

Transporte e Estados Confinados de Portadores de
Carga em Nanoestruturas de Grafeno

Silvia Helena Roberto de Sena

8 de junho de 2010

Silvia Helena Roberto de Sena

*Transporte e Estados Confinados de
Portadores de Carga em Nanoestruturas de
Grafeno*

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

Orientador:

Prof. Dr. João Milton Pereira Júnior

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

Fortaleza – CE

22 de fevereiro de 2010

Dissertação de Mestrado sob o título Transporte e Estados Confinados de Portadores de Carga em Nanoestruturas de Grafeno, defendida por Silvia Helena Roberto de Sena e aprovada em 22 de fevereiro de 2010, em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

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

Prof. Dr. Jeanlex Soares de Sousa
Departamento de Física - UFC

Prof. Dr. Eudnilson Lins de Albuquerque
Departamento de Física - UFRN

Aos meus pais, Fátima e Ernandes, e à minha irmã Ana Cristina.

Agradecimentos

- Agradeço primeiramente a Deus por me acompanhar sempre que preciso.
- Aos meus pais Fátima e Ernandes, pela a educação e pelos valores que me foram transmitidos ao longo da vida e pelo exemplo de honestidade e trabalho.
- À minha querida irmã Ana Cristina (Bebê), por ser minha segunda mãe, minha melhor amiga, pelo cuidado constante, por acompanhar todo o meu desenvolvimento desde a minha adolescência, aconselhando sempre que preciso.
- Ao meu orientador Prof. João Milton Pereira Júnior, pela sua valiosa contribuição à minha formação, por ser um orientador sempre presente e pela paciência e disponibilidade de repassar seus conhecimentos.
- Ao Prof. Raimundo Nogueira da Costa Filho pela sua importante contribuição à minha formação durante a graduação e por sempre estar disposto a ajudar.
- Aos professores do grupo de pesquisa Gil de Aquino Farias e Wandemberg Paiva Ferreira pela atenção e por fornecerem os meios para a realização desse trabalho.
- Aos professores Eudenilson Lins de Albuquerque e Jeanlex Soares de Sousa pelo tempo dispensado na leitura desse trabalho e pelas valiosas sugestões.
- Ao amigo Alberto pelo companheirismo durante toda a graduação. Aos amigos e companheiros de sala Philipe e Igor pelas esclarecedoras discussões sobre física e por tornarem os dias no picí divertidos. Ao amigo Jovem (Ítalo) pela amizade, pelas piadas sem graça que fazem rir de qualquer forma e por deixar meu computador no ponto para eu trabalhar.
- Ao CNPQ - Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, pelo suporte financeiro.

Resumo

Nesse trabalho, investigamos o comportamento dos portadores de carga em uma folha de grafeno quando a mesma encontra-se sujeita à influência de um potencial eletrostático unidimensional $U(x)$. Primeiramente, consideramos dois poços de potencial acoplados por uma barreira central. Para essa estrutura, calculamos o espectro de energia dos estados confinados bem como o comportamento da densidade de probabilidade para alguns estados específicos. Apresentamos também, alguns resultados para o coeficiente de transmissão eletrônico através dessas estruturas.

Em seguida, consideramos uma super-rede formada por múltiplas barreiras de potencial e introduzimos uma desordem correlacionada na largura das barreiras. Para esse sistema, resultados para a transmissão dos portadores através dessa estrutura bem como a condutância para vários valores de desordem são apresentados. Finalmente uma super-rede quase-periódica que segue a série de Fibonacci foi considerada e resultados para a transmissão através dessa estrutura também foram apresentados.

Abstract

In this work we investigate the behavior of charge carriers in a graphene sheet subjected to a one-dimensional electrostatic potential $U(x)$. At first we consider two coupled quantum wells potential. For this structure we calculate the energy spectrum for the bound states, as well as the probability density behavior for some particular states. Some results for the electronic transmission coefficient through these structures are also presented.

Next, we consider the electrostatic potential as a mutibarrier structure and then a correlated disorder was introduced in the barrier width. For this system, the transmission of these carriers through this potential as well as the conductance are investigated for different disorder strengths. Finally a quasiperiodic superlattice that follows the Fibonacci serie was taken into account and the results for transmission were also presented for this structure.

Sumário

Lista de Figuras	p. ix
1 Introdução	p. 13
1.1 Fabricação de folhas de grafeno	p. 15
1.2 Por que estudar grafeno?	p. 17
1.3 Sumário	p. 21
2 Modelo Teórico	p. 22
2.1 Modelo Tight-binding	p. 22
2.2 Modelo Contínuo	p. 25
2.3 Método da Matriz de Transferência	p. 27
3 Poços Duplos em Grafeno	p. 31
3.1 Estados Confinados em Fios Quânticos	p. 32
3.2 Transmissão	p. 32
3.3 Poço simples	p. 33
3.4 Poço duplo	p. 35
4 Super-redes finitas em grafeno	p. 42
4.1 Super-redes desordenadas	p. 42
4.2 Estruturas Quase-periódicas	p. 50
4.2.1 Super-rede quase-periódica de Fibonacci	p. 50
5 Conclusões e perspectivas	p. 58

Sumário

viii

Referências

p. 60

Lista de Figuras

1	Três formas alotrópicas do carbono:(A) diamante, (B) grafite, (C) fulereno C_{60}	p. 14
2	Os três tipos diferentes de nanotubos:(A) armchair, (B) zigzag, (C) quiral. Em (d) está mostrado esquematicamente a estrutura de um nanotubo desenrolado.	p. 15
3	Filmes finos de grafite. (A) Fotografia de MLG de ≈ 3 nm de espessura. (B) Imagem obtida por microscopia de força atômica de uma área de $4\mu m^2$ desse filme próximo a sua borda. O marrom escuro indica a superfície do SiO_2 e a cor laranja é de uma região 3 nm acima da superfície do SiO_2 . (C) imagem de uma monocamada de grafeno obtida por microscopia de força atômica. (D) Imagem obtido com microscopia eletrônica de varredura de dispositivo experimental de FLG. (E) Visão esquemática do dispositivo em (D). [8]	p. 16
4	Efeito ambipolar de campo elétrico [18].	p. 18
5	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) σ_{xy} para um bicamada de grafeno, onde a quantização é usual e ocorre em valores inteiros de $4e^2/h$. Essa figura foi adaptada de [18].	p. 19
6	Efeito Hall quântico anômalo no grafeno a temperatura ambiente. Condutividade Hall σ_{xy} (vermelho) e resistividade longitudinal ρ_{xx} (azul) como função da voltagem de porta. (inserção) A seqüência de níveis de Landau para elétrons no grafeno. Essa figura foi adaptada de [19].	p. 20

7	(a) Os três diagramas ilustram o espectro de partículas em uma folha de grafeno e os níveis de energia de Fermi através de uma barreira de potencial de largura D e altura V_0 . O espectro é linear para baixas energias. O pseudospin σ é paralelo (anti-paralelo) a direção do movimento dos elétrons (buracos) e possui direção fixa ao longo dos ramos vermelho e amarelo do espectro. (b) O nível de fermi (linha pontilhada) fica na banda de condução fora da barreira e na banda de valência na região da barreira [22].	p. 20
8	Estrutura de rede do grafeno, formada por duas redes triangulares interpenetradas A e B. \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os vetores unitários da rede e \mathbf{R}_i , $i = 1, 2, 3$ localizam os primeiros vizinhos.[25]	p. 22
9	Relação de dispersão eletrônica do grafeno. Direita: zoom nas bandas de energia na região próxima ao ponto de Dirac [26].	p. 25
10	Ilustração de como um potencial unidimensional pode ser aproximado por uma seqüência de barreiras.	p. 28
11	(a) Visão da seção transversal do dispositivo. (b) Perfil do potencial de elétrons no grafeno produzido pelo dispositivo mostrado em (a). [32] . .	p. 31
12	Perfil de um poço simples simétrico de potencial de largura L_0 e profundidade U_0	p. 33
13	Espectro dos estados confinados em um poço simétrico de potencial de largura $L_0 = 200$ nm e profundidade $U_0 = -50$ meV. (inserção superior) Amplitudes de probabilidade correspondentes as subredes A e B para o estado destacado no gráfico principal. (inserção inferior) Densidade de probabilidade do estado destacado no gráfico principal.	p. 34
14	(a)Gráfico de contorno do coeficiente de transmissão para elétrons com energia $E > 0$ incidentes em um poço de potencial com largura $L_0 = 200$ nm e profundidade $U_0 = -50$ meV. (b) Transmissão para valores fixos de k_y . A curva verde corresponde a $k_y = 0,15 \text{ nm}^{-1}$ e a curva preta para $k_y = 0$	p. 35
15	Perfil do potencial. Dois poços com potencial U_1 e U_3 , larguras L_1 e L_3 separados por uma barreira com potencial U_2 e largura L_2	p. 36

- 16 Estados confinados em poços duplos simétricos de potencial acoplados por uma barreira. Os parâmetros são $L_1 = L_2 = L_3 = 50$ nm, $U_1 = U_3 = -100$ meV e $U_2 = 100$ meV. (Direita) Densidade de probabilidade dos estados destacados no gráfico principal. p. 37
- 17 Energia de estados confinados em poços duplos simétricos de potencial em função da altura da barreira central. Os parâmetros são $L_1 = L_2 = L_3 = 50$ nm, $U_1 = U_3 = -100$ meV e $k_y = 0.13$ nm⁻¹. p. 38
- 18 Estados confinados em poços duplos simétricos de potencial. Os parâmetros são $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm $U_1 = U_3 = -100$ meV e $U_2 = 0$. (inserções) Densidades de probabilidade dos estados destacados no gráfico principal. p. 39
- 19 Estados confinados em poços duplos assimétricos de potencial. Os parâmetros são $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm $U_1 = -100$ meV, $U_2 = 0$, $U_3 = -50$ meV. (inserção) Amplificação da região demarcada no gráfico principal. (Direita) Comportamento da densidade de probabilidade dos estados destacados no gráfico principal. p. 40
- 20 (Esquerda) Gráfico de contorno do coeficiente de transmissão para elétrons com energia $E > 0$ incidentes em poços duplos de grafeno com $U_1 = U_3 = -100$ meV, $U_2 = 100$ meV e $L_1 = L_2 = L_3 = 50$ nm. (Direita) Transmissão para valores fixos de k_y p. 40
- 21 O mesmo da Fig. 17, mas com $U_1 = U_3 = -100$ meV, $U_2 = 0$ meV, $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm. p. 41
- 22 O mesmo da Fig. 17, mas com $U_1 = -100$ meV, $U_2 = 0$ meV, $U_3 = -50$ meV, $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm. p. 41
- 23 Perfil do potencial gerado pela super-rede. U_0 define a altura das barreiras, d_W a largura dos poços e d_B a largura das barreiras. p. 43
- 24 Média do incremento na largura de cada barreira para um valor de $\delta = 0,9$ para diferentes valores do coeficiente de correlação χ p. 44
- 25 Coeficiente de transmissão em função do ângulo de elétrons incidentes na estrutura com $E = 83$ meV e valores de desordem $\delta = 0, 0.05, 0.1$ e 0.2 . Em todos os casos $\chi = 0$ p. 45

26	gráfico da razão de participação em função do grau de desordem δ para $E = 83$ meV e $U_0 = 200$ meV.	p. 47
27	O mesmo da Fig.25 para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.	p. 48
28	gráfico da razão de participação em função do grau de desordem δ para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.	p. 49
29	Coeficiente de transmissão em função do ângulo para um desordem fixa $\delta = 0, 2$. A energia dos elétrons incidentes na estrutura é $E = 83$ meV e os valores do coeficiente de correlação são $\chi = 0; 0, 2; 0, 5$ e $0, 8$	p. 50
30	gráfico da razão de participação em função do coeficiente de correlação χ para $\delta = 0, 2$, $E = 83$ meV e $U_0 = 200$ meV.	p. 51
31	O mesmo da Fig. 29 para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.	p. 52
32	gráfico da razão de participação em função do coeficiente de correlação χ para $\delta = 0, 2$, $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.	p. 53
33	O mesmo da Fig. 31 para $E = 10$ meV.	p. 53
34	Condutância de elétrons com $E = 83$ meV em função da altura das barreiras de potencial U_0 para vários valores de desordem. Em todas as curvas $\chi = 0$	p. 54
35	Esquema de formação para uma super-rede quase-periódica de Fibonacci.	p. 54
36	Dependência angular da transmissão eletrônica através de uma super-rede de Fibonacci para as gerações: (a) S_5 , (b) S_6 , (c) S_7 e (d) S_8	p. 55
37	Dependência angular da transmissão eletrônica através de uma super-rede de Fibonacci para as gerações: (a) S_9 , (b) S_{10} , (c) S_{11} e (d) S_{12}	p. 56
38	Coeficiente de transmissão em função da energia dos portadores para um $k_y = 0.01$ nm ⁻¹ fixo. (a) S_5 , (b) S_8 , (c) S_{11} , (d) S_6 (e) S_9 , (f) S_{12}	p. 57

1 *Introdução*

O elemento Carbono é responsável pela existência de uma enorme variedade de materiais. Dentre estes, pode-se citar todos os compostos orgânicos e varias estruturas de sólidos cristalinos. As diversas estruturas de carbono possuem dimensionalidade que pode variar de 0D a 3D. A capacidade de formar materiais com formas estruturais, dimensionalidades e, conseqüentemente, propriedades tão variadas deve-se às diferentes possibilidades de ligação química entre átomos de carbono, que por sua vez, provém de hibridizações distintas dos orbitais atômicos.

Em linhas gerais, pode-se dizer que hibridização é uma sobreposição dos orbitais atômicos (combinação das funções de onda atômica que possuem mesmo número quântico principal). No átomo de carbono (C : $1s^2 2s^2 2p^2$) os elétrons do orbital $1s$ são fortemente ligados, conhecidos como elétrons do caroço. Os quatro elétrons restantes, chamados elétrons de valência, ocupam os orbitais $2s$ $2p_x$ $2p_y$ $2p_z$ e são responsáveis pela formação de orbitais híbridos sp^n ($n= 1, 2, 3$) parcialmente preenchidos que participam das ligações químicas. Três tipos de hibridizações são possíveis no carbono, uma para cada valor de n . O tipo de hibridização do átomo de carbono tem caráter fundamental na dimensionalidade dos materiais por ele formado. No caso de uma hibridização sp^n existe a formação de $n+1$ orbitais híbridos e, portanto, $n+1$ ligações σ responsáveis pela forma estrutural de um composto n -dimensional, enquanto $4-(n+1)$ orbitais p puros, parcialmente preenchidos, dão origem a ligações essencialmente mais fracas e delocalizadas chamadas ligações π . Para $n = 1$, duas ligações σ dão origem a um cadeia unidimensional; para $n = 2$, três ligações σ formam um estrutura trigonal plana e para $n = 3$, quatro ligações σ definem um tetraedro regular que forma a estrutura tridimensional do diamante [1][2][3].

Dentre os cristais de carbono mais conhecidos estão o diamante e o grafite, ambos encontrados na natureza e com propriedades bem conhecidas e estudadas. Nos últimos vinte e cinco anos, um grande interesse pelo estudo de materiais carbonosos ressurgiu com a descoberta do fulereno C_{60} em 1985 por H. W. Kroto et al. [4]. Essa estrutura é composta por um arranjo de 60 átomos de carbono, um em cada vértice da junção de 20

hexágonos e 12 pentágonos dispostos de uma forma semelhante a uma bola de futebol. Em 1996 H. W. Kroto, R. F. Curl e R. E. Smalley dividiram o premio Nobel de química por esse trabalho.

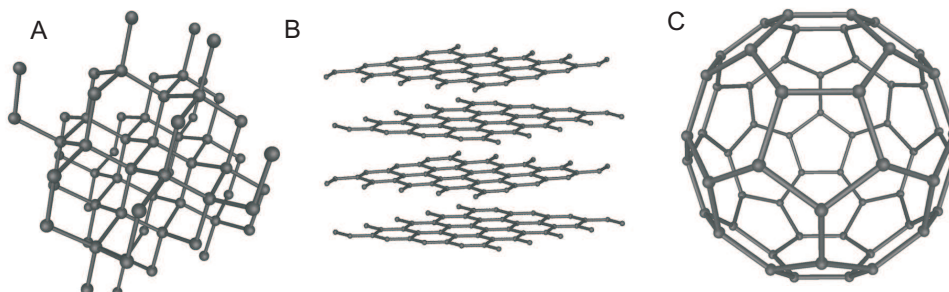


Figura 1: Três formas alotrópicas do carbono:(A) diamante, (B) grafite, (C) fulereno C_{60} .

Pouco tempo depois, em 1991, foi realizada a primeira observação experimental de um novo tipo de estrutura, os chamados nanotubos de carbono de paredes múltiplas [5], seguida, em 1993, pela a produção dos primeiros nanotubos de parede simples, cujos diâmetros variavam de 0,7 nm a 1,6 nm [6]. Estruturalmente, um nanotubo pode ser visto como uma folha de grafite enrolada na forma de um cilindro. A forma como essa folha é enrolada torna possível a distinção entre diferentes nanotubos. Formalmente diz-se que um nanotubo é inteiramente determinado pelo vetor quiral $\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 = (n, m)$, onde n e m são quaisquer inteiros, com $0 \leq |m| \leq n$, enquanto a_1 e a_2 definem a célula unitária de uma única camada do grafite. Um nanotubo pode ser igualmente caracterizado pelo seu diâmetro $d = |\vec{C}_h| / \pi$ e o ângulo quiral $\theta = \cos^{-1}(\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1 / |\vec{C}_h| |\vec{a}_1|) = \cos^{-1}((2n + m) / 2\sqrt{n^2 + m^2 + nm})$, responsáveis por determinar o módulo e a orientação do vetor quiral. Baseado nesses parâmetros, pode-se dividir os nanotubos de carbono em três tipos: armchair, quando $m = n$ e $\theta = 30^\circ$; zigzag, quando $m = 0$ e $\theta = 0^\circ$ e quiral, quando $0 < |m| < n$ e $0^\circ < \theta < 30^\circ$. Observou-se que o diâmetro e o ângulo quiral são determinantes nas propriedades eletrônicas dos nanotubos [7]. Nanotubos metálicos são obtidos sempre que $(2n + m)$ ou, equivalentemente, $(n - m)$ é um múltiplo de 3. Em particular, nanotubos armchair (n, n) são sempre metálicos, enquanto nanotubos zigzag $(n, 0)$ são metálicos quando n é um múltiplo de 3 e semicondutores caso contrário.

Mais recentemente, no ano de 2004, uma nova classe de materiais surge com a obtenção de um cristal de carbono puramente bidimensional. Pesquisadores da universidade de Manchester, ao realizar trabalhos com filmes finos de grafite, conseguiram isolar uma única folha de grafite (também conhecido como grafeno) de alta qualidade e estável a

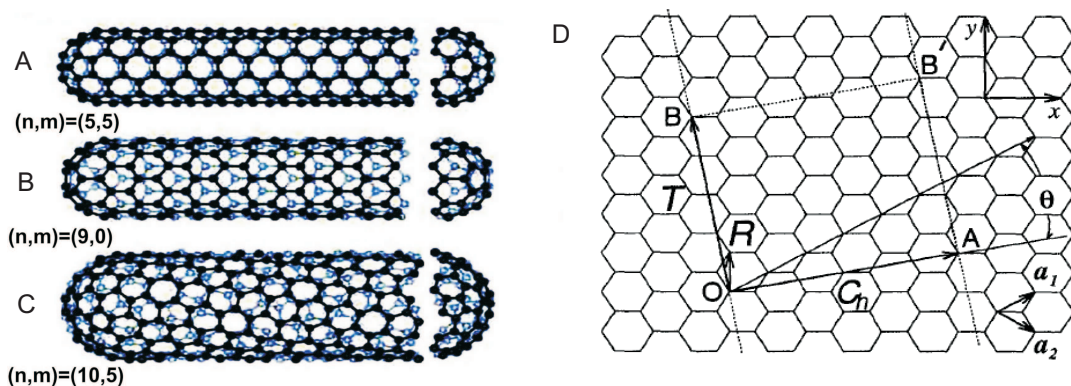


Figura 2: Os três tipos diferentes de nanotubos:(A) armchair, (B) zigzag, (C) quiral. Em (d) está mostrado esquematicamente a estrutura de um nanotubo desenrolado.

condições ambientes [8]. Desde então uma grande atenção foi voltada para esse material que mostrou propriedades peculiares, sinalizando seu grande potencial para aplicações tecnológicas. Muitos estudos teóricos sobre esse material já tinham sido feitos, no entanto, sempre tomando o grafeno como uma primeira aproximação para o estudo do grafite. O primeiro desses trabalhos foi realizado em 1947 por Wallace como tentativa de calcular a estrutura de bandas do grafite [9].

Levando-se em conta a estrutura do grafite, pode-se descrever o grafeno como um cristal bidimensional constituído de átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal. Cada átomo está ligado a três primeiros vizinhos por meio de ligações σ fortes que formam ângulos de 120° entre si. Cada ligação σ é resultado da hibridização sp^2 entre os três orbitais $2s$, $2p_x$ e $2p_y$ para três dos elétrons de valência. O orbital p_z correspondente ao quarto elétron de valência fica perpendicular ao plano definido pelas ligações σ . Dessa forma, cada átomo de carbono possui um orbital parcialmente preenchido que se superpõem a orbitais de átomos vizinhos dando origem a ligações π fracas. Esses elétrons quase livres, chamados elétrons π são os principais responsáveis pelas propriedades de transporte no grafeno [3].

1.1 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 uti-

lizada para isolar a primeira folha de grafeno [8]. Esse método é extremamente simples e consiste basicamente em usar uma fita adesiva para separar as camadas de um cristal de grafite (no experimento original foram usadas plaquetas de HOPG, sigla em inglês para o grafite pirolítico altamente orientado, de 1mm de espessura) e, então, friccionar a amostra sobre um substrato de óxido de silício SiO_2 . O segredo da técnica consiste em encontrar uma monocamada de grafeno entre as demais camadas. Filmes de grafite com espessuras inferiores a 50 nm são transparentes ao microscópio ótico, no entanto, devido a uma adição de caminho ótico, camadas de diferentes espessuras produzem diferentes padrões de interferência sobre o substrato de SiO_2 . Isso define a região onde a monocamada deve ser procurada, utilizando microscopia de força atômica. Verificou-se que filmes com espessura inferiores a $\approx 1,5\text{nm}$ não são visíveis nem via desvio de padrão de interferência, o que separa os filmes em duas classes: FLG (sigla em inglês para grafeno de poucas camadas) e MLG (sigla em inglês para grafeno de muitas camadas). A partir de amostras contendo FLG, a monocamada pode ser então ser procurada usando microscopia eletrônica de varredura [10].

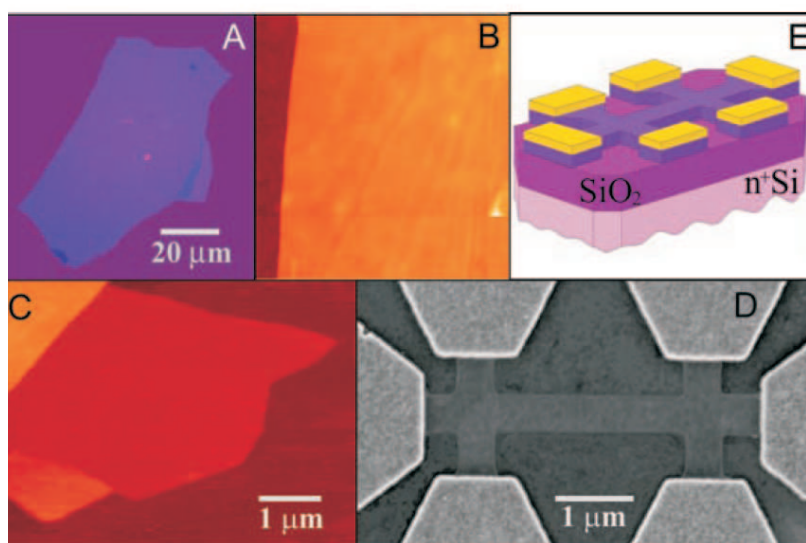


Figura 3: Filmes finos de grafite. (A) Fotografia de MLG de $\approx 3\text{ nm}$ de espessura. (B) Imagem obtida por microscopia de força atômica de uma área de $4\mu\text{m}^2$ desse filme próximo a sua borda. O marrom escuro indica a superfície do SiO_2 e a cor laranja é de uma região 3 nm acima da superfície do SiO_2 . (C) imagem de uma monocamada de grafeno obtida por microscopia de força atômica. (D) Imagem obtido com microscopia eletrônica de varredura de dispositivo experimental de FLG. (E) Visão esquemática do dispositivo em (D). [8]

Apesar de ser uma técnica simples, o que viabiliza o estudo experimental desse ma-

material em muitos grupos de pesquisa, esse tipo de clivagem a partir do cristal de grafite é inviável para uma produção industrial em larga escala de dispositivos eletrônicos baseados em grafeno. Por essa razão, surgiu um grande interesse em novas formas de fabricação. Uma das mais estudadas é o crescimento epitaxial de camadas de grafeno sobre outros cristais, esse crescimento no topo de outros cristais evita as instabilidades responsáveis por romper ou modificar as ligações do cristal bidimensional. Depois de obter a estrutura desejada, o aparato é resfriado e o cristal constituído de algumas camadas de grafeno (1-12 camadas) [11][12] pode, então, ser removido do substrato.

1.2 Por que estudar grafeno?

Embora muitos estudos teóricos sobre grafeno tenham sido realizados nos últimos 60 anos [9][13][14], a descoberta desse material é bastante recente, pouco mais de cinco anos se passaram desde a produção da primeira folha de grafeno. Essa demora deve-se, em parte, à crença de que tais cristais estritamente bidimensionais fossem termodinamicamente instáveis e, portanto, não deveriam existir na sua forma livre, mas apenas como parte componente de outras estruturas [17]. Acreditava-se que flutuações térmicas em cristais bidimensionais causariam deslocamentos dos átomos que atingiriam valores comparáveis às distâncias interatômicas, tendendo a deformar o cristal em estruturas curvas [15][16]. Além de pertencer a uma nova e inesperada classe de materiais, o grafeno possui propriedades singulares que atraíram um grande interesse por parte da comunidade acadêmica.

Uma única folha de grafeno exhibe excelentes propriedades eletrônicas. Medidas nesse material revelaram uma alta mobilidade μ , podendo esta superar $15.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ mesmo sob condições ambiente [8]. Além disso, observou-se que μ praticamente independe da temperatura. Isso revela que o valor de μ a 300 K, por exemplo, ainda é limitado por processos de espalhamento devido a impurezas ou defeitos, podendo, assim, ser melhorado e alcançar valores próximos a $100.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Embora alguns semicondutores, como o antimoneto de índio (InSb), possuam valores de μ próximos a $77.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ a temperatura ambiente, esses valores são obtidos para semicondutores sem nenhuma dopagem, enquanto, no grafeno, a mobilidade permanece alta mesmo em amostras eletricamente ou quimicamente dopadas [17].

Talvez a mais notável característica do grafeno seja o fato de seus portadores de carga serem governados pela equação de Dirac, equação esta reponsável pela descrição

de partículas de spin $1/2$ na eletrodinâmica quântica. Elétrons no grafeno, a baixas energias ($E < 1$ eV) [17], comportam-se como partículas relativísticas de massa nula e velocidade da luz efetiva da ordem de 10^6 m/s, exibindo um espectro de baixas energias cônico com gap zero [18]. Alguns efeitos que decorrem desse fato são: efeito de campo elétrico ambipolar, mínimo de condutividade, efeito Hall quântico anômalo e tunelamento de Klein.

Por efeito de campo elétrico ambipolar entende-se que os portadores de carga podem ser continuamente trocados de elétrons para buracos alterando a direção do campo elétrico aplicado. A Fig.4 mostra o efeito de campo elétrico no grafeno. A condutividade cresce linearmente com a voltagem de porta V_g para ambas as polaridades, com mudança de sinal na vizinhança de $V_g = 0$. Esse comportamento mostra que voltagem de porta positiva induz concentração de elétrons enquanto voltagem negativa induz concentração de buracos. Isso se deve à adição ou retirada de elétrons do substrato.

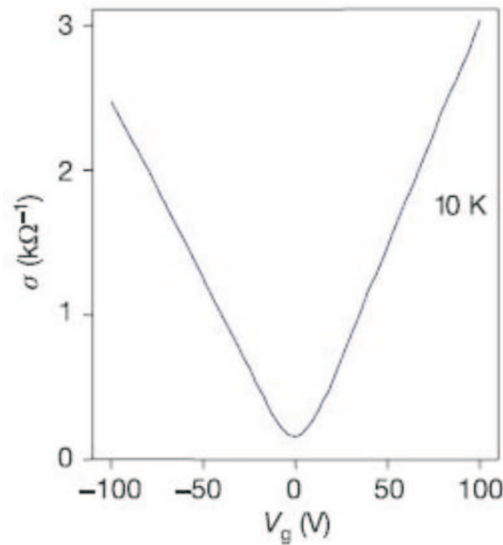


Figura 4: Efeito ambipolar de campo elétrico [18].

Sabe-se que efeito Hall quântico (EHQ) descreve a quantização da condutividade Hall σ_{xy} , condutividade medida perpendicular à corrente, em platôs de valores inteiros de $4e^2/h$. No entanto, no grafeno o EHQ observado diferencia-se do efeito convencional. Nesse material, 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 [18]. Esse comportamento é explicado pela presença de um nível de Landau em $N = 0$ no espectro de energia $E = \pm v_F \sqrt{2e\hbar B N}$ do grafeno em um campo magnético B , onde \pm indicam elétrons e buracos. A Fig. 5 mostra a condutividade Hall σ_{xy} e a condutividade longitudinal ρ_{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.

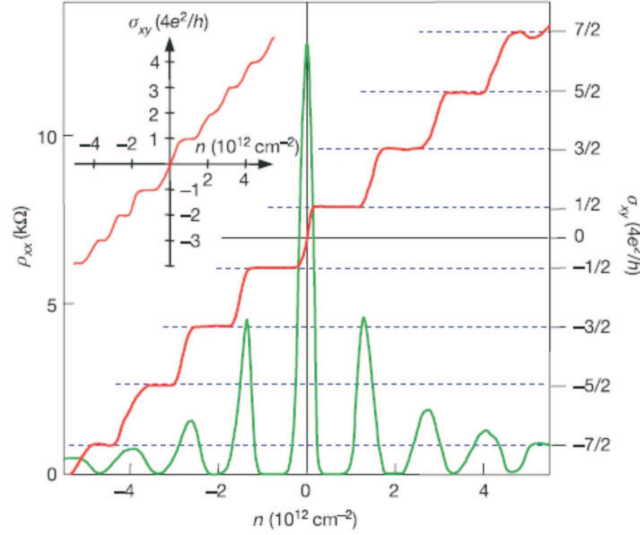


Figura 5: Efeito Hall quântico anômalo no grafeno a temperatura de 4 K e campo magnético de 14 T como função da concentração dos portadores de carga. (inserção) σ_{xy} para um bicamada de grafeno, onde a quantização é usual e ocorre em valores inteiros de $4e^2/h$. Essa figura foi adaptada de [18].

Uma outra indicação experimental que revela a singular qualidade eletrônica desse material é a possibilidade de observação do EHQ a temperatura ambiente [19], fato que somente era observado em outros sistemas a baixas temperaturas, normalmente inferiores ao ponto de ebulição do hélio líquido [20]. Apesar do progresso obtido com a possibilidade de observação do EHQ a temperatura ambiente, ainda existe a necessidade de campos magnéticos extremamente altos. A Fig.6 [19] mostra as condutividades Hall σ_{xy} e longitudinal ρ_{xx} a temperatura de 300 K e campo magnético de 29 T. No entanto, Y. Zhang et al. afirmam em [21] que platôs Hall têm sido observados em $B < 20T$ a 300 K e espera-se que com a melhora da qualidade das amostras e, conseqüentemente, aumento da mobilidade μ o EHQ poderá ser observado a temperatura ambiente fazendo uso de magnetos comuns. Mais uma característica singular dos portadores de carga do grafeno surge quando esses são submetidos a potenciais eletrostáticos, tais como barreiras de potencial. Elétrons no grafeno são capazes de tunelar qualquer barreira de potencial com probabilidade 1 desde que sua incidência seja normal. Isso ocorre devido a uma transição da banda de condução para a banda de valência, ou seja, na região da barreira o portador se propaga através de um estado de buraco. Esse comportamento é normalmente citado como paradoxo de Klein no grafeno, em analogia ao paradoxo de Klein na eletrodinâmica quântica, onde partículas começam a penetrar uma barreira de potencial quando sua altura excede duas

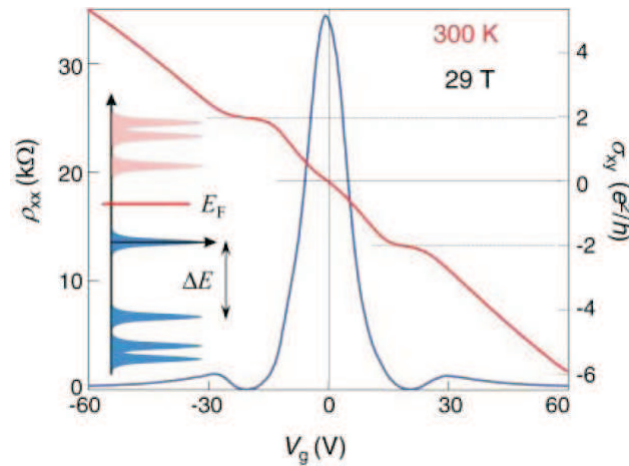


Figura 6: Efeito Hall quântico anômalo no grafeno a temperatura ambiente. Condutividade Hall σ_{xy} (vermelho) e resistividade longitudinal ρ_{xx} (azul) como função da voltagem de porta. (inserção) A seqüência de níveis de Landau para elétrons no grafeno. Essa figura foi adaptada de [19].

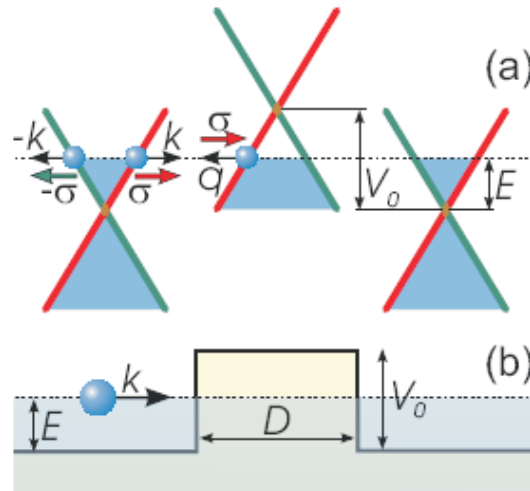


Figura 7: (a) Os três diagramas ilustram o espectro de partículas em uma folha de grafeno e os níveis de energia de Fermi através de uma barreira de potencial de largura D e altura V_0 . O espectro é linear para baixas energias. O pseudospin σ é paralelo (anti-paralelo) a direção do movimento dos elétrons (buracos) e possui direção fixa ao longo dos ramos vermelho e amarelo do espectro. (b) O nível de fermi (linha pontilhada) fica na banda de condução fora da barreira e na banda de valência na região da barreira [22].

vezes a sua energia de repouso mc^2 . A partir desse ponto, a transmissão praticamente independe da altura da barreira e aproxima-se da transmissão perfeita para barreiras de potencial muito altas.

Devido às propriedades aqui descritas e muitas outras não citadas, existe, atualmente, um grande ânimo em viabilizar aplicações tecnológicas do grafeno, tais como transistores totalmente feitos de átomos de carbono. Isso eliminaria a necessidade de junções metálicas, tornando possível a construção de dispositivos ainda menores que os atuais. Outra possível aplicação é usar o grafeno como um sensor de gás [23]. Quando uma molécula é adsorvida na superfície de uma folha de grafeno ocorre uma mudança local da resistividade elétrica, possibilitando, assim, sua detecção. Embora esse efeito também ocorre em outras matérias, no grafeno, devido à sua alta condutividade elétrica, a mudança da resistividade torna-se detectável mesmo quando uma única molécula é adsorvida.

1.3 Sumário

No capítulo subsequente será mostrado o porquê da analogia entre o comportamento dos portadores de carga no grafeno e férmions de massa nula na eletrodinâmica quântica. Para isso, vamos partir do Hamiltoniano tight-binding escrito na forma de segunda quantização e obter um Hamiltoniano análogo ao de Dirac para férmions relativísticos. Ainda nesse capítulo, será apresentado o método de matrizes de transferência, método esse utilizado na obtenção de todos os resultados numéricos apresentados nesse trabalho.

No capítulo 3, mostrar-se-á como obter o espectro de estados confinados em poços duplos de grafeno, bem como o coeficiente de transmissão para os estados propagantes a partir de um dado elemento da matriz de transferência. Os resultados para esse sistema são, então, expostos sempre ressaltando as peculiaridades devidas ao material considerado.

No capítulo 4, o sistema considerado será uma super-rede finita constituída de uma seqüência de barreiras de potencial. Primeiramente, vamos considerar que as larguras das barreiras são escolhidas aleatoriamente, variando dentro de um dado intervalo que é determinado por um fator que controla a força da desordem. Serão apresentados resultados para o coeficiente de transmissão e condutância para vários valores de desordem, de forma a investigar qual a influência da desordem do potencial sobre o comportamento das partículas. Em seguida, vamos considerar uma super-rede que segue a série de Fibonacci e apresentar resultados para a transmissão e condutância de elétrons incidentes nessa estrutura.

Finalmente, no último capítulo serão apresentadas as conclusões desse trabalho, bem como algumas perspectivas para trabalhos futuros.

2 Modelo Teórico

Neste capítulo vamos partir de uma descrição microscópica do grafeno para obter um modelo contínuo da dinâmica de portadores no limite de baixas energias. Nessa descrição, desprezaremos as bordas do cristal, considerando-o infinito e também não levaremos em conta as interações elétron-elétron ou spin-órbita. Para isso, usaremos a aproximação de ligação forte (tight-binding). Nesse modelo, considera-se que cada elétron π associado a um átomo de carbono, possui uma probabilidade diferente de zero de ser encontrado apenas nas vizinhas desse átomo, ou seja, nos seus vizinhos mais próximos. Dessa forma, cada elétron pode migrar de vizinho em vizinho ao longo da rede. Apesar de ser umas das abordagens microscópicas mais simples, o modelo tight-binding funciona extremamente bem para o cálculo da estrutura de bandas do grafeno [24].

2.1 Modelo Tight-binding

Grafeno é constituído por uma camada de átomos de carbono organizados em uma rede hexagonal. Essa estrutura cristalina não é uma rede de Bravais, no entanto ela pode ser vista como duas redes triangulares interpenetradas A e B , ou tratada como uma rede triangular com dois átomos por célula unitária [9]. Os vetores de rede são escritos como:

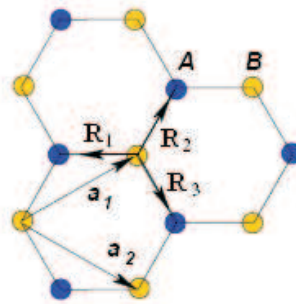


Figura 8: Estrutura de rede do grafeno, formada por duas redes triangulares interpenetradas A e B . \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os vetores unitários da rede e \mathbf{R}_i , $i = 1, 2, 3$ localizam os primeiros vizinhos.[25]

$$\vec{a}_1 = \frac{3a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \quad \vec{a}_2 = \frac{3a}{2}\hat{x} - \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \quad (2.1)$$

onde a é a distância entre dois átomos de carbono e \hat{x} e \hat{y} são vetores unitários. Os vetores que definem a rede recíproca são:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}\hat{x} + \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\hat{y}, \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}\hat{x} - \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\hat{y}, \quad (2.2)$$

O Hamiltoniano tight-binding para elétrons no grafeno escrito no formalismo de segunda quantização, incluindo apenas o termo de hopping entre os primeiros vizinhos, é escrito como:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} t(\mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{b}_j + \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{a}_i), \quad (2.3)$$

onde $t \approx 2,8\text{eV}$ é o parâmetro associado à transição de elétrons entre os sítios mais próximos. Os operadores \mathbf{a}_i^\dagger e \mathbf{a}_i são responsáveis pela criação e destruição, respectivamente, de elétrons no sítio i da subrede A, enquanto \mathbf{b}_j^\dagger e \mathbf{b}_j têm a mesma função para um sítio j na subrede B. Os termos $\sum_j \epsilon \mathbf{a}_j^\dagger \mathbf{a}_j$ e $\sum_j \epsilon \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{b}_j$ que fornecem as energias on-site foram omitidos, já que seu único efeito é deslocar o nível de energia de Fermi do sistema. Quando uma folha de grafeno está sob a ação de um potencial de porta, a energia on-site é igual ao a voltagem de porta, caso contrário, a energia on-site é nula.

Considerando a rede infinita, pode-se fazer uma transformada de Fourier no Hamiltoniano. Para isso escrevemos

$$\mathbf{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k, \quad \mathbf{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k^\dagger \quad (2.4)$$

$$\mathbf{b}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}, \quad \mathbf{b}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}^\dagger. \quad (2.5)$$

Substituindo (2.4) e (2.5) em (2.3) o Hamiltoniano fica

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \frac{t}{N} \left[\sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} + \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right], \quad (2.6)$$

que pode ser reescrito como:

$$\mathcal{H} = - \frac{t}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} [e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_j} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k]. \quad (2.7)$$

Cada átomo possui três primeiros vizinhos, então, fixando a origem em um sítio i qualquer e fazendo j variar sobre os primeiros vizinhos, localizados por $\vec{R}_1 = (-a, 0)$, $\vec{R}_2 = (a/2, a\sqrt{3}/2)$, $\vec{R}_3 = (a/2, -a\sqrt{3}/2)$, obtemos:

$$\mathbf{H} = -\frac{t}{N} \sum_i \sum_{k,k'} [e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} (e^{-ik'_x a} + e^{ik'_x a/2} e^{ik'_y \sqrt{3}a/2} + e^{ik'_x a/2} e^{-ik'_y \sqrt{3}a/2}) + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k (e^{ik'_x a} + e^{-ik'_x a/2} e^{-ik'_y \sqrt{3}a/2} + e^{-ik'_x a/2} e^{ik'_y \sqrt{3}a/2})] \quad (2.8)$$

$$\mathbf{H} = -t \sum_k [g(\vec{k}) \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_k + g^*(\vec{k}) \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{a}_k], \quad (2.9)$$

onde

$$g(\vec{k}) = e^{ik'_x a} + 2 \cos(k'_y \sqrt{3}a/2) e^{-ik'_x a/2} \quad (2.10)$$

é o fator de estrutura da rede cristalina.

Note que Hamiltoniano na Eq.(2.9) acima pode ser escrito como

$$\mathbf{H} = \sum_k \langle \Psi_k | \mathbf{H}_k | \Psi_k \rangle \quad (2.11)$$

onde $|\Psi_k\rangle = (\mathbf{a}_k \ \mathbf{b}_k)^T$ e \mathbf{H}_k representam, respectivamente, o estado eletrônico e o Hamiltoniano para um dado \vec{k} . Escreve-se \mathbf{H}_k como

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} 0 & -tg(\vec{k}) \\ -tg^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Pode-se obter facilmente os autovalores de \mathbf{H}_k como sendo

$$E_{\pm k} = \pm t|g(\vec{k})| = \pm t\sqrt{3 + f(\vec{k})}, \quad (2.13)$$

com $f(\vec{k}) = 4 \cos(3k_x a/2) \cos(\sqrt{3}k_y a/2) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a)$ [25].

O gráfico da Eq.(2.13), mostrado na Fig. 9, representa a estrutura de bandas de uma única folha de grafite. A banda de valência ($E < 0$) toca a banda de condução ($E > 0$) em seis pontos localizados nos vértices da primeira zona de Brillouin. Esses pontos, conhecidos como pontos de Dirac, são de particular importância no estudo do grafeno, uma vez que nesses pontos observa-se ausência de gap e uma dispersão eletrônica cônica incomum para pequenos valores de $|E|$. Os vértices de três desses cones estão conectados pelos vetores da rede recíproca, por isso eles são equivalentes. Da mesma forma, os outros três cones

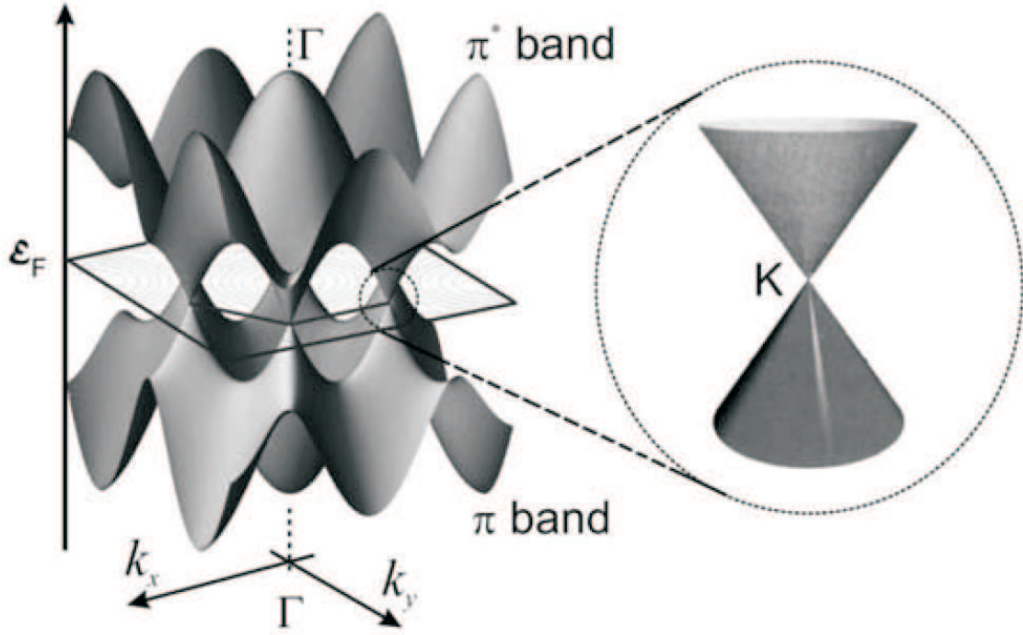


Figura 9: Relação de dispersão eletrônica do grafeno. Direita: zoom nas bandas de energia na região próxima ao ponto de Dirac [26].

também são equivalentes entre si. Cada vértice contribui com 1/3 de cone, por essa razão, é comumente dito que dois desses seis cones não são equivalentes. Suas posições no espaço recíproco são dadas pelos vetores \vec{K} e \vec{K}' como segue:

$$\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \vec{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{-2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (2.14)$$

2.2 Modelo Contínuo

O Hamiltoniano da Eq.(2.12) provém de uma abordagem microscópica e seus elementos dependem explicitamente do parâmetro de rede a . Como não estamos interessados em nenhum efeito de borda e consideramos um arranjo infinito de átomos, podemos reduzir o Hamiltoniano da Eq.(2.12) ao modelo contínuo se considerarmos apenas a vizinhança dos pontos K e K' . Os termos não nulos da matriz que representa o Hamiltoniano são dados em termos de $g(\vec{k})$. Então, para obter uma forma aproximada desse operador na vizinhança dos vales K e K' basta fazer uma expansão em série de Taylor de $g(\vec{k})$ em torno desses pontos. Dessa forma, considerando apenas termos de primeira ordem, $g(\vec{k})$ em torno de \vec{K}' pode ser aproximado na forma:

$$g(\delta\vec{k}) \approx g(\vec{K}') + \left. \frac{\partial g}{\partial k_x} \right|_{\vec{k}=\vec{K}'} (k_x - K'_x) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_y} \right|_{\vec{k}=\vec{K}'} (k_y - K'_y) + O(\delta k^2), \quad (2.15)$$

onde $\delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{K}'$. Depois de avaliar $g(\vec{k})$ e suas derivadas de primeira ordem no referido ponto, obtém-se as seguintes expressões:

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} \left(\frac{-\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) k'_x - \frac{3a}{2} \left(\frac{-\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) ik'_y, \quad (2.16)$$

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) e^{i5\pi/6}. \quad (2.17)$$

A fase que aparece no lado direito da Eq.(2.17), representada pelo termo exponencial, pode ser incluída no ket de estado sem nenhuma mudança na física do sistema, uma vez que o quadrado da norma desse termo é um. Assim, o Hamiltoniano final que descreve estados com vetor de onda no vale centrado em \vec{K}' é dado por

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F (k'_x - ik'_y) \\ \hbar v_F (k'_x + ik'_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

com $\hbar v_F = 3at/2$. Esse é exatamente o Hamiltoniano de Dirac bidimensional para férmions relativísticos com termo de massa nulo e a velocidade da luz c substituída pela velocidade de Fermi $v_F \approx 1 \times 10^6$ m/s. Por esse motivo, é dito freqüentemente que os elétrons no grafeno comportam-se como férmions relativísticos sem massa. A Hamiltoniano acima pode então ser escrito de uma forma mais concisa como

$$\mathbf{H}_k = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (2.19)$$

onde as componentes $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ dadas pelas matrizes de Pauli. O grau de liberdade de spin, descrito pelas matrizes de Pauli σ_i , é chamado de pseudospin para distingui-lo do spin real do elétron que não está sendo considerado nessa abordagem. Se considerássemos o outro vale centrado em \vec{K} , encontraríamos o mesmo Hamiltoniano com $k_y \rightarrow -k_y$. Assim, a equação que descreve um elétron no grafeno, considerando a contribuição dos dois vales, assume a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & v_F \boldsymbol{\sigma}^\dagger \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle, \quad (2.20)$$

onde $E = \pm \hbar v_F k$ fornece o espectro de energias e $|\Psi\rangle = (\psi_{K'}, \psi_K) = (\psi'_A, \psi'_B, \psi_B, \psi_A)^T$ é um espinor cujas as componentes ψ_A, ψ'_A e ψ_B, ψ'_B estão relacionadas, respectivamente, com as amplitudes de probabilidade das subredes A e B. Na ausência de espalhamento inter-vales os estados correspondentes aos vales \vec{K} e \vec{K}' são degenerados, de modo que vamos trabalhar apenas com o Hamiltoniano bidimensional da Eq.(2.19).

Uma quantidade importante a ser definida é helicidade ou quiralidade. O operador associado a essa grandeza é definido como a projeção do operador momento ao longo do pseudospin:

$$\mathbf{h} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}. \quad (2.21)$$

Fica claro da definição acima que $[\mathbf{H}, \mathbf{h}] = 0$, logo \mathbf{h} é uma constante do movimento. Decorre desse fato a razão pela qual dizemos que os portadores de carga no grafeno tem uma natureza quiral, ou seja, a direção do movimento está intimamente relacionada com a direção do pseudospin. Além disso, autoestados $\psi_{K'}$ e ψ_K também são autoestados de \mathbf{h} com autovalores $\pm 1/2$ para o vale K' e $\mp 1/2$ para o vale K . Isso nos diz que elétrons possuem quiralidade positiva (negativa) e buracos possuem quiralidade negativa (positiva) no vale K' (K).

2.3 Método da Matriz de Transferência

Nosso objetivo nesta seção é desenvolver um método para resolver a Eq.(2.20). Vamos considerar o grafeno com uma estrutura cristalina perfeita, sem nenhuma impureza ou defeito. Então, de maneira a resolver o problema de uma forma mais geral, incluiremos dois termos ao Hamiltoniano (2.19), de forma que a equação a ser resolvida assume a forma:

$$(v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + mv_F^2 \sigma_z + U)|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (2.22)$$

O segundo termo da equação é um termo de massa, responsável pela introdução de um gap no espectro de energia, que pode surgir devido a uma interação com o substrato [28] ou acoplamento spin-orbita [25], enquanto o terceiro, representa um potencial eletrostático. Seu único efeito é o deslocamento do nível de energia de Fermi do sistema.

A equação (2.22) pode ser reescrita da seguinte forma

$$\hbar v_F \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_B = i(E - U - mv_F^2) \psi_A, \quad (2.23)$$

$$\hbar v_F \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_A = i(E - U + mv_F^2) \psi_B. \quad (2.24)$$

Para prosseguirmos precisamos de alguma informação sobre o potencial. Então, a partir de agora consideraremos um potencial unidimensional $U = U(x)$. Dessa forma, como

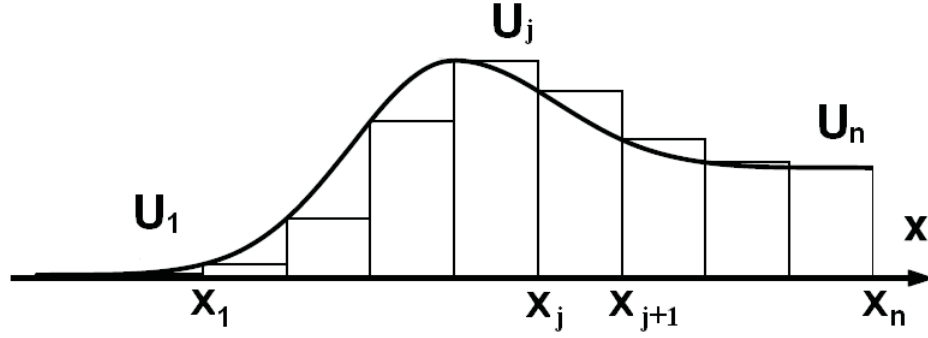


Figura 10: Ilustração de como um potencial unidimensional pode ser aproximado por uma seqüência de barreiras.

$[\mathbf{H}, \mathbf{p}_y] = 0$, podemos assumir $\psi_{A(B)}(x, y) = e^{ik_y y} \phi_{A(B)}(x)$. Assim, o par equações diferenciais parciais acima torna-se o seguinte par de equações ordinárias acopladas:

$$\frac{d\phi_B}{dx} + k_y \phi_B = i(\varepsilon - u(x) - \Delta)\phi_A, \quad (2.25)$$

$$\frac{d\phi_A}{dx} - k_y \phi_A = i(\varepsilon - u(x) - \Delta)\phi_B, \quad (2.26)$$

onde $\varepsilon \equiv E/\hbar v_F$, $u(x) \equiv U(x)/\hbar v_F$, $\Delta \equiv mv_F/\hbar$. As equações acima podem ser facilmente desacopladas. Fazendo isso para ϕ_A obtém-se que

$$\frac{d^2 \phi_A}{dx^2} + \frac{u'}{(\varepsilon - u + \Delta)} \frac{d\phi_A}{dx} - \left[k_y^2 + \frac{u' k_y}{(\varepsilon - u + \Delta)} - (\varepsilon - u)^2 + \Delta^2 \right] \phi_A = 0. \quad (2.27)$$

A idéia desse método é aproximar um potencial unidimensional suave qualquer por uma seqüência de barreiras de potencial constante [29][30][31]. Quão menor a largura dessas barreiras e, portanto, maior o número de barreiras, melhor será a aproximação e, conseqüentemente, os resultados. A Fig. 10 ilustra o que foi dito acima. A região na qual o método é aplicado é delimitada pelos pontos x_1 e x_{n-1} , onde n é o número de regiões de potencial constante. Assume-se que para $x \in [x_{j-1}, x_j]$ o potencial é uma constante dada por $U = U_j$. Assim sendo, em uma determinada região j , $u'_j = 0$, logo a Eq.(2.26) reduz-se a

$$\frac{d^2 \phi_A^j}{dx^2} + \alpha_j^2 \phi_A^j = 0, \quad (2.28)$$

com $\alpha_j^2 \equiv [(\varepsilon - u_j)^2 - k_y^2 - \Delta^2]$. A solução da Eq.(2.27) é bastante simples e assume a forma

$$\phi_A^j(x) = A_j e^{i\alpha_j x} + B_j e^{-i\alpha_j x}. \quad (2.29)$$

Encontrado ϕ_A^j , temos de (2.25) que

$$\phi_B^j(x) = ig_-^j A_j e^{i\alpha_j x} + ig_+^j B_j e^{-i\alpha_j x}, \quad (2.30)$$

onde $g_\pm^j = (k_y \pm i\alpha_j)/(\varepsilon - u_j + \Delta)$. Dessa forma, $|\Psi\rangle$ fica completamente determinado e pode ser escrito na forma matricial como segue:

$$|\Psi\rangle = e^{ik_y y} G_j M_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

onde

$$G_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ ig_-^j & ig_+^j \end{pmatrix}, \quad M_j = \begin{pmatrix} e^{i\alpha_j x} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha_j x} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Aplicando a condição de continuidade da função de onda na interface $x = x_j$ entre as regiões j e $j + 1$ obtém-se uma equação que relaciona os coeficientes dessas duas regiões da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} = N_{j+1}(x_j) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

com

$$N_{j+1}(x_j) = M_{j+1}^{-1}(x_j) G_{j+1}^{-1} G_j M_j(x_j) \quad (2.34)$$

$$N_{j+1}(x_j) = \frac{i(u_{j+1} - \varepsilon - \Delta)}{2\alpha_{j+1}} \begin{pmatrix} (g_+^{j+1} - g_-^j) e^{i(\alpha_j - \alpha_{j+1})x_j} & (g_+^{j+1} - g_+^j) e^{-i(\alpha_j + \alpha_{j+1})x_j} \\ (g_-^j - g_-^{j+1}) e^{i(\alpha_j + \alpha_{j+1})x_j} & (g_+^j - g_-^{j+1}) e^{-i(\alpha_j - \alpha_{j+1})x_j} \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

É importante notar que, ao contrário do caso da equação de Schrödinger, não podemos assumir a continuidade da derivada espacial da função de onda. De fato, as derivadas de φ_A e φ_B serão geralmente descontínuas.

Note que para uma incidência normal ($k_y = 0$) de elétrons na interface entre as regiões j e $j + 1$ de um potencial eletrostático no grafeno ($\Delta = 0$), a matriz $N_{j+1}(x_j)$ reduz-se a

$$N_{j+1}(x_j) = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i(|\varepsilon - u_j| + |\varepsilon - u_{j+1}|)x_j} \\ e^{i(|\varepsilon - u_j| + |\varepsilon - u_{j+1}|)x_j} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

indicando que o elétron se propaga com 100% de probabilidade de uma região para outra (tunelamento de Klein), tendo sua função de onda alterada apenas por um fator de fase.

Considerando que o potencial original foi aproximado por n regiões de potencial constante, então aplica-se a condição de continuidade $(n - 1)$ vezes nos pontos x_1, \dots, x_{n-1} para obter a relação entre os coeficientes da primeira e última região como segue:

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

onde $N = N_n N_{n-1} \cdots N_2$ é a matriz de transferência. Feito isso, o problema fica reduzido ao cálculo de um produtório de matrizes. Mostrar-se-á, nos capítulos subseqüentes, que a partir dos elementos da matriz de transferência pode-se facilmente encontrar o espectro de energia de estados confinados, bem como a probabilidade de transmissão eletrônica.

3 Poços Duplos em Grafeno

Estudaremos, nesse capítulo, um sistema constituído de dois poços quânticos acoplados por meio de uma barreira de potencial. Apesar do tunelamento Klein tornar potenciais eletrostáticos estruturas transparentes aos portadores no grafeno, existe a possibilidade de confinar elétrons (buracos) em poços (barreiras) de potencial, desde que estes possuam a componente $k_y \neq 0$. Estamos interessados em investigar o comportamento de estados confinados nesses poços bem como a forma do espectro de energia por eles formado. Na verdade, pode-se dizer que tratamos com estados quase-confinados, já que os portadores só estão confinados em uma direção. Além disso, calcularemos o coeficiente de transmissão de elétrons incidentes nessa estrutura.

A Fig.11 ilustra como produzir experimentalmente barreiras de potencial em grafeno. O perfil de potencial mostrado em b) deve-se basicamente às voltagens de porta inferior V_b e superior V_t aplicadas a folha de grafeno. A voltagem V_b devida a camada de substrato $n++$ Si define a densidade n_1 de portadores na região 1, enquanto a voltagem de porta V_t define outra densidade n_2 na região 2.

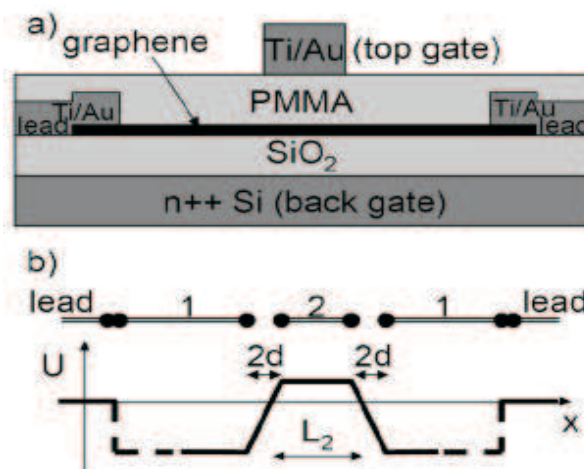


Figura 11: (a) Visão da seção transversal do dispositivo. (b) Perfil do potencial de elétrons no grafeno produzido pelo dispositivo mostrado em (a). [32]

3.1 Estados Confinados em Fios Quânticos

O comportamento da função de onda de portadores de carga no grafeno ao atravessar uma região de potencial depende fortemente da sua direção de propagação. De acordo com a Eq.(2.28), quando $\Delta = 0$, dois tipos de soluções são possíveis dependendo do sinal de $(\varepsilon - u_j)^2 - k_y^2$. Quando $(\varepsilon - u_j)^2 - k_y^2 > 0$ nós temos estados propagantes, que descrevem elétrons e buracos livres. No entanto, sempre que $(\varepsilon - u_j)^2 - k_y^2 < 0$, nós teremos a possibilidade de confinar elétrons para valores finitos de k_y .

No capítulo anterior foi mostrado que os coeficientes da função de onda da última região do potencial A_n e B_n relacionam-se com os coeficientes da primeira região A_1 e B_1 através de uma matriz de transferência, de forma que

$$A_n = N_{11}A_1 + N_{12}B_1, \quad (3.1)$$

$$B_n = N_{21}A_1 + N_{22}B_1. \quad (3.2)$$

Como estamos interessados em estados ligados, precisamos, então, garantir que a função de onda tenha um decaimento exponencial nas primeira e última regiões de potencial. Tendo em mente as Eqs. (2.27) e (2.28), observa-se que essa condição é satisfeita quando α_1 e α_n são números imaginários puros e $A_1 = B_n = 0$. Olhando a Eq.(2.2) vemos que as condições impostas acima implicam que

$$N_{22} = 0. \quad (3.3)$$

Dessa forma, encontrar um estados confinados resume-se a encontrar os zeros da Eq.(2.3).

3.2 Transmissão

Tendo em vista a importância das propriedades de transporte de dispositivos eletrônicos e que tais propriedades, como corrente e condutância, podem ser obtidas a partir do coeficiente de transmissão eletrônico, nosso objetivo, agora, é calcular a transmissão de elétrons ($E > k_y$) através da estrutura mostrada na Fig.12. Lembrando das Eqs. (2.27) e (2.28), para que tenhamos estados propagantes vindos da esquerda para direita, precisamos que $B_n = 0$. Isso implica que $B_1/A_1 = -N_{21}/N_{22}$. O coeficiente de transmissão

é, por definição, $T = |A_n/A_1|^2$. Então, de acordo com as Eqs. (3.1) e (3.2), temos que

$$T = \left| N_{11} + N_{12} \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = \left| \frac{\det N}{N_{22}} \right|^2. \quad (3.4)$$

Sempre que o potencial da primeira e última regiões forem iguais, como nesse caso, $\det N = 1$ e, portanto,

$$T = \left| \frac{1}{N_{22}} \right|^2. \quad (3.5)$$

3.3 Poço simples

Vamos considerar, inicialmente, o caso de um poço simples simétrico de largura L_0 e profundidade U_0 , como mostrado na Fig. 12.

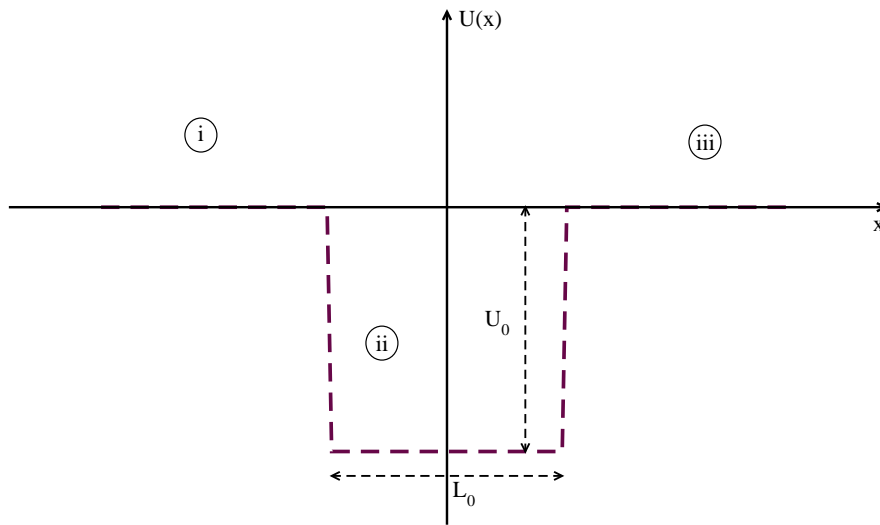


Figura 12: Perfil de um poço simples simétrico de potencial de largura L_0 e profundidade U_0 .

A Fig. 13 mostra as energias correspondentes aos estados eletrônicos confinados em um poço simétrico de potencial no grafeno como função da componente k_y do vetor de onda. As linhas pontilhadas delimitam o limite entre estados propagantes (elétrons para

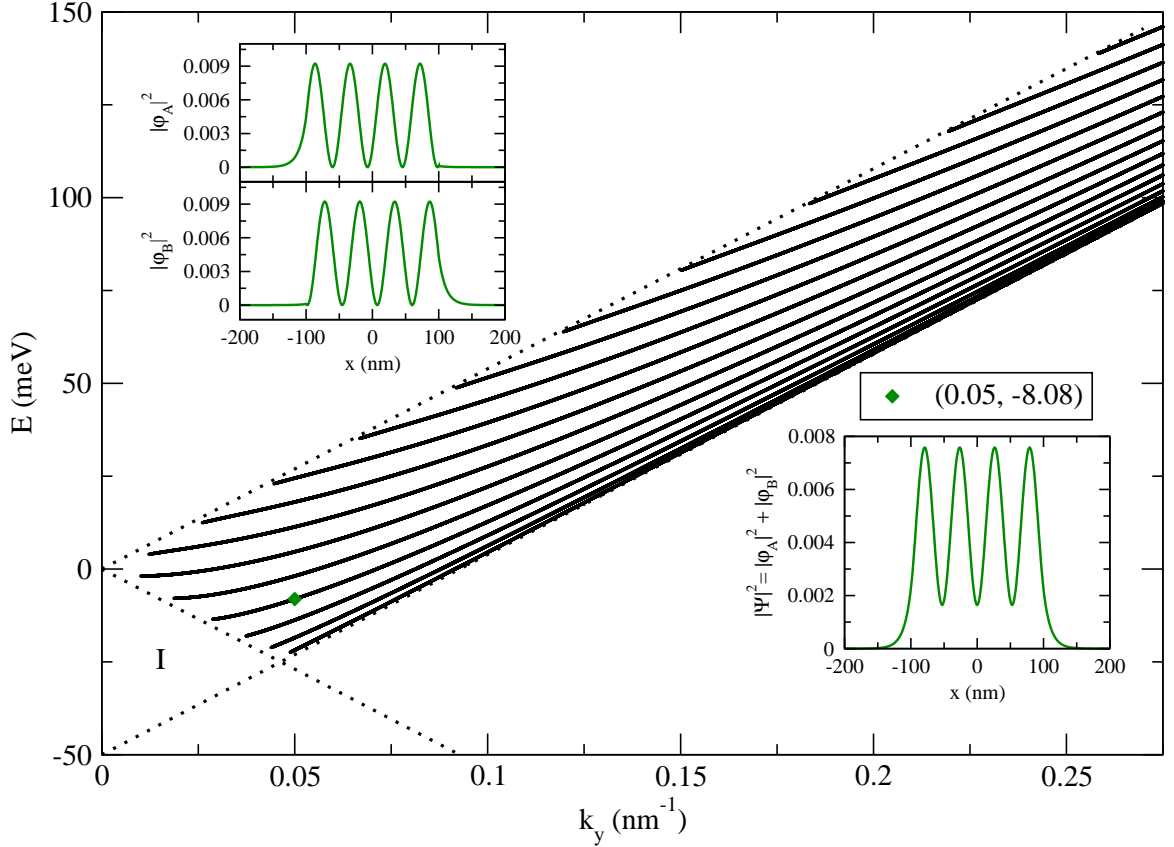


Figura 13: Espectro dos estados confinados em um poço simétrico de potencial de largura $L_0 = 200$ nm e profundidade $U_0 = -50$ meV. (inserção superior) Amplitudes de probabilidade correspondentes as subredes A e B para o estado destacado no gráfico principal. (inserção inferior) Densidade de probabilidade do estado destacado no gráfico principal.

$E > \hbar v_F$ e buracos para $E < -\hbar v_F$) e estados ligados de elétrons. Pode-se observar que, para um dado par de parâmetros (U_0, L_0), o número de ramos, bem como o espaçamento entre eles, depende do valor de k_y . Para pequenos valores existe um cut-off (região I) que surge devido a conversão de elétrons confinados na região do poço em buracos livres na região da barreira. Para valores grandes de k_y os ramos são aproximados por

$$E = \hbar v_F \left[\left(\frac{n\pi}{L} \right)^2 + k_y^2 \right]^{1/2}, \quad (3.6)$$

onde n é um número inteiro. Para um dado valor de k_y a precisão dessa aproximação melhora a medida que L cresce [33]. A diferença mais evidente do caso não-relativístico é a própria dependência na componente y do momento. Além disso, nota-se uma tendência dos ramos em interceptar a linha que separa os estados confinados da região contínua, revelando a possibilidade da conversão de estados de elétrons e buracos livres em estados eletrônicos confinados por um pequeno aumento no valor de k_y . A inserção superior da Fig. 13 mostra as amplitudes de probabilidade associadas com as subredes A e B do

estado com coordenadas $k_y = 0,03 \text{ nm}^{-1}$ e $E = 0,15 \text{ meV}$, enquanto a inserção inferior mostra o comportamento da densidade de probabilidade desse mesmo estado. Pode-se notar uma descontinuidade nas derivadas das amplitudes de probabilidade associadas às subredes A e B em $x = 100 \text{ nm}$ e $x = -100 \text{ nm}$, respectivamente. Além disso, existe uma diferença de fase entre φ_A e φ_B que induz uma espécie de "polarização de subrede" na região de potencial não-nulo.

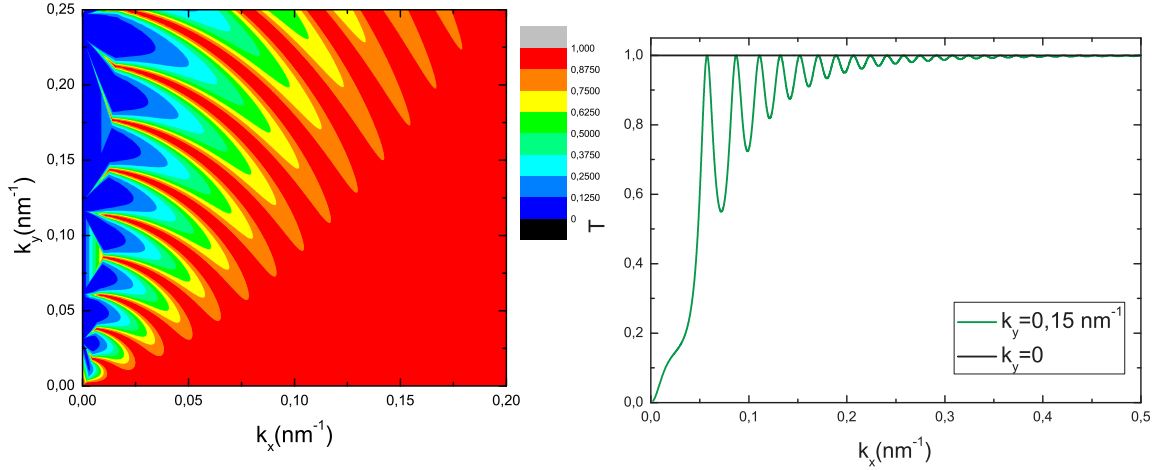


Figura 14: (a) Gráfico de contorno do coeficiente de transmissão para elétrons com energia $E > 0$ incidentes em um poço de potencial com largura $L_0 = 200 \text{ nm}$ e profundidade $U_0 = -50 \text{ meV}$. (b) Transmissão para valores fixos de k_y . A curva verde corresponde a $k_y = 0,15 \text{ nm}^{-1}$ e a curva preta para $k_y = 0$.

A Fig.14(a) mostra o gráfico de contorno para o coeficiente de transmissão de um elétron com energia $E > 0$ como função de $k_x = \sqrt{(\varepsilon - u_0)^2 - k_y^2}$ e k_y . Esse resultado revela uma dependência na direção com que o elétron incide na região do poço, exibindo transmissão perfeita para uma grande variedade de direções, inclusive para o caso de incidência normal $k_y = 0$, comportamento que o distingue do caso não-relativístico. Para pequenos valores de k_x observa-se uma seqüência de picos de transmissão perfeita. Na Fig.14(b) temos as curvas da transmissão em função de k_x para $k_y = 0,15 \text{ nm}^{-1}$ e $k_y = 0$, correspondentes ao gráfico em (a).

3.4 Poço duplo

Devido à simetria entre elétrons e buracos no grafeno em torno de $E = 0$, uma estrutura que funciona como uma barreira de potencial para elétrons será um poço de potencial para buracos. Por isso, consideraremos agora o sistema formado por poços duplos simétricos.

Como mostrado na Fig. 15, o primeiro poço tem largura L_1 e profundidade U_1 , enquanto o segundo poço tem largura L_3 e profundidade U_3 e está separado do primeiro por uma barreira de largura L_2 e altura U_2 .

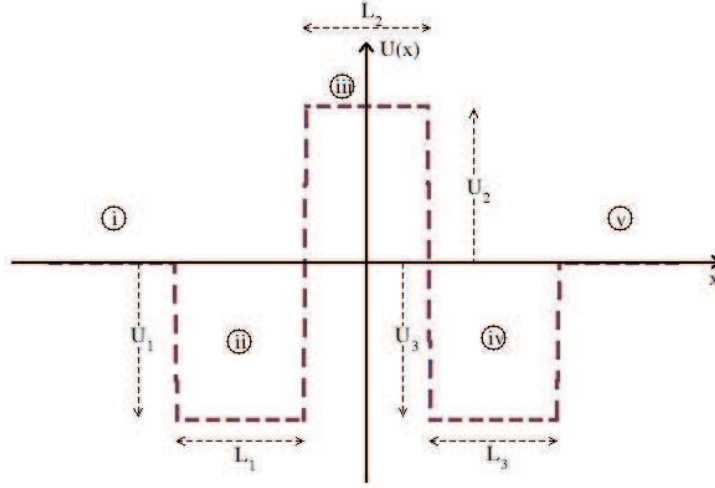


Figura 15: Perfil do potencial. Dois poços com potencial U_1 e U_3 , larguras L_1 e L_3 separados por uma barreira com potencial U_2 e largura L_2 .

A Fig. 16 mostra o espectro de estados confinados em poços duplos simétricos de largura 50 nm e profundidade 100 meV separados por uma barreira de altura 100 meV. Verifica-se, para $U_2 > 0$, o aparecimento de novos ramos associados a estados de buracos confinados na região da barreira, já que $\partial E/\partial k_y < 0$. Na região II do gráfico, entre $k_y = 0$ e $k_y = (U_2 - \min[U_1, U_3])/2\hbar v_F \approx 0,185 \text{ nm}^{-1}$, observa-se vários anti-cruzamentos de ramos, devido a uma superposição de estados de elétrons e buracos, o que torna esses ramos quase horizontais, indicando uma velocidade de grupo aproximadamente nula. No lado direito da Fig.16 é mostrado o comportamento da densidade de probabilidade dos estados destacados no espectro de energia. O número de picos nas regiões de poços e barreira indicam quais os ramos que contribuem para a formação desses novos estados. A altura desses picos depende da posição na qual esses estados encontram-se no espectro de energia. Para estados cujas energias encontram-se na porção do ramo em $\partial E/\partial k_y < 0$, temos picos mais elevados na região da barreira, enquanto que nas porções do ramo em que $\partial E/\partial k_y > 0$ a densidade de probabilidade apresenta picos mais elevados no interior dos poços. Nota-se que $\partial E/\partial k_y \approx 0$ para valores muito pequenos de k_y de forma que a altura dos picos tende a ser uniforme.

Na Fig.17 temos as energias de estados confinados em função da altura U_2 da barreira central para um valor fixo de $k_y = 0,13 \text{ nm}^{-1}$. Pode-se notar a presença de dois tipos de estados: estados eletrônicos, pertencentes aos ramos quase horizontais que sofrem

pouquíssima influência com o acréscimo de U_0 e estados de buracos que começam a aparecer para valores de $U_0 > 25$ meV e são fortemente dependentes da altura da barreira.

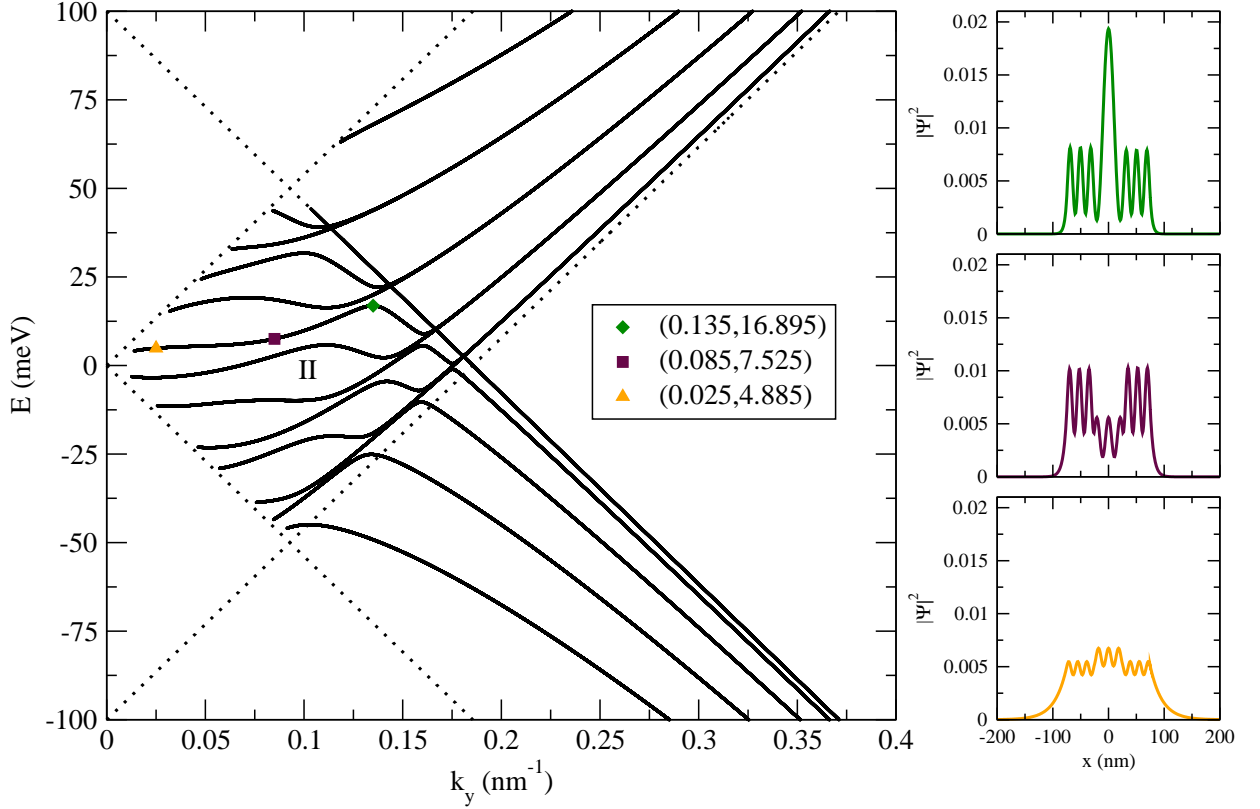


Figura 16: Estados confinados em poços duplos simétricos de potencial acoplados por uma barreira. Os parâmetros são $L_1 = L_2 = L_3 = 50$ nm, $U_1 = U_3 = -100$ meV e $U_2 = 100$ meV. (Direita) Densidade de probabilidade dos estados destacados no gráfico principal.

A Fig. 18 mostra o espectro para o caso em que $U_2 = 0$ e a separação entre os poços é de apenas 20 nm, o que causa uma quebra de degenerescência dos estados para pequenos valores de k_y , já que para pequenos valores de vetor de onda a função de onda decai mais lentamente na região das barreiras, causando a superposição entre estados dos dois poços. As inserções nessa figura mostram o comportamento da densidade de probabilidade dos estados destacados no espectro de energia, revelando que cada um dos dois estados, com mesmo vetor de onda e provenientes do mesmo ramo, está levemente mais localizado em um dos poços.

Finalmente, na Fig. 19, temos o espectro de poços assimétricos, o primeiro com profundidade 100 meV e o segundo com, 50 meV. Observa-se uma superposição de estados na região entre $E = \hbar v_F k_y$ e $E = \hbar v_F k_y + \min[U_1, U_3]$, ocasionando uma repulsão entre os

ramos nessa região, como é mostrado na inserção feita nesse gráfico. Caso considerássemos a distância entre os poços consideravelmente grande, os ramos correspondentes a cada um dos poços iriam apenas se sobrepor, sem causar nenhuma influência um sobre o outro. O lado direito da Fig. 19 mostra o comportamento da densidade de probabilidade dos estados assinalados. Em laranja, está mostrado o comportamento de um estado do terceiro ramo do primeiro poço. A medida que se caminha nesse ramo na direção negativa de k_y ocorre uma interferência desse ramo com o primeiro ramo do segundo poço, como indica o gráfico de cor verde. Para valores ainda menores de k_y , nota-se uma transferência do estado do segundo poço para o primeiro poço, indicado por um pico na densidade de probabilidade em roxo.

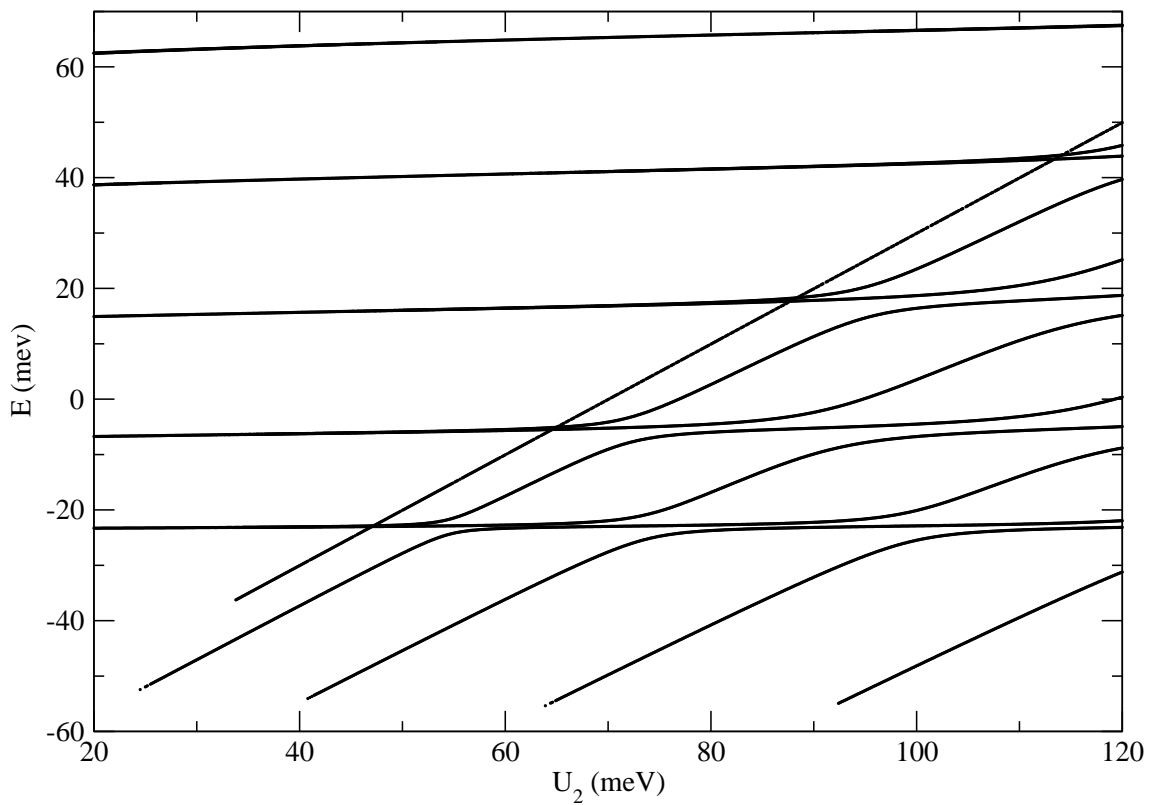


Figura 17: Energia de estados confinados em poços duplos simétricos de potencial em função da altura da barreira central. Os parâmetros são $L_1 = L_2 = L_3 = 50$ nm, $U_1 = U_3 = -100$ meV e $k_y = 0.13$ nm $^{-1}$.

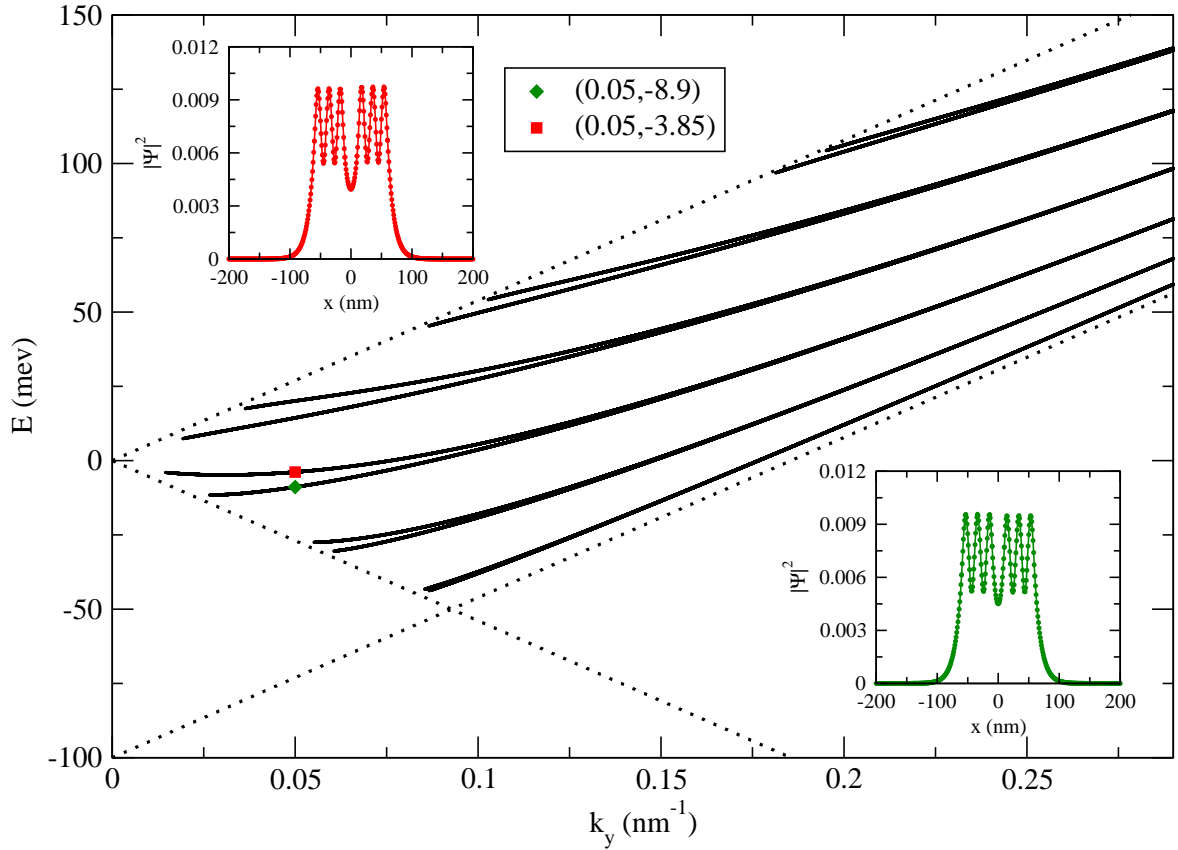


Figura 18: Estados confinados em poços duplos simétricos de potencial. Os parâmetros são $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm $U_1 = U_3 = -100$ meV e $U_2 = 0$. (inserções) Densidades de probabilidade dos estados destacados no gráfico principal.

As Figs. 20, 21 e 22 mostram o gráfico de contorno do coeficiente de transmissão de elétrons com $E > 0$, bem como curvas de transmissão para valores fixos de k_y . Os parâmetros do potencial correspondentes a esses gráficos são os mesmos das Figs. 16, 18 e 19, respectivamente. Assim como no caso de barreiras simples [22] e duplas [34], os resultados apresentam uma forte dependência direcional. Nota-se que o gráfico da Fig.17 claramente distingui-se dos dois últimos devido a presença de um vale na transmissão para quase todos os valores de k_y , com exceção do caso de incidência normal, enquanto as Figs.18 e 19 exibem transmissão perfeita para um muitas direções de incidência.

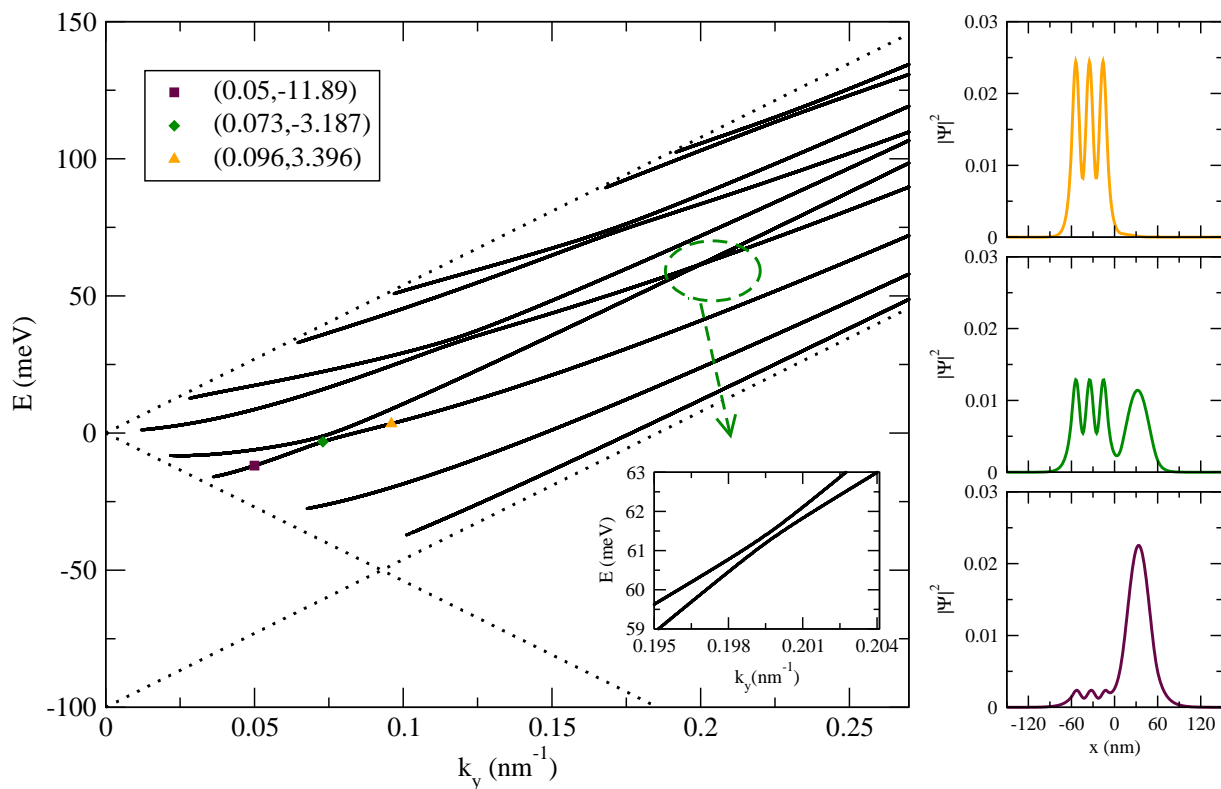


Figura 19: Estados confinados em poços duplos assimétricos de potencial. Os parâmetros são $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm, $U_1 = -100$ meV, $U_2 = 0$, $U_3 = -50$ meV. (inserção) Amplificação da região demarcada no gráfico principal. (Direita) Comportamento da densidade de probabilidade dos estados destacados no gráfico principal.

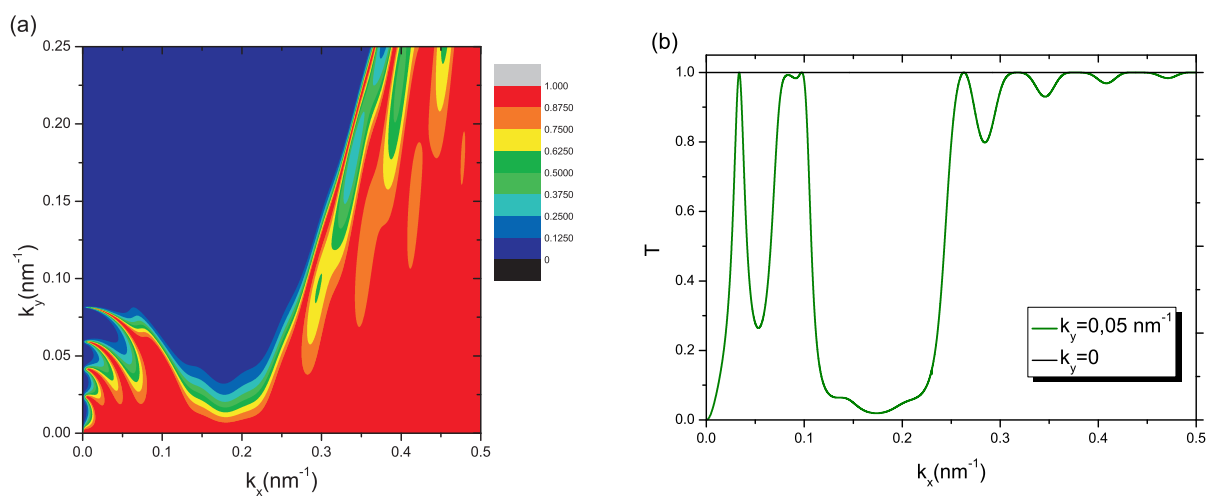


Figura 20: (Esquerda) Gráfico de contorno do coeficiente de transmissão para elétrons com energia $E > 0$ incidentes em poços duplos de grafeno com $U_1 = U_3 = -100$ meV, $U_2 = 100$ meV e $L_1 = L_2 = L_3 = 50$ nm. (Direita) Transmissão para valores fixos de k_y .

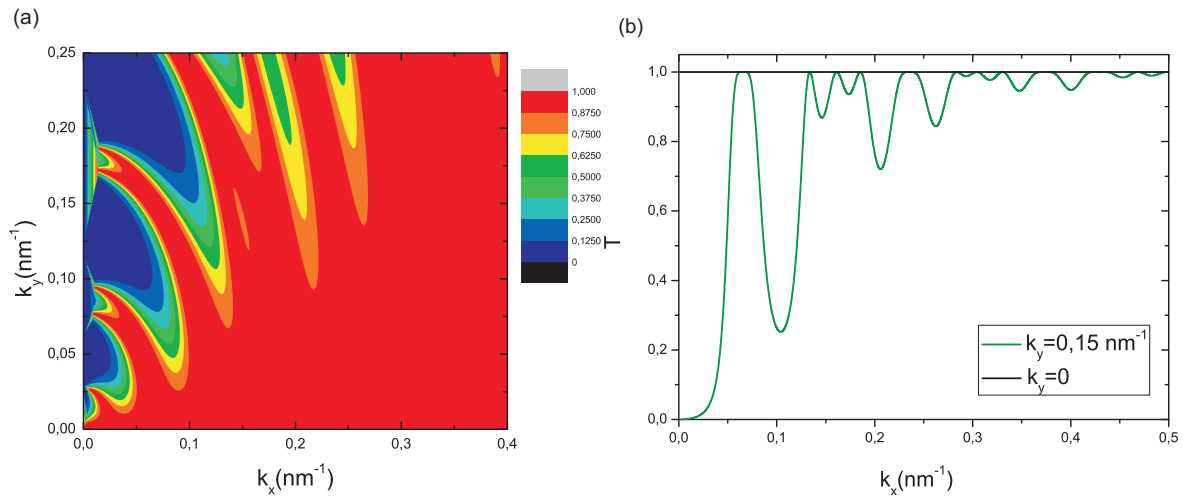


Figura 21: O mesmo da Fig. 17, mas com $U_1 = U_3 = -100$ meV, $U_2 = 0$ meV, $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm.

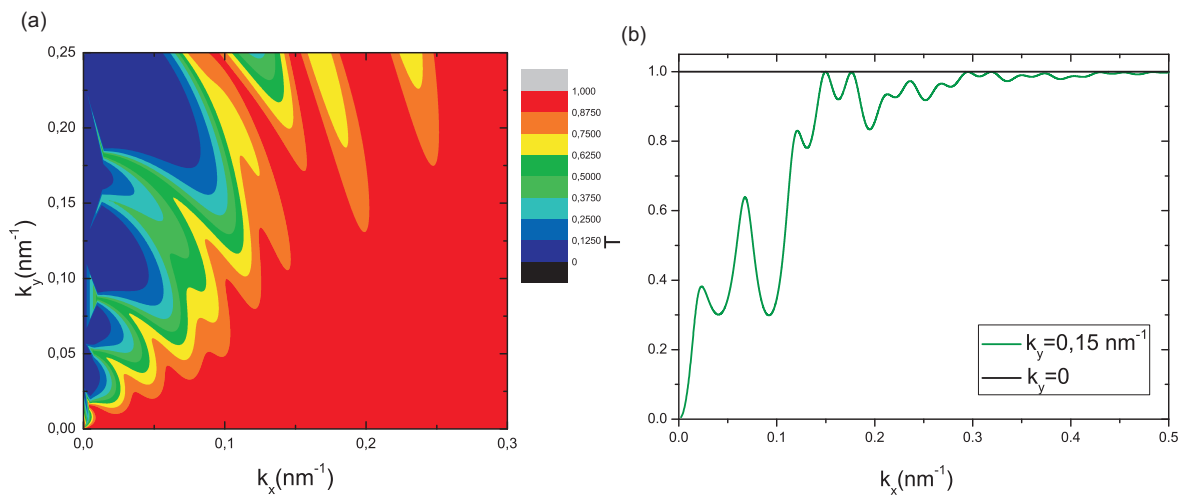


Figura 22: O mesmo da Fig. 17, mas com $U_1 = -100$ meV, $U_2 = 0$ meV, $U_3 = -50$ meV, $L_1 = L_3 = 50$ nm, $L_2 = 20$ nm.

4 *Super-redes finitas em grafeno*

Em 1969, Esaki e Tsu propuseram o primeiro estudo sobre estruturas quânticas consistindo de múltiplas barreiras formadas por heterojunções de materiais semicondutores [37][38][39], as chamadas super-redes. Posteriormente, o advento de técnicas de crescimento de cristais, como crescimento epitaxial por feixe molecular (MBE) na década de 1970, possibilitou a fabricação de heteroestruturas semicondutoras de alta qualidade e, conseqüentemente, levou a uma grande quantidade de estudos nessa área.

Assim como no caso de barreiras simples e duplas, uma super-rede pode ser produzida em grafeno através da deposição de eletrodos sobre a folha de grafeno ou, alternativamente, utilizado-se substratos estruturados. O método experimental pode ser baseado numa extensão da técnica utilizada em [32]. Tais estruturas foram objeto de estudo recente em [40], onde são apresentados resultados da dispersão para uma super-rede periódica unidimensional em grafeno, bem como a transmissão para um número finito de barreiras.

Neste capítulo estudaremos super-redes em grafeno, consistindo de um seqüência de N_c barreiras de potencial. Na primeira seção, será considerada uma super-rede desordenada, onde a largura das barreiras varia aleatoriamente em torno de um valor médio. A desordem é controlada por um parâmetro δ que quando feito igual a zero retorna ao caso periódico. Na segunda seção, vamos considerar um potencial que não é periódico, mas também não é desordenado. Especificamente, vamos utilizar um potencial descrito por uma seqüência de Fibonacci. Em ambos os casos calcularemos o coeficiente de transmissão bem como a condutância do sistema em função de alguns parâmetros do potencial.

4.1 Super-redes desordenadas

Um aspecto relevante das super-redes nesse caso, é o fato de que as técnicas utilizadas para sua obtenção podem levar a uma pequena incerteza na largura das regiões onde os gates são depositados, dando origem a uma espécie desordem na estrutura das super-

redes. Por esse motivo, neste capítulo vamos considerar uma super-rede desordenada representada por uma sequência de N_c barreiras de potencial. Por desordenado queremos dizer que o perfil de potencial produzido por essa estrutura possui algum parâmetro que varia aleatoriamente entre os sítios. No modelo considerado, a direção de crescimento da super-rede é designada pelo eixo x e, de forma que possamos desprezar os efeitos de borda, assume-se que as larguras das folhas de grafeno são muito maiores que d_B . As barreiras possuem altura U_0 , largura d_B e estão separadas por poços de largura d_W , como mostrado na Fig. 21. O parâmetro escolhido para introduzir desordem no sistema foi a largura d_B da barreira. A largura da i -ésima barreira é definida como $d_{B_i} = d_{B_{\text{médio}}} (1 + \delta \xi_i)$, onde $-1 \leq \xi_i \leq 1$ é um número aleatório e δ é o parâmetro que determina a força da desordem, ou seja, fornece o intervalo no qual a largura da barreira pode variar em torno de seu valor médio.

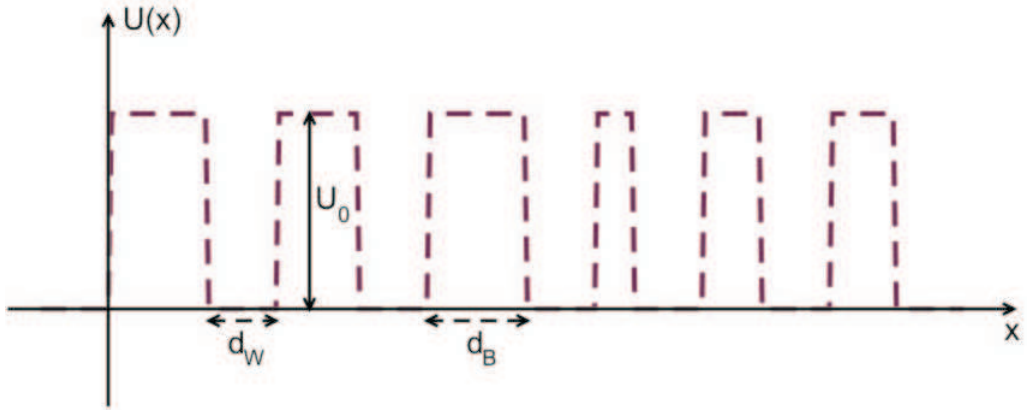


Figura 23: Perfil do potencial gerado pela super-rede. U_0 define a altura das barreiras, d_W a largura dos poços e d_B a largura das barreiras.

Para melhor analisarmos o efeito causado pela introdução da desordem no sistema, vamos definir o conjunto de números ξ_i não como uma sequência completamente aleatória de números, mas sim como uma sequência de números correlacionados por um parâmetro χ , chamado coeficiente de correlação. Os números ξ_i são gerados como segue:

$$\xi_i = 2\sqrt{\chi\xi_0^2 + (1-\chi)\xi^2} - 1, \quad (4.1)$$

onde $-1 \leq \xi_0 \leq 1$ é um número aleatório sorteado a cada realização e $-1 \leq \xi \leq 1$ é um novo número aleatório sorteado na definição da largura de cada barreira. Dessa forma, quando $\chi = 0$ temos uma super-rede totalmente aleatória, enquanto para $\chi = 1$ temos uma super-rede periódica com $d_{B_i} = d_{B_{\text{médio}}}(1 + \delta\xi_0) = cte.$

Sempre que não especificado, todos os resultados numéricos apresentados nessa seção correspondem a médias feitas sobre 1000 realizações. Os valores numéricos escolhidos para os parâmetros d_W , $d_{B_{\text{médio}}}$, U_0 e N_c são, respectivamente, 10 nm, 50 nm, 200 meV e 100. Além disso, assumimos que a energia dos elétrons incidentes é igual a 83 meV.

A Fig. 24 mostra um gráfico do incremento na largura de cada barreira para vários valores do coeficiente de correlação. Nota-se que a medida que essa correlação aumenta existe uma tendência das larguras das barreiras assumirem alguns valores "preferidos". Isso implica na diminuição do caráter aleatório do potencial.

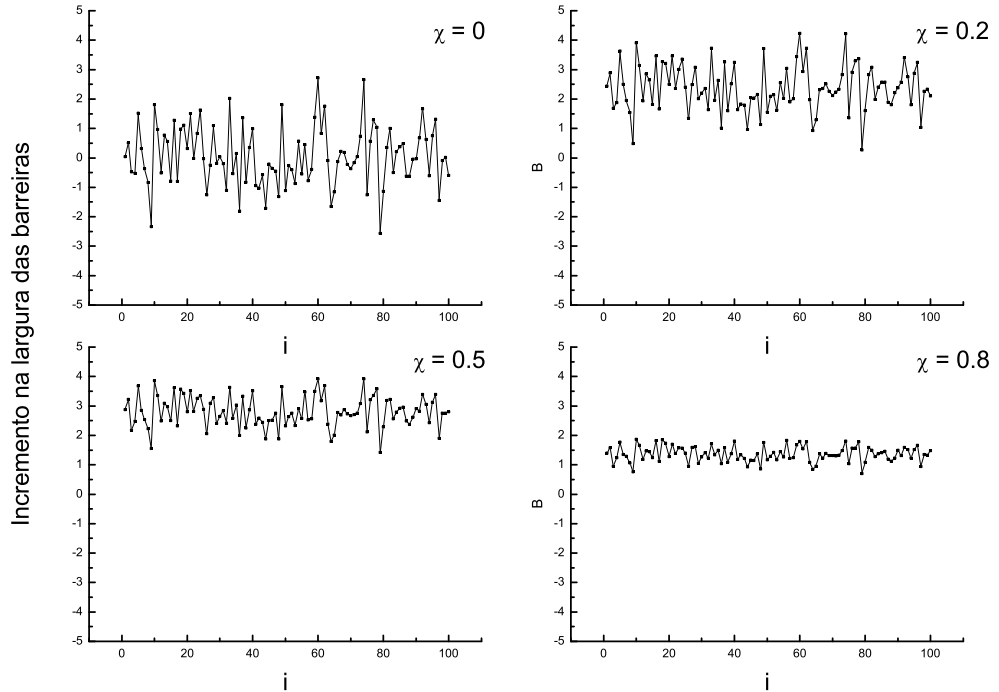


Figura 24: Média do incremento na largura de cada barreira para um valor de $\delta = 0,9$ para diferentes valores do coeficiente de correlação χ .

Estamos interessados em observar o efeito de um potencial aleatório no coeficiente de transmissão e na condutância de elétrons incidindo nessa estrutura. Os cálculos numéricos para a transmissão são realizados usando o método de matrizes de transferência já apresentado anteriormente. Uma vez calculado o coeficiente de transmissão, a condutividade do sistema pode ser calculado usando a fórmula de Buttiker [41]

$$G = G_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(E, \varphi) \cos \varphi d\varphi, \quad (4.2)$$

onde $G_0 = \frac{e}{\pi} \left(\frac{e^2}{h} \right)$ e $\varphi = \arctan \frac{k_y}{E}$.

A Fig. 25 mostra a dependência angular do coeficiente de transmissão para vários valores de desordem δ . A curva em preto representa o caso em que $\delta = 0$, ou seja, temos uma super-rede periódica. Podemos ver que o efeito da desordem é destruir as bandas de transmissão em torno de $\varphi = -\pi/4$ e $\varphi = \pi/4$, de forma que somente elétrons com incidência próxima da normal são transmitidos. Note, no entanto, que o aumento de δ , nesse caso, tende a alargar as curvas de transmissão, de forma a aumentar o número de ângulos em que pode ocorrer transmissão.

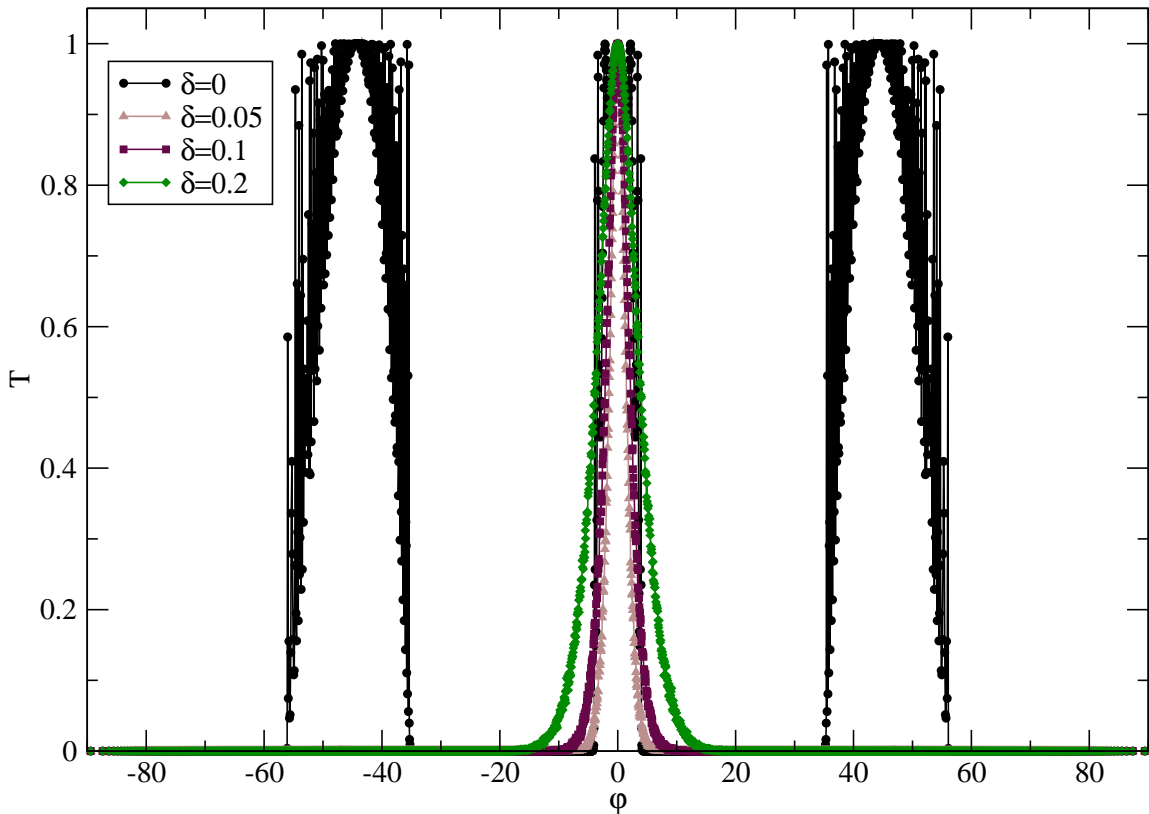


Figura 25: Coeficiente de transmissão em função do ângulo de elétrons incidentes na estrutura com $E = 83$ meV e valores de desordem $\delta = 0, 0.05, 0.1$ e 0.2 . Em todos os casos $\chi = 0$.

Para averiguar de fato como o aumento de δ afeta a transmissão de elétrons na Fig.23, vamos introduzir uma medida da contribuição do coeficiente de transmissão para cada direção de incidência de portadores, a qual atribuiremos o nome de *razão de participação*, em analogia com trabalhos anteriores que investigaram a distribuição de modos de vibração em [44] e em estudo de localização de Anderson [45]. Essa função é definida como

$$\alpha = \frac{1}{N_\varphi} \frac{\left(\sum_{i=1}^{N_\varphi} |T(\varphi_i)| \right)^2}{\sum_{i=1}^{N_\varphi} |T(\varphi_i)|^2}, \quad (4.3)$$

onde $T(\varphi_i)$ é o coeficiente de transmissão para um dado ângulo φ_i e $N_\varphi = 2001$ é número de ângulos considerados, ou seja, o número de pontos em uma dada curva do coeficiente de transmissão. A grandeza $1/N_\varphi \leq \alpha \leq 1$ nos dá uma indicação do número de ângulos que participa na transmissão eletrônica. Como um simples exemplo, imagine que todos os ângulos contribuam da mesma forma, ou seja, $T(\varphi_i) = T = \text{cte}$, então $\alpha = 1$. No caso oposto, quando somente um ângulo contribue para a transmissão, temos que $\alpha = 1/N_\varphi$.

A Fig. 26 apresenta o gráfico da razão de participação α em função grau de desordem δ para $E = 83$ meV e $U_0 = 200$ meV. Nota-se que α decresce rapidamente no intervalo entre $\delta = 0$ e $\delta = 0.05$, onde atinge seu valor mínimo. Esse comportamento nos diz que o aumento da desordem nesse intervalo diminui o número de ângulos em que pode haver transmissão, ratificando que a introdução da desordem, por menor que seja, tende a destruir as bandas de transmissão laterais. A partir desse ponto, observa-se que α tem um comportamento oscilatório amortecido a medida que δ aumenta. Esse resultado mostra que o efeito do aumento da desordem no sistema depende do intervalo no qual variamos essa desordem. Dessa forma, também é possível aumentar a transmissão de elétrons com o aumento de δ , ao contrário do que foi sugerido em [43].

Na Fig. 27 temos o coeficiente de transmissão para elétrons incidentes com energia $E = 10$ meV. A altura das barreiras, nesse caso, é $U_0 = 100$ meV. Assim como na Fig. 25 a introdução de uma aleatoriedade no potencial tende a remover todos os picos de

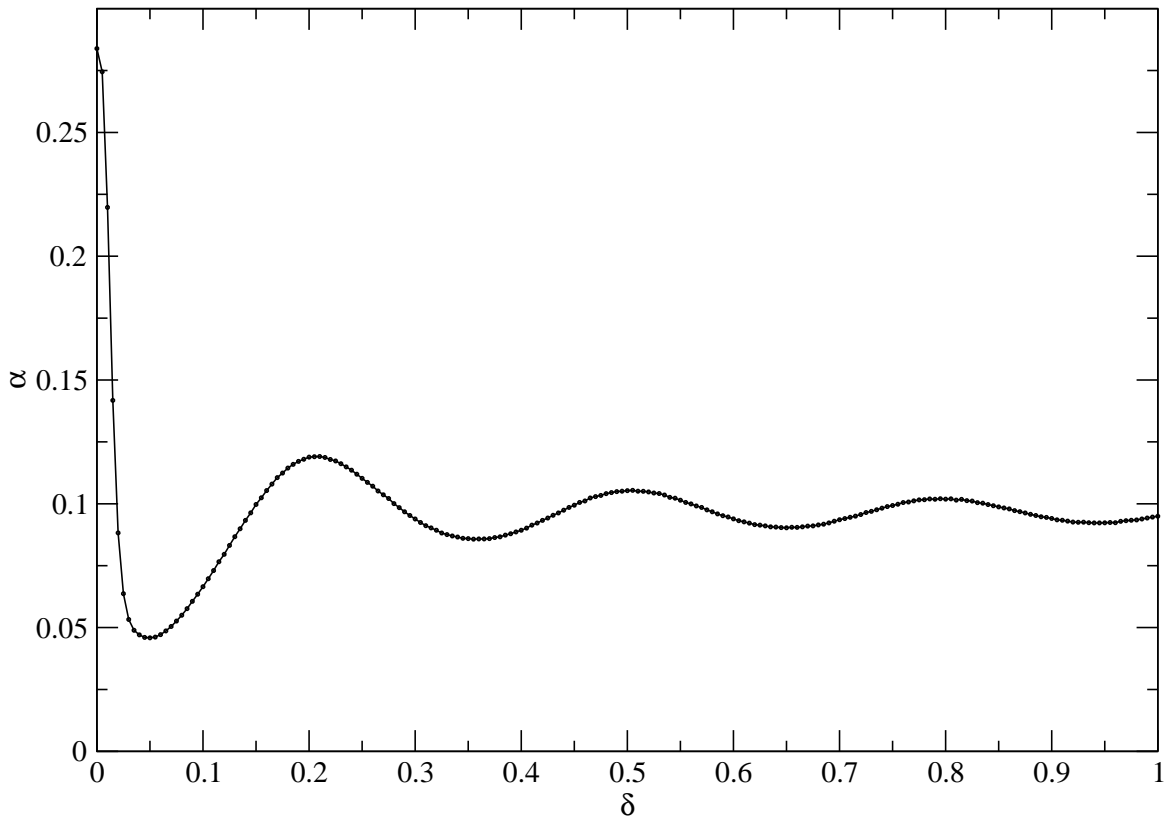


Figura 26: gráfico da razão de participação em função do grau de desordem δ para $E = 83$ meV e $U_0 = 200$ meV.

transmissão unitária, exceto o pico em torno de $\varphi = 0$. No entanto, para essa combinação entre a energia do elétron e a altura das barreiras existe probabilidade de transmissão para todos os ângulos de incidência e, diferentemente do caso anterior, a partir de $\delta = 0,01$ o aumento de δ tende a estreitar a curva de transmissão, diminuindo a probabilidade de transmissão para todas as direções de incidência com exceção de incidências com φ em torno de 0.

A Fig. 28 mostra o gráfico da razão de participação α em função grau de desordem δ para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV. Diferentemente da Fig. 26, a razão de participação nesse caso apresenta um leve crescimento para valores muito pequenos de δ . Esse comportamento pode ser explicado com o auxílio do gráfico anterior. Note que a introdução de uma desordem muito pequena, nesse caso $\delta = 0,01$, diminui consideravelmente a altura dos picos de transmissão laterais, em contrapartida a altura dos mínimos aumenta e, em adição, para $|\varphi| > 75,5^\circ$ a probabilidade de transmissão é superior ao caso periódico, produzindo assim um leve crescimento da razão de participação α . Para $\delta > 0,01$ observa-se que α decresce até atingir seu valor mínimo em $\delta = 0,27$. A partir desse ponto a razão de participação exhibe um comportamento oscilatório semelhante ao encontrado na Fig. 26.

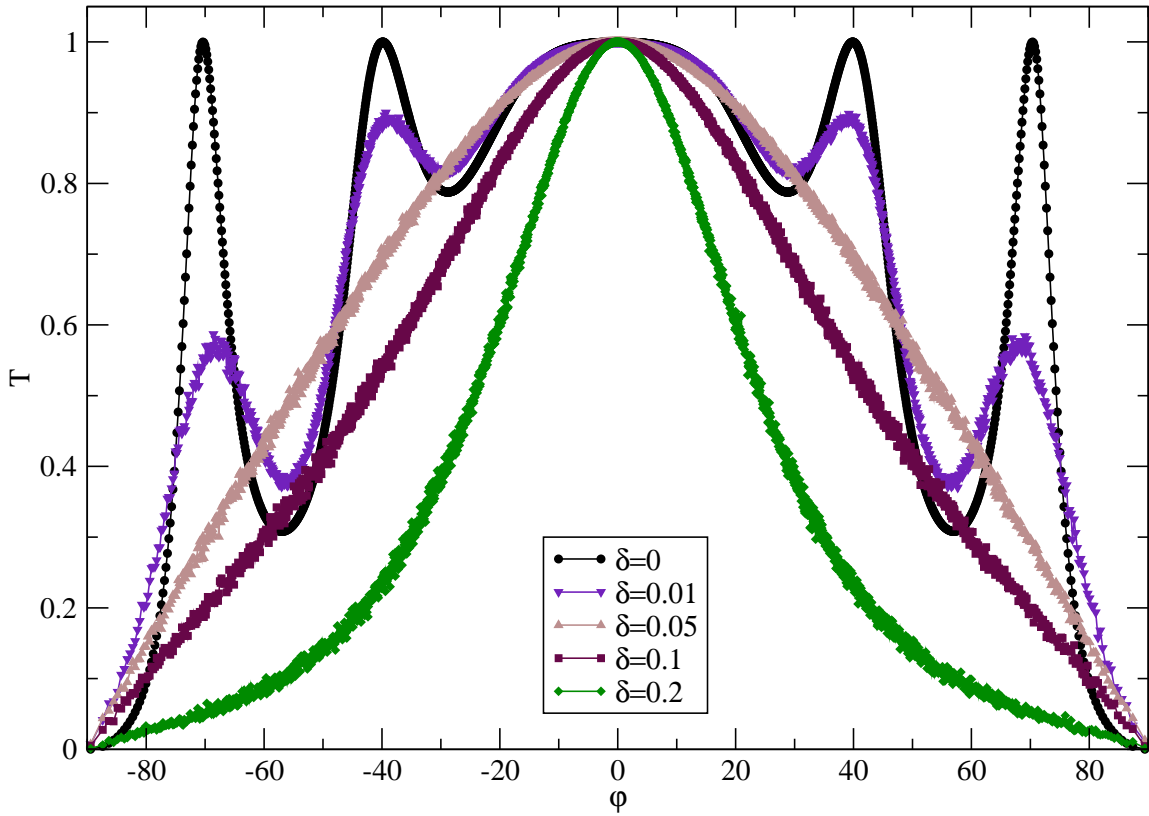


Figura 27: O mesmo da Fig.25 para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.

Até agora não consideramos nenhum caso em que existe uma correlação entre a largura das barreiras. Para observar o efeito da introdução da correlação no sistema vamos fixar um valor de δ e calcular a transmissão para diferentes valores de χ . O gráfico da Fig. 29 mostra curvas da dependência angular do coeficiente de transmissão para uma desordem fixa $\delta = 0,2$ e coeficiente de correlação $\chi = 0; 0,2; 0,5; 0,8$. A energia dos elétrons é $E = 83$ meV e a altura das barreiras é $U_0 = 200$ meV. Observa-se que nesse caso que a introdução da correlação só causa efeitos significativos para $\chi = 0,8$, produzindo um significativo aumento na transmissão para $10^\circ < |\varphi| < 30^\circ$.

De forma análoga ao que fizemos anteriormente, vamos calcular agora a razão de participação em função do coeficiente de correlação para $\delta = 0,2$. O gráfico da Fig. 30 mostra o caso em que $E = 83$ meV e $U_0 = 200$ eV. Nota-se que, para esses parâmetros, o aumento da correlação até $\chi = 0,5$ pouco influencia o número de ângulos que participam da transmissão. No entanto, a partir desse valor observa-se um rápido crescimento de α , indicando um alargamento na curva da transmissão.

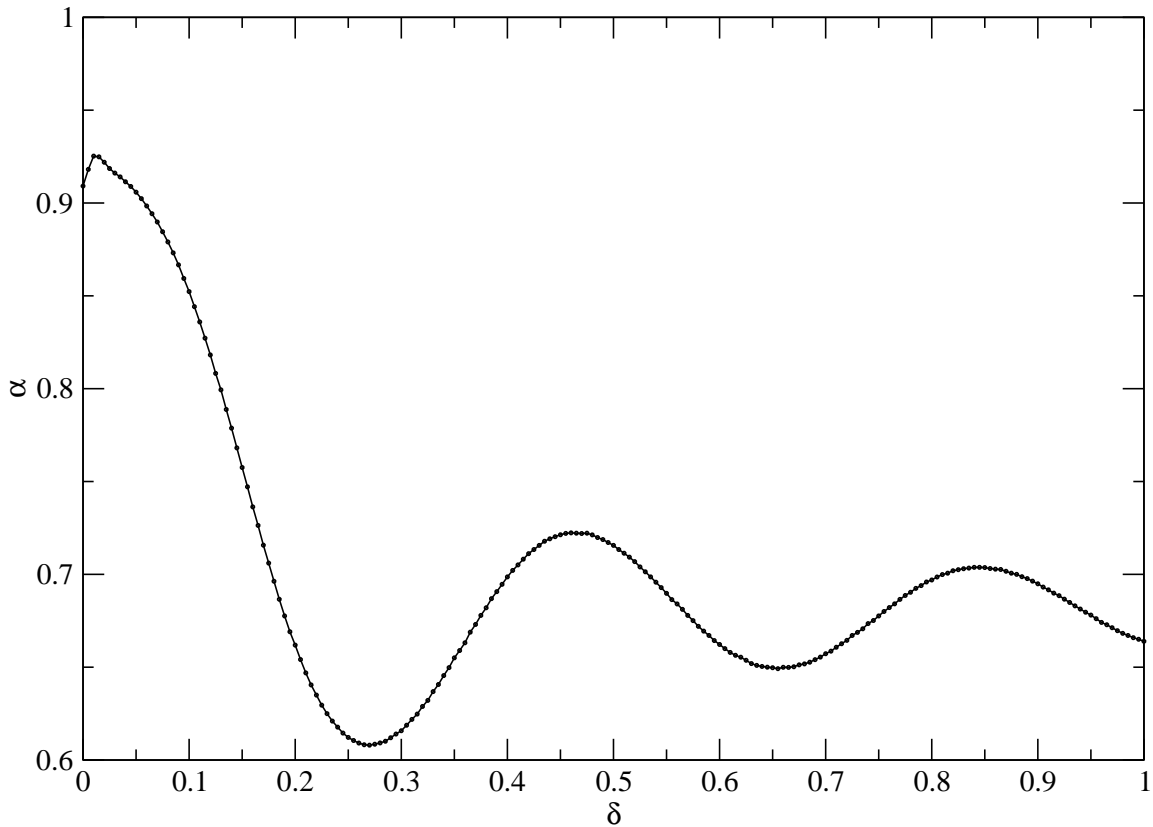


Figura 28: gráfico da razão de participação em função do grau de desordem δ para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.

Na Fig. 31 apresentamos o mesmo tipo de resultado da figura anterior, mas agora a energia é $E = 10$ meV e a altura das barreiras é $U_0 = 100$ meV. Para essa energia o efeito da introdução de correlação é bem mais significativo do que no caso anterior. O aumento do coeficiente χ eleva a probabilidade de transmissão para todos os ângulos de incidência.

No gráfico da Fig. 32 temos α em função de χ para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV. Diferentemente do caso anterior, a introdução e o aumento contínuo da correlação alteram de forma significativa o intervalo de ângulos que participam na transmissão.

Agora estamos interessados em saber como a condutância é afetada pela introdução da desordem no potencial. Calculamos então a condutância em função da altura das barreiras de potencial para vários valores de desordem. A Fig. 33 mostra o caso em que $E = 83$ meV, enquanto na Fig. 34, $E = 10$ meV. Em ambos os casos o aumento de δ diminui a condutância de uma forma geral. No entanto, para alguns valores específicos de U_0 é possível que um sistema desordenado apresente condutância superior ao caso periódico.

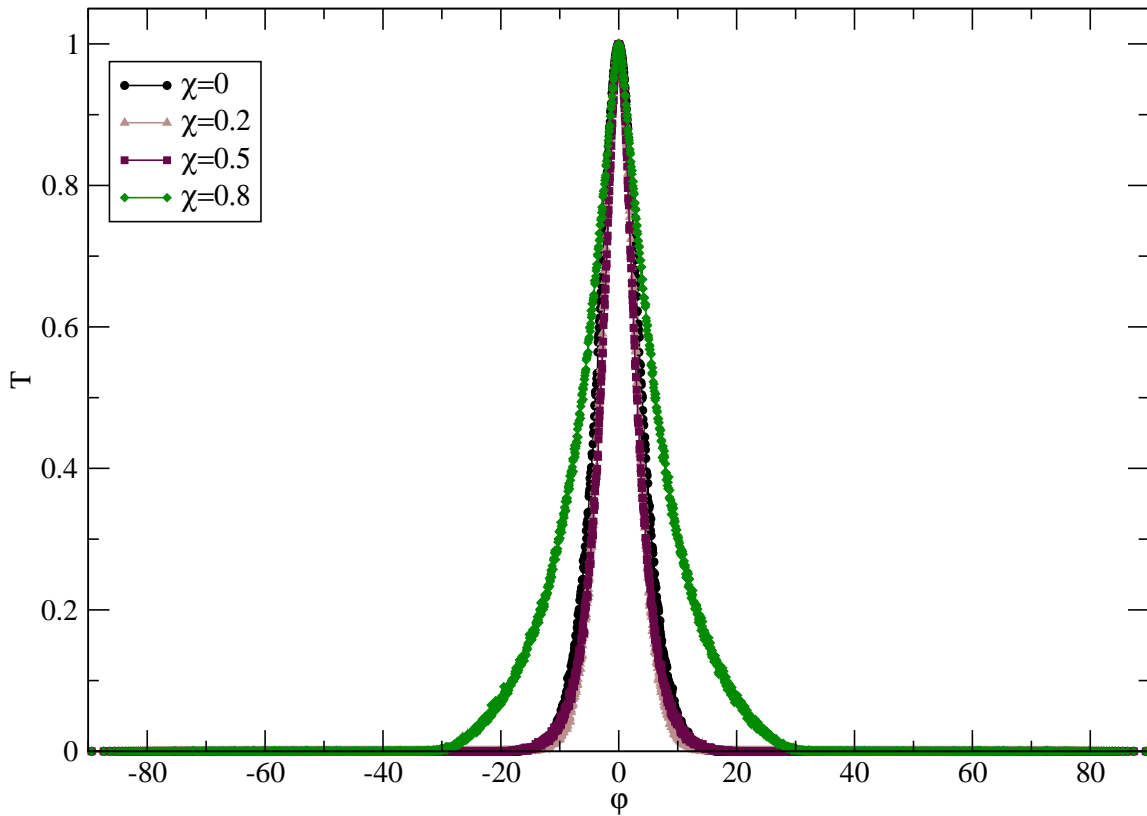


Figura 29: Coeficiente de transmissão em função do ângulo para um desordem fixa $\delta = 0,2$. A energia dos elétrons incidentes na estrutura é $E = 83$ meV e os valores do coeficiente de correlação são $\chi = 0; 0,2; 0,5$ e $0,8$.

4.2 Estruturas Quase-periódicas

A descoberta de uma nova classe de materiais, os chamados quase-cristais, no ano de 1984 [46][47] causou grande surpresa no meio acadêmico. Até então apenas duas classes de estruturas sólidas eram conhecidas: sólidos cristalinos, estruturas altamente ordenadas que exibem simetrias translacional e orientacional caracterizadas pela repetição periódica de células unitárias idênticas; e sólidos amorfos, que não apresentam ordem estrutural. Os quase-cristais seriam então uma fase intermediária entre sólidos amorfos e cristalinos, uma vez que apresentam uma ordem orientacional, mas não são invariantes sob translação.

4.2.1 Super-rede quase-periódica de Fibonacci

Vimos como elétrons são transmitidos através de estruturas periódicas e desordenadas. Nessa seção vamos investigar como se dá o transporte através de estruturas quase-periódicas [48]. Para isso vamos considerar uma super-rede de Fibonacci, que pode ser vista como um protótipo de um quase-cristal unidimensional.

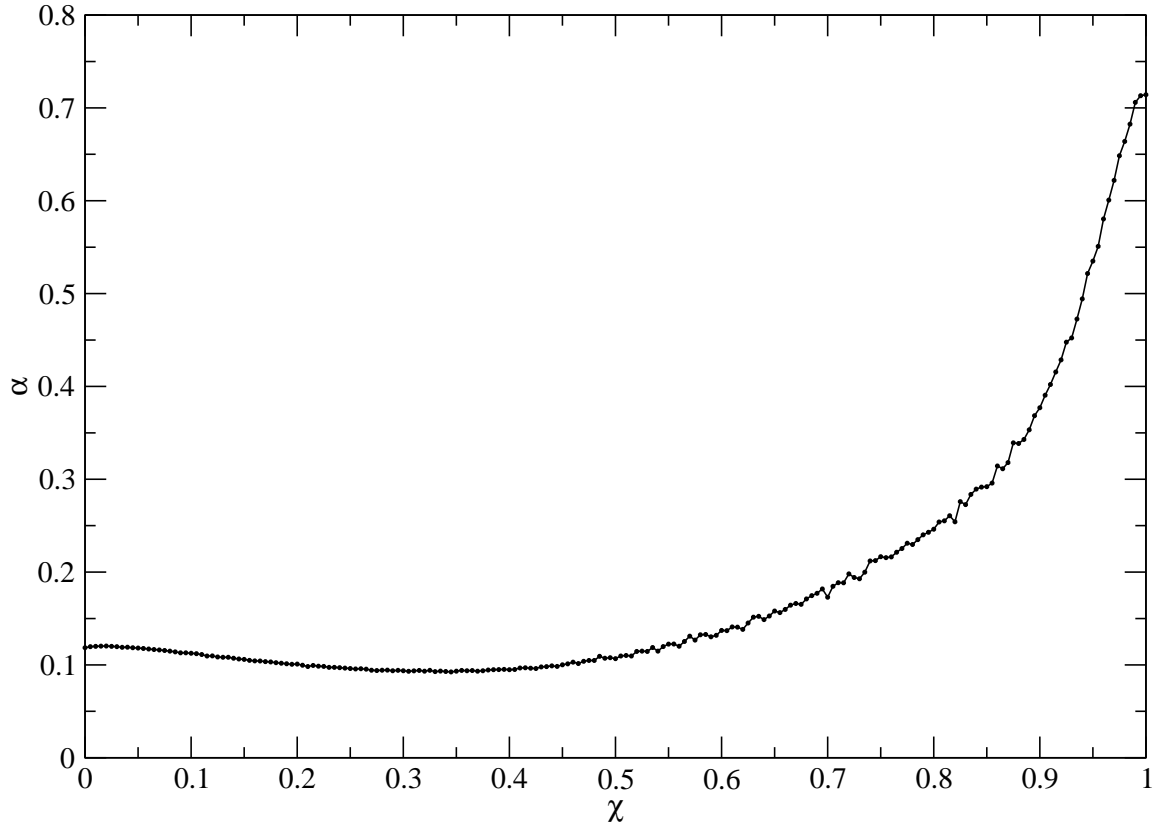


Figura 30: gráfico da razão de participação em função do coeficiente de correlação χ para $\delta = 0, 2$, $E = 83$ meV e $U_0 = 200$ meV.

A Fig. 35 representa a super-rede em questão. A região rotulada com **A** indica uma região $U_0 = 0$ e o rótulo **B** representa a junção de três regiões, formando uma barreira de potencial com $U_0 > 0$. A estrutura é então construída da seguinte maneira: a primeira região é definida como sendo tipo **A**, o que chamaremos de série S_0 , enquanto a segunda região é definida como **B**, o que chamaremos de S_1 , a partir desse ponto as séries subsequentes serão definidas por $S_m = S_{m-1}S_{m-2}$.

As figuras 36 e 37 mostram o comportamento da dependência angular do coeficiente de transmissão para estruturas de Fibonacci que vão, respectivamente, da série de número 5 até a série 12. Os valores numéricos considerados são: energia dos elétrons $E = 50$ meV, altura das barreiras $U_0 = 100$ meV, largura das barreiras $d_b = 50$ nm e largura dos poços $d_w = 10$ nm. Percebe-se o desdobramento dos picos laterais em torno de $\varphi = \pm 50^\circ$ devido aos efeitos de ressonância a medida que aumentamos a geração, bem como o estreitamento do pico central, a partir da geração S_8 , com o aparecimento de novos picos em torno de $\varphi = \pm 25^\circ$.

Na Fig. 38 temos o coeficiente de transmissão versus a energia dos portadores. Em (a), (b), (c), (d), (e) e (f) temos resultados para as gerações S_5 , S_8 , S_{11} , S_6 , S_9 e S_{12} ,

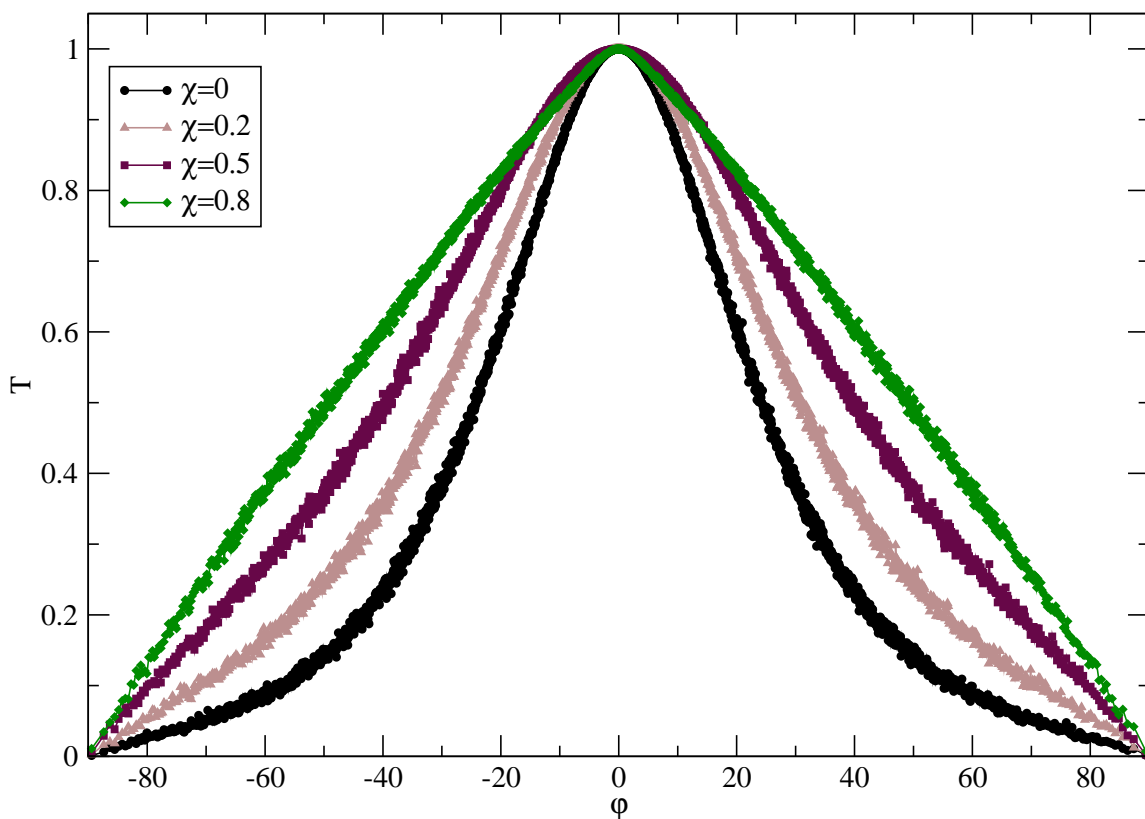


Figura 31: O mesmo da Fig. 29 para $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.

respectivamente. Note a mudança de escala entre as gerações. A medida que aumentamos a geração a escala na energia é reduzida de forma que o aspecto visual da transmissão é inalterada. Isso nos permite visualizar o caráter auto-similar da transmissão, mostrando que as gerações S_5 , S_8 e S_{11} apresentam auto-similaridade, assim como as gerações S_6 , S_9 e S_{12} .

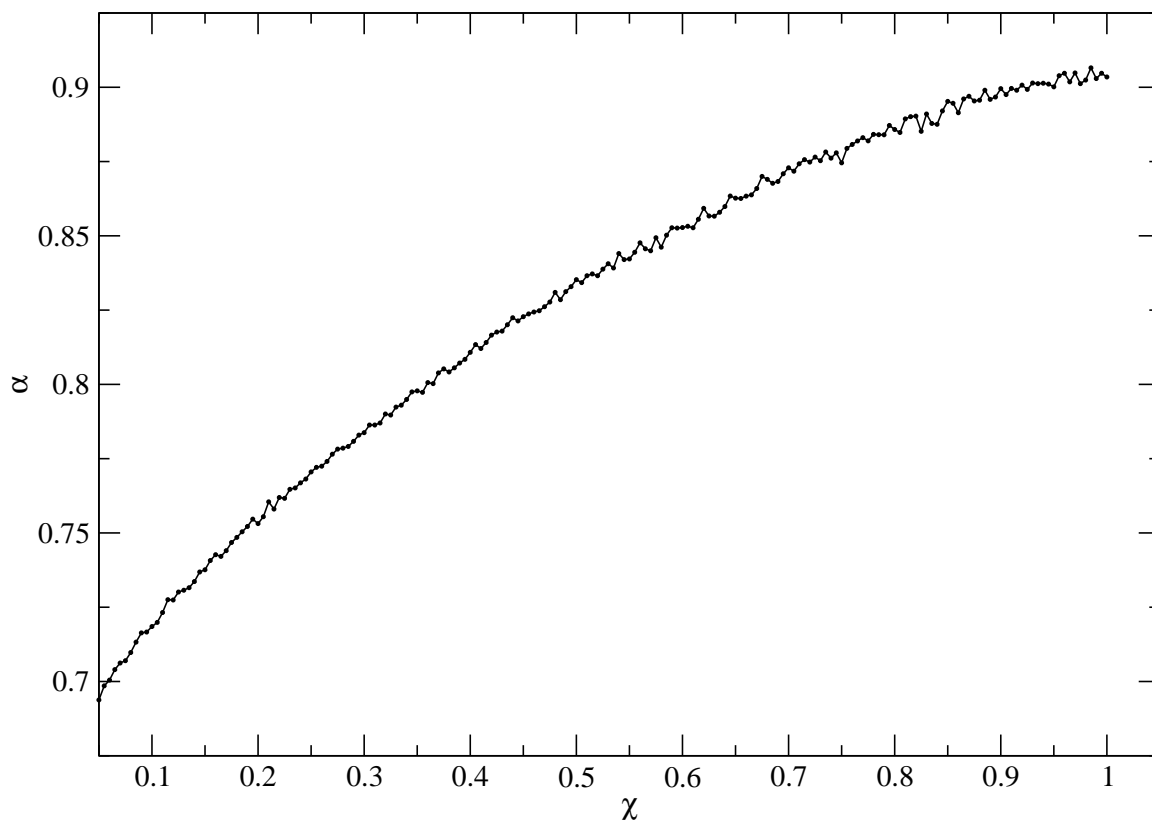


Figura 32: gráfico da razão de participação em função do coeficiente de correlação χ para $\delta = 0, 2$, $E = 10$ meV e $U_0 = 100$ meV.

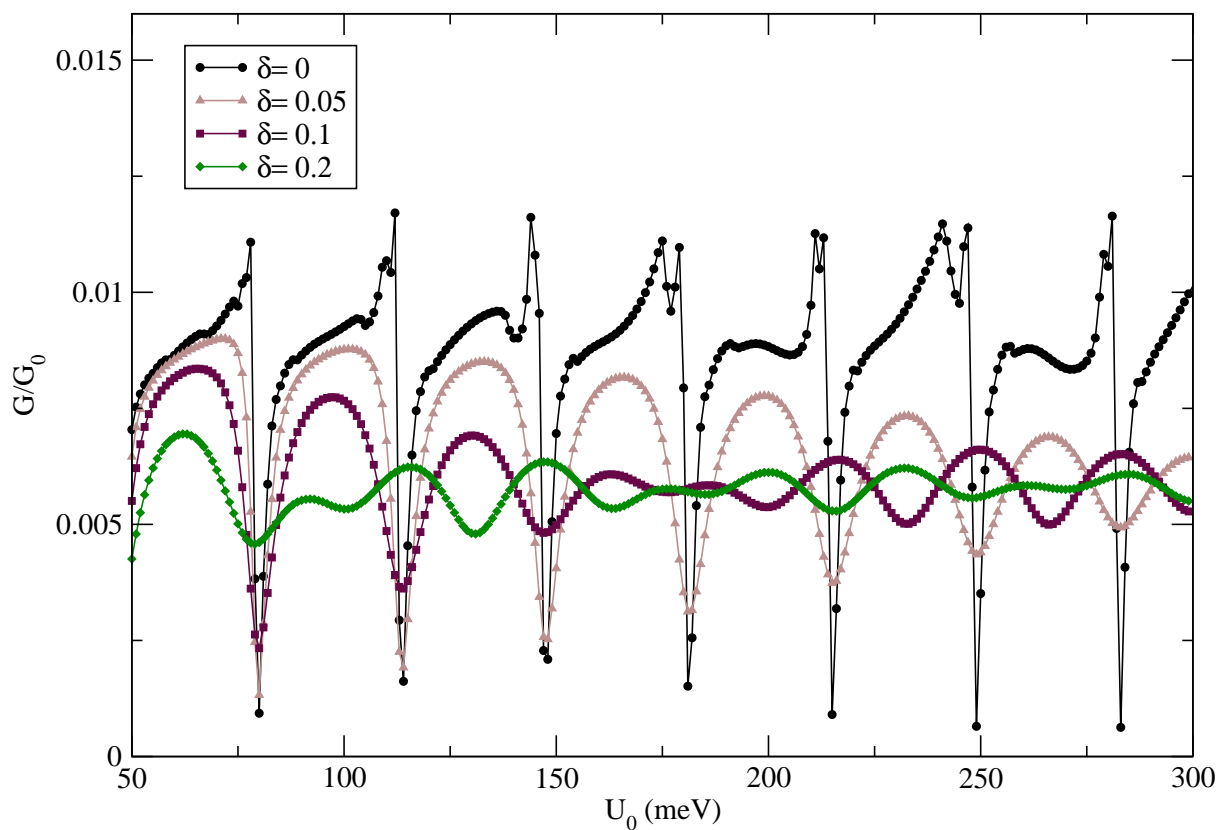


Figura 33: O mesmo da Fig. 31 para $E = 10$ meV.

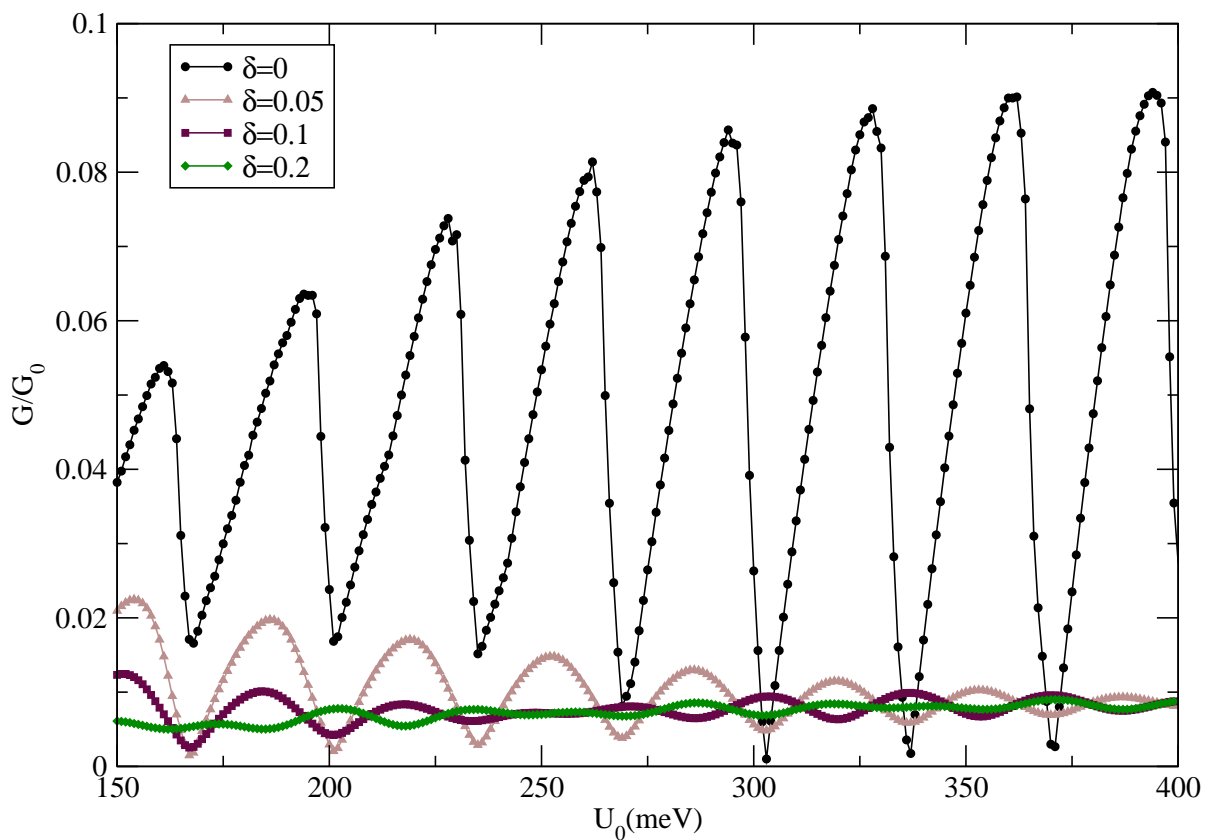


Figura 34: Condutância de elétrons com $E = 83$ meV em função da altura das barreiras de potencial U_0 para vários valores de desordem. Em todas as curvas $\chi = 0$.

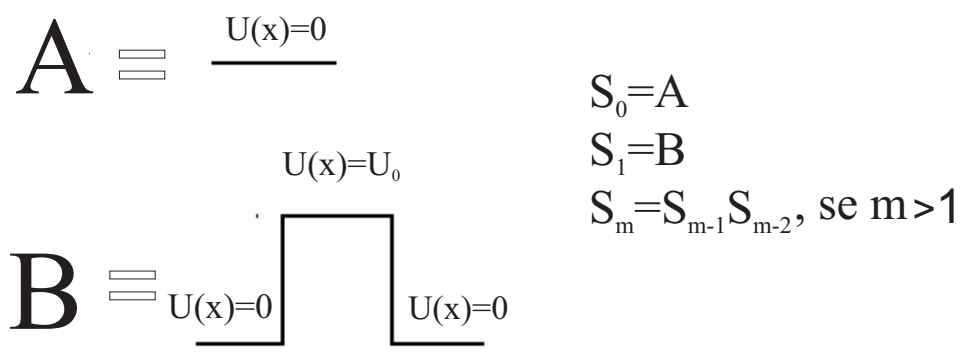


Figura 35: Esquema de formação para uma super-rede quase-periódica de Fibonacci.

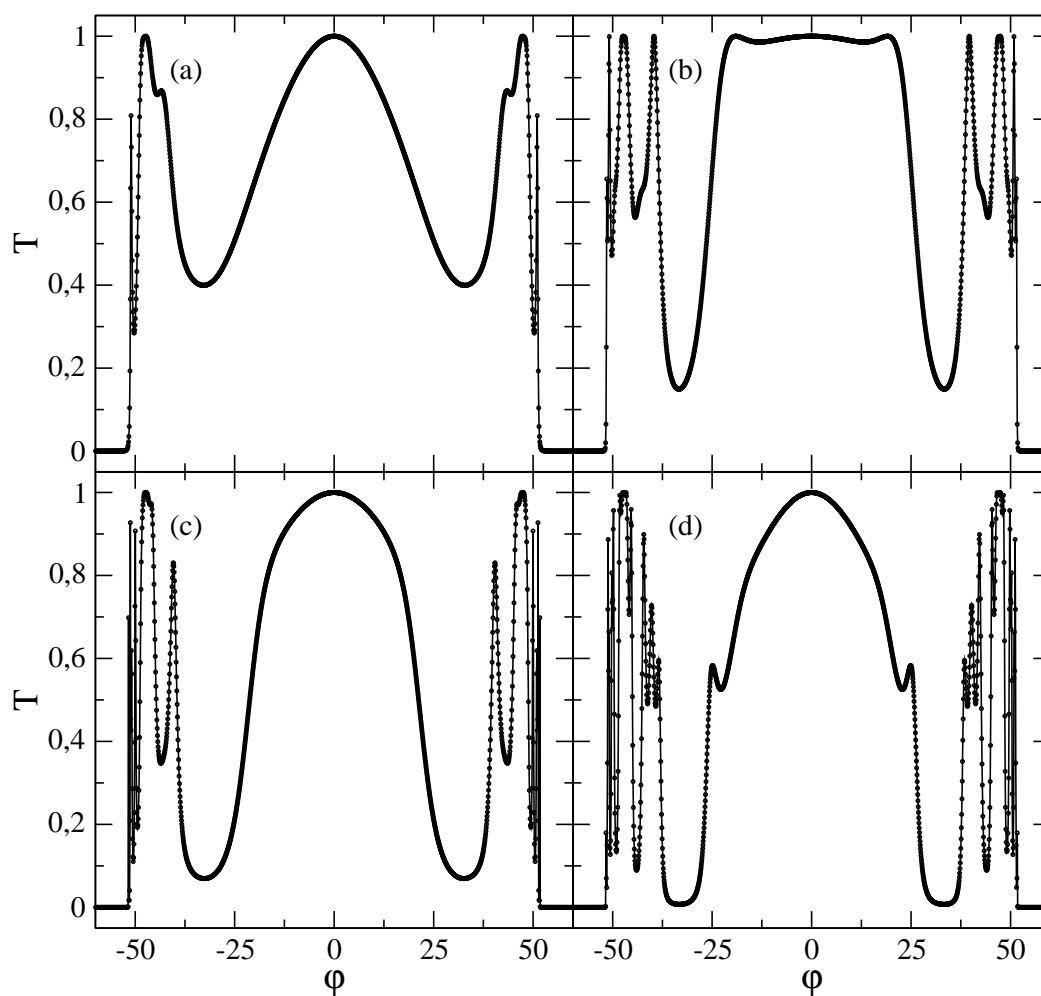


Figura 36: Dependência angular da transmissão eletrônica através de uma super-rede de Fibonacci para as gerações: (a) S_5 , (b) S_6 , (c) S_7 e (d) S_8 .

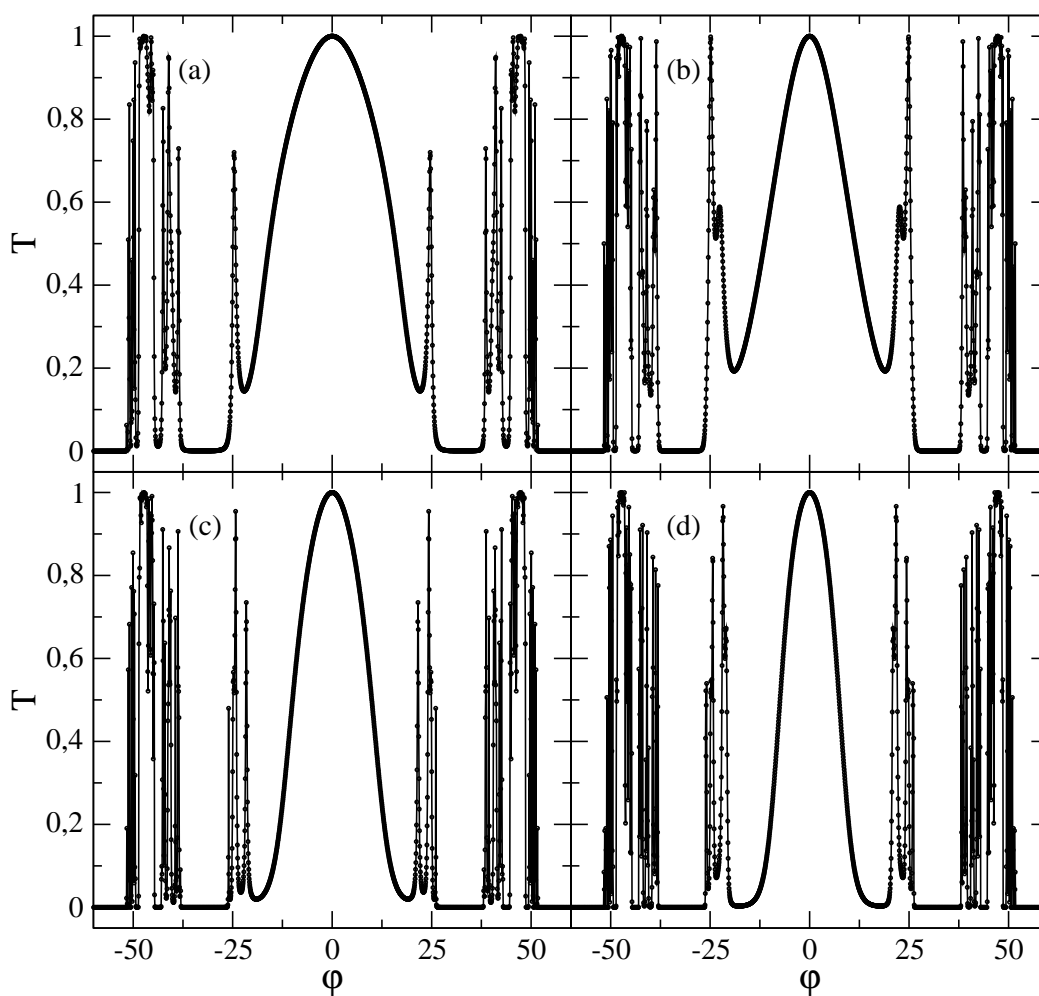


Figura 37: Dependência angular da transmissão eletrônica através de uma super-rede de Fibonacci para as gerações: (a) S_9 , (b) S_{10} , (c) S_{11} e (d) S_{12} .

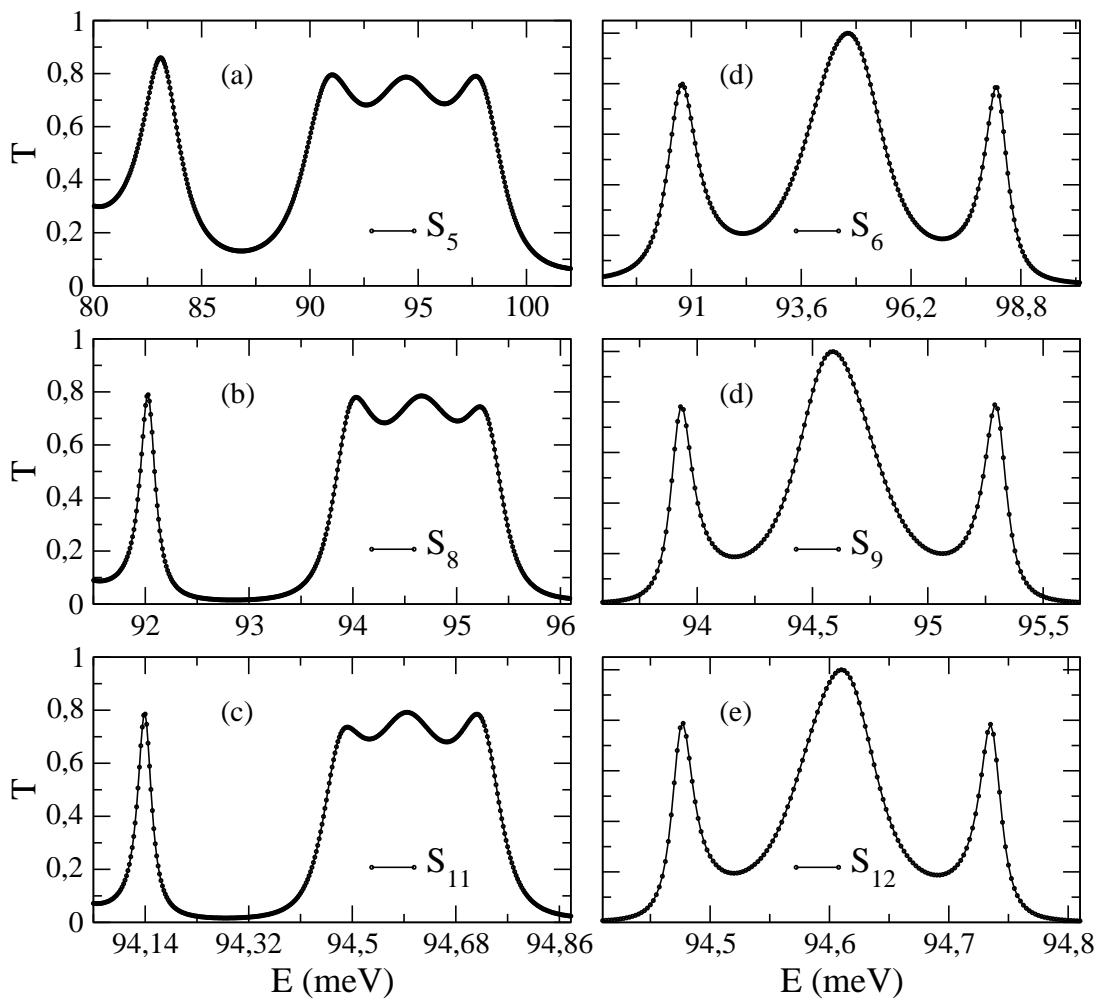


Figura 38: Coeficiente de transmissão em função da energia dos portadores para um $k_y = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ fixo. (a) S_5 , (b) S_8 , (c) S_{11} , (d) S_6 , (e) S_9 , (f) S_{12} .

5 *Conclusões e perspectivas*

Apresentou-se, nesse trabalho, alguma das propriedades fundamentais do grafeno, assim como resultados para o comportamento de seus portadores de carga quando submetidos a potenciais unidimensionais.

No capítulo 2, foi mostrado o motivo pelo qual é habitual dizer que elétrons no grafeno comportam-se como férmions relativísticos de massa zero, justificando assim o tratamento feito a partir da equação de Dirac. Ainda no segundo capítulo foi apresentado o método da matriz de transferência utilizado na obtenção dos resultados numéricos desse trabalho. Pôde-se verificar facilmente a partir da forma da matriz de transferência que elétrons incidentes de forma normal em uma barreira de potencial são transmitidos com probabilidade um (paradoxo de Klein) e adquirem apenas um fator de fase na suas respectivas funções de onda.

No capítulo 3, mostrou-se que a despeito do paradoxo de Klein pode-se obter estados quase confinados em poços quânticos em grafeno. A relação de dispersão eletrônica para esses estados possui uma dependência na componente do vetor de onda paralela a barreira e apresenta ramos aproximadamente hiperbólicos, o que torna possível, no caso de poços duplos assimétricos, a existência de cruzamentos e anti-cruzamentos entre os ramos. Observou-se, para $U_2 \neq 0$, o aparecimento de estados confinados de buracos, bem como uma região onde estados de elétrons e buracos estão superpostos, indicando uma velocidade de grupo aproximadamente nula. No final desse mesmo capítulo foram apresentados resultados para a transmissão eletrônica através dos poços duplos considerados na seção anterior, onde pôde-se observar uma transmissão perfeita para incidências em torno da normal.

O capítulo 4 foi dedicado ao estudo de transporte eletrônico através de super-redes desordenadas e quase-periódicas. No primeiro caso, verificou-se que a introdução da desordem por menor que seja tende a destruir os picos de transmissão laterais característicos no caso da super-rede periódica. Além disso, foram apresentados resultados para a razão

de participação α do coeficiente de transmissão em função do grau de desordem δ , revelando um decaimento inicial rápido e um comportamento oscilatório posterior. Ainda no caso de super-redes desordenadas, calculou-se a condutância do sistema em função da altura das barreiras de potencial para vários valores de desordem. De uma forma geral, a desordem tende a diminuir a condução eletrônica, exceto para valores específicos de potencial. Finalmente, para o caso de super-redes quase-periódicas de Fibonacci, foram apresentados resultados para a dependência angular da transmissão eletrônica através das gerações 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 e 12. Observou-se, nos gráficos de transmissão versus energia dos portadores, que as gerações 5, 8 e 11 bem como as gerações 6, 9 e 12 apresentam um comportamento auto-similar.

Como perspectivas para trabalhos futuros, pretendemos estudar como as propriedades de transporte aqui apresentadas são alteradas pela introdução de um campo magnético [49]. Além disso, gostaríamos de estudar outros tipos de desordem, tais como desordens estruturais causadas pela introdução de impurezas na amostra de grafeno. Nesse caso, torna-se necessária a utilização de um modelo microscópico, como o tight-binding, para se descrever corretamente o efeito das interações de curto alcance das impurezas.

Referências

- [1] C. A. Coulson, Valence (Oxford University Press, London 1953)
- [2] Hugh O. Pierson, Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes: Properties, Processing and Applications (Noyes Publications, New Jersey 1993).
- [3] R. Saito, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes (Imperial College Press, London 1998).
- [4] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley, C_{60} : Buckminsterfullerene, *Nature*, **318**, 162-164 (1985).
- [5] Sumio Iijima, Helical microtubules of grahitic carbon, *Nature*, **354**, 56-58 (1991).
- [6] Sumio Iijima and Toshinari Lchihashi, Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter *Nature*, **363**, 603-605 (1993).
- [7] Jeroen W. G. Wilder, Liesbeth C. Venema, Andrew G. Rinzler, Richard E. Smalley, Cees Dekker, Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes, *Nature* 391, 59-62 (1998).
- [8] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, *Science*, **306**, 666-669 (2004).
- [9] P. R. Wallace, The Band Theory of Graphite, *Phys. Rev.* **71**, 622-634 (1947).
- [10] <http://www.sciencemag.org/cgi/content/full/306/5696/666/DC1>, Supporting Online Material, Materials and Methods.
- [11] Alfonso Reina, Xiaoting Jia, John Ho, Daniel Nezich, Hyungbin Son, Vladimir Bulovic, Mildred S. Dresselhaus and Jing Kong, Large Area, Few-Layer Graphene Films on Arbitrary Substrates by Chemical Vapor Deposition, *Nano Lett.*, **9**, 30 (2009).
- [12] Keun Soo Kim, Yue Zhao, Houk Jang, Sang Yoon Lee, Jong Min Kim, Kwang S. Kim, Jong-Hyun Ahn, Philip Kim, Jae-Young Choi and Byung Hee Hong, Large-scale pattern growth of graphene films for stretchable transparent electrodes, *Nature*, **457**, 706 (2009).
- [13] J. W. McClure, Diamagnetism of graphite, *Phys. Rev.*, **104**, 666-671 (1956).
- [14] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, Band structure of graphite. *Phys. Rev.* **109**, 272-279 (1958).
- [15] N. D. Mermin, Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.*, **176**, 250-254 (1968).

- [16] L. D. Landau and Lifshitz, E. M. Statistical Physics, Part I (Pergamon, Oxford, 1980).
- [17] A. K. Geim and K. S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Materials* **6**, 183-191 (2007)
- [18] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang¹, 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).
- [19] K. S. Novoselov et al., *Science*, **315** 1379 (2007).
- [20] S. Das Sarma, A. Pinczuk, *Perspectives in Quantum Hall Effects* (Wiley-VCH, Weinheim, 2004).
- [21] Y. Zhang, Yan-Wen Tan, Horst L. Stormer, and Philip Kim, Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene, *Nature*, **438**, 201-204 (2005).
- [22] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene, *Nature Physics*, **2**, 620-625 (2006).
- [23] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene, *Nature Materials*, **6**, 652-655 (2007).
- [24] S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch, *Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties* (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, Weinheim 2004).
- [25] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, The electronic properties of graphene *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109 (2009).
- [26] T. Chakraborty, Graphene: a nanoscale quantum playing field, *Physics in Canada*, November/December (2006).
- [27] C. W. J. Beenakker, Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene, *Rev. Mod. Phys.*, **80**, 1337 (2008).
- [28] S.Y. Zhou, G. H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. De Heer, D. H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto and A. Lanzara, Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene, *Nature Materials*, **6**, 770 (2007).
- [29] Y. Ando and T. Itoh, Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers, *J. Appl. Phys.*, **61**, 1497 (1987)
- [30] John H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors. An introduction* (Cambridge University Press, Cambridge (1998).
- [31] H. Chau Nguyen and V. Lien Nguyen, Tunneling of Dirac electrons through one-dimensional potentials in graphene: a T-matrix approach, *J. Phys. Condens. Matter*, **21**, 1 (2009).

- [32] B. Huard, J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, and D. Goldhaber-Gordon, B. Huard, Transport Measurements Across a Tunable Potential Barrier in Graphene, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 236803 (2007).
- [33] J. Milton Pereira Jr., V. Mlinar, F. M. Peeters, P. Vasilopoulos, Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells, *Phys. Rev. B*, **74** 045424 (2006).
- [34] J. M. Pereira Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Graphene-based resonant-tunneling structures, *Appl. Phys. Lett.*, **90** 132122 (2007).
- [35] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, Two-dimensional atomic crystals, *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **102**, 10451-10453 (2005).
- [36] A. H. Castro Neto et al., *Phys. World* **19**, 33 (2006).
- [37] L. Esaki and R. Tsu, Superlattice and negative conductivity in semiconductors, IBM Research Note RC-2418 (1969).
- [38] L. Esaki and R. Tsu, Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors, *IBM J. Res. Develop.* **14**, 61 (1970).
- [39] R. Tsu and L. Esaki, Tunneling in a finite superlattice, *Appl. Phys. Lett.* **22**, 562 (1973).
- [40] Michaël Barbier, F. M. Peeters, P. Vasilopoulos, and J. Milton Pereira Jr., Dirac and Klein-Gordon particles in one-dimensional periodic potentials, *Phys. Rev. B*, **77**, 115446 (2008).
- [41] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, Cambridge (1995)).
- [42] Chunxu Bai and Xiangdong Zhang, Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice, *Phys. Rev. B* **76**, 075430 (2007).
- [43] N. Abedpour, Ayoub Esmailpour, Reza Asgari, and M. Reza Rahimi Tabar, Conductance of a disordered graphene superlattice, *Phys. Rev. B* **79**, 165412 (2009).
- [44] R. J. Bell and P. Dean, Atomic Vibrations in Vitreous Silica, *Discuss. Faraday Soc.* **50**, 55-61 (1970).
- [45] J. T. Edwards and D. J. Thouless, Numerical studies of localization in disordered systems, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5**, 807-820 (1972).
- [46] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, and J. W. Cahn, Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1951 (1984).
- [47] Dov Levine, Paul Joseph Steinhardt, Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2477 (1984).
- [48] Eudencilson L. Albuquerque, Michael G. Cottam, *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures* (Elsevier B. V., Amsterdam 2004).

[49] M. Ramezani Masir, A. Matulis, and F. M. Peeters, Quasibound states of Schrödinger and Dirac electrons in a magnetic quantum dot, *Phys. Rev. B* **79**, 155451 (2009).

[50] <http://grapheneindustries.com>