.31)$$

$$\frac{d\phi_{A'}}{d\rho} + \frac{m+1}{\rho}\phi_{A'} = (E - U_2)\phi_{B'} - t\phi_A \quad (3.32)$$

$$\frac{d\phi_{B'}}{d\rho} - \frac{m}{\rho}\phi_{B'} = -(E - U_2)\phi_{A'}. \quad (3.33)$$

Esse último sistema é válido sempre que os potenciais dependerem apenas da coordenada radial. Observe que nos intervalos  $0 \leq \rho \leq R - w/2$  e  $\rho \geq R + w/2$  podemos escrever a solução analítica para esse potencial. De fato nesses intervalos os potenciais satisfazem a condição  $U_1(\rho) = -U_2(\rho) = \pm V$  constante, então a solução nesses intervalos são dados pelas equações (3.9), (3.15), (3.19) e (4.11): para  $0 \leq \rho \leq R - w/2$ ,

$$\phi_A^< = C_1^< \Re[J_m(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[J_m(\alpha\rho)]$$

$$\phi_B^< = \frac{1}{V-E} \{C_1^< \Re[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[\alpha J_{m-1}(\alpha\rho)]\}$$

$$\phi_{B'}^< = -\frac{1}{t(V-E)} \{C_1^< \Re[\tau J_m(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[\tau J_m(\alpha\rho)]\}$$

$$\phi_{A'}^< = -\frac{1}{t(V^2-E^2)} \{C_1^< \Re[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)] + C_2^< \Im[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha\rho)]\},$$

onde  $\tau = -\alpha^2 + (V-E)^2$ , e para  $\rho \geq R + w/2$

$$\phi_A^> = C_3^> \Re[K_m(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[K_m(i\alpha\rho)]$$

$$\phi_B^> = \frac{1}{V+E} \{C_3^> \Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)]\}$$

$$\phi_{B'}^> = \frac{1}{t(V+E)} \{C_3^> \Re[\tau' K_m(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[\tau' K_m(i\alpha\rho)]\}$$

$$\phi_{A'}^> = -\frac{1}{t(V^2-E^2)} \{C_3^> \Re[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha\rho)] + C_4^> \Im[i\alpha\tau' K_{m+1}(i\alpha\rho)]\},$$

onde  $\tau' = -\alpha^2 + (V+E)^2$  e eliminamos as soluções que divergem por anulando as respectivas constantes multiplicativas. Para a região  $R - w/2 \leq \rho \leq R + w/2$  não temos a solução analítica, ao invés disso vamos discretizar o intervalo em  $N$  pontos  $\rho_i$  tal que

$$\rho_i = R - \frac{w}{2} + i\Delta\rho,$$

onde

$$\Delta\rho = \frac{w}{N+1}.$$

e vamos calcular numericamente as componentes do *pseudospinor* em cada ponto  $\rho_i$ . De um ponto de vista algébrico, desejamos achar o valor de  $4N + 4$  variáveis:  $4N$  provenientes dos  $N$  pontos  $\rho_i$ , duas provenientes da solução analítica do intervalo  $0 \leq \rho \leq R - w/2$  e duas provenientes da solução analítica do intervalo  $\rho \geq R + w/2$ . Para determinarmos essas variáveis devemos achar  $4N + 4$  equações. Através da série de Taylor, podemos dizer que:

$$\phi_j(\rho + \Delta\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi_j^{(n)}(\rho)}{n!} \Delta\rho^n \quad \text{para } j = A, B, B', A', \quad (3.34)$$

onde  $\phi_j^{(n)}(\rho)$  é a  $n$ -ésima derivada de  $\phi_j(\rho)$  (convencionamos que  $\phi_j^{(0)}(\rho) = \phi_j(\rho)$ ). Substi-

tuindo  $\Delta\rho$  por  $-\Delta\rho$  obtemos a série:

$$\phi_j(\rho - \Delta\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{\phi_j^{(n)}(\rho)}{n!} \Delta\rho^n. \quad (3.35)$$

Subtraindo a equação (3.34) pela equação (3.35), obtemos que:

$$\begin{aligned} \phi_j(\rho + \Delta\rho) - \phi_j(\rho - \Delta\rho) &= 2 \sum_{n=\text{impar}}^{\infty} \frac{\phi_j^{(n)}(\rho)}{n!} \Delta\rho^n \\ &= 2\Delta\rho \phi_j^{(1)}(\rho) + O(\Delta\rho^3). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Aplicando a equação (3.36) aos pontos  $\rho_0, \rho_1, \dots, \rho_N$  e desprezando termos de ordem superior obtemos  $4N + 4$  equações relacionando as  $4N + 4$  variáveis. Substituindo  $\phi_j^{(1)}(\rho)$  obtemos as equações:

$$\phi_A(\rho_{i+1}) = \phi_A(\rho_{i-1}) + 2\Delta\rho \left[ -\frac{m}{\rho_i} \phi_A(\rho_i) - (E - U_1(\rho_i)) \phi_B(\rho_i) \right] \quad (3.37)$$

$$\phi_B(\rho_{i+1}) = \phi_B(\rho_{i-1}) + 2\Delta\rho \left[ \frac{m-1}{\rho_i} \phi_B(\rho_i) + (E - U_1(\rho_i)) \phi_A(\rho_i) - t \phi_{B'}(\rho_i) \right] \quad (3.38)$$

$$\phi_{B'}(\rho_{i+1}) = \phi_{B'}(\rho_{i-1}) + 2\Delta\rho \left[ \frac{m}{\rho_i} \phi_{B'}(\rho_i) - (E - U_2(\rho_i)) \phi_{A'}(\rho_i) \right] \quad (3.39)$$

$$\phi_{A'}(\rho_{i+1}) = \phi_{A'}(\rho_{i-1}) + 2\Delta\rho \left[ -\frac{m+1}{\rho_i} \phi_{A'}(\rho_i) + (E - U_2(\rho_i)) \phi_{B'}(\rho_i) - t \phi_A(\rho_i) \right], \quad (3.40)$$

para  $i = 0, 1, \dots, N$ . Assim obtemos um sistema homogêneo de  $4N + 4$  variáveis e  $4N + 4$  equações. Para que esse sistema possua solução não trivial o determinante da matriz dos coeficientes deve se anular. Dessa forma obtemos os autovalores do Hamiltoniano: apenas para certos valores de energia o determinante da matriz dos coeficientes se anula.

Na prática o método exige um custo computacional alto pois deve-se calcular várias vezes o determinante de uma matriz de ordem  $4N + 4$  (usamos  $N = 1000$ ). Para viabilizar o método, ao invés de calcularmos o determinante da matriz dos coeficientes de ordem  $4N + 4$ , simplificamos o sistema para um quatro por quatro através do método da substituição: se temos o valor das componentes no ponto  $\rho_{i-1}$  e no ponto  $\rho_i$  podemos calcular, usando as equações (3.37), (3.38), (3.39) e (3.40), o valor das componentes no ponto seguinte,  $\rho_{i+1}$ . Através da solução analítica do intervalo  $0 \leq \rho \leq R - w/2$ , as componentes nos pontos  $\rho_{-1}$  e  $\rho_0$  podem ser calculadas em função de  $C_1^<$  e  $C_2^<$ . Então podemos calcular as componentes no ponto  $\rho_1$  como função de  $C_1^<$  e  $C_2^<$ . Agora temos as componentes nos pontos  $\rho_0$  e  $\rho_1$  em função de  $C_1^<$  e  $C_2^<$ , então também podemos obter as componentes no ponto  $\rho_2$  em função de  $C_1^<$  e  $C_2^<$ . Assim podemos calcular progressivamente as componentes nos pontos  $\rho_3, \rho_4, \dots, \rho_N$  em função de  $C_1^<$  e  $C_2^<$ . Como as componentes para  $\rho_{N+1}$  podem ser calculadas em função de  $C_3^>$  e  $C_4^>$  através da solução

analítica do intervalo  $R + w/2 \leq \rho$ , obtemos um sistema homogêneo de quatro equações e apenas quatro variáveis, a saber,  $C_1^<$ ,  $C_2^<$ ,  $C_3^>$  e  $C_4^>$  ao usarmos as equações (3.37), (3.38), (3.39) e (3.40) para  $\rho_N$ . Por último, achamos os autovalores do Hamiltoniano impondo a condição de que o determinante da matriz dos coeficientes desse sistema 4x4 fosse nulo.

No próximo capítulo apresentamos como os níveis de energia se alteram devido a introdução de interfaces graduais, bem como apresentamos quais as interfaces graduais foram utilizadas.

## 4 Resultados

Neste capítulo apresentaremos o espectro de energia como função dos parâmetros que definem os potenciais estudados. Para o anel simples, foi analisado o comportamento dos níveis de energia em relação ao raio do anel,  $R$ , e em relação a intensidade do potencial eletrostático,  $V$ , e comparamos com o sistema estudados por I. Martin *et al.* o qual nós referiremos como potencial *kink* axial. Para o anel duplo, foi analisado o comportamento dos níveis de energia em relação ao raio médio do anel duplo,  $R = (R_1 + R_2)/2$ , em relação a largura,  $L = R_2 - R_1$ , e em relação a intensidade do potencial eletrostático,  $V$ . Finalmente apresentamos como os níveis de energia se alteram devido a introdução de interfaces graduais, bem como apresentamos quais as interfaces graduais foram utilizadas. Em todos os potenciais estudados verificou-se relação:

$$E(m) = -E(-m). \quad (4.1)$$

a qual é equivalente a relação  $E(p_y) = -E(-p_y)$  como é achado no potencial *kink* axial [15]. Observe que no gráfico (d) da Figura 3.2 não se observa tal comportamento, portanto esse resultado deve ter origem na natureza topológica do confinamento.

Podemos deduzir através das equações (3.30), (3.31), (3.32) e (3.33) uma outra interessante relação entre as energias dos estados com índices  $m$  e  $-m$  para potenciais que dependem apenas da coordenada radial: em todos os sistemas que estudamos era válido que  $U_1(\rho) = -U_2(\rho)$ , por isso vamos substituir  $U_1(\rho) = -U_2(\rho) = U(\rho)$  nas equações (3.30), (3.31), (3.32) e (3.33),

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_B}{d\rho} - \frac{m-1}{\rho}\phi_B &= (E-U)\phi_A - t\phi_{B'} \\ \frac{d\phi_A}{d\rho} + \frac{m}{\rho}\phi_A &= -(E-U)\phi_B \\ \frac{d\phi_{A'}}{d\rho} + \frac{m+1}{\rho}\phi_{A'} &= (E+U)\phi_{B'} - t\phi_A \\ \frac{d\phi_{B'}}{d\rho} - \frac{m}{\rho}\phi_{B'} &= -(E+U)\phi_{A'}. \end{aligned}$$

Analisaremos como se comporta o espectro de energia para um potencial o qual é o simétrico aditivo do potencial  $U(\rho)$ . Substituindo o potencial *kink*  $U(\rho)$  por um potencial  $-U(\rho)$  nessas

ultimas equações, obtemos o seguinte sistema de equações,

$$\begin{aligned}\frac{d\phi_B}{d\rho} + \frac{(-m)+1}{\rho}\phi_B &= (E_s(m)+U)\phi_A - t\phi_{B'} \\ \frac{d\phi_A}{d\rho} - \frac{(-m)}{\rho}\phi_A &= -(E_s(m)+U)\phi_B \\ \frac{d\phi_{A'}}{d\rho} - \frac{(-m)-1}{\rho}\phi_{A'} &= (E_s(m)-U)\phi_{B'} - t\phi_A \\ \frac{d\phi_{B'}}{d\rho} + \frac{(-m)}{\rho}\phi_{B'} &= -(E_s(m)-U)\phi_{A'},\end{aligned}$$

e introduzimos o subscrito  $s$  para enfatizarmos que é a energia do potencial  $-U$ . Agora vamos substituir  $m$  por  $-m'$  e vamos reorganizar as equações,

$$\begin{aligned}\frac{d\phi_{A'}}{d\rho} - \frac{m'-1}{\rho}\phi_{A'} &= (E_s(-m')-U)\phi_{B'} - t\phi_A \\ \frac{d\phi_{B'}}{d\rho} + \frac{m'}{\rho}\phi_{B'} &= -(E_s(-m')-U)\phi_{A'} \\ \frac{d\phi_B}{d\rho} + \frac{m'+1}{\rho}\phi_B &= (E_s(-m')+U)\phi_A - t\phi_{B'} \\ \frac{d\phi_A}{d\rho} - \frac{m'}{\rho}\phi_A &= -(E_s(-m')+U)\phi_{B'}.\end{aligned}$$

Observe que o sistema para o potencial  $-U$  com índice  $-m = m'$  é igual ao sistema para o potencial  $U$  com índice  $m$ , porém trocando  $A$  por  $B'$ ,  $B$  por  $A'$  e vice-versa. Como às autoenergias,  $E_s(m')$ , independem de como rotulamos as componentes, elas serão iguais as energias do sistema de potencial  $U$  com índice  $m$ ,  $E(m)$ , isto é,

$$E_s(-m) = E(m). \quad (4.2)$$

Por definição o potencial *antikink* é o simétrico aditivo do potencial *kink*, portanto combinando as equações (4.1) e (4.2), obtemos que,

$$E_{ak}(m) = -E_k(m), \quad (4.3)$$

onde  $E_{ak}$  é a energia do potencial *antikink* e  $E_k$  do *kink*.

A equação (4.3) é bastante útil para calcularmos o espectro de energia nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}'$ . O Hamiltoniano nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}'$ ,  $H'$ , sujeito aos potenciais radiais  $U_1(\rho) = -U_2(\rho) = U(\rho)$  é obtido do Hamiltoniano nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$  por

substituindo  $p_y$  por  $-p_y$ , ou seja, trocando  $\pi$  por  $\pi^\dagger$  e vice-versa, isto é,

$$H' = \begin{bmatrix} U & \pi^\dagger & t & 0 \\ \pi & U & 0 & 0 \\ t & 0 & -U & \pi \\ 0 & 0 & \pi^\dagger & -U \end{bmatrix}, \quad (4.4)$$

As energias são obtidas pela equação de autovalores,  $H'\Psi = E'\Psi$ ,

$$\begin{bmatrix} U & \pi^\dagger & t & 0 \\ \pi & U & 0 & 0 \\ t & 0 & -U & \pi \\ 0 & 0 & \pi^\dagger & -U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \\ \Psi_{B'} \\ \Psi_{A'} \end{bmatrix} = E' \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \\ \Psi_{B'} \\ \Psi_{A'} \end{bmatrix},$$

a qual pode ser escrita como,

$$\begin{bmatrix} -U & \pi & t & 0 \\ \pi^\dagger & -U & 0 & 0 \\ t & 0 & U & \pi^\dagger \\ 0 & 0 & \pi & U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{B'} \\ \Psi_{A'} \\ \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix} = E' \begin{bmatrix} \Psi_{B'} \\ \Psi_{A'} \\ \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

que é igual ao Hamiltoniano nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$  sujeito ao potencial simétrico  $-U(\rho)$ , porém trocando  $A$  por  $B'$ ,  $B$  por  $A'$  e vice-versa. Como os autovalores da equação (4.5) independem de como rotulamos as componentes, então eles serão iguais aos autovalores do Hamiltoniano nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$  sujeito ao potencial simétrico  $-U(\rho)$ , isto é,

$$E'(m) = E_s(m),$$

onde a linha indica que é a energia nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}'$ . Usando a equação (4.3), obtemos que,

$$E'_k(m) = -E_k(m).$$

Através dessa última equação pode-se obter o espectro próximo do ponto  $\mathbf{K}'$  conhecendo o espectro próximo do ponto  $\mathbf{K}$ .

## 4.1 Anel Simples

Traçamos o espectro de energia como função do raio,  $R$ , do anel (Figura 4.1) e como função da raiz da amplitude do potencial kink,  $V^{1/2}$  (Figura 4.2). Nos gráficos apenas traçamos as energias para valores positivos de  $m$ , porém pela equação (4.1) as energias para valores negativos

de  $m$  são obtidas refletindo o espectro em relação ao eixo das abscissas. As linhas sólidas são os pontos em que,

$$|E| = \frac{|V|t}{\sqrt{4V^2 + t^2}},$$

portanto, energias com o módulo maior que esse valor pertencem a um contínuo de energias.

Nos gráficos das Figuras 4.1 e 4.2 os estados para  $m = 0$  não são os estados com o menor valor absoluto de energia. Isto significa que para energias próximas do nível de Fermi os estados não possuem o momento angular nulo. Em semicondutores, tal fenômeno é apenas observado na presença de um campo magnético o qual origina o efeito Aharonov-Bohm.

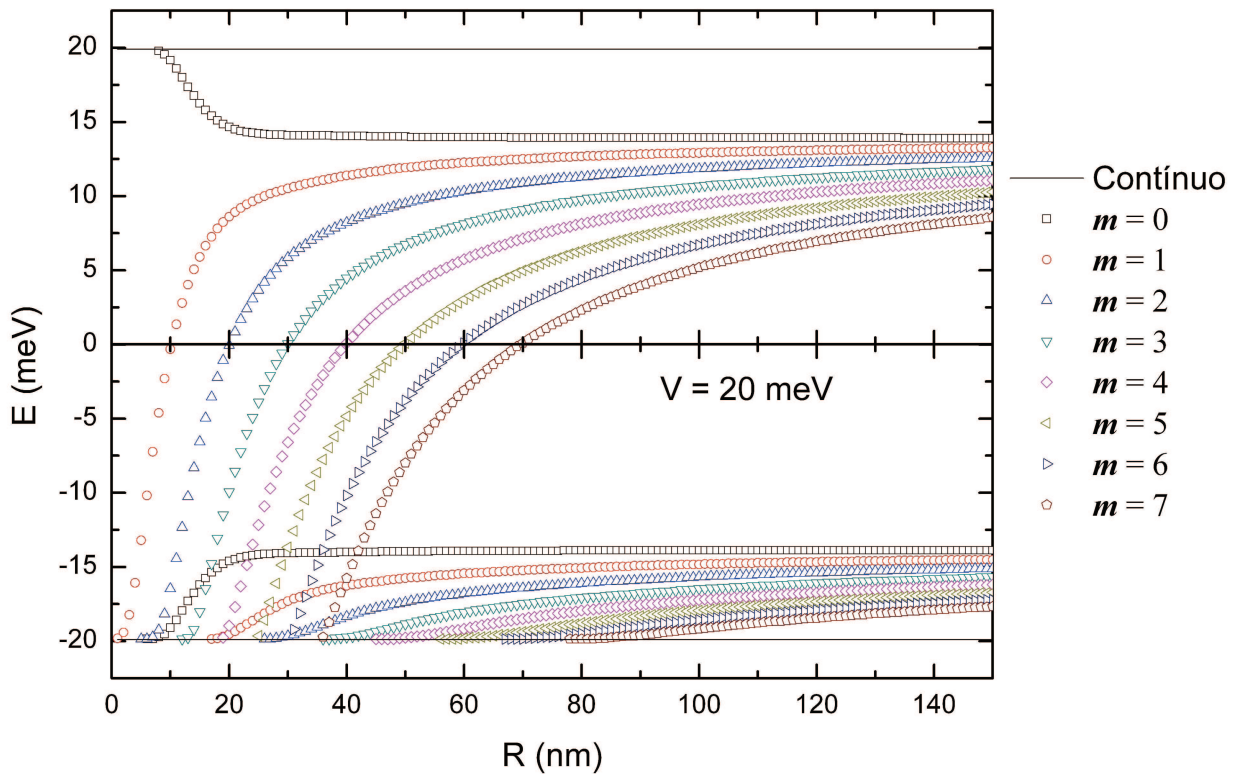


Figura 4.1: Espectro próximo do ponto  $K$  como função do raio do anel para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e para o valor de  $V$  indicado no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixo das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior.

Observe, no gráfico das energias como função do raio que todas as subbandas possuem um comportamento assintótico para grandes valores de  $R$ . De fato todas as subbandas tendem para os valores de energia para o potencial kink linear onde  $p_y = 0$  [7]. Isso ocorre pelo fato de que quanto maior o raio do anel, menor será a curvatura e no limite em que o raio torna-se infinito, o anel torna-se uma linha e o kink passa ser axial ao invés da radial. Podemos demonstrar esse

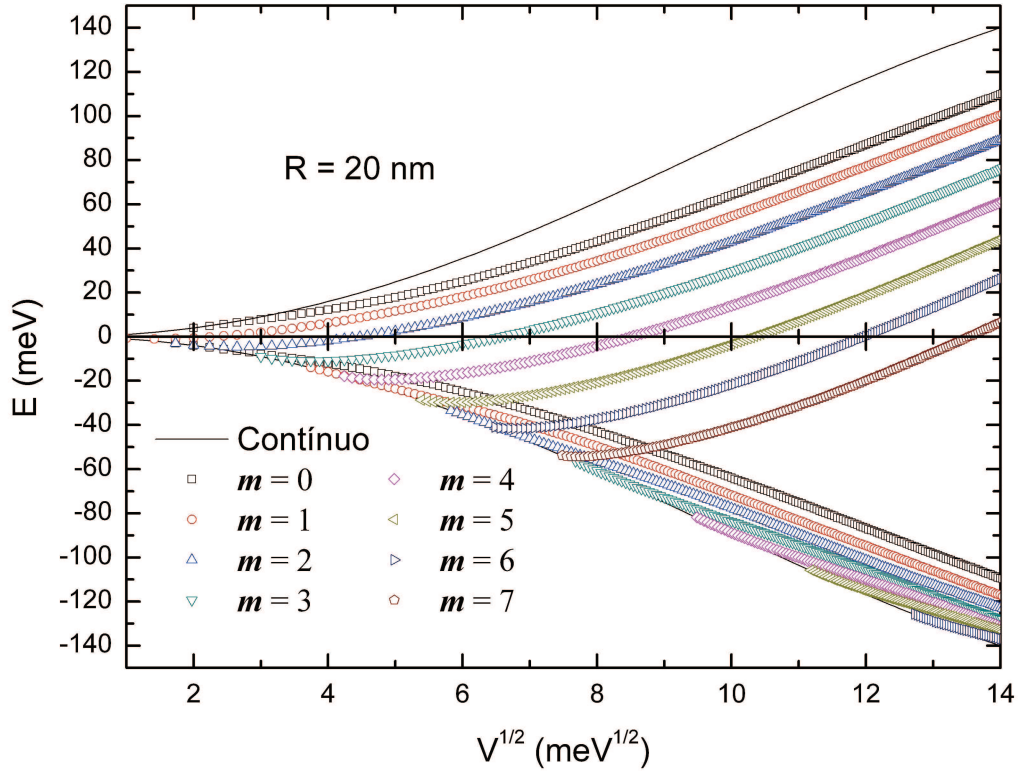


Figura 4.2: Espectro próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e para valor de  $R$  indicado no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixo das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior.

resultado introduzindo a coordenada  $x'$  definida por:

$$x' = \rho - R, \quad (4.6)$$

então em termos de  $x'$  temos que:

$$U(\rho) = \begin{cases} V, & \text{se } -R \leq x' < 0 \\ -V, & \text{se } 0 < x' < \infty \end{cases}$$

e sistema de equações separadas adquirem a forma:

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_B}{dx'} - \frac{m-1}{x'+R}\phi_B &= (E-U)\phi_A - t\phi_{B'} \\ \frac{d\phi_A}{dx'} + \frac{m}{x'+R}\phi_A &= -(E-U)\phi_B \\ \frac{d\phi_{A'}}{dx'} + \frac{m+1}{x'+R}\phi_{A'} &= (E+U)\phi_{B'} - t\phi_A \\ \frac{d\phi_{B'}}{dx'} - \frac{m}{x'+R}\phi_{B'} &= -(E+U)\phi_{A'}. \end{aligned}$$

Passando o limite quando  $R$  tende para o infinito, obtemos que,

$$U_{\infty}(x') = \begin{cases} V, & \text{se } -\infty < x' < 0 \\ -V, & \text{se } 0 < x' < \infty \end{cases}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_{B\infty}}{dx'} &= (E_{\infty} - U_{\infty})\phi_{A\infty} - t\phi_{B'\infty} \\ \frac{d\phi_{A\infty}}{dx'} &= -(E_{\infty} - U_{\infty})\phi_{B\infty} \\ \frac{d\phi_{A'\infty}}{dx'} &= (E_{\infty} + U_{\infty})\phi_{B'\infty} - t\phi_{A\infty} \\ \frac{d\phi_{B'\infty}}{dx'} &= -(E_{\infty} + U_{\infty})\phi_{A'\infty}, \end{aligned}$$

onde usamos a notação,

$$F_{\infty} = \lim_{R \rightarrow \infty} F.$$

Essas equações são exatamente as mesmas que obtemos quando se calcula a energia  $E(p_y)$  para  $p_y = 0$  em um *kink* linear. Observe ainda que  $E_{\infty}$  independe de  $m$ , o que mostra que o valor assintótico independe de  $m$ .

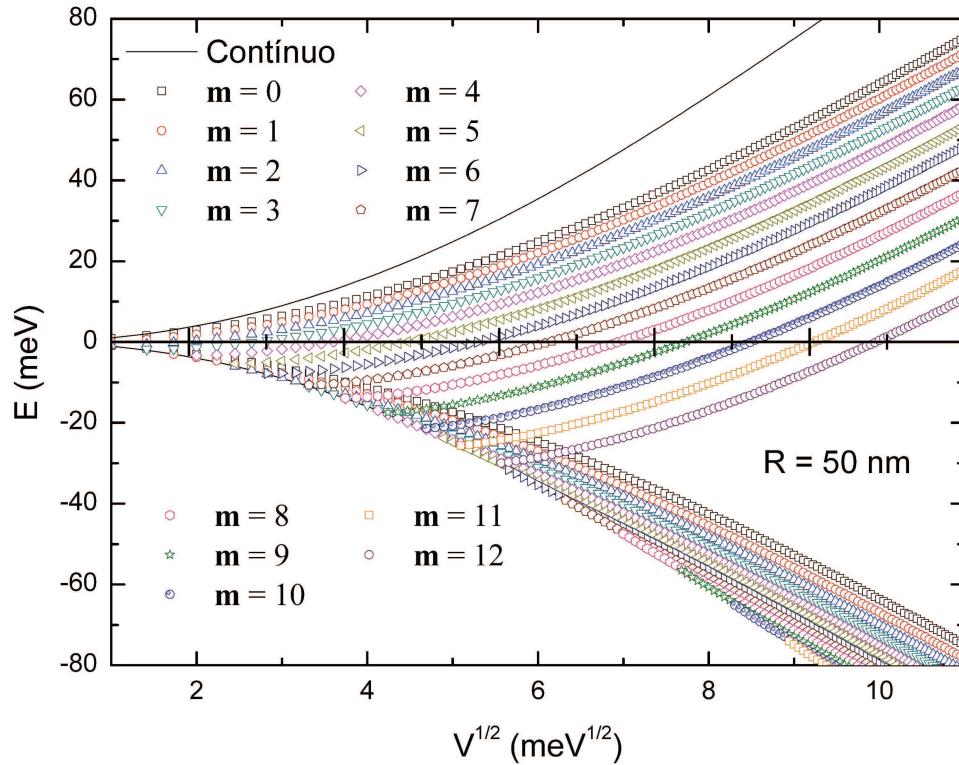


Figura 4.3: Espectro próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 12$  e para  $R = 50$  nm. Observa-se um maior número de estados com energia nula do que o mesmo espectro para  $R = 20$  nm.

Devido à equação (4.1) os estados de energia nula sempre possuirão uma dupla degenerescência como a achada no caso de um potencial kink axial. Porém diferentemente do caso linear os estados que possuem energia nula, no anel, apenas existem para certos valores de  $R$  e  $V$ , isso ocorre devido à quantização do momento angular  $m$ . A Figura 4.3 evidencia isso onde traçamos o espectro como função de  $V$  para um valor maior do raio onde se observa o aparecimento mais freqüente dos estados com energia nula. No limite quando o raio tende para o infinito esperamos que para todos os valores de  $V$  existam estados com energia nula como no caso axial. Para o potencial *kink* axial acha-se que os zeros ocorrem quando[7]

$$p_y^0 \simeq \frac{\hbar\sqrt{tV}}{2^{3/4}}. \quad (4.7)$$

Podemos através de argumentos heurísticos achar uma relação equivalente para o anel: vimos que para grandes valores de  $R$  a coordenada  $x'$  definida pela equação (4.6) aproxima a coordena  $x$ , da mesma forma podemos aproximar a coordenada  $y$  usando a coordenada  $\theta$ . Definiremos uma coordenada  $y'$  como a altura definida por (ver Figura 4.4):

$$y' = R \tan(\theta). \quad (4.8)$$

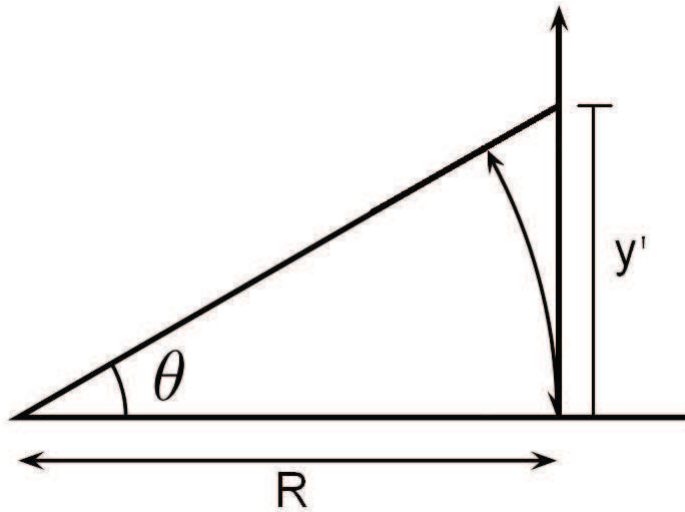


Figura 4.4: Visão geométrica da coordenada  $y'$ .

Observe que podemos escrever  $\theta$  como:

$$\begin{aligned} \theta &= \arctan\left(\frac{y'}{R}\right) \\ &= \frac{y'}{R} - \frac{1}{3}\left(\frac{y'}{R}\right)^3 + \frac{1}{5}\left(\frac{y'}{R}\right)^5 + \dots \end{aligned}$$

desprezando termos de ordem  $1/R^2$  ou superior, obtemos que

$$\theta \approx \frac{y'}{R}. \quad (4.9)$$

No caso radial,  $\psi_A$  é proporcional à  $e^{im\theta}$ , substituindo o  $\theta$  da equação (4.9), obtemos que,

$$\psi_A \approx \phi_A(x') e^{i\frac{m}{R}y'} \quad (4.10)$$

Já no caso linear, como o confinamento apenas acontece na direção do eixo Ox, então a dependência em y é ainda uma onda plana como no caso de uma ddp homogênea, equação , isto é,

$$\psi_A = \phi_A(x) e^{ik_y y} = \phi_A(x) e^{i\frac{p_y}{\hbar} y}. \quad (4.11)$$

Comparando as exponenciais e das equações (4.10) e (4.11) podemos relacionar o momento angular  $m$  com o momento linear  $p_y = \hbar k_y$  como segue,

$$\frac{m}{R} \approx \frac{p_y}{\hbar},$$

onde essa relação é tanto melhor quanto maior for o valor de  $R$ . Então usando a equação (4.7) achamos a condição para que tenhamos estados de energia zero,

$$\frac{m}{R} \approx \frac{p_y^0}{\hbar},$$

ou seja,

$$\frac{m}{R} \approx \frac{\sqrt{tV}}{2^{3/4}}. \quad (4.12)$$

Apenas para valores de  $R$  e  $V$  que satisfazem a equação (4.12) para  $m = 0, \pm 1, \dots$  existirão estados de energia nula. Observe que para  $m = 0$  não podem existir tais estados<sup>1</sup> o que concorda com os espectros apresentados. Para  $V = (20 \text{ meV})/\hbar v_F$ , temos que  $p_y^0/\hbar \approx 0.1 \text{ nm}^{-1}$ , então obtemos os estados de energia nula em  $R \approx 10 \text{ nm}$  para  $m = \pm 1$ , em  $R \approx 20 \text{ nm}$  para  $m = \pm 2$  e assim por diante, os quais podem ser observados no gráfico da Figura 4.1.

A equação (4.7) foi deduzida apenas para  $V \ll t$  [15], portanto a equação (4.12) também possuem essa limitação. Por exemplo, se  $V = (100 \text{ meV})/\hbar v_F$ , a equação (4.12) prevê que os zeros aconteceram para  $R \approx m(5 \text{ nm})$ , porém o gráfico da Figura 4.5 mostra que os zeros acontecem antes dos valores previstos.

<sup>1</sup>Exceto para o caso trivial em que  $V = 0$ .

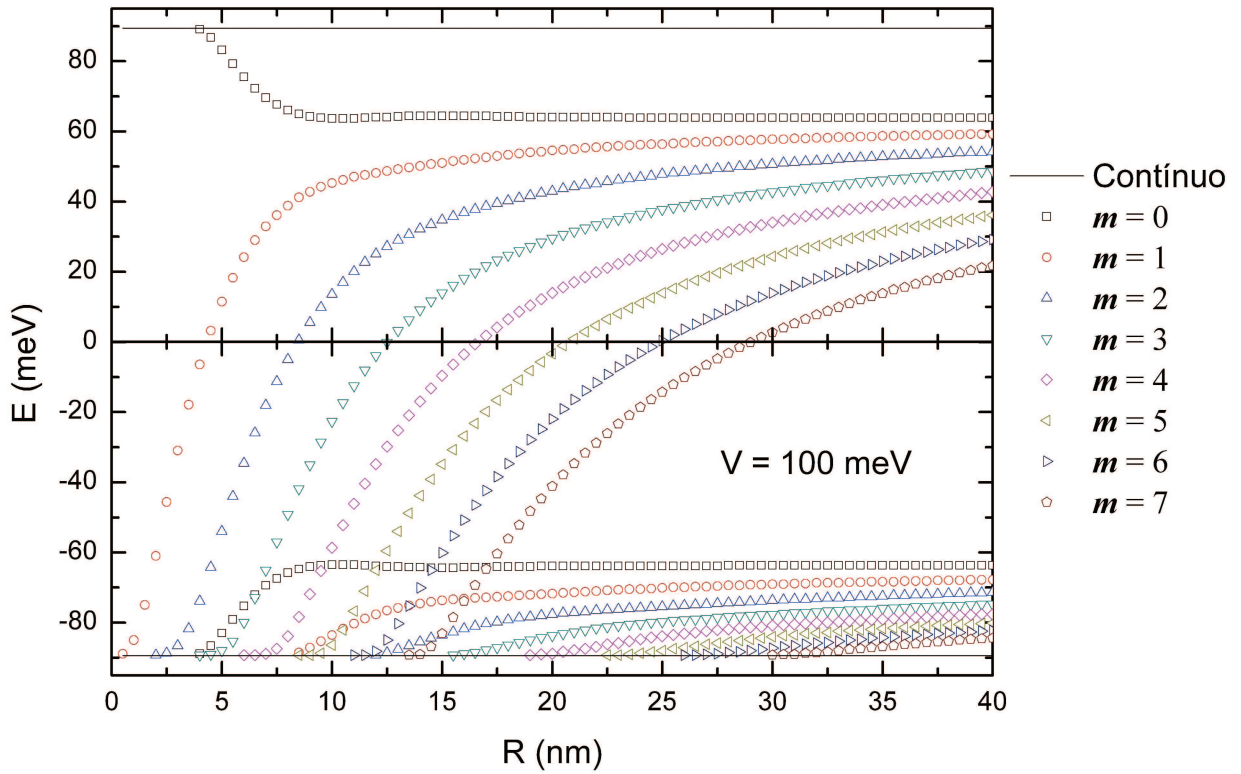


Figura 4.5: Espectro próximo do ponto  $K$  como função do raio do anel para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e para o valor de  $V$  indicado no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixo das abscissas o espectro mostrado. Observe que devido ao alto valor de  $V$ , os zeros acontecem antes dos valores previstos.

## 4.2 Anel Duplo

Nesta seção mostramos o espectro de energia como função da distância entre os anéis  $L = R_2 - R_1$ , do raio médio  $R = (R_1 + R_2)/2$ , e da amplitude do potencial,  $V$ . Nas Figuras 4.6 e 4.7 podemos verificar que o espectro se assemelha com a superposição das subbandas de dois anéis que constituem o anel duplo. Porém enquanto que para  $\rho = R_1$  (primeiro anel) o potencial  $U_1$  troca de sinal de  $+V$  para  $-V$ , para  $\rho = R_2$  (segundo anel) esse potencial troca de sinal de  $-V$  para  $+V$ . Portanto o primeiro anel é formado por um potencial *kink*, enquanto que o segundo é formado pelo potencial *antikink*. Na Figura 4.8 comparamos o espectro do anel duplo com os espectros dos dois anéis que constituem o anel duplo. Comparamos as subbandas  $m = 3$  de cada anel e vemos uma boa concordância quando a diferença entre as energias dos anéis simples é alta (para o anel com o maior raio comparamos com a subbanda  $m = -3$ , pois, como vimos  $E_{ak}(m) = E_k(-m)$ ).

Quando as energias dos anéis simples tornam-se comparáveis nota-se o aparecimento de um *gap* entre as bandas do anel duplo. Tal cruzamento é denominado *anticrossing*. O *gap* é aberto

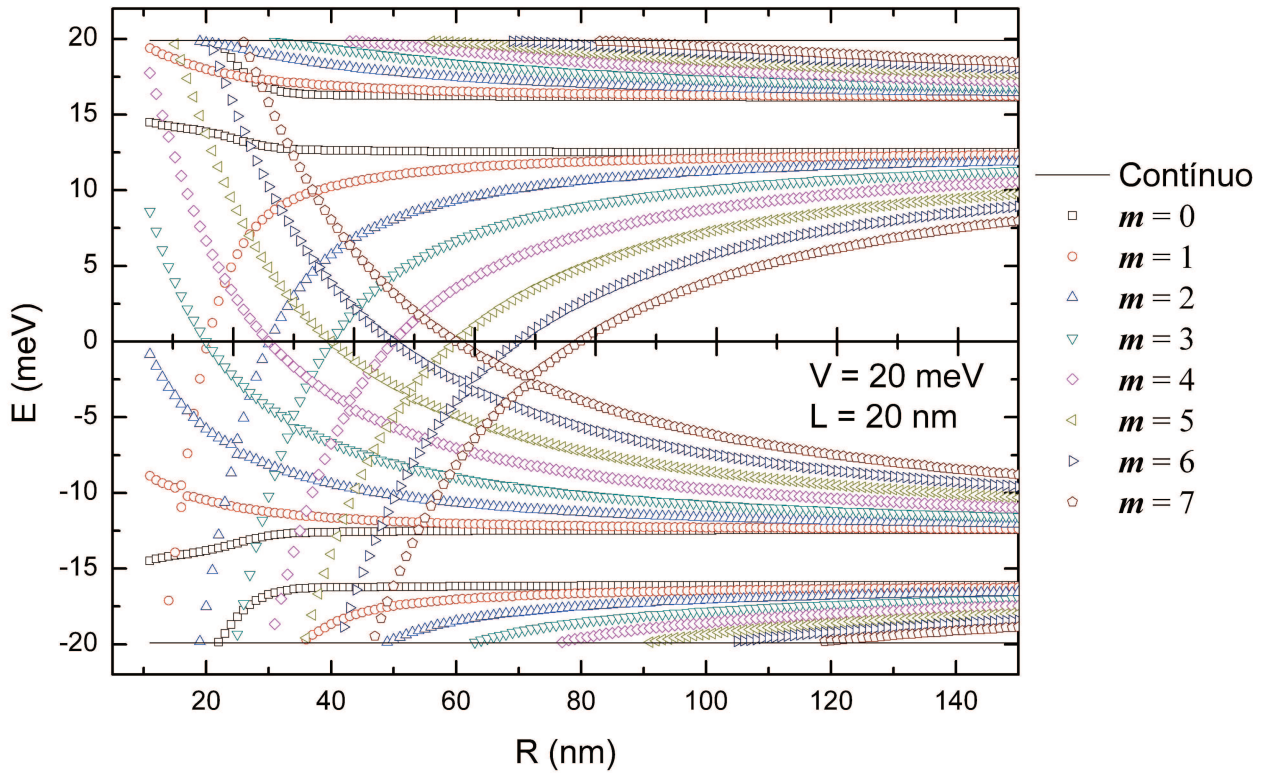


Figura 4.6: Espectro de um anel duplo próximo do ponto  $K$  como função do raio médio para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e para valores de  $V$  e  $L$  indicados no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixos das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior.

tanto nos gráficos do espectro em função do raio,  $R$ , como em função da amplitude  $V$ , como podemos ver claramente nas Figuras 4.10 e 4.12. Tal *gap* é semelhante ao *gap* aberto no cruzamento dos níveis de energia nos estados polar e homopolar das moléculas [36] e de fato podemos fazer um tratamento semelhante. Seja  $\Phi_1 = [\psi_{1A} \ \psi_{1B} \ \psi_{1B'} \ \psi_{1A'}]^T$  e  $\Phi_2 = [\psi_{2A} \ \psi_{2B} \ \psi_{2B'} \ \psi_{2A'}]^T$  as soluções, respectivamente, do anel simples interno e externo que constituem um anel duplo. Seja  $H$  o Hamiltoniano do anel duplo, o qual pode ser escrito como,

$$H = H_1 + W_2 = H_2 + W_1,$$

onde  $H_1$  ( $H_2$ ) é o Hamiltoniano do anel interno (externo). Os operadores  $W_1$  e  $W_2$  são dados por:

$$W_i = \begin{bmatrix} w_i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -w_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -w_i \end{bmatrix}, \quad (4.13)$$

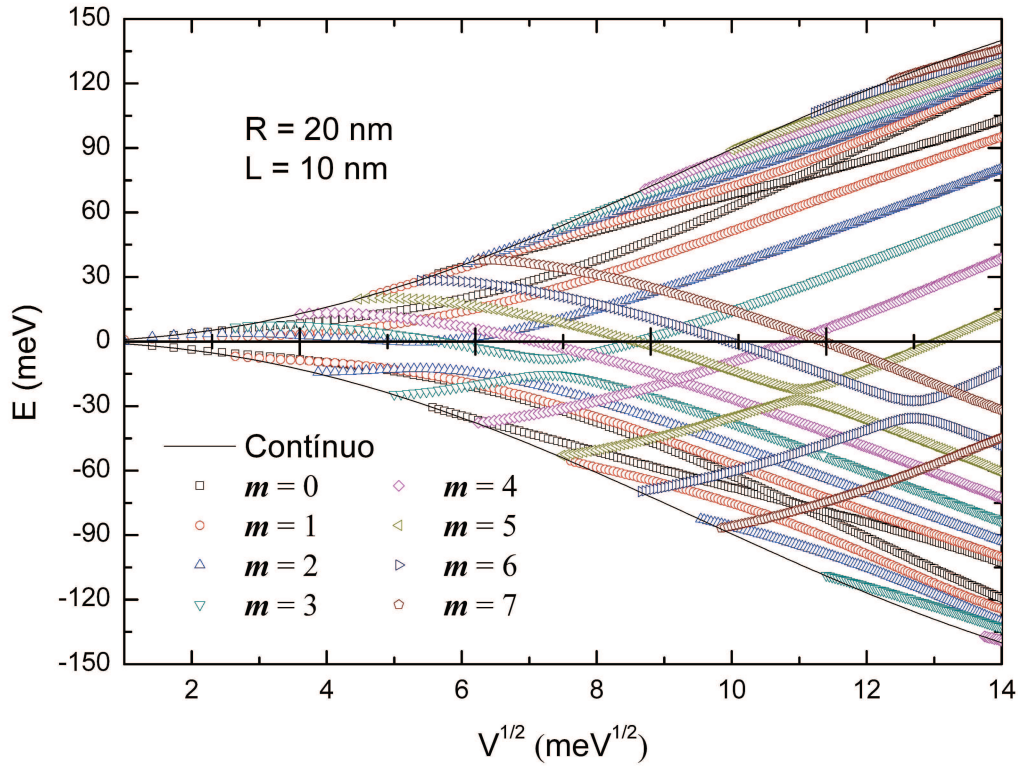


Figura 4.7: Espectro de um anel duplo próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $R$  e  $L$  indicados no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixo das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior.

onde,

$$w_1(\rho) = \begin{cases} 2V, & \text{se } 0 < \rho < R_1 \\ 0, & \text{se } \rho > R_1 \end{cases}$$

$$w_2(\rho) = \begin{cases} 0, & \text{se } 0 < \rho < R_2 \\ 2V, & \text{se } \rho > R_2. \end{cases}$$

Observe que,

$$\begin{aligned} \langle \Phi_1 | H | \Phi_1 \rangle &= \varepsilon_1 + \langle \Phi_1 | W_2 | \Phi_1 \rangle \\ \langle \Phi_2 | H | \Phi_1 \rangle &= \varepsilon_1 \langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle + \langle \Phi_2 | W_2 | \Phi_1 \rangle, \end{aligned} \quad (4.14)$$

onde  $H_1 \Phi_1 = \varepsilon_1 \Phi_1$ . O operador  $W_2$  apenas é diferente de zero para valores de  $\rho$  maiores que o raio do anel externo,  $R_2$ , porém as componentes do *pseudospinor*  $\Phi_1$  apenas assume valores apreciáveis na proximidades de  $R_1$ , portanto podemos dizer que,

$$\langle \Phi_1 | H | \Phi_1 \rangle \approx \varepsilon_1. \quad (4.15)$$

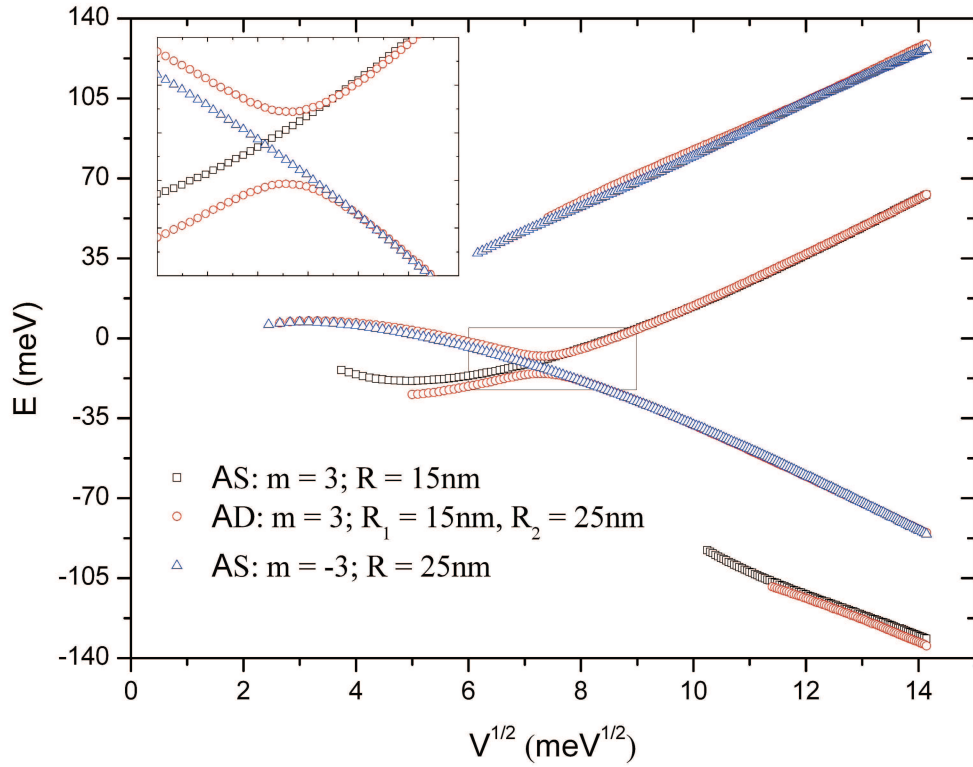


Figura 4.8: Comparação entre as energias do anel duplo e as energias dos anéis simples que formam o anel duplo. Em preto as energias com índice  $m = 3$  de um anel simples com um raio igual ao raio menor do anel duplo  $R_1 = 15$  nm. Em vermelho as energias com índice  $m = 3$  do anel duplo. Em azul as energias com índice  $m = -3$  de um anel simples com raio igual ao raio maior do anel duplo  $R_2 = 25$  nm. Utilizamos o índice  $m = -3$ , pois no raio  $R_2$ , temos um potencial *antikink*.

O elemento  $\langle \Phi_2 | W_2 | \Phi_1 \rangle$  pode ser calculado explicitamente e é dado por,

$$\varepsilon_{12} = \langle \Phi_2 | W_2 | \Phi_1 \rangle = 2V\gamma_2 \langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle, \quad (4.16)$$

onde,

$$\gamma_2 = \frac{\int_{R_2}^{\infty} \psi_{2A}^{\dagger} \psi_{1A} dx^2 + \int_{R_2}^{\infty} \psi_{2B}^{\dagger} \psi_{1B} dx^2 - \int_{R_2}^{\infty} \psi_{2B'}^{\dagger} \psi_{1B'} dx^2 - \int_{R_2}^{\infty} \psi_{2A'}^{\dagger} \psi_{1A'} dx^2}{\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_2^{\dagger} \Phi_1 dx^2},$$

é um número menor que um que depende de  $R_2$ . Pelas equações (4.14) e (4.15), podemos dizer que,

$$H\Phi_1 \approx \varepsilon_1 \Phi_1 + \varepsilon_{12} \Phi_2,$$

onde devemos desprezar termos  $\langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle^2$  ou superiores. Da mesma forma, podemos mostrar

que,

$$H\Phi_2 \approx \varepsilon_{21}\Phi_1 + \varepsilon_2\Phi_2,$$

onde  $H_2\Phi_2 = \varepsilon_2\Phi_2$ , e,

$$\varepsilon_{21} = \langle \Phi_1 | W_1 | \Phi_2 \rangle = 2V\gamma_1 \langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle \quad (4.17)$$

$$\gamma_1 = \frac{\int_0^{R_1} \psi_{1A}^\dagger \psi_{2A} dx^2 + \int_0^{R_1} \psi_{1B}^\dagger \psi_{2B} dx^2 - \int_0^{R_1} \psi_{1B'}^\dagger \psi_{2B'} dx^2 - \int_0^{R_1} \psi_{1A'}^\dagger \psi_{2A'} dx^2}{\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_1^\dagger \Phi_2 dx^2}. \quad (4.18)$$

Através da equação (4.14) e da equação equivalente para  $\varepsilon_{21}$ , obtemos que,

$$\varepsilon_{21} - \varepsilon_{12} = \langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle (\varepsilon_1 - \varepsilon_2). \quad (4.19)$$

Seja  $\Psi_1$  e  $\Psi_2$ , autovetores do Hamiltoniano do anel duplo com energias  $E_1$  e  $E_2$  respectivamente, de tal forma que  $E_1$  ( $E_2$ ) é a subbanda superior (inferior) do cruzamento dos níveis  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  dos anéis simples (Figura 4.9). Vamos supor que a soluções podem ser escritas como,

$$\Psi_1 \approx C_{11}\Phi_1 + C_{12}\Phi_2$$

$$\Psi_2 \approx C_{21}\Phi_1 + C_{22}\Phi_2,$$

substituindo na equação de autovalor, obtemos que,

$$E_i = \varepsilon_1 + \frac{C_{i2}}{C_{i1}}\varepsilon_{21} = \varepsilon_2 + \frac{C_{i1}}{C_{i2}}\varepsilon_{12}. \quad (4.20)$$

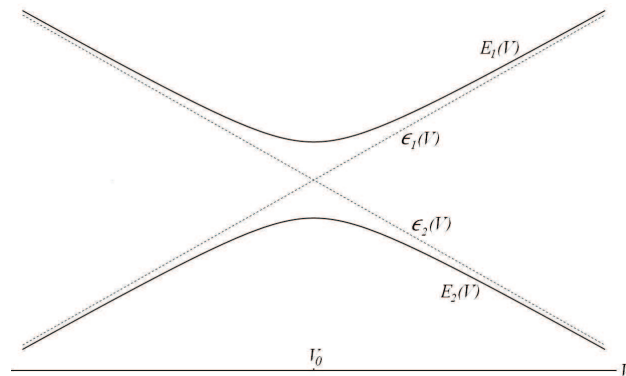


Figura 4.9: Esboço do cruzamento de dois níveis de energia.

Tanto  $E_1$  e  $E_2$  quanto os epsíllons são funções da amplitude do potencial  $V$  e, de fato, até mesmo os *pseudospinores* dependem de  $V$ . Seja  $V_0$  o valor da amplitude do potencial  $V$  onde

ocorre o cruzamento dos níveis de energia. Vemos que,

$$E_1(V) \approx \begin{cases} \varepsilon_2(V), & \text{se } V \ll V_0 \\ \varepsilon_1(V), & \text{se } V \gg V_0 \end{cases}$$

$$E_2(V) \approx \begin{cases} \varepsilon_1(V), & \text{se } V \ll V_0 \\ \varepsilon_2(V), & \text{se } V \gg V_0. \end{cases}$$

Se  $V \ll V_0$ , então  $E_1 \approx \varepsilon_2$ , logo,

$$\frac{C_{11}}{C_{12}} \varepsilon_{12} \approx 0 \quad (4.21)$$

$$\frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{21} \approx \varepsilon_2 - \varepsilon_1. \quad (4.22)$$

combinando essas últimas equações com a equação (4.19) obtemos que,

$$\frac{C_{11}}{C_{12}} \approx 0,$$

ou,

$$\frac{C_{11}}{C_{12}} \approx -\langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle.$$

Em ambos os casos podemos dizer que  $|C_{12}| \gg |C_{11}|$ , portanto,

$$\Psi_1 \approx \Phi_2.$$

De forma semelhante pode-se mostrar que quando as energias  $E_1$  e  $E_2$  tendem para umas das energias  $\varepsilon_1$  ou  $\varepsilon_2$ , a solução tenderá para a solução do anel simples respectivo a energia. Portanto, variando a amplitude do potencial, podemos fazer o elétron tunelar de um anel para o outro. O teorema adiabático garante-nos que se a amplitude do potencial for variada lentamente, o elétron irá tunelar de um anel para outro, porém se a mudança for rápida, o elétron saltará de nível e permanecerá no mesmo anel.

Agora analisaremos o intervalo em que  $V \approx V_0$ . Nesse intervalo temos que  $\varepsilon_1 \approx \varepsilon_2$  e pela equação (4.19) obtemos que  $\varepsilon_{12} \approx \varepsilon_{21} \approx \varepsilon$ . Das equações (4.20), obtemos que  $|C_{11}| = |C_{12}|$ , e então,

$$E_1 = \varepsilon_1 + |\varepsilon|$$

$$E_2 = \varepsilon_1 - |\varepsilon|,$$

Finalmente achamos que o *gap* aberto  $\Delta E = E_1 - E_2$  é dado por,

$$\Delta E = 2|\varepsilon| = 4|V\gamma\langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle|. \quad (4.23)$$

Portanto o gap é proporcional ao produto  $\langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle$  que chamaremos de *overlap* dos *pseudospinores*. Imediatamente vemos que se os *pseudospinores* tiverem valores diferentes de  $m$ , o *overlap* é nulo e não existe *gap*, isto é, apenas existe *anticrossing* nas subbandas que possuem o mesmo momento angular  $m\hbar$ . Isso pode ser observado em todos os gráficos desta seção. Naturalmente quanto maior for a distância entre os anéis,  $L$ , menor será o *overlap* entre os *pseudospinores*, portanto, o *gap* será cada vez menor o que pode ser visto comparando os gráfico das Figuras 4.7 e 4.11 ou, das Figuras 4.12 e 4.13, onde mostramos o gráfico do espectro em função de  $V$  para mesmo valor de  $R$ , porém, para dois valores de  $L$  diferentes. Ao aumentarmos o raio  $R$ , o *gap* entre as bandas também aumenta. Podemos ver isso comparando os gráfico das Figuras 4.7 e 4.12 ou, das Figuras 4.11 e 4.13, onde mostramos o gráfico do espectro em função de  $V$  para mesmo valor de  $L$ , porém, para dois valores de  $R$  diferentes. Isso significa que o *overlap* dos *pseudospinores* aumenta, portanto, podemos dizer que o coeficiente de decaimento<sup>2</sup> dos estados dos anéis simples aumenta proporcional ao raio do respectivo anel. Esse comportamento torna-se cada vez mais tênue com o aumento do raio, pois, o espectro em função de  $R$  possui um caráter assintótico. Na Figura 4.12 o gap foi grande o suficiente para retirar os estados com energia nula para os valores de  $V$  apresentados, porém para valores  $V$  mais altos esses estados tornam a aparecem para valores de  $m$  mais elevados.

Na Figura 4.14 traçamos o espectro como função da distância  $L$  dos anéis, mantendo o raio médio,  $R$ , constante. No limite em que  $L = 0$ , o potencial aplicado tende simplesmente para o caso de uma ddp homogênea, portanto as subbandas deixam de existir sobrando apenas o gap entre as bandas de valência (região abaixo da linha sólida inferior) e a banda de condução (região acima da linha sólida superior). No limite em que  $L = 2R$  (não faz sentido falar nesse parâmetro além desse limite) o raio do anel interno anula-se, ou seja, o anel interno deixa de existir sobrando apenas o anel mais externo. a Figura 4.14 podemos ver as subbandas do anel interno “imerso” no contínuo na medida em que aumentamos  $L$  sobrando apenas as subbandas do anel externo.

### 4.3 Interfaces Graduais

Tratamos com duas interfaces graduais diferentes. Em ambas traçamos o espectro como função da amplitude do potencial  $V$  e como função da espessura da interface gradual  $w$ .

<sup>2</sup>Coefficiente que mede o quão rápido a função de onda decai.

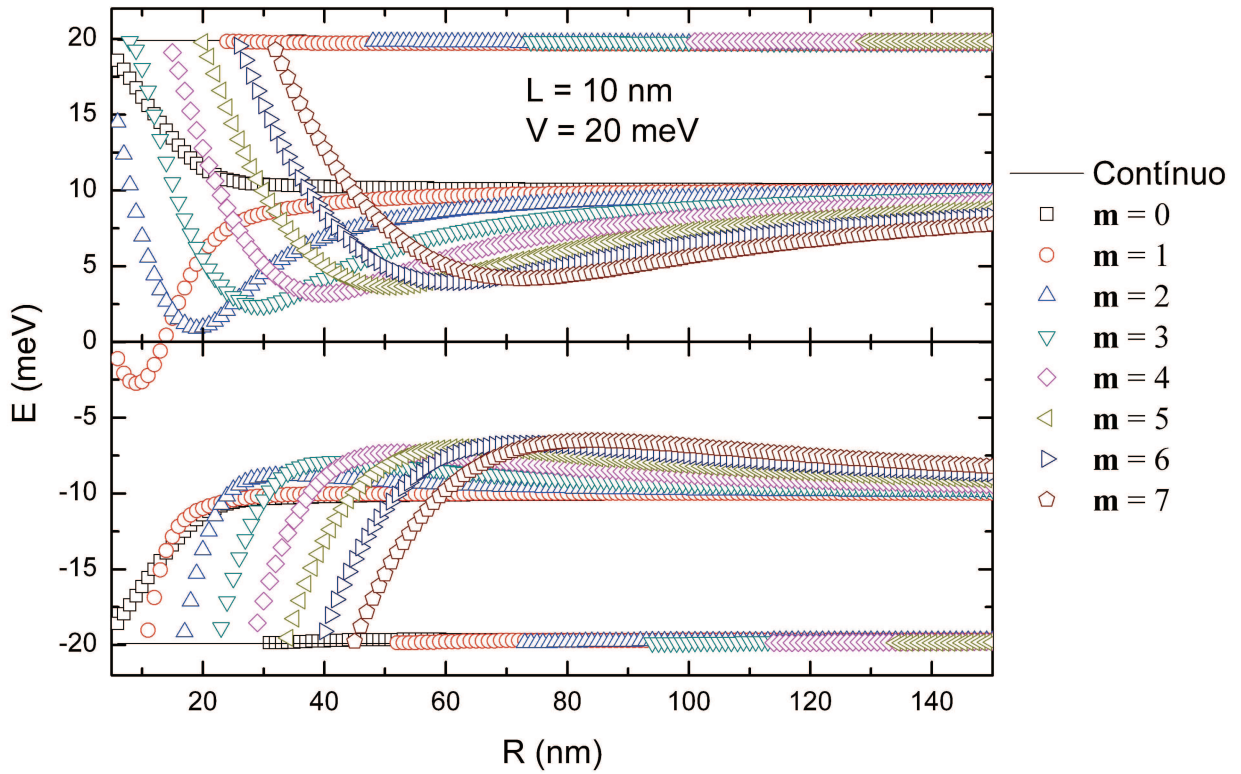


Figura 4.10: Espectro de um anel duplo próximo do ponto  $K$  como função do raio médio para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e para valores de  $V$  e  $L$  que realçam o *gap* entre as energias com o mesmo índice  $m$ .

### 4.3.1 Interface Linear

Nesse caso tratamos com uma mudança linear, ou seja,

$$V(\rho) = V_0 \frac{(R - w/2 - \rho)}{w/2} + V_0,$$

o qual é esboçado na Figura 4.15.

O gráfico do espectro em função da amplitude do potencial  $V$  é mostrado na Figura 4.16, onde vemos que o comportamento qualitativo dos níveis de energias é muito semelhante ao caso abrupto, porém quantitativamente diferente. Para  $V^{1/2} \sim 14$  o nível de energia para  $m = 0$  com interface gradual é aproximadamente 65 meV, enquanto que para a interface abrupta é aproximadamente 100 meV. Na Figura 4.17 traçamos o gráfico do espectro como função da espessura da interface onde podemos ver o surgimento de novas subbandas “emergindo” do contínuo para valores mais elevados da espessura  $w$ . Tal resultado é consistente com os obtidos para para o kink axial [15].

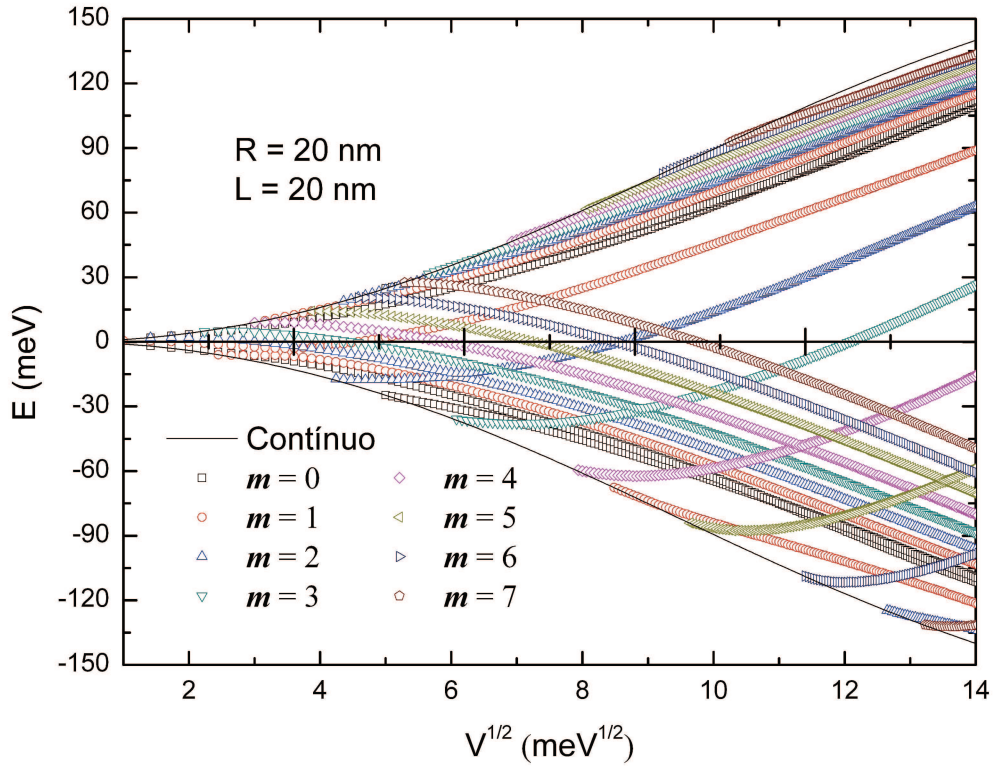


Figura 4.11: Espectro de um anel duplo próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $R$  e  $L$  indicados no gráfico.

### 4.3.2 Interface Não-Linear

Nesse caso tratamos com uma mudança não linear, fizemos,

$$V(\rho) = V_0 \cos\left(\frac{(\rho - R + w/2)\pi}{w}\right),$$

o qual é esboçado na Figura 4.18.

O gráfico do espectro em função da amplitude do potencial  $V$  é mostrado na Figura 4.19. Tal espectro apresenta um comportamento ainda mais semelhante ao caso abrupto tanto qualitativamente quanto quantitativamente. Na Figura 4.20 traçamos o gráfico do espectro como função da espessura da interface no qual a única diferença observada para o mesmo espectro da interface linear é que neste as energias são “antecipadas” em relação ao primeiro, o que sugere que houve algo semelhante a uma mudança de escala.

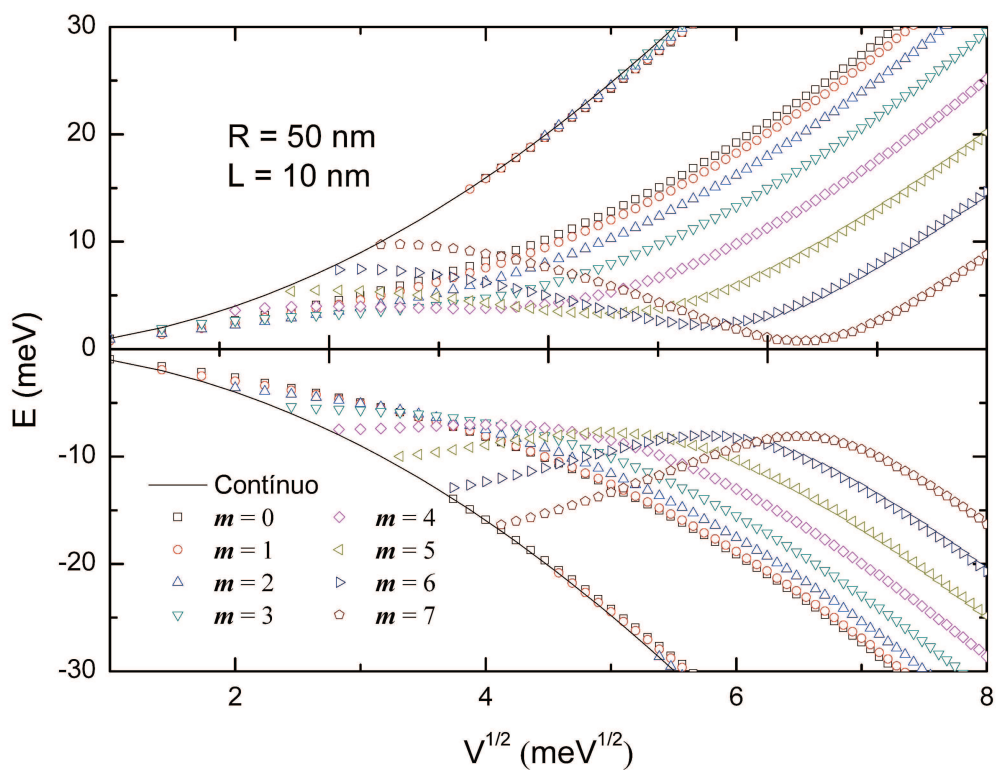


Figura 4.12: Espectro de um anel duplo próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $R$  e  $L$  indicados no gráfico.

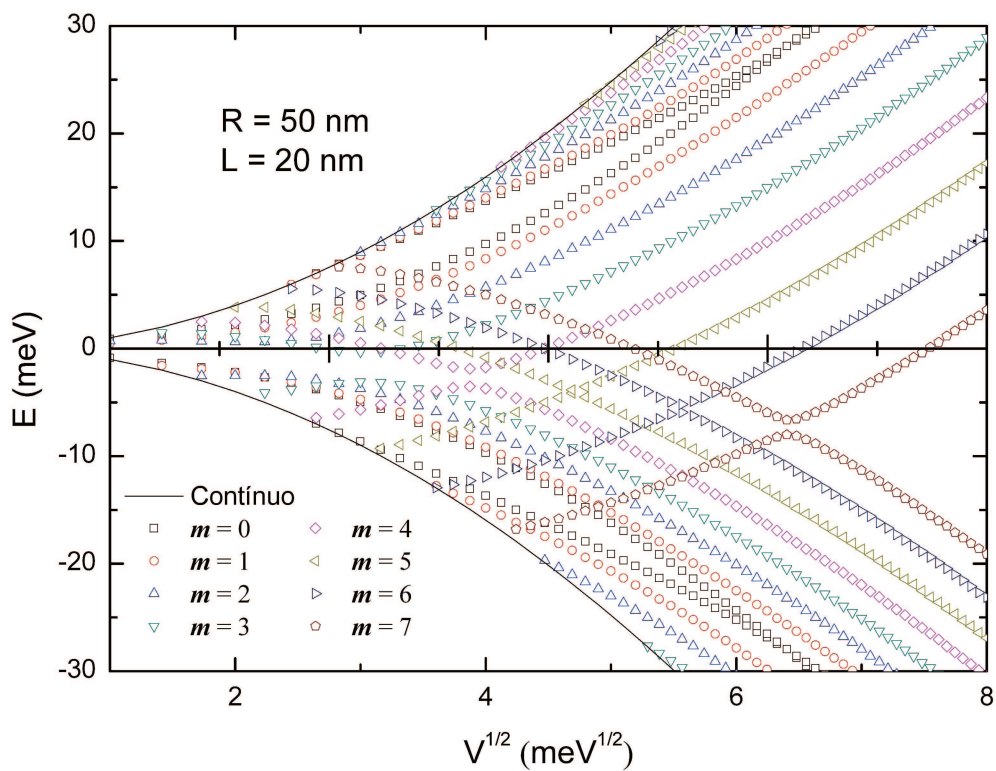


Figura 4.13: Espectro de um anel duplo próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $R$  e  $L$  indicados no gráfico.

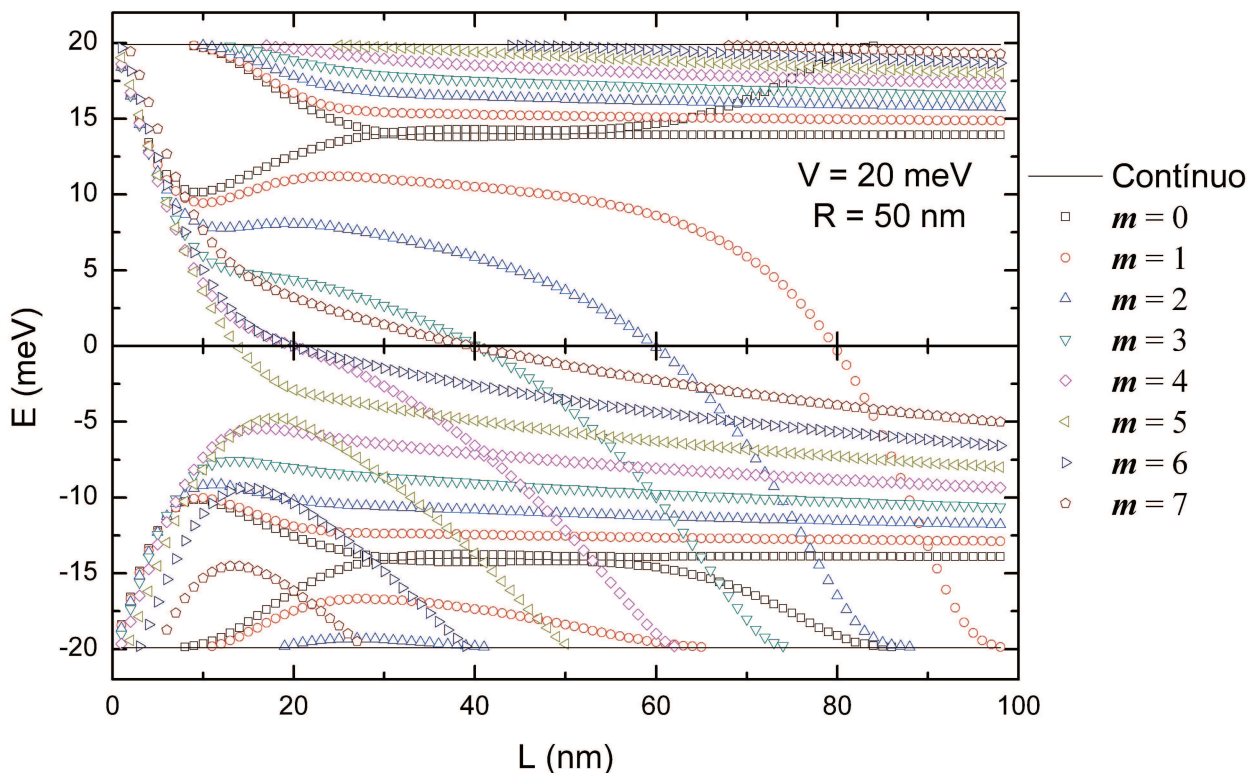


Figura 4.14: Espectro de energia como função da distância  $L$  entre os anéis simples para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $R$  e  $V$  indicados no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixo das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior.

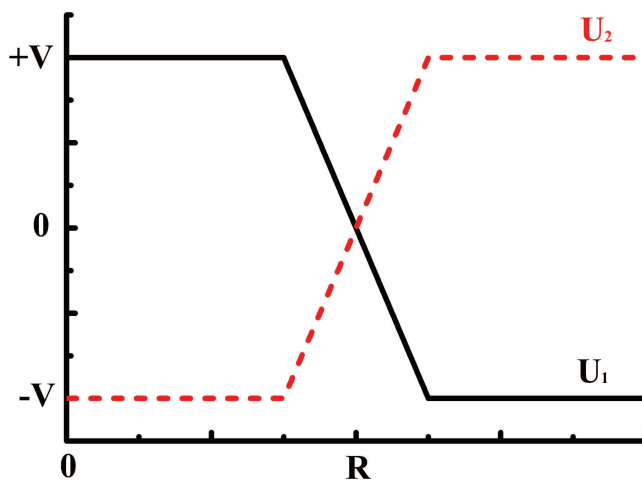


Figura 4.15: Gráfico do potencial  $U$  (em preto) e  $-U$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel com interfaces graduais lineares.

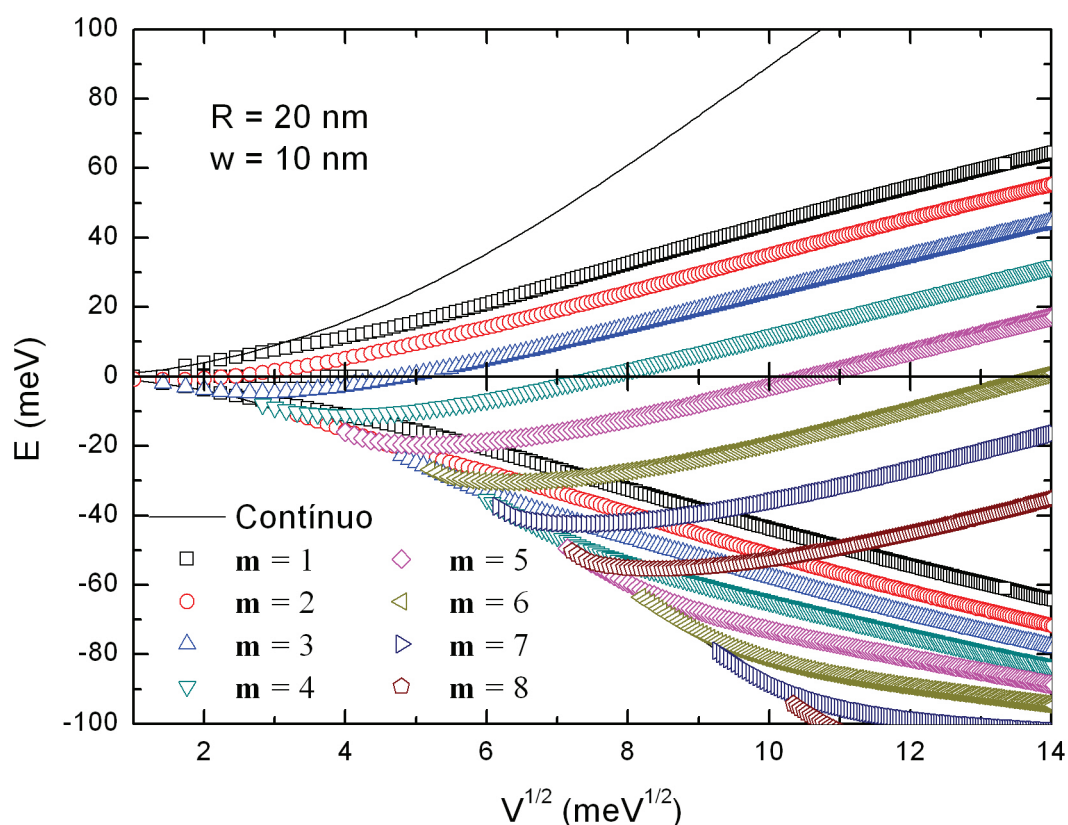


Figura 4.16: Espectro de um anel com interfaces graduais lineares próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $R$  e  $w$  indicados no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixo das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior.

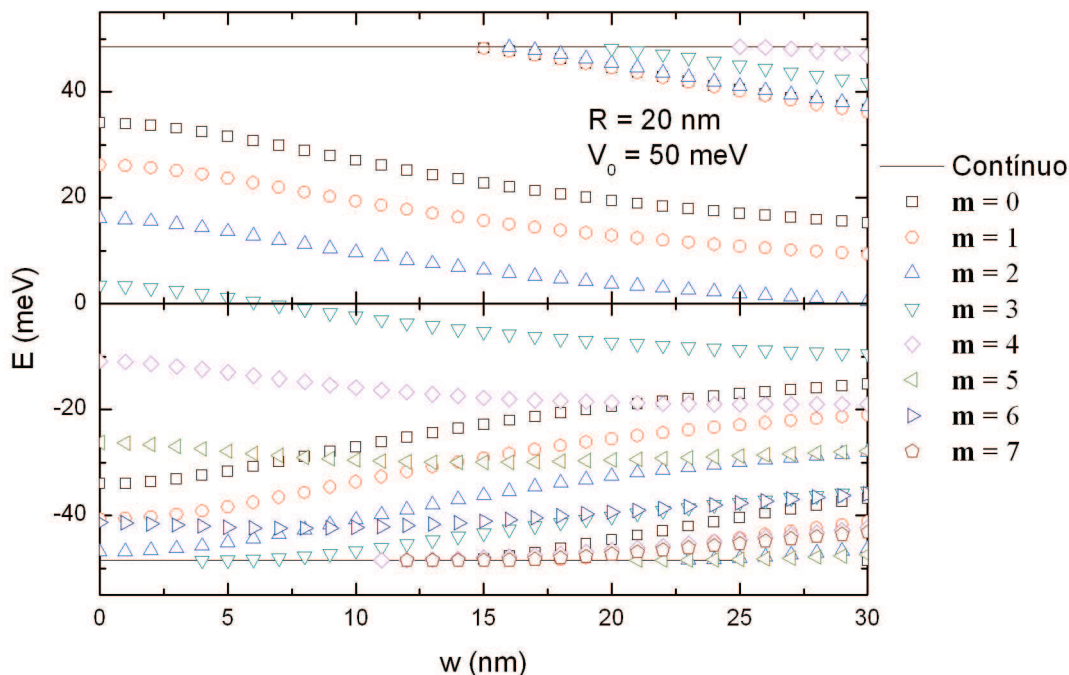


Figura 4.17: Espectro de um anel com interfaces graduais lineares próximo do ponto  $K$  como função da espessura,  $w$  da interface para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $V$  e  $R$  indicados no gráfico. O espectro para  $m = -1, -2, \dots, -7$  pode ser obtido apenas refletindo em relação ao eixo das abscissas o espectro mostrado. Para energias acima da linha sólida superior temos um contínuo de energias. Da mesma forma para energias abaixo da linha sólida inferior.

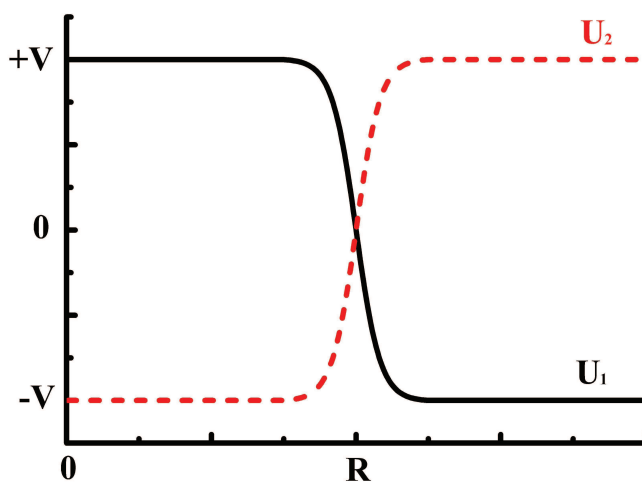


Figura 4.18: Gráfico do potencial  $U$  (em preto) e  $-U$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel com interfaces graduais não lineares.

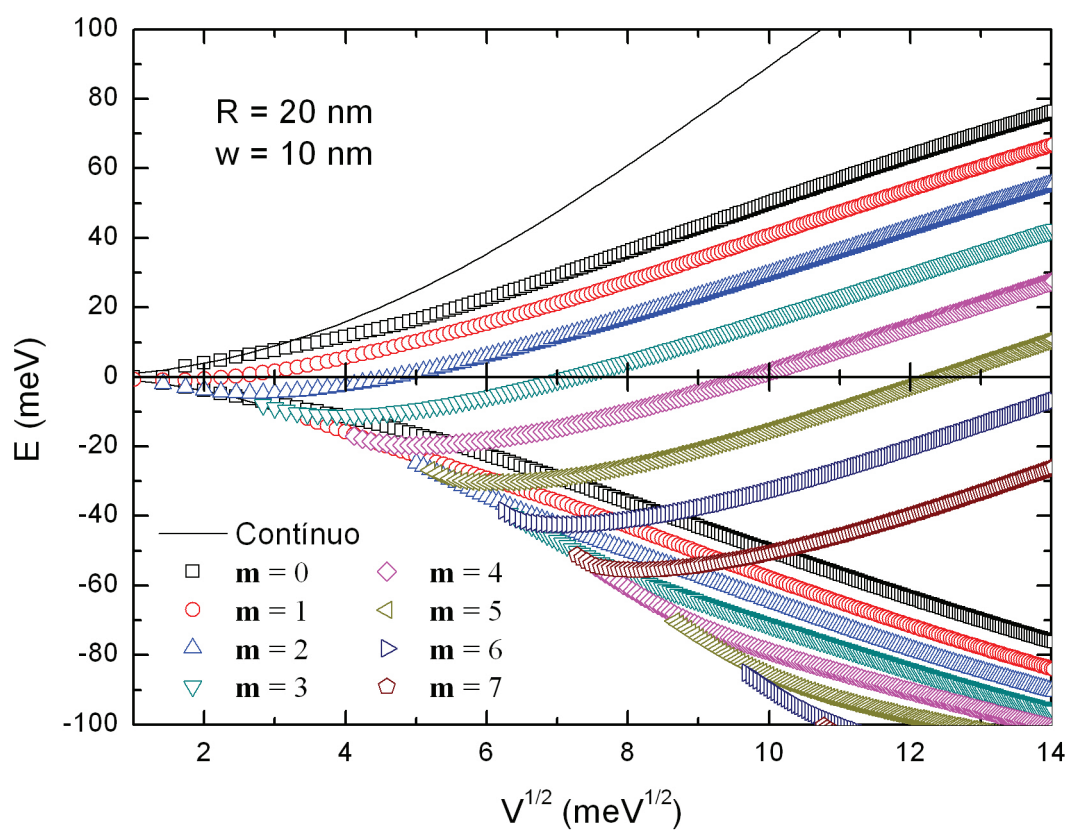


Figura 4.19: Espectro de um anel com interfaces graduais não lineares próximo do ponto  $K$  como função da amplitude do potencial para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $R$  e  $w$  indicados no gráfico.

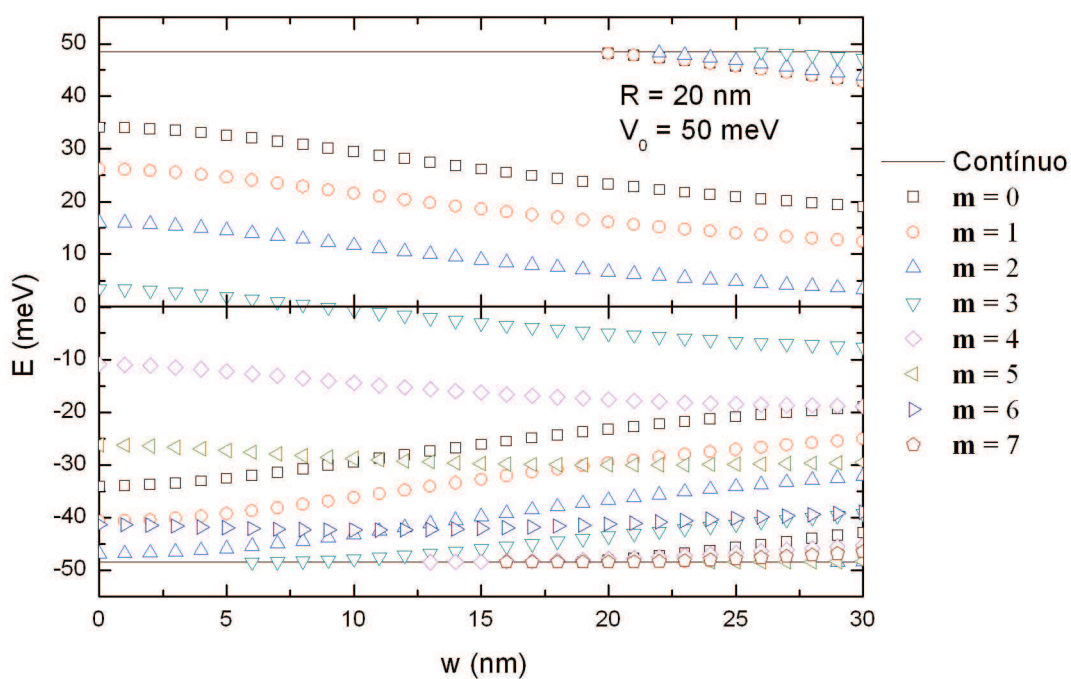


Figura 4.20: Espectro de um anel com interfaces graduais não lineares próximo do ponto  $K$  como função da espessura,  $w$ , da interface para  $m = 0, 1, \dots, 7$  e valores de  $V$  e  $R$  indicados no gráfico.

## *Conclusões*

Nos últimos trinta anos foram descobertas novas formas alotrópicas do carbono que demonstraram possuir algumas propriedades passíveis de aplicações em várias áreas da ciência. Apresentamos tais formas alotrópicas concentrando principalmente nossas atenções no grafeno, onde discutimos superficialmente um pouco da evolução de sua descoberta e de sua síntese. Também foram discutidas algumas propriedades singulares do grafeno e da bicamada de grafeno, tais como, o tunelamento Klein, um efeito Hall Quântico anômalo e um gap controlável.

Utilizamos o formalismo *tight-binding* para descrever os portadores de carga no grafeno. A partir desse formalismo é possível desenvolver a equação de Dirac para o grafeno justificando o motivo pelo qual se é habitual dizer que elétrons no grafeno comportam-se como férmions relativísticos de massa nula em duas dimensões. Tal descrição foi estendida à uma bicamada de grafeno e mostramos que quando submetida à uma diferença de potencial constante apresenta um gap no espectro, o qual pode ser controlado variando a diferença de potencial entre as camadas. Quando a diferença de potencial é nula o espectro não exibe gap restando apenas bandas parabólicas. Mostramos ainda como tal gap se comporta em função da diferença de potencial aplicada, exibindo um comportamento aproximadamente linear, para pequenos valores da diferença de potencial.

Os principais resultados deste trabalho relaciona-se a um tipo particular de confinamento, conhecido como confinamento topológico, no qual a diferença de potencial aplicada sobre a bicamada de grafeno muda de sinal na região de confinamento. Aplicamos o formalismo desenvolvido aos sistemas que consistiam de potenciais que mudavam de sinal abruptamente na direção radial (potencial *kink* radial) dando origem a estados semelhantes aos estados em anéis quânticos semicondutores e calculamos analiticamente o espectro de energia. Incluímos, através de cálculos numéricos, efeitos de uma mudança gradual do sinal dos potenciais.

Mostramos como o espectro de energia próximo do ponto  $\mathbf{K}$  se comporta em relação aos parâmetros que definem os potenciais estudados, e mostramos como calcular o espectro próximo do ponto  $\mathbf{K}'$  partindo do espectro próximo do ponto  $\mathbf{K}$ . Nos potenciais estudados mostramos ser possível o confinamento espacial dos portadores de carga o que em uma monocamada mostra-se impossível devido ao tunelamento Klein. Para um anel simples (uma única

mudança de sinal na direção radial) os resultados são semelhantes aos resultados obtidos por um potencial em que a mudança de sinal ocorre na direção axial (potencial *kink* axial). Assim como no problema axial [15], também achamos estados com energia nula, porém como o momento angular é quantizado, apenas para certos valores do raio do anel e da intensidade da diferença de potencial que se obtém tais estados. Os níveis de menor energia possuem momento angular diferente de zero, fenômeno que é apenas observado em semicondutores sujeitos a campos magnéticos. O espectro em função do raio do anel exibe um comportamento assintótico, tendendo para o espectro do potencial axial quando o raio cresce indefinidamente.

No estudo do anel duplo o qual consiste de dois anéis quânticos concêntricos, obtemos anticrossing semelhantes aos achados no cruzamento dos níveis de energia nos estados polar e homopolar das moléculas. Mostramos que o *gap* que é aberto é proporcional ao *overlap* dos estados dos anéis simples o que justifica o fato que os *anticrossing* apenas acontecem em níveis de energia com o mesmo valor de momento angular  $m\hbar$ . Mostramos que quando um nível de energia do anel duplo tende para um nível de energia de um dos anéis simples, o estado é aproximadamente o estado do anel simples. Portanto podemos fazer um elétron confinado em um dos anéis simples tunelar para o outro, apenas controlando o potencial aplicado. O teorema adiabático garante-nos que se a amplitude do potencial for variada lentamente, o elétron irá tunnelar de um anel para outro, porém se a mudança for rápida, o elétron saltará de nível e permanecerá no mesmo anel.

Ao acréscimo de interfaces graduais o espectro de um anel muda quantitativamente, apesar de não mudar qualitativamente. Em conforme com o potencial *kink* axial achamos que ao aumentarmos a espessura da interface gradual surgem novas subbandas.

Como perspectivas futuras, pretendemos incluir nos cálculos efeitos de segundos vizinhos que foram negligenciados neste trabalho. Estudar o comportamento do espectro sob a influência de um campo magnético e incluir interação elétron-elétron estudando dois elétrons em tais sistemas.

## *Apêndice A – Soluções linearmente independentes*

No Capítulo 3 afirmamos que as funções

$$f_1(\rho) = \Re[J_m(\alpha\rho)], \quad (\text{A.1})$$

$$f_2(\rho) = \Im[J_m(\alpha\rho)], \quad (\text{A.2})$$

$$f_3(\rho) = \Re[K_m(i\alpha\rho)], \quad (\text{A.3})$$

$$f_4(\rho) = \Im[K_m(i\alpha\rho)], \quad (\text{A.4})$$

onde  $\alpha$  é dado por

$$\alpha = \sqrt{V^2 + E^2 - \sqrt{4V^2E^2 - t^2(V^2 - E^2)}},$$

são soluções da equação radial ao separarmos as variáveis da equação (3.6):

$$\nabla^2 \nabla^2 \psi_A + 2(V^2 + E^2) \nabla^2 \psi_A + [(V^2 - E^2)^2 + t^2(V^2 - E^2)] \psi_A = 0. \quad (\text{3.6})$$

A equação radial pode ser obtido substituindo  $\psi_A = \phi_A(\rho)e^{im\theta}$  na equação (3.6), porém podemos mostrar que as funções (A.1), (A.2), (A.3) e (A.4) são soluções linearmente independentes (LI) da equação radial sem saber a forma exata desta. Para isso, primeiramente, vamos mostrar que, se  $F_m(\alpha\rho)e^{im\theta}$ , onde  $F_m$  denota as funções de Bessel, é solução da equação (3.6), então  $\Re[F_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}$  e  $\Im[F_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}$  também o são. PROVA:  $F_m(\alpha\rho)e^{im\theta}$  é solução da equação (3.6), se e somente se,  $\alpha$  é solução da equação (3.7),

$$\alpha^4 \pm 2(V^2 + E^2)\alpha^2 + (V^2 - E^2)^2 + t^2(V^2 - E^2) = 0. \quad (\text{3.7})$$

Porém, é bem conhecido que se  $\alpha$  é solução de uma equação polinomial com coeficientes reais, então  $\bar{\alpha}$  (o complexo conjugado de  $\alpha$ ) também é solução da mesma equação. Isso significa que  $F_m(\bar{\alpha}\rho)e^{im\theta} = F_m(\overline{\alpha\rho})e^{im\theta}$  também é solução da equação (3.6). Porém é válido que [35]:

$$F_m(\bar{x}) = \overline{F_m(x)},$$

para qualquer uma das funções de Bessel. Então  $\overline{F_m(\alpha\rho)}e^{im\theta}$  também é solução da equação (3.6). Finalmente concluímos que

$$\Re[F_m(\alpha\rho)]e^{im\theta} = \frac{F_m(\alpha\rho) + \overline{F_m(\alpha\rho)}}{2} e^{im\theta}$$

e

$$\Im[F_m(\alpha\rho)]e^{im\theta} = \frac{F_m(\alpha\rho) - \overline{F_m(\alpha\rho)}}{2i} e^{im\theta}$$

são soluções da equação (3.6). Ora, se  $G(\rho)e^{im\theta}$  é solução da equação (3.6), então  $G(\rho)$  será solução da equação radial separada, logo, (A.1), (A.2), (A.3) e (A.4) são soluções da equação radial.

Agora resta-nos mostrar que as funções (A.1), (A.2), (A.3) e (A.4) são LI. Para isso calcularemos o Wronskiano,  $W[f_1, f_2, f_3, f_4](\rho)$ , delas. Pode-se mostrar que se  $f_1(\rho)$ ,  $f_2(\rho)$ ,  $f_3(\rho)$  e  $f_4(\rho)$  são soluções de uma equação diferencial ordinária de quarta ordem em um intervalo aberto  $I$ , então ou  $W[f_1, f_2, f_3, f_4](\rho)$  será zero em todo  $I$  (se elas foram linearmente dependentes) ou  $W[f_1, f_2, f_3, f_4](\rho)$  será diferente de zero em todo  $I$  (se elas foram linearmente independentes) [37]. Portanto, basta calcularmos o Wronskiano para algum valor de  $\rho$  e mostrar que ele é diferente de zero. A expressão analítica do Wronskiano é demasiadamente extensa, complexa e não fornece muita informação, por isso, julgamos melhor apenas mostrar o gráfico do Wronskiano. A Figura A.1 mostra o gráfico do Wronskiano para  $\rho = 10$  nm como função da energia (Wronskiano depende de  $\alpha$  que, por sua vez, depende da energia). Mostramos os gráficos para  $V = t/2$  (azul),  $V = t/4$  (vermelho) e  $V = t/8$  (amarelo). O Wronskiano mostrou-se ser independente de  $m$ , algo que é comum com as funções de Bessel [34], e, para  $\rho = 10$  nm (portanto, para qualquer valor de  $\rho$ ), é diferente de zero para energias dentro do intervalo (3.8),

$$|E| < \frac{|V|t}{\sqrt{4V^2 + t^2}}. \quad (3.8)$$

O Wronskiano zera para  $|E| = \frac{|V|t}{\sqrt{4V^2 + t^2}}$ , e permanece nulo fora do intervalo (3.8). Isso mostra que as soluções (A.1), (A.2), (A.3) e (A.4) são LI no intervalo de energias que estamos estudando.

Nas figuras seguintes, mostramos os gráficos das funções (A.1), (A.2), (A.3) e (A.4), para  $V = t/2$  e  $E = V/2$ . Dentro do intervalo de energias que estamos estudando, as funções  $f_1(\rho) = \Re[J_m(\alpha\rho)]$  e  $f_2(\rho) = \Im[J_m(\alpha\rho)]$ , para todo  $m$ , são finitas na origem, porém divergem quando  $\rho$  cresce indefinidamente. Por outro lado, a função  $f_3(\rho) = \Re[K_m(i\alpha\rho)]$ , para todo  $m$ , diverge para  $\rho = 0$  e converge para zero quando  $\rho$  cresce indefinidamente. A função  $f_4(\rho) = \Im[K_m(i\alpha\rho)]$  tem o mesmo comportamento de função  $\Re[K_m(i\alpha\rho)]$  para  $m \neq 0$ , porém para  $m = 0$  ela é finita na origem e converge para zero quando  $\rho$  cresce indefinidamente.

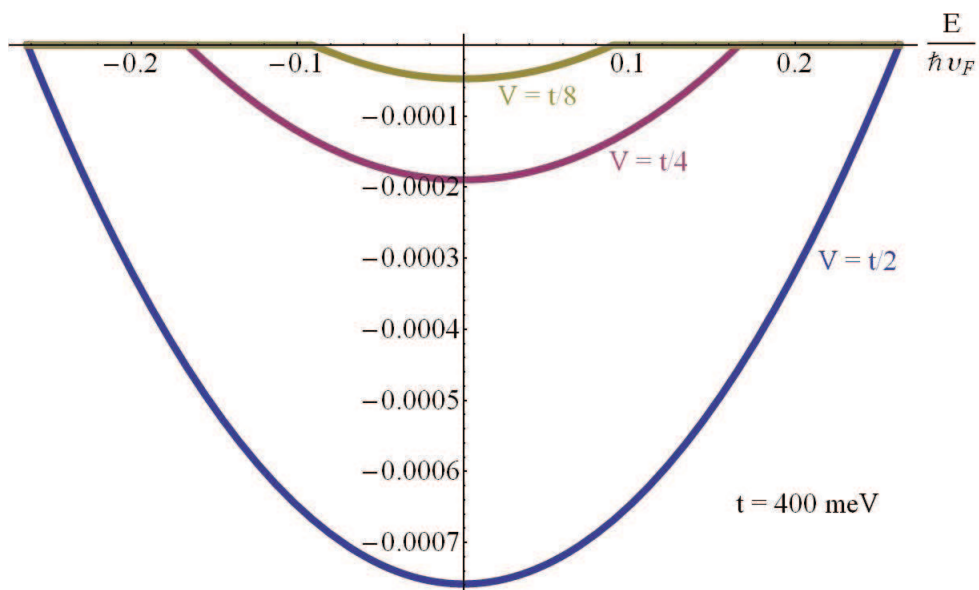


Figura A.1: Wronskiano das funções  $f_1(\rho)$ ,  $f_2(\rho)$ ,  $f_3(\rho)$  e  $f_4(\rho)$ ,  $W[f_1, f_2, f_3, f_4](\rho)$ , como função da energia,  $E$ , para  $\rho = 10$  nm e três valores de  $V$ :  $V = t/2$  (azul),  $V = t/4$  (vermelho) e  $V = t/8$  (amarelo). O Wronskiano é nulo para  $|E| \geq \frac{|V|t}{\sqrt{4V^2+t^2}}$ .

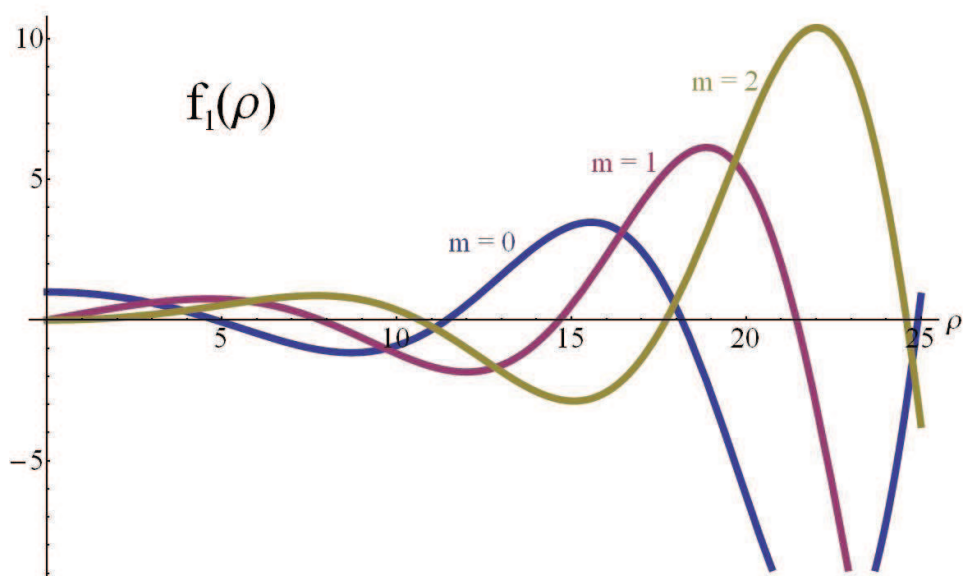


Figura A.2: Gráfico da função  $f_1(\rho) = \Re[J_m(\alpha\rho)]$  para  $V = t/2$ ,  $E = V/2$  e três valores de  $m$  diferentes:  $m = 0$  (azul),  $m = 1$  (vermelho) e  $m = 2$  (amarelo).

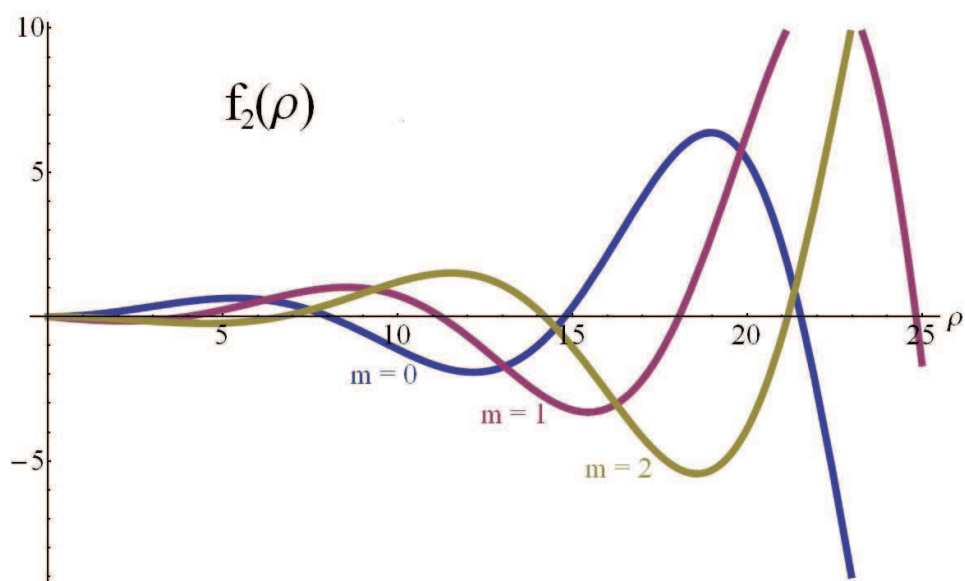


Figura A.3: Gráfico da função  $f_2(\rho) = \Im[J_m(\alpha\rho)]$  para  $V = t/2$ ,  $E = V/2$  e três valores de  $m$  diferentes:  $m = 0$  (azul),  $m = 1$  (vermelho) e  $m = 2$  (amarelo).

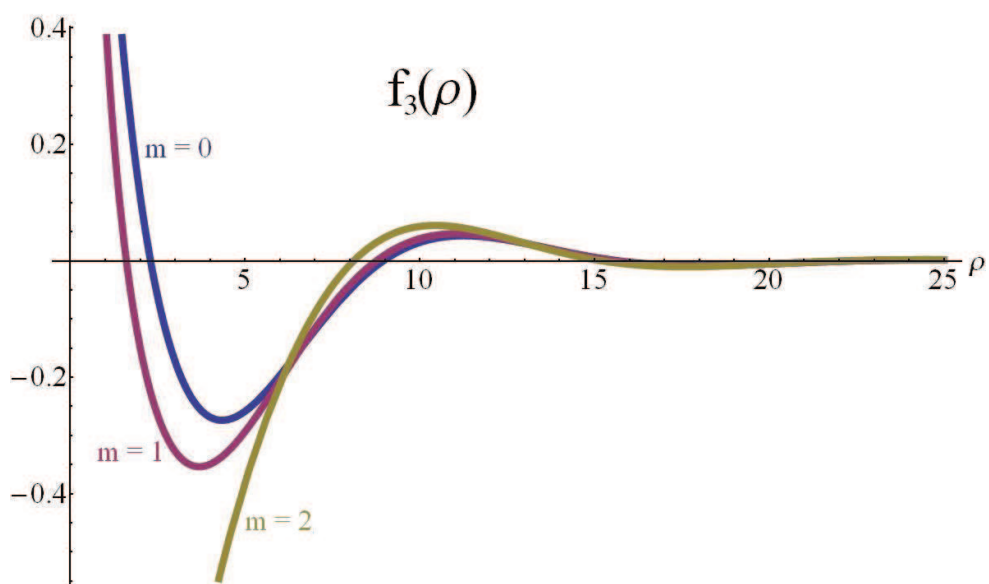


Figura A.4: Gráfico da função  $f_3(\rho) = \Re[K_m(i\alpha\rho)]$  para  $V = t/2$ ,  $E = V/2$  e três valores de  $m$  diferentes:  $m = 0$  (azul),  $m = 1$  (vermelho) e  $m = 2$  (amarelo).

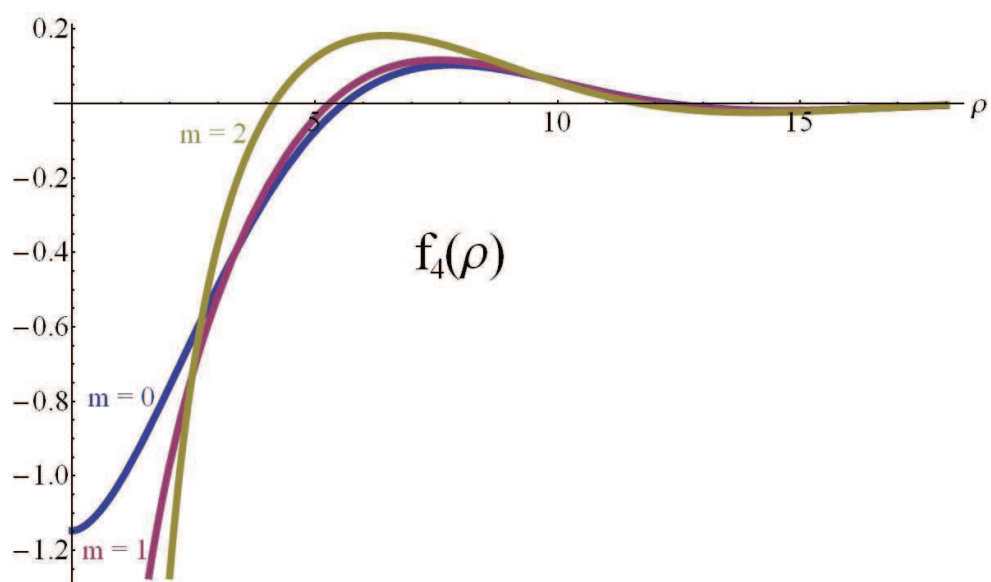


Figura A.5: Gráfico da função  $f_4(\rho) = \Im[K_m(i\alpha\rho)]$  para  $V = t/2$ ,  $E = V/2$  e três valores de  $m$  diferentes:  $m = 0$  (azul),  $m = 1$  (vermelho) e  $m = 2$  (amarelo).

## Apêndice B – Matriz dos elementos

Os elementos da matriz dos coeficientes do sistema homogêneo para o anel quântico duplo são:

$$\begin{aligned}
 T_{11} &= \Re[J_m(\alpha R_1)], \\
 T_{12} &= \Im[J_m(\alpha R_1)], \\
 T_{13} &= -\Re[J_m(\alpha R_1)], \\
 T_{14} &= -\Im[J_m(\alpha R_1)], \\
 T_{15} &= -\Re[K_m(i\alpha R_1)], \\
 T_{16} &= -\Im[K_m(i\alpha R_1)], \\
 T_{17} &= 0, \\
 T_{18} &= 0, \\
 T_{21} &= \frac{\Re[\alpha J_{m-1}(\alpha R_1)]}{V-E}, \\
 T_{22} &= \frac{\Im[\alpha J_{m-1}(\alpha R_1)]}{V-E}, \\
 T_{23} &= \frac{\Re[\alpha J_{m-1}(\alpha R_1)]}{V+E}, \\
 T_{24} &= \frac{\Im[\alpha J_{m-1}(\alpha R_1)]}{V+E}, \\
 T_{25} &= -\frac{\Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R_1)]}{V+E}, \\
 T_{26} &= -\frac{\Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R_1)]}{V+E}, \\
 T_{27} &= 0, \\
 T_{28} &= 0, \\
 T_{31} &= -\frac{\Re[\tau J_m(\alpha R_1)]}{V-E}, \\
 T_{32} &= -\frac{\Im[\tau J_m(\alpha R_1)]}{V-E}, \\
 T_{33} &= -\frac{\Re[\tau' J_m(\alpha R_1)]}{V+E}, \\
 T_{34} &= -\frac{\Im[\tau' J_m(\alpha R_1)]}{V+E},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{35} &= -\frac{\Re[\tau'K_m(i\alpha R_1)]}{V+E}, \\
T_{36} &= -\frac{\Im[\tau'K_m(i\alpha R_1)]}{V+E}, \\
T_{37} &= 0, \\
T_{38} &= 0, \\
T_{41} &= \Re[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha R_1)], \\
T_{42} &= \Im[\alpha\tau J_{m+1}(\alpha R_1)], \\
T_{43} &= -\Re[\alpha\tau'J_{m+1}(\alpha R_1)], \\
T_{44} &= -\Im[\alpha\tau'J_{m+1}(\alpha R_1)], \\
T_{45} &= -\Re[i\alpha\tau'K_{m+1}(i\alpha R_1)], \\
T_{46} &= -\Im[i\alpha\tau'K_{m+1}(i\alpha R_1)], \\
T_{47} &= 0, \\
T_{48} &= 0, \\
T_{51} &= 0, \\
T_{52} &= 0, \\
T_{53} &= -\Re[J_m(\alpha R_2)], \\
T_{54} &= -\Im[J_m(\alpha R_2)], \\
T_{55} &= -\Re[K_m(i\alpha R_2)], \\
T_{56} &= -\Im[K_m(i\alpha R_2)], \\
T_{57} &= \Re[K_m(i\alpha R_2)], \\
T_{58} &= \Im[K_m(i\alpha R_2)], \\
T_{61} &= 0, \\
T_{62} &= 0, \\
T_{63} &= \frac{\Re[\alpha J_{m-1}(\alpha R_2)]}{V+E}, \\
T_{64} &= \frac{\Im[\alpha J_{m-1}(\alpha R_2)]}{V+E}, \\
T_{65} &= -\frac{\Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R_2)]}{V+E}, \\
T_{66} &= -\frac{\Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R_2)]}{V+E}, \\
T_{67} &= -\frac{\Re[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R_2)]}{V-E}, \\
T_{68} &= -\frac{\Im[i\alpha K_{m-1}(i\alpha R_2)]}{V-E}, \\
T_{71} &= 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_{72} &= 0, \\
T_{73} &= -\frac{\Re[\tau' J_m(\alpha R_2)]}{V + E}, \\
T_{74} &= -\frac{\Im[\tau' J_m(\alpha R_2)]}{V + E}, \\
T_{75} &= -\frac{\Re[\tau' K_m(i\alpha R_2)]}{V + E}, \\
T_{76} &= -\frac{\Im[\tau' K_m(i\alpha R_2)]}{V + E}, \\
T_{77} &= -\frac{\Re[\tau K_m(i\alpha R_2)]}{V - E}, \\
T_{78} &= -\frac{\Im[\tau K_m(i\alpha R_2)]}{V - E}, \\
T_{81} &= 0, \\
T_{82} &= 0, \\
T_{83} &= -\Re[\alpha \tau' J_{m+1}(\alpha R_2)], \\
T_{84} &= -\Im[\alpha \tau' J_{m+1}(\alpha R_2)], \\
T_{85} &= -\Re[i\alpha \tau' K_{m+1}(i\alpha R_2)], \\
T_{86} &= -\Im[i\alpha \tau' K_{m+1}(i\alpha R_2)], \\
T_{87} &= \Re[i\alpha \tau K_{m+1}(i\alpha R_2)], \\
T_{88} &= \Im[i\alpha \tau K_{m+1}(i\alpha R_2)].
\end{aligned}$$

## *Apêndice C – Artigos publicados relacionados à tese*

- XAVIER, L. J. P.; PEREIRA JR., J. M.; CHAVES, A.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. Topological confinement in graphene bilayer quantum rings. *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 212108 (2010).

## *Referências Bibliográficas*

- [1] CASTRO NETO, A. H.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109 (2009).
- [2] KROTO, H. W.; HEATH, J. R.; O'BRIEN, S. C.; CURL, R. F.; SMALLEY, R. E. C<sub>60</sub>: Buckminsterfullerene. *Nature*, **318**, 162-164 (1985).
- [3] DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; EKLUND P. C. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes: Their Properties and Applications*. San Diego: Academic Press, 1996. 965 p.
- [4] IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, **354**, 56-58 (1991).
- [5] REICH, S.; THOMSEN, C.; MAULTZSCH J. *Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties*. Weinheim: Wiley-VCH, 2004. 224 p.
- [6] NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K.; MOROZOV, S. V.; JIANG, D.; ZHANG, Y.; DUBONOS, S. V.; GRIGORIEVA I. V.; FIRSOV, A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, **306**, 666-669 (2004).
- [7] WALLANCE, P. R. The Band Theory of Graphite. *Phys. Rev.*, **71**, 622-634 (1947).
- [8] SAITO, R.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. London: Imperial College Press, 1998. 259 p.
- [9] K. S. NOVOSELOV, A. K. GEIM, S. V. MOROZOV, D. JIANG, M. I. KATSNELSON, I. V. GRIGORIEVA, S. V. DUBONOS AND A. A. FIRSOV, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, **438**, 197-200 (2005).
- [10] MCCANN, E.; FAL'KO, V. I. Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer. *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 086805 (2006).
- [11] PEREIRA JR., J. M.; VASILOPOULOS, P.; PEERTERS, F. M. Tunable Quantum Dots in Bilayer Graphene. *Nano Lett.*, **7**, 946 (2007).
- [12] PEREIRA JR., J. M.; PEERTERS, F. M.; VASILOPOULOS, P.; COSTA, R. N.; FARIAS, G. A. Landau levels in graphene bilayer quantum dots. *Phys. Rev. B*, **79**, 195403 (2009).
- [13] ZARENIA, M.; PEREIRA JR., J. M.; PEERTERS, F. M.; FARIAS, G. A. Electrostatically Confined Quantum Rings in Bilayer Graphene. *Nano Lett.*, **9**, 4088 (2009).
- [14] ZARENIA, M.; PEREIRA JR., J. M.; CHAVES, A.; PEERTERS, F. M.; FARIAS, G. A. Simplified model for the energy levels of quantum rings in single layer and bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, **81**, 045431 (2010).

- [15] MARTIN, I.; BLANTER, YA. M.; MORPURGO, A. F. Topological confinement in graphene bilayer. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 036804 (2008).
- [16] XAVIER, L. J. P.; PEREIRA JR., J. M.; CHAVES, A.; FARIAS, G. A.; PEETERS, F. M. Topological confinement in graphene bilayer quantum rings. *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 212108 (2010).
- [17] MARTINEZ, J. C.; JALIL, M. B. A.; TAN, S. G. Robust localized modes in bilayer graphene induced by an antisymmetric kink potential. *Appl. Phys. Lett.*, **95**, 213106 (2009).
- [18] SAN-JOSE, P.; PRADA, E.; MCCANN, E.; SCHOMERUS, H. Pseudospin Valve in Bilayer Graphene: Towards Graphene-Based Pseudospintronics. *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 247204 (2009).
- [19] MOORE, J. E.; BALENTS, L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, **75**, 121306(R) (2007).
- [20] FU, L.; KANE, C. L.; MELE, E. J. Topological Insulators in Three Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 106803 (2007).
- [21] <http://www.sciencemag.org/cgi/content/full/306/5696/666/DC1>, Supporting Online Material, Materials and Methods.
- [22] ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. Philadelphia : Brooks Cole, 1976, 848 p.
- [23] REICH, S.; MAULTZSCH, J.; THOMSEN, C. Tight-binding description of graphene. *Phys. Rev. B*, **66**, 035412 (2002).
- [24] SENA, S. H. R. *Transporte e Estados Confinados de Portadores de Carga em Nanoestruturas de Grafeno*. 2010. 64 f. Dissertação (Mestrado) – Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Ceará. 2010.
- [25] YU, P. Y.; CARMONA, M. *Fundamentals of Semiconductors*. New York: Springer, 2005, 639 p.
- [26] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics*. New York: John Wiley, c1977, v.2.
- [27] DIVINCENZO, D. P.; MELE, E. J. Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds. *Phys. Rev. B*, **29**, 1685 (1984).
- [28] PEREIRA JR., J. M.; PEETERS, F. M.; VASILOPOULOS, P. Landau levels and oscillator strength in a biased bilayer of graphene. *Phys. Rev. B*, **76**, 115419 (2007).
- [29] OHTA, T.; BOSTWICK, A.; SEYLLER, T.; HORN, K.; ROTENBERG, E. Controlling the Electronic Structure of Bilayer Graphene. *Science*, **313**, 951 (2006).
- [30] CHAVES, A. *Confinamento em Fios Quânticos Semicondutores*. 2007. 97 f. Dissertação (Mestrado) – Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Ceará. 2007.
- [31] HARRISON P. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructure*. 2 ed. West Sussex: Wiley, 2005, 508 p.

- [32] RYCERZ, A.; TWORZYDLO, J.; BEENAKKER, C. W. J. Valley filter and valley valve in graphene. *Nature Phys.*, **3**, 172 (2007).
- [33] BUTKOV, E. *Física Matemática*. Rio de Janeiro: Guanabara, 1988, 725 p.
- [34] ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. *Mathematical Methods for Physicists*, 6<sup>a</sup> ed. Boston, Massachusetts : Elsevier, 2005, 1182.
- [35] ABRAMOWITZ, M. AND STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 9th printing. New York: Dover, 1972, 1046 p.
- [36] ZENER, C. *Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels*.. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. Vol. 137, No. 833 (Sep. 1, 1932), pp. 696-702
- [37] BOYCE, W. E.; DIPRIMA, R. C. *Equações diferenciais elementares e problemas de valores de contorno*. 8 ed. Rio de Janeiro, RJ: Livros Técnicos e Científicos, c2006, 434 p.