



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DUARTE JOSÉ PEREIRA DE SOUSA

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM ANÉIS QUÂNTICOS DE GRAFENO

FORTALEZA

2015

DUARTE JOSÉ PEREIRA DE SOUSA

**TRANSPORTE ELETRÔNICO EM ANÉIS
QUÂNTICOS DE GRAFENO**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. João Milton Pereira Jr.

Coorientador: Prof. Dr. Andrey Chaves

FORTALEZA

2015

DUARTE JOSÉ PEREIRA DE SOUSA

TRANSPORTE ELETRÔNICO EM ANÉIS QUÂNTICOS DE GRAFENO

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 13/07/2015

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. João Milton Pereira Jr. (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Cláudio Lucas Nunes de Oliveira
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Eduardo Costa Girão
Universidade Federal do Piauí (UFPI)

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

S696t Sousa, Duarte José Pereira de.
Transporte eletrônico em anéis quânticos de grafeno / Duarte José Pereira de Sousa. – Fortaleza, 2015.
82 f.:il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de Física, Fortaleza, 2015.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada
Orientação: Prof. Dr. João Milton Pereira Jr.

1. Grafeno.. 2. Propriedades eletrônicas.. 3. Transporte eletrônico.. 4. Sistemas mesoscópicos.. 5. Anéis quânticos.. I. Título.

CDD:537.5

Aos Meus Familiares

AGRADECIMENTOS

Aos professores João Milton Pereira Jr. e Andrey Chaves, pela orientação e pela confiança em mim depositada durante a realização deste trabalho.

Aos meus grandes amigos do Departamento de Física da UFC, em especial a Luan Vieira, pelas valiosas discussões que ajudaram a enriquecer o trabalho, a Gabriel Oliveira, Diego Felix, João Paulo Nogueira, Ícaro Rodrigues e Vanderley junior, pela amizade e companheirismo. Bem como todos os outros com os quais convivi durante minha formação.

RESUMO

Neste trabalho, é proposto um dispositivo de controle de corrente que explora a fase adquirida por um portador de carga quando este tunela através de uma barreira de potencial no grafeno no regime balístico sem a necessidade da presença de um gap no espectro de energias. O sistema atua como um interferômetro baseado em um anel quântico de grafeno com bordas *armchair*, onde a diferença de fase entre as funções de onda para elétrons que tomam diferentes caminhos pode ser controlada através da intensidade das barreiras de potencial nos braços do anel. Variando os parâmetros das barreiras a interferência pode tornar-se completamente destrutiva. É demonstrado como esse efeito de interferência pode ser utilizado para o desenvolvimento de portas lógicas simples baseadas em grafeno.

Palavras-chave: Grafeno. Propriedades eletrônicas. Transporte eletrônico. Sistemas mesoscópicos. Anéis quânticos.

ABSTRACT

In this work, we propose a current switch device that exploits the phase acquired by a charge carrier as it tunnels through a potential barrier in graphene in the ballistic regime without the need of the presence of a gap in the spectrum. The system acts as an interferometer based on an armchair graphene quantum ring, where the phase difference between interfering electronic wave functions for each path can be controlled by tuning the height of a potential barrier in the ring arms. By varying the parameters of the potential barriers the interference can become completely destructive. We demonstrate how this interference effect can be used for developing a simple graphene-based logic gate.

Keywords: Graphene. Electronic properties. Electronic transport. Mesoscopic systems. Quantum rings.

LISTA DE TABELAS

- 1 Configurações dos potenciais nas regiões A, B e C [veja Fig .25] para todas as portas lógicas que podem ser obtidas com tal estrutura. . . . p. 79

LISTA DE FIGURAS

1	Alguns alótropos do carbono: (a) grafeno, (b) grafite, (c) nanotubo de carbono e (d) fulereno.	p. 17
2	Bordas Armchair e Zigzag de uma rede cristalina do tipo favo-de-mel. .	p. 20
3	Efeito de campo em monocamada de grafeno. (a) Comportamento da resistividade como função do potencial para diferentes temperaturas ($T = 5$ K curva amarela, $T = 70$ K curva azul e $T = 300$ K curva verde). (b) Condutividade em função da voltagem aplicada para $T = 70$ K. (Figura adotada da Ref [11])	p. 21
4	(a) Imagem de microscopia eletrônica de varredura de um transistor de efeito de campo (FET) baseado em grafeno. O substrato é feito de SiO_2 sobre um wafer de Si altamente dopado, onde uma camada de Y_2O_3 foi depositada sobre a amostra de grafeno, fazendo o papel do contato superior (<i>Top Gate</i>). (b) Padrão característico da corrente elétrica em função de V_{TG} de uma tal dispositivo à temperatura ambiente [20]. . . .	p. 22
5	Dispositivo fotodetector baseado em grafeno sob iluminação.	p. 23
6	Evolução das bordas e morfologia de cristais de grafeno crescidos em um substrato de Pt via CVD G-E-RG. (a)-(b) estágio de crescimento e orientação das bordas zigzag (ZZ) e armchair (AM). (c)-(h) Alteração estrutural consequente da variação dos parâmetros envolvidos no crescimento para diferentes instantes de tempo. (i) etapa de recrescimento (regrowth). De acordo com a Ref. [25]	p. 24
7	Anel quântico de grafeno modelado pela técnica de litografia por feixe elétrons. Cada conector é ligado a dois eletrodos: S1/2 (Source 1 ou 2) e D1/2 (Drain 1 ou 2), permitindo a medida de resistência entre quatro terminais [28]	p. 25

8	(a) Rede cristalina do grafeno. Os átomos vermelhos (azuis) representam, isoladamente, os sítios da subrede A (B). Os vetores que ligam um sítio específico aos seus vizinhos mais próximos são os \vec{t}_i 's, enquanto que os \vec{a}_i 's são os vetores primitivos. (b) Primeira zona de Brillouin. Destacam-se os vetores de rede, \vec{b}_i 's, e os pontos K e K'	p. 27
9	Relação de dispersão de uma monocamada de grafeno. O zoom mostra uma dispersão linear para pequenos valores de energia (valores próximos aos pontos de Dirac).	p. 29
10	Tunelamento de Klein no grafeno. Espalhamento de elétron por uma barreira de potencial quadrada (cima) e a definição dos ângulos de espalhamento nas regiões I, II e III (baixo)[4].	p. 35
11	Probabilidade de transmissão através de uma barreira de potencial de 100 nm de comprimento como função do ângulo de incidência para $V = 200$ meV (curva vermelha) e $V = 285$ meV (curva azul) [3].	p. 38
12	Estrutura de bandas e densidade de estados de nanofitas de grafeno com bordas zigzag (a)-(c), e armchair (d)-(f). (a) e (d) $N = 4$, (b) e (e) $N = 5$, (c) e (f) $N = 30$	p. 40
13	Nanofita armchair com espessura W . O sistema é considerado infinito na direção x , enquanto possui um número finito de linhas de átomos na direção y	p. 41
14	Espectro de energias para nanofitas armchair com diferentes espessuras no limite de Dirac, com $N = 299$ (esquerda), 300 (meio) e 301 (direita), respectivamente.	p. 42
15	Barreira de potencial quadrada de comprimento D e intensidade V em uma nanofita armchair de espessura W , considerada infinita na direção x	p. 43
16	Probabilidade de transmissão em função do potencial para uma nanofita armchair metálica. As várias curvas correspondem às transmissões dos diferentes modos (correspondentes aos diferentes valores de n).	p. 45

17	Aneis quânticos (a) losangular ($L_E = 6.9$ nm e $L_I = 4.9$ nm) e (a) hexagonal ($L_E = 6.1$ nm e $L_I = 4.1$ nm), ambos com bordas armchair, juntamente com um anel unidimensional de raio (a) 3.2 nm e (b) 4.7 nm, respectivamente. (b) e (d) Espectro de energias obtido do modelo simplificado (curvas solidas) e do modelo tight-binding (curvas tracejadas), para os sistemas das figuras (a) e (b), respectivamente [42].	p. 48
18	(a) Transporte difusivo e (b) transporte balístico.	p. 51
19	Um condutor bidimensional de comprimento L e espessura W conectado a dois contatos (S e D) aos quais é imposto uma diferença de potencial V . p. 52	
20	Um dispositivo acoplado a dois contatos (S e D) através de dois conectores. A aplicação de uma diferença de potencial, $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$, faz com que os elétrons atravessem o dispositivo, com probabilidade T , gerando uma corrente elétrica.	p. 53
21	Condutância de uma constrição, destacada no canto superior esquerdo da figura, como função de sua espessura (controlada por uma voltagem) V_g [47].	p. 55
22	Distribuição de energias dos contatos 1 (esquerda) e 2 (direita) para (a) $\mathcal{T} = 0$ K e (b) $\mathcal{T} \neq 0$ K.	p. 56
23	Derivada da função de fermi para $\mathcal{T} = 100$ K (curva tracejada) e $\mathcal{T} = 300$ K (curva contínua).	p. 58
24	Modelo tight-binding unidimensional simplificado. Os sítios $i \leq -1$ correspondem ao conector, enquanto que os restantes representam a região central do dispositivo.	p. 61
25	Esboço do interferômetro proposto: Uma anel hexagonal, acoplado a conectores, de entrada e de saída, infinitos (representados pelos sítios vermelhos), com três regiões de potenciais não nulos, produzidos por eletrodos, representados pelas regiões A , B , no braço superior, e C , no braço inferior do anel.	p. 66
26	Probabilidade de transmissão como função da energia em tal sistema, considerando $V_A = V_B = V_C = 0$, (a) para diferentes valores do comprimento L com uma espessura fixada $W = 5,96$ nm, e (b) para diferentes valores de espessura W com comprimento fixo $L = 9,94$ nm	p. 68

27	Sistema simplificado para a descrição do sistema representado na figura 25.	p. 68
28	Junção tripla correspondente a conexão entre um conector e os dois braços do anel hexagonal [veja Fig. 25]. As amplitudes que entram na região de espalhamento (região triangular) são representadas pela letra A enquanto que as de saída são representadas pela letra B	p. 70
29	Comparação entre as probabilidades de transmissão analítica (curva contínua), calculada através da Eq. (4.5) para um anel circular unidimensional de raio $R \approx 47$ nm, e numérica (pontos), calculada para o sistema esboçado em Fig. 25 com $W \ll L$ ($W \approx 0.54$ nm e $L = 44.4$ nm).	p. 71
30	Probabilidade de transmissão como função da intensidade da barreira de potencial V_C na região C [veja Fig. 25], com $W = 18.3$ nm, para $V_A = V_B = 0$, considerando diferentes espessuras da barreira: $W_C = 22.7$ nm (curva contínua), $W_C = 28.4$ nm (curva tracejada) e $W_C = 34.1$ nm (curva pontilhada).	p. 72
31	Comparação entre os valores de V_{min} , onde a probabilidade de transmissão atinge um mínimo $T = 0$, obtidos numericamente (símbolos) e analiticamente (curva tracejada).	p. 74
32	Probabilidade de transmissão como função da intensidade da barreira de potencial V_C na região C [veja Fig. 25], com $\mathcal{T} = 77$ K (temperatura do Nitrogênio líquido), com $W = 18.3$ nm, para $V_A = V_B = 0$, considerando diferentes espessuras da barreira: $W_C = 22.7$ nm (curva contínua), $W_C = 28.4$ nm (curva tracejada) e $W_C = 34.1$ nm (curva pontilhada).	p. 75
33	Mapas de contorno da probabilidade de transmissão como função das intensidades das barreiras de potencial V_A e V_B nas regiões A e B [veja Fig. 25], considerando espessuras $W_A = W_B = 5.7$ nm e $W_C = 11.4$ nm ($W_A = W_B = W_C/2$), para (a) $V_C = 0$ e (b) $V_C = V_{min} = 166$ meV. . .	p. 77

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	p. 15
1.1	Grafeno	p. 17
1.1.1	Algumas propriedades gerais	p. 18
1.2	Aplicações	p. 21
1.2.1	Transistores baseados em grafeno	p. 21
1.2.2	Fotodetectores baseados em grafeno	p. 22
1.2.3	Células solares baseadas em grafeno	p. 23
1.3	Fabricação de nanoestruturas de grafeno	p. 24
2	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DO GRAFENO	p. 26
2.1	Monocamada de grafeno	p. 26
2.1.1	Modelo tight-binding	p. 26
2.1.2	Aproximação de baixas energias	p. 30
2.1.3	Autoestados	p. 32
2.1.4	Tunelamento de Klein	p. 33
2.2	Nanofitas de grafeno	p. 39
2.2.1	Propriedades gerais	p. 39
2.2.2	Nanofitas armchair no limite de Dirac	p. 40
2.2.3	Tunelamento de Klein em uma nanofita armchair	p. 43
2.3	Anéis quânticos de grafeno	p. 46
2.3.1	Modelo simplificado para anéis quânticos de grafeno	p. 46

3	TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS	p. 50
3.1	Transporte balístico	p. 50
3.2	A formula de Landauer	p. 53
3.3	Condutância para temperatura não nula	p. 56
3.4	Matriz de espalhamento	p. 59
3.5	Modelo computacional	p. 60
3.5.1	Modelo unidimensional	p. 60
3.5.2	generalização para sistemas 2D e 3D	p. 63
4	TRANSPORTE ELETRÔNICO EM ANÉIS QUÂNTICOS DE GRAFENO	p. 65
4.1	Sistema e suas ressonâncias	p. 66
4.2	Condutância dependente do potencial	p. 72
4.3	Portas lógicas em anéis quânticos de grafeno	p. 76
5	CONCLUSÃO	p. 80
	REFERÊNCIAS	p. 81

1 INTRODUÇÃO

Desde a invenção do circuito integrado em 1959, o processo de miniaturização de componentes eletrônicos tem permitido um aumento na capacidade de processamento de dispositivos. Tal processo tem estimulado grande interesse teórico e experimental na área de semicondutores e tem revolucionado a indústria de produtos eletrônicos nas últimas décadas. Grande parte do interesse está relacionado às recentes descobertas de novos materiais que possuem propriedades promissoras para futuras aplicações, dentre os quais podemos citar os materiais com estrutura cristalina bidimensional. Estes materiais preservam suas propriedades eletrônicas mesmo quando esfoliados até obter-se um plano extremamente fino, com espessura de apenas um (ou poucos) átomo(s). Dessa forma, o *design* de novos nanodispositivos baseados em tais materiais tem se mostrado um campo de crescente interesse, buscando-se alcançar os mais finos dispositivos possíveis.

Em particular, a monocamada de grafeno, alótropo bidimensional do carbono, tem sido considerado um substituto promissor ao silício em nanodispositivos eletrônicos [1]. Tal material exhibe propriedades de transporte eletrônico não usuais tais como alta mobilidade eletrônica, efeito Hall quântico anômalo [2], Tunelamento de Klein [3], dentre outras [4]. Entretanto, o tunelamento de Klein, i.e. transmissão perfeita através de barreiras de potencial para elétrons que incidem normalmente sobre as mesmas, torna a criação de portas lógicas um tanto complicada, pois pode não ser possível obter o estado *off*, onde não há corrente elétrica através do dispositivo.

A habilidade de bloquear o transporte de carga através de um dispositivo de uma maneira controlável, que é facilmente alcançada em junções semicondutoras, é fundamental para o desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos. Nesse sentido, a maioria dos esforços direcionados ao *design* de portas lógicas tem como ponto principal a indução de um *gap* de uma maneira controlável. Isso não é simples de se obter em monocamadas de grafeno, onde não existe *gap* eletrônico intrínseco [4], o qual só é alcançado se for quebrada a chamada simetria de sub-rede cristalina do material [5]. A dificuldade em se

produzir tal quebra de simetria experimentalmente tem atrasado o uso efetivo do grafeno em dispositivos eletrônicos atualmente.

Uma alternativa possível para a modulação da corrente através do dispositivo consiste na exploração das propriedades ondulatórias do elétron. Nesse sentido, as propostas de aplicação tecnológica de efeitos de interferência quântica têm crescido no contexto de nanodispositivos moleculares [6]. Entretanto, uma das desvantagens desse tipo de *design* é o fato de que os princípios de funcionamento de tais dispositivos quase sempre dependem fortemente do posicionamento preciso dos conectores (*leads*) em sítios moleculares específicos, o que pode ser pouco adequado para fins de aplicação. Em sistemas mesoscópios tradicionais, a interferência quântica é tipicamente induzida através do efeito Aharonov-Bohm, onde a fase extra adquirida provém do potencial vetor associado ao campo magnético [7]. Entretanto, muitas vezes tal efeito não tem se mostrado viável para a produção de portas lógicas, devido à baixa razão *on/off*, isto é, a uma diferença relativamente baixa entre a corrente que passa através do dispositivo no modo ligado (*on*) e aquela que vaza pelo dispositivo no modo desligado (*off*). Assim, o trabalho direcionado ao *design* de novos dispositivos baseados em novas propriedades quânticas, ou em novas formas de se induzir diferenças de fase, tem se mostrado promissor.

O presente trabalho consiste no estudo de um nano-dispositivo eletrônico de grafeno onde utiliza-se o conceito de interferência quântica para produzir um corte na corrente, sem a necessidade de se induzir um *gap* neste material. Tal interferência, produzida por uma fase obtida através do tunelamento de Klein, e não por campos magnéticos, mostra-se ser facilmente controlável e apresenta uma alta razão *on/off*, como será descrito. Com isso resolvem-se os problemas (i) da criação de uma porta lógica definitivamente bidimensional, (ii) do corte de corrente no grafeno (sem criação de *gap*) e (iii) do aprimoramento da razão *on/off* em interferômetros quânticos.

1.1 Grafeno

Grafeno [Fig. 1(a)] é uma camada bidimensional de átomos de carbono arranjados em uma estrutura do tipo favo-de-mel. Cada átomo de carbono possui seis elétrons, dois dos quais são fortemente ligados ao núcleo. Os quatro elétrons restantes, presentes nas camadas mais externas do átomo, ficam disponíveis para fazer ligações com outros átomos. No grafeno, cada átomo de carbono é fortemente ligado a três outros átomos do mesmo tipo em um plano (ligações σ) deixando o quarto elétron disponível, na terceira dimensão, para condução eletrônica. Os orbitais correspondentes ao quarto elétron, em cada átomo de carbono, formam ligações mais fracas conhecidas como ligações π . Fundamentalmente, as propriedades eletrônicas do grafeno são ditadas pelas bandas de condução e de valência dos orbitais π . O caráter forte das ligações σ faz com que o grafeno seja um material extremamente duro, com uma resistência de ruptura cerca de 300 vezes maior que a do aço estrutural A36. Apesar disso, ele é extremamente leve, com 0,77 miligramas/metro quadrado (para propósitos de comparação, um metro quadrado de papel é 1000 mais pesado)[4].

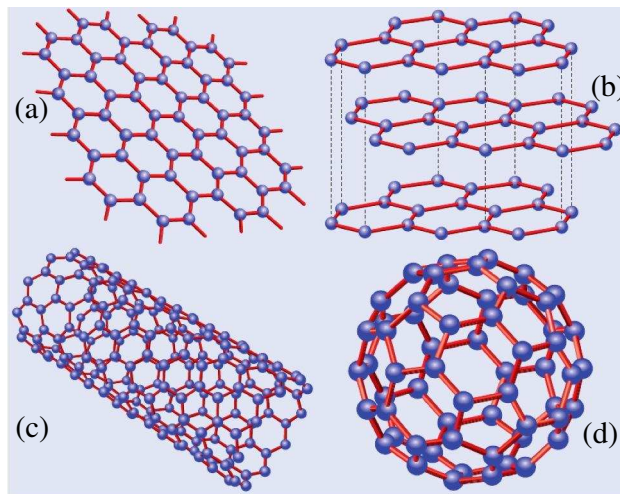


Figura 1: Alguns alótropos do carbono: (a) grafeno, (b) grafite, (c) nanotubo de carbono e (d) fulereno.

Desde que possui apenas um átomo de espessura, e a dinâmica dos portadores de carga é confinada em um plano, ele é considerado o mais perfeito material bidimensional possível na natureza [8]. Por muitas vezes, é tomado como ponto de partida para o estudo das propriedades eletrônicas de outros alótropos do carbono. Os nanotubos [Fig. 1(c)], de uma maneira ilustrativa, são obtidos enrolando-se uma folha de grafeno ao longo de uma direção e reconectando as ligações entre os átomos. Assim, de um ponto de vista físico, eles podem ser pensados como sendo estruturas unidimensionais. Já os fulerenos

[Fig. 1(d)], que são considerados sistemas 0-dimensionais, são moléculas onde os átomos de carbono são arranjados em uma estrutura esférica com hexágonos e pentágonos. A introdução de defeitos, como pentágonos, no grafeno, gera uma curvatura positiva. Dessa forma, fulerenos podem ser pensados como grafeno torcido. O grafite [Fig. 1(b)], alótropo tridimensional do carbono, consiste em monocamadas de grafeno empilhadas umas sobre as outras. Tais camadas permanecem ligadas através da interação de Van der Waals que, por sua vez, é relativamente fraca em comparação as ligações σ entre os átomos em cada camada. Como consequência, o comprimento de ligação entre duas camadas de átomos no grafite ($\approx 3,35 \text{ \AA}$) é maior que a constante de rede do grafeno ($\approx 1,42 \text{ \AA}$)[4].

1.1.1 Algumas propriedades gerais

Os primeiros estudos relacionados às propriedades eletrônicas do grafeno, algumas décadas atrás, foram de caráter teórico e tiveram como objetivo sua generalização ao caso do grafite [9]. Naquela época, Landau e Peierls argumentaram que estruturas cristalinas puramente bidimensionais seriam termodinamicamente instáveis e, portanto, não poderiam ser produzidas experimentalmente. O argumento foi posteriormente estendido por Mermin [10] e suportado por várias observações experimentais. Entretanto, em 2004, folhas de grafeno foram isoladas e estudadas em laboratório [11], trabalho que resultou, em 2010, no prêmio Nobel de Física para Konstantin Novoselov e Andre Geim [1]. Tais cristais, que puderam ser obtidos sobre substratos não cristalinos, mostraram ter não somente alta qualidade, mas também propriedades eletrônicas não usuais se comparados com outros materiais, atraindo assim grande interesse científico nos campos de pesquisas teóricas e experimentais.

Algumas das propriedades eletrônicas não usuais do grafeno têm origem no comportamento dos elétrons de baixa energia. Aqui encontra-se um dos aspectos mais interessantes da teoria do grafeno que é o de que tais excitações comportam-se como partículas relativísticas de massa nula, também conhecidas como fermions de Dirac. Tal comportamento abre a possibilidade para novos fenômenos, alguns dos quais oriundos da eletrodinâmica quântica de neutrinos, não observáveis em outros materiais. Fermions de Dirac comportam-se de uma maneira não usual comparados a elétrons não relativísticos se forem sujeitos a campos magnéticos, levando a novos fenômenos, como um efeito Hall quântico inteiro, distinto do que é observado em gases de elétrons bidimensionais usuais, que foi medido experimentalmente [4]. Outra característica interessante é o fato que de fermions de Dirac com massa nula tunelam através de barreiras de potencial com probabi-

lidade 1 se incidirem normalmente sobre tais barreiras, tal fenômeno é uma característica única de partículas ultrarelativísticas e está diretamente relacionado ao paradoxo de Klein da eletrodinâmica quântica. Apesar de ser altamente discutido no contexto de física de partículas, astro-física e física nuclear, o tunelamento de Klein (Tunelamento de fermions de Dirac sobre as condições do paradoxo de Klein) de partículas elementares tem se mostrado um fenômeno extremamente complicado para se investigar experimentalmente, devido às altas energias requeridas para a observação experimental. Entretanto, fermions de Dirac no grafeno movem-se a uma velocidade cerca de 300 vezes menor que a velocidade da luz, levando à possibilidade de observação de tal fenômeno a energias menores. De fato, pouco tempo após as previsões teóricas do tunelamento de Klein no grafeno [3], tal efeito foi confirmado experimentalmente [12].

O caráter ultrarelativístico dos portadores de carga no grafeno tem consequências importantes em suas propriedades de transporte eletrônico. Em sistemas fortemente desordenados, por exemplo, as flutuações típicas de energia potencial, assumindo que sejam mais intensas que a energia cinética, fazem com os portadores de carga da estrutura fiquem confinados em poças de potencial. Elétrons tunelam entre as regiões classicamente permitidas com uma probabilidade de transmissão que cresce com $|T/V|$ (Energia cinética/ Energia potencial), fazendo com que uma percolação ocorra para algum valor dessa razão [13]. No grafeno, a situação é bastante diferente devido ao tunelamento de Klein. Não importando quão pequeno seja a razão $|T/V|$ os portadores de carga não podem ser confinados em poças de potencial. Portanto, o tunelamento de Klein faz com que as inhomogeneidades em larga escala tornem-se irrelevantes. Outro fenômeno que tem grande influência nas propriedades de transporte eletrônico do grafeno é o *Zitterbewegung* (movimento trêmulo característico de partículas relativísticas), primeiramente discutido por Schrödinger por volta de 1930 [14]. Um regime de transporte 'pseudodifusivo', onde existe uma desordem mesmo na ausência de processos de espalhamento, surge como consequência de tal fenômeno. Tal desordem intrínseca mostrou-se ser semelhante àquela presente em metais *altamente desordenados* [15]. Dessa forma, uma condutividade mínima da ordem do quanta de condutância $4e^2/h$ é prevista com uma precisão de algum fator de ordem um [16]. De fato, a descoberta experimental da condutividade mínima no grafeno ocorreu antes de sua previsão teórica (sendo as últimas baseadas no formalismo de Landauer para o transporte quântico e em outras considerações sobre a condutividade de um gás de fermions de Dirac de massa nula bidimensional) [17].

Propriedades não usuais na física do grafeno também surgem no contexto de sistemas em escala mesoscópica [18]. Os novos efeitos tem origem nas condições de contorno

satisfeitas pelas funções de onda em amostras com diferentes tipos de bordas. Os tipos de bordas mais estudados, *zigzag* e *armchair* [Fig. 2], apresentam propriedades bastante diferentes entre si.

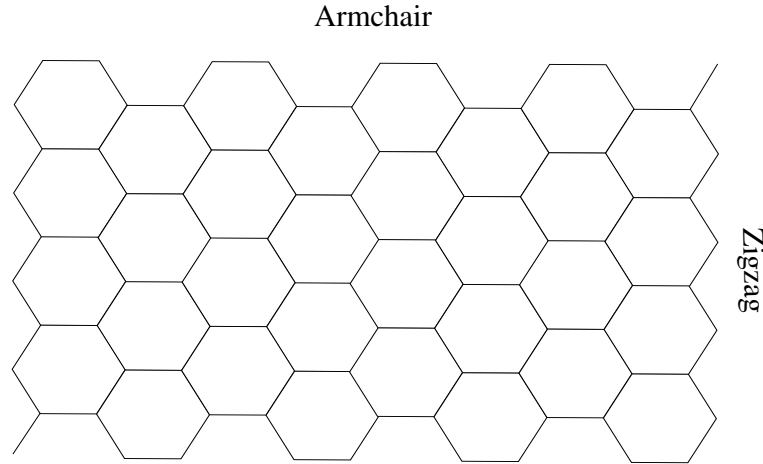


Figura 2: Bordas Armchair e Zigzag de uma rede cristalina do tipo favo-de-mel.

As nanofitas de grafeno, que são basicamente fios quânticos de grafeno, formam um cenário interessante para o estudo de algumas propriedades que possam surgir como consequência dos diferentes tipos de bordas que o sistema pode ter. Nanofitas do tipo armchair podem ser obtidas, de acordo com a Fig. 2, se pensarmos a estrutura como sendo infinita na direção horizontal e finita na direção vertical. Já uma nanofita do tipo zigzag pode ser obtida escolhendo a dimensão da direção vertical como sendo infinita enquanto que a correspondente a direção horizontal é finita. Nanofitas do tipo zigzag apresentam modos com energia nula não presentes em nanofitas do tipo armchair. Tais modos correspondem a estados localizados nas bordas do sistema [4]. Nanofitas armchair apresentam um *gap* que oscila com o aumento da largura lateral, comportamento não presente em nanofitas zigzag, podendo apresentar características metálicas ou semicondutoras [18]. As diferentes nanofitas apresentam diferentes condutâncias e, como consequência geral da estrutura de bandas do grafeno e do comportamento característico de um sistema bidimensional, a condutância apresenta um perfil crescente a medida que os valores de energia se distanciam dos cones de Dirac (pontos onde as bandas de valência e de condução se tocam no grafeno), e portanto a condutância assume uma forma de 'V' como função da diferença de potencial aplicado ao sistema [18].

1.2 Aplicações

Estudos relativos às propriedades elétricas, óticas, mecânicas e termoelétricas de monocamadas de grafeno, ao longo dos anos, tem mostrado o grande potencial de aplicações práticas do material. Dessa forma, o campo de pesquisas tem expandido, além do contexto da física da matéria condensada, para aplicações em nanodispositivos eletrônicos, biosensores, células solares e etc. Abaixo, seguem alguns exemplos de possíveis aplicações práticas.

1.2.1 Transistores baseados em grafeno

A alta mobilidade eletrônica a temperatura ambiente é talvez a propriedade mais frequentemente citada no contexto de aplicações envolvendo dispositivos eletrônicos baseados em grafeno. Mobilidades de $10,000 - 15,000 \text{ cm}^2/(\text{V s})$ são rotineiramente medidas em laboratório para amostras de grafeno sobre substratos baseados em silício [19]. Juntamente com um forte efeito de campo elétrico [Fig. 3], que leva a uma densidade de portadores de carga eletrostaticamente ajustável no intervalo $n < 10^4 \text{ cm}^{-2}$, a alta mobilidade eletrônica faz do grafeno um possível candidato para futuras aplicações em transistores de efeito de campo, FET¹, de alta velocidade.

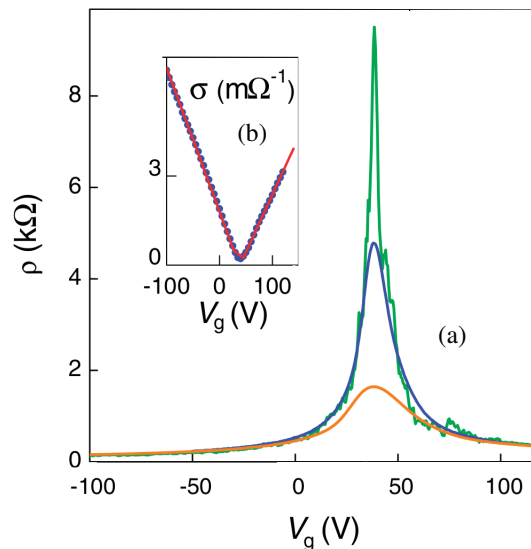


Figura 3: Efeito de campo em monocamada de grafeno. (a) Comportamento da resistividade como função do potencial para diferentes temperaturas ($T = 5 \text{ K}$ curva amarela, $T = 70 \text{ K}$ curva azul e $T = 300 \text{ K}$ curva verde). (b) Condutividade em função da voltagem aplicada para $T = 70 \text{ K}$. (Figura adotada da Ref [11])

¹Sigla para 'Field Effect Transistor'

Os transistores de efeito de campo baseados em grafeno mais frequentemente estudados são compostos de dois contatos, conhecidos na literatura como *Source* (S) e *Drain* (D), conectados a uma amostra de grafeno, usualmente uma nanofita, sobre um dielétrico que funciona como um contato de base (conhecido na literatura como *back gate*). Depositando-se outra camada de dielétrico sobre a amostra (*Top Gate*) é possível obter a configuração na qual a concentração de carga no canal pode ser controlada através de quatro contatos. A figura 4(a) apresenta uma imagem de microscopia eletrônica de varredura de um FET baseado em grafeno enquanto a Fig. 4(b) apresenta o comportamento da corrente elétrica, à temperatura ambiente, como função do potencial V_{TG} (Potencial no *Top Gate*) com $V_{DS} = 0.01V$ (Diferença de potencial *Drain* - *Source*). A referência [19] é um review dedicado a transistores baseados em grafeno.

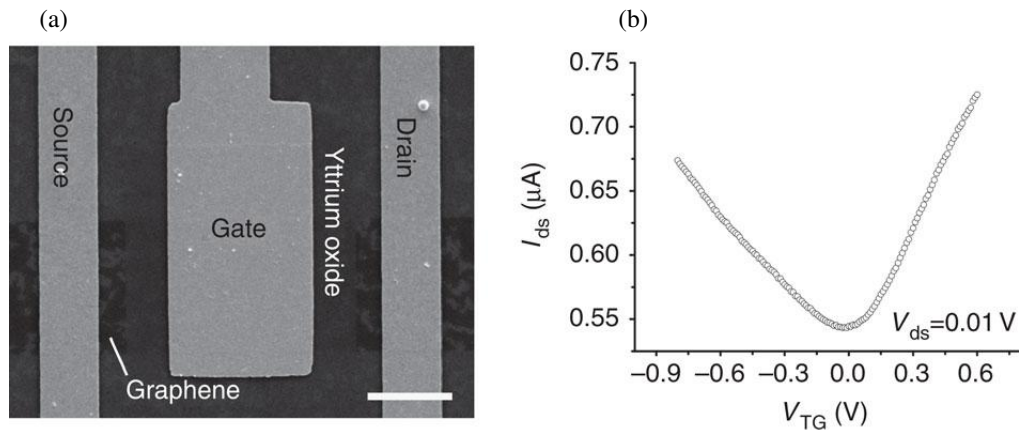


Figura 4: (a) Imagem de microscopia eletrônica de varredura de um transistor de efeito de campo (FET) baseado em grafeno. O substrato é feito de SiO_2 sobre um wafer de Si altamente dopado, onde uma camada de Y_2O_3 foi depositada sobre a amostra de grafeno, fazendo o papel do contato superior (*Top Gate*). (b) Padrão característico da corrente elétrica em função de V_{TG} de uma tal dispositivo à temperatura ambiente [20].

1.2.2 Fotodetectores baseados em grafeno

Monocamadas de grafeno absorvem cerca de 2.3 % da luz branca incidente, que é um valor relativamente alto para uma estrutura com apenas um átomo de espessura. Tal valor, que é consequência da estrutura de bandas única do material, tem sido demonstrado experimentalmente [21]. O valor da absorção pode ser calculado teoricamente utilizando a regra de ouro de Fermi com base no comportamento de um gás de fermions de Dirac bidimensional sobre um campo elétrico perpendicular ao plano do material [21]. O valor obtido é $\pi\alpha$, onde $\alpha \approx 1/137$ é a constante de estrutura fina, em concordância com o resultado experimental.

Fótons incidentes sobre o grafeno são, em grande parte, absorvidos gerando pares de elétron e buracos (e-b). Os portadores de cargas poderiam ser multiplicados, se possível, e submetidos a uma diferença de potencial, gerada por dois eletrodos, levando a uma corrente detectável através de uma amostra. Entretanto, pares e-b no grafeno tem um tempo de vida muito curto, fazendo com que os portadores de carga fótoexcitados não contribuam para a corrente no dispositivo. Porém, uma fotocorrente pode ser detectada na interface grafeno-eletrodo sob iluminação local [22]. A diferença entre a função trabalho do eletrodo e o nível de fermi no grafeno gera um pequeno campo elétrico local que pode ser compensado ou intensificado pela voltagem de gate entre os eletrodos. Assim, pode haver uma separação do par e-b [23]. A figura 5 mostra um esquema de um fotodetector baseado em um transistor com um contato de base.

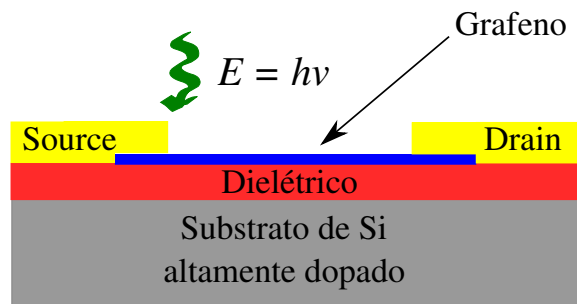


Figura 5: Dispositivo fotodetector baseado em grafeno sob iluminação.

É importante mencionar que, desde que a estrutura de bandas do grafeno apresenta um gap nulo, ou seja, a banda de valência toca a banda de condução, a absorção de fótons de todas as frequências poderá ocorrer, fazendo com que tais sistemas possam detectar no intervalo de frequências do visível ao infravermelho.

1.2.3 Células solares baseadas em grafeno

Células solares, também conhecidas como células fotovoltaicas, são sistemas que convertem energia solar em energia elétrica. Tais sistemas são compostos por camadas semicondutoras e são capazes de produzir um campo elétrico perpendicular às camadas quando expostos à luz solar. Em geral, células solares exigem materiais que sejam bons condutores e que sejam relativamente transparentes, permitindo que a luz passe através do mesmo. O óxido de Índio e Estanho é utilizado na fabricação de células solares cumprindo tais requerimentos. Entretanto, tal material é raro, fazendo com que painéis solares sejam muito caros.

Excelentes propriedades elétricas, óticas e mecânicas, fazem do grafeno um substituto

promissor ao óxido de Índio e Estanho, podendo levar a fabricação de células solares mais baratas, desde que o carbono é altamente abundante.

1.3 Fabricação de nanoestruturas de grafeno

Amostras de grafeno relativamente grandes e de alta qualidade são indispensáveis para futuras aplicações, especialmente em eletrônica e em optoeletrônica. Várias técnicas de produção de monocamadas de grafeno foram desenvolvidas e aprimoradas ao longo dos anos. Em particular podemos citar a esfoliação do grafite, que consiste na esfoliação mecânica de um cristal de grafite pirolítico altamente orientado (HOPG) até obter-se poucas camadas, ou até monocamadas, de grafeno. Filmes de mais $100\ \mu\text{m}$ de largura e de alta qualidade puderam ser fabricados através de tal método [11].

Além da técnica de esfoliação mecânica, o grafeno também pode ser obtido através de técnicas de crescimento. A deposição química de vapor (CVD) tem mostrado grande potencial na fabricação de monocamadas de grafeno relativamente grandes [24]. A vantagem sobre a esfoliação mecânica é que a CVD permite, sobre certas circunstâncias, o crescimento controlado de estruturas com bordas bem definidas [25].

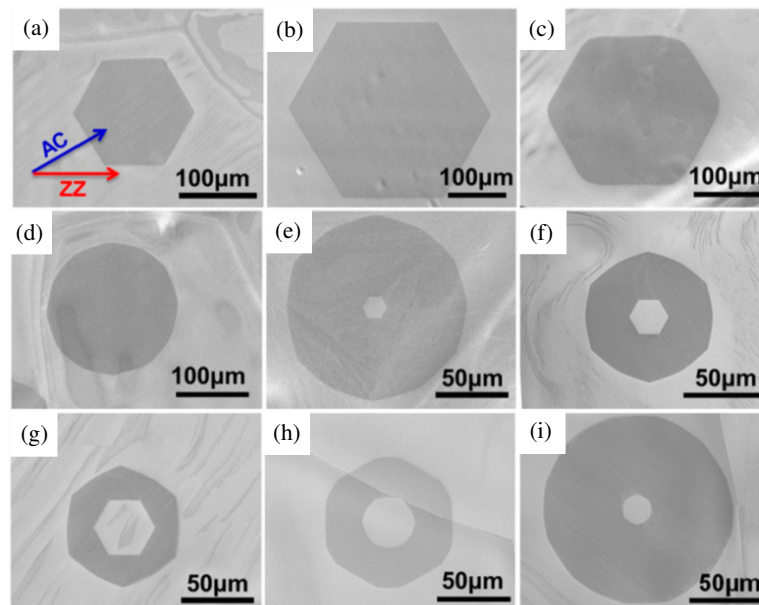


Figura 6: Evolução das bordas e morfologia de cristais de grafeno crescidos em um substrato de Pt via CVD G-E-RG. (a)-(b) estágio de crescimento e orientação das bordas zigzag (ZZ) e armchair (AM). (c)-(h) Alteração estrutural consequente da variação dos parâmetros envolvidos no crescimento para diferentes instantes de tempo. (i) etapa de recrescimento (regrowth). De acordo com a Ref. [25]

A figura 6 apresenta pontos e anéis quânticos de grafeno, com bordas bem definidas, produzidos pela técnica CVD G-E-RG (*growth-etching-regrowth*) [25]. O método consiste em crescer pontos quânticos de grafeno sobre um substrato, que no caso é uma folha de Platina (Pt), pelo método CVD e então variar parâmetros envolvidos na fabricação de tais estruturas (Taxa de variação do fluxo de metano, no caso). Tais variações podem induzir alterações controláveis no formato das bordas da amostra.

Após a etapa de obtenção de folhas de grafeno sobre substratos, a modelagem das amostras, para fabricação de dispositivos, pode ser alcançada através da técnica de litografia por feixe de elétrons. Esta técnica é bastante utilizada em trabalhos cujo escopo é o estudo das oscilações de Aharonov-Bohm em anéis quânticos, usualmente circulares, de grafeno e/ou de ouro, como citado em [26, 27]. O método consiste em fazer um feixe de elétrons varrer uma folha de grafeno coberta por um resiste, que é um polímero especial que é sensível a irradiação por elétrons, expondo-o ao feixe em um padrão específico, de forma a produzir a geometria desejada para o sistema e, então, remover seletivamente as regiões expostas ou não do resiste (dependendo do tipo do mesmo). Dessa forma, o que resta é o sistema modelado sobre o substrato. A mesma técnica pode ser utilizada para ajustar as posições dos eletrodos.

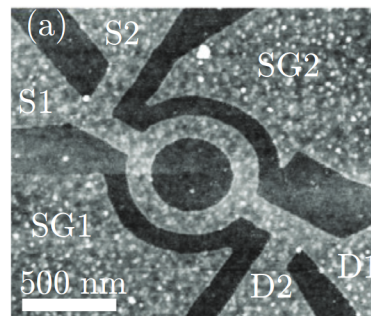


Figura 7: Anel quântico de grafeno modelado pela técnica de litografia por feixe elétrons. Cada conector é ligado a dois eletrodos: S1/2 (Source 1 ou 2) e D1/2 (Drain 1 ou 2), permitindo a medida de resistência entre quatro terminais [28]

A figura 7 apresenta um anel quântico de grafeno usado para o estudo do efeito Aharonov-Bohm, discutido em mais detalhes na referência [28]. Amostras de grafeno foram produzidas através da esfoliação mecânica de grafite natural e foram depositadas sobre um substrato de Si altamente dopado coberto por uma camada de SiO_2 . Litografia por feixe de elétrons foi usada para definir a forma da estrutura. Finalmente, contatos foram adicionados por uma segunda litografia por feixe de elétrons.

2 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DO GRAFENO

Grafeno, uma monocamada de átomos de carbono arranjados em uma estrutura do tipo favo de mel, é considerado um material promissor para futuras aplicações em nanoeletrônica e em outras áreas, além de ser visto como um veículo para o estudo de fenômenos fundamentais relacionados à eletrodinâmica quântica. A possibilidade do estudo de fenômenos relativísticos no grafeno é consequência da estrutura de bandas única do material e tem implicações importantes em suas propriedades eletrônicas. Neste capítulo, é feita uma pequena revisão sobre as propriedades eletrônicas de uma monocamada de grafeno.

2.1 Monocamada de grafeno

2.1.1 Modelo tight-binding

Começaremos calculando as bandas de energia e os estados eletrônicos de uma monocamada de grafeno. Os átomos de carbono são dispostos em uma estrutura cristalina do tipo favo de mel que pode ser pensada como a combinação de duas subredes triangulares distintas e independentes, conhecidas como subredes A e B [Fig. 8(a)]. Os vetores primitivos da rede triangular são:

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

onde $a \approx 1.42$ Å é a distância média entre dois átomos de carbono.

A rede cristalina do grafeno possui dois átomos por célula unitária, um pertencente à subrede A e outro à subrede B, de forma que cada átomo da subrede A é rodeado por três vizinhos mais próximos da subrede B e vice versa. Os vetores que ligam um sítio

específico aos vizinhos mais próximos são

$$\vec{t}_1 = \frac{a}{2} (1, \sqrt{3}), \quad \vec{t}_2 = \frac{a}{2} (1, -\sqrt{3}), \quad \vec{t}_3 = -a(1, 0), \quad (2.2)$$

de acordo com a Fig. 8(a). A rede recíproca de uma rede triangular é também uma rede triangular, com vetores de rede

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}). \quad (2.3)$$

A primeira zona de Brillouin é esquematizada na Fig. 8(b), com destaque para dois pontos que são de importância particular para a física do grafeno. Tais pontos são conhecidos como pontos de Dirac por motivos que serão esclarecidos posteriormente. Os vetores de onda que os caracterizam são

$$\vec{K}' = \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \quad \vec{K} = \frac{2\pi}{3a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right). \quad (2.4)$$

O modelo tight-binding, ou modelo de ligação forte, é uma ótima aproximação para calcular estrutura eletrônica de bandas em sólidos usando funções de onda aproximadas que são superposições das funções de onda dos átomos localizados nos sítios atômicos do cristal. Nesse modelo, considera-se que o Hamiltoniano em um dado sítio, H_i , seja uma ótima aproximação para o Hamiltoniano total do sólido, H , quando este último é calculado em um átomo localizado naquele sítio [29].

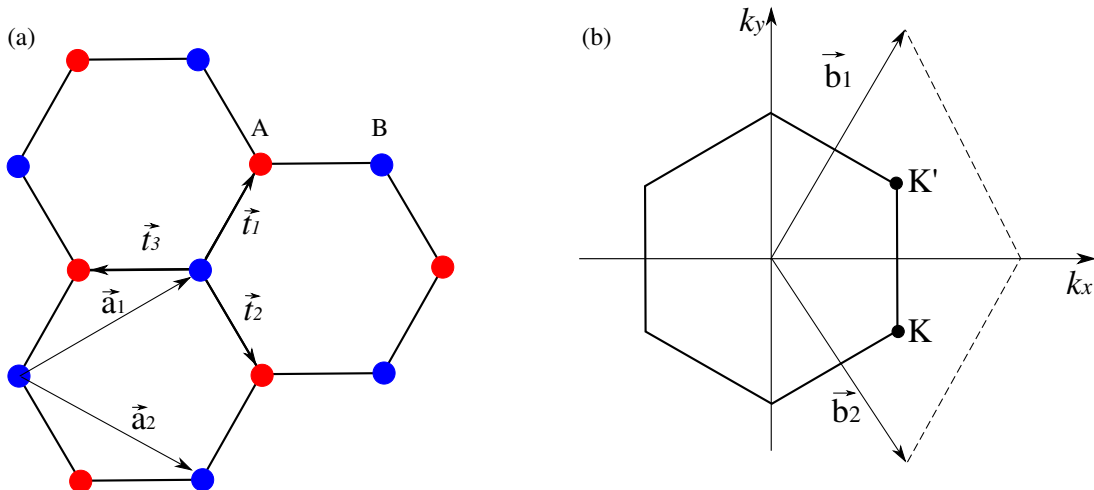


Figura 8: (a) Rede cristalina do grafeno. Os átomos vermelhos (azuis) representam, isoladamente, os sítios da subrede A (B). Os vetores que ligam um sítio específico aos seus vizinhos mais próximos são os \vec{t}_i 's, enquanto que os \vec{a}_i 's são os vetores primitivos. (b) Primeira zona de Brillouin. Destacam-se os vetores de rede, \vec{b}_i 's, e os pontos K e K' .

O Hamiltoniano tight-binding no formalismo de segunda quantização, considerando o hopping apenas entre os primeiros vizinhos, tem a forma

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,j} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i), \quad (2.5)$$

onde $t \approx 2.8$ eV é o parâmetro de hopping entre os vizinhos mais próximos. Os operadores a_i^\dagger (a_i), conhecidos como operadores de criação (destruição), criam (destroem) elétrons nos sítios i da subrede A, enquanto os operadores b_i^\dagger (b_i) fazem o mesmo na subrede B. Tais operadores satisfazem as relações de anticomutação característica de fermions

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{i,j}, \quad \{b_m, b_n^\dagger\} = \delta_{m,n}, \quad \{a_i, a_j\} = 0, \quad \{b_m, b_n\} = 0, \quad (2.6)$$

onde os índices i e j representam sítios da subrede A e os índices m e n representam os da subrede B.

A relação de dispersão do grafeno pode ser obtida facilmente através da transformada de Fourier dos operadores de criação e destruição

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_k, \quad b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} b_k, \quad (2.7)$$

onde $\vec{k} = (k_x, k_y)$ e N representa o número de células unitárias. O estado eletrônico no espaço dos momentos pode ser obtido através da criação de um elétron, de vetor de onda \vec{k} , partindo do estado de vácuo em um sítio da rede cristalina

$$|\psi(k)\rangle = (Aa_k^\dagger + Bb_k^\dagger)|0\rangle, \quad (2.8)$$

onde o estado de vácuo, denotado por $|0\rangle$, satisfaz $a_k|0\rangle = b_k|0\rangle = 0$ e os números A e B estão relacionados com a amplitude de probabilidade nas subredes A e B. Assim, a substituição das equações (2.7) em (2.5) leva a

$$\mathcal{H}_k = -t \sum_k \sum_{l=1}^3 (e^{-i\vec{k}\cdot\vec{t}_l} a_k^\dagger b_k + e^{i\vec{k}\cdot\vec{t}_l} b_k^\dagger a_k), \quad (2.9)$$

permitindo escrever a equação de Schrödinger

$$\mathcal{H}_k |\psi(k)\rangle = E(k) |\psi(k)\rangle. \quad (2.10)$$

A substituição do Hamiltoniano (2.9) e do estado eletrônico (2.8) na Eq. (2.10), juntamente com as relações de anticomutação entre os operadores fermiônicos, nos leva a

duas equações que podem ser unificadas em uma única equação matricial:

$$\begin{pmatrix} 0 & f(k) \\ f(k)^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E(k) \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

onde

$$f(k) = -t \sum_{l=1}^3 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{t}_l} = -t \left(2e^{-ik_x a/2} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) + e^{ik_x a} \right). \quad (2.12)$$

Assim, as bandas de energia são obtidas através da diagonalização da Eq. (2.11):

$$E(k) = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)}, \quad (2.13)$$

onde os sinais + e - referem-se às bandas de condução e de valência, respectivamente. É interessante notar que para os vetores de onda da Eq. (2.4) temos $E(K) = E(K') = 0$. De fato, a figura 9 apresenta o gráfico da Eq. (2.13), onde observa-se a existência de seis pontos, dos quais apenas dois não são equivalentes (\vec{K} e \vec{K}'), onde as bandas de condução e de valência se tocam. Isso significa, do ponto de vista da teoria de bandas, que o grafeno é um material de gap nulo.

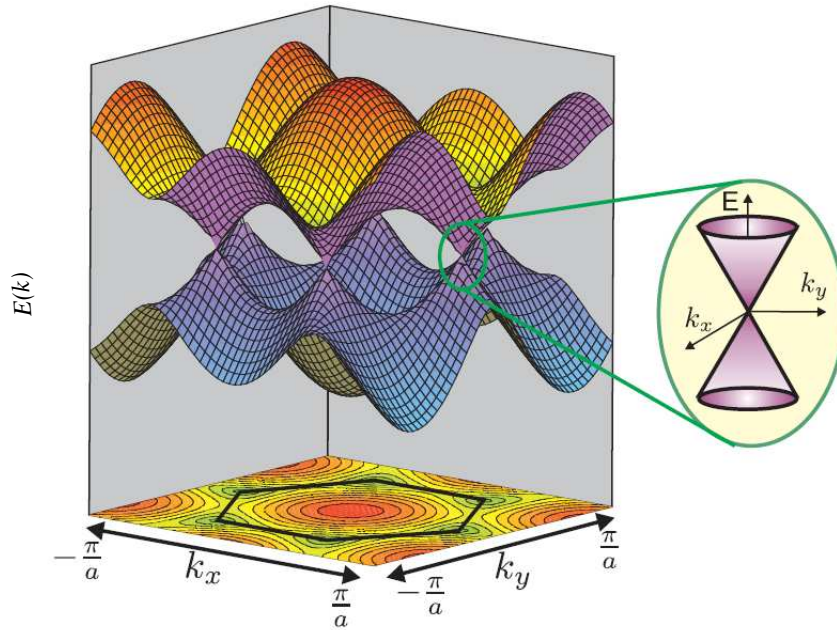


Figura 9: Relação de dispersão de uma monocamada de grafeno. O zoom mostra uma dispersão linear para pequenos valores de energia (valores próximos aos pontos de Dirac).

2.1.2 Aproximação de baixas energias

A energia de Fermi no grafeno não dopado (sem excesso de portadores de carga) coincide com a energia nos pontos K , possuindo uma banda de valência completamente ocupada e uma banda de condução completamente vazia [30]. A natureza fermiônica dos portadores de carga faz com que a adição de elétrons (ou buracos) ao sistema, através da dopagem, altere a energia de Fermi, podendo assumir valores próximos aos dos pontos onde as bandas se tocam. Dessa forma, o comportamento de elétrons e buracos de baixa energia é extremamente importante para a física do grafeno.

Consideremos o comportamento de portadores de carga que possuam vetores de onda nas proximidades dos pontos K , ou seja, consideremos:

$$\vec{k} = \vec{k}' - \vec{Q}, \quad (2.14)$$

onde \vec{Q} pode representar \vec{K} ou \vec{K}' , e \vec{k}' é um vetor de onda cujas componentes assumem valores pequenos. Podemos obter uma aproximação do Hamiltoniano, Eq. (2.11), através da expansão da função $f(k)$ para \vec{k} dado pela Eq. (2.14),

$$-\frac{f(k)}{t} = \sum_{l=1}^3 e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{t}_l} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{t}_l}, \quad (2.15)$$

lembrando sempre que $f(Q) = \sum \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{t}_l) = 0$ (Energia é nula nos pontos K 's).

Assim

$$-\frac{f(k)}{t} \approx \sum_{l=1}^3 (1 - i\vec{k}' \cdot \vec{t}_l) e^{i\vec{Q} \cdot \vec{t}_l} = \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{Q} \cdot \vec{t}_l} - i \sum_{l=1}^3 \vec{k}' \cdot \vec{t}_l e^{i\vec{Q} \cdot \vec{t}_l}, \quad (2.16)$$

que pode ser escrito como

$$-\frac{f(k)}{t} \approx -i\vec{k}' \cdot \sum_{l=1}^3 \vec{t}_l e^{i\vec{Q} \cdot \vec{t}_l}. \quad (2.17)$$

Observando que $\nabla_{\vec{k}} f(k) = i \sum \vec{t}_l e^{i\vec{k} \cdot \vec{t}_l}$, obtemos a identidade

$$f(k) = t\vec{k}' \cdot \nabla_{\vec{k}} f(Q). \quad (2.18)$$

O gradiente da função f no ponto \vec{Q} , que pode ser calculado facilmente através da Eq. (2.12), é dado por

$$\nabla_{\vec{k}} f(Q) = e^{-i\pi/3} \left(-i\frac{3}{2}a\hat{k}_x \pm \frac{3}{2}a\hat{k}_y \right), \quad (2.19)$$

onde \hat{k}_i é o vetor unitário da direção $i = x, y$ no espaço recíproco, e escolhemos o sinal +

para $\vec{Q} = \vec{K}$ e - para $\vec{Q} = \vec{K}'$. Assim, a Eq. (2.18) nos leva a

$$f(k) = -i\frac{3}{2}at(k'_x \mp ik'_y)e^{-i\pi/3}. \quad (2.20)$$

Podemos escrever $-i \exp(-i\pi/3) = \exp(-i5\pi/6)$ de forma que os Hamiltonianos da descrição microscópica, Eq. (2.11), nas vizinhanças dos pontos \vec{K} e \vec{K}' , podem ser reescritos, respectivamente, como

$$\mathcal{H}_{\vec{K}} \approx \frac{3at}{2}e^{-i5\pi/6} \begin{pmatrix} 0 & k'_x - ik'_y \\ k'_x + ik'_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$\mathcal{H}_{\vec{K}'} \approx \frac{3at}{2}e^{-i5\pi/6} \begin{pmatrix} 0 & k'_x + ik'_y \\ k'_x - ik'_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

A fase $5\pi/6$ pode ser incorporada nos vetores de estado ou pode ser excluída através de uma transformação unitária das funções da base. Assim, o Hamiltoniano efetivo nas vizinhanças dos pontos \vec{K} e \vec{K}' toma a forma

$$\mathcal{H}_{\vec{K},\vec{K}'} \approx \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k'_x \mp ik'_y \\ k'_x \pm ik'_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

onde $v_F = 3at/2\hbar \approx 10^6 m/s$ é a velocidade de Fermi dos portadores de carga de baixa energia no grafeno.

O Hamiltoniano (2.23), que pode ser reescrito como $\mathcal{H} = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ em torno do ponto \vec{K}^1 , onde $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ é um vetor cujas componentes são as matrizes de Pauli e $\vec{p} = \hbar \vec{k}'$, é o análogo bidimensional do Hamiltoniano de Dirac para férmions de massa nula². Ao invés da velocidade da luz c temos a velocidade de Fermi $v_F \approx c/300$. Por essa razão, diz-se que as excitações de baixa energia no grafeno comportam-se como férmions de Dirac de massa nula com uma velocidade efetiva v_F .

Os autoestados do Hamiltoniano de Dirac bidimensional são espinores de duas componentes, onde a primeira é a amplitude de probabilidade para um férmion com $m = 1/2$ (spin-up), enquanto que a segunda componente é a amplitude de probabilidade para um férmion com $m = -1/2$ (spin-down). Entretanto, no caso do grafeno a situação é um pouco diferente. O autoestado do Hamiltoniano aproximado também é um espinor de duas componentes, entretanto a primeira componente representa a amplitude de proba-

¹Em torno do ponto \vec{K}' temos $\mathcal{H} = v_F \vec{\sigma}^* \cdot \vec{p}$

²O Hamiltoniano de Dirac em duas dimensões é $H = c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} + mc^2\sigma_z$

bilidade para encontrar um portador de carga na subrede A, enquanto que a segunda componente refere-se a amplitude de probabilidade para encontrar um portador de carga na subrede B, como pode ser inferido através de Eq. (2.11). De uma maneira mais clara, podemos escrever

$$\Psi_{\vec{K}} = \begin{pmatrix} \psi_{KA} \\ \psi_{KB} \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

onde ψ_{KA} (ψ_{KB}) representa a função de onda, nas vizinhanças do ponto \vec{K} , na subrede A (B). Assim, dizemos que as autofunções do Hamiltoniano (2.23) são pseudoespinores, onde o pseudospin-up significa subrede A e pseudospin-down significa subrede B.

A equação de Schrödinger para elétrons de baixa energia no grafeno torna-se

$$v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \psi_K = E \psi_K, \quad (2.25)$$

cujas autoenergias, que podem ser encontradas facilmente, assumem os valores $E = \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, mostrando uma dispersão cônica que está de acordo com o zoom na Fig. 9. Assim, como $|\vec{p}| = \hbar |\vec{k}| = \hbar \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, podemos reescrever a Eq. (2.25) na forma

$$\frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|} \psi_K = \pm \frac{\hbar}{2} \psi_K, \quad (2.26)$$

onde podemos definir, em analogia com o operador de spin da mecânica quântica $\vec{S} = \hbar \vec{\sigma}/2$, o pseudoespín $\vec{S}' = \hbar \vec{\sigma}/2$. Portanto, no espaço dos momento, a Eq. (2.26) implica que os autovalores de $\vec{S}' \cdot \hat{n}$ são $\pm \hbar/2$, onde $\hat{n} = \vec{p}/|\vec{p}|$ é o vetor unitário na direção do momento. Assim, para os portadores de carga no grafeno, o pseudospin é projetado na direção do momento. Para elétrons, ambos apontam no mesmo sentido (sinal positivo), enquanto que para buracos apontam em sentidos opostos (sinal negativo). Por essa razão dizemos que os férmions de Dirac no grafeno são partículas quirais.

2.1.3 Autoestados

Os autoestados, ou pseudoespinores, para elétrons de baixa energia no grafeno podem ser calculados facilmente através da equação de Dirac. De fato, a equação Dirac [Eq. (2.25)], que é uma equação matricial, é equivalente ao par de equações acopladas

$$(\partial_x - i\partial_y)\psi_2 = i\epsilon\psi_1, \quad (2.27)$$

$$(\partial_x + i\partial_y)\psi_1 = i\epsilon\psi_2, \quad (2.28)$$

onde $\psi_1(\psi_2)$ refere-se à $\psi_{KA}(\psi_{KB})$, sendo $\epsilon = E/\hbar v_F$. As equações podem ser desacopladas facilmente através da aplicação do operador $(\partial_x - i\partial_y)$ na Eq. (2.28), de forma que

$$(\partial_x^2 + \partial_y^2)\psi_1 = -\epsilon^2\psi_1. \quad (2.29)$$

Desde que a partícula está livre, podemos obter ondas planas como soluções. Assim, supondo que $\psi_1 = A \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$, onde $\vec{k} = (k_x, k_y)$, $\vec{r} = (x, y)$ e A é uma constante, obtem-se $\epsilon^2 = k_x^2 + k_y^2$, como esperado. A segunda componente do pseudoespino, ψ_2 , é obtida pela substituição de ψ_1 na Eq. (2.28)

$$\psi_2 = s \frac{A}{\epsilon} (k_x + ik_y) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (2.30)$$

onde $s = \pm$ ($s = \text{sgn}(E)$), assumindo o valor positivo para elétrons e o negativo para buracos. Por fim, os autoestados da Eq. (2.25) tem a forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad (2.31)$$

onde $\phi = \arctan(k_y/k_x)$ é o ângulo entre o momento do elétron e o eixo x ³. A constante A assume o valor $1/\sqrt{2}$ de forma que $\psi^\dagger\psi = 1$.

Portanto, as autofunções do Hamiltoniano de Dirac, para elétrons de baixa energia no grafeno, guardam uma diferença de fase entre as subredes A e B. Tal fase intrínseca determina algumas propriedades de grande importância para a física do grafeno: é a origem de uma fase de Berry de π em torno dos pontos \vec{K} 's [31] e do tunelamento quiral [3].

2.1.4 Tunelamento de Klein

A transmissão de uma partícula através de uma região classicamente proibida, conhecida como tunelamento, é uma característica única da natureza ondulatória da matéria. Tal fenômeno, que foi primeiramente aplicado no contexto do decaimento alfa, em 1928, por Gamow [32], mostrou-se ser de natureza quântica geral e tem sido explorado no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos, tais como diodos [33] e etc. A transmissão não nula tem origem no acoplamento das soluções da equação de Schrödinger em ambos os lados da barreira, que são basicamente ondas planas, com funções de onda que decaem na região do potencial. Como consequência, a probabilidade de transmissão decresce

³Onde usamos a identidade: $a + ib = \sqrt{a^2 + b^2} e^{i \arctan(b/a)}$

com o aumento das dimensões da barreira, tendendo a zero no limite de uma barreira infinita. Entretanto, após os trabalhos de Dirac[34], que culminaram em uma descrição relativística para o elétron, percebeu-se que a equação de Dirac gerava resultados que estavam em completo desacordo com àqueles previstos pela teoria quântica não relativística. Em particular, para certos intervalos de energia, o tunelamento através de uma barreira de potencial quadrada poderia ser 100% eficiente. Esse importante resultado ficou conhecido como tunelamento de Klein [35].

Elétrons de baixa energia no grafeno comportam-se como fermions de Dirac de massa nula, como mostrado nas seções anteriores. Consequentemente, a transmissão de elétrons e buracos através de barreiras de potencial apresenta características não usuais, se comparadas àquelas correspondentes a outros materiais.

Consideremos agora o espalhamento de portadores de carga no grafeno em uma barreira de potencial quadrada. Consideremos três regiões [veja Fig. 10]. Na região II existe uma barreira de potencial constante de intensidade V e largura D , enquanto que nas outras regiões a partícula está livre. As funções de onda, para cada uma das regiões, são:

região I)

$$\psi_I(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i(\pi-\phi)} \end{pmatrix} e^{i(-k_x x + k_y y)}, \quad (2.32)$$

região II)

$$\psi_{II}(\mathbf{r}) = \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i(\pi-\theta)} \end{pmatrix} e^{i(-q_x x + k_y y)}, \quad (2.33)$$

região III)

$$\psi_{III}(\mathbf{r}) = \frac{t}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (2.34)$$

onde $\phi = \arctan(k_y/k_x)$, $\theta = \arctan(k_y/q_x)$, $s = \text{sgn}(E)$, $s' = \text{sgn}(E - V)$ e $q_x = \sqrt{(V - E)^2/(\hbar v_F)^2 - k_y^2}$. Os números complexos r e t são os coeficientes de reflexão e de transmissão, respectivamente.

As condições de contorno a serem satisfeitas são

$$\psi_I(0, y) = \psi_{II}(0, y) \quad (2.35)$$

$$\psi_{II}(D, y) = \psi_{III}(D, y), \quad (2.36)$$

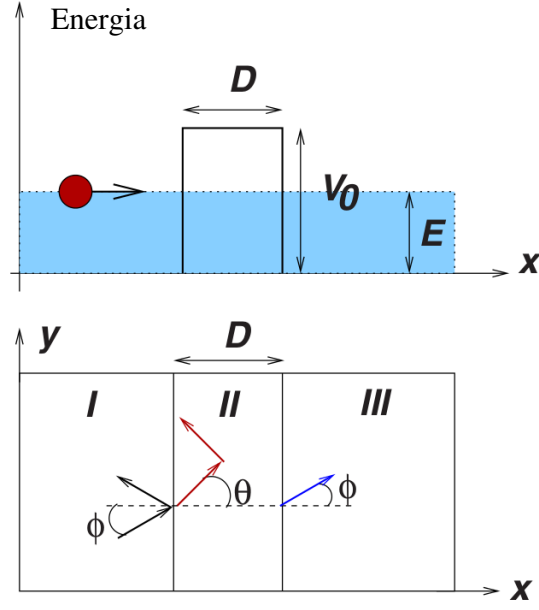


Figura 10: Tunelamento de Klein no grafeno. Espalhamento de elétron por uma barreira de potencial quadrada (cima) e a definição dos ângulos de espalhamento nas regiões I, II e III (baixo)[4].

observando que, ao contrário do caso da equação de Schrödinger, não precisamos exigir as condições de continuidade das derivadas nas interfaces, a expressão para a corrente de probabilidade não envolve derivadas de ψ_A e ψ_B . Utilizando as equações (2.32), (2.33) e (2.34), as equações (2.35) e (2.36) podem ser reescritas na forma:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

$$a \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{iq_x D} + b \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-iq_x D} = t \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik_x D}. \quad (2.38)$$

De Eq. (2.38), obtemos

$$ae^{iq_x D} + be^{-iq_x D} = te^{ik_x D}, \quad (2.39)$$

$$as'e^{i\theta}e^{iq_x D} - bs'e^{-i\theta}e^{-iq_x D} = tse^{i\phi}e^{ik_x D}. \quad (2.40)$$

A Eq. (2.39) pode ser reescrita como

$$ae^{iq_x D} = te^{ik_x D} - be^{-iq_x D}, \quad (2.41)$$

enquanto que a Eq. (2.40) assume a forma

$$ae^{iq_x D} = t \frac{s}{s'} e^{i(\phi-\theta)} e^{ik_x D} + be^{-2i\theta} e^{-iq_x D}. \quad (2.42)$$

Igualando Eq. (2.41) e Eq. (2.42), obtemos

$$te^{i(k_x+q_x)D} = \frac{2be^{-i\theta} \cos \theta}{1 - (s/s')e^{i(\phi-\theta)}}. \quad (2.43)$$

Podemos encontrar outra equação relacionando t e b isolando o termo $a(1 - s'e^{i\theta})^T$ da Eq. (2.37) e substituindo na Eq. (2.38). Assim,

$$\left[\begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} \right] e^{iq_x D} - t \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik_x D} = 2ib \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} \sin(q_x D), \quad (2.44)$$

de onde podemos escrever

$$(1+r)e^{iq_x D} - te^{ik_x D} = 2ib \sin(q_x D) \quad (2.45)$$

$$(se^{i\phi} - rse^{-i\phi})e^{iq_x D} - tse^{i\phi}e^{ik_x D} = -2ibs'e^{-i\theta} \sin(q_x D). \quad (2.46)$$

A Eq. (2.46) pode ser reescrita como

$$re^{iq_x D} = e^{2i\phi} e^{iq_x D} - te^{2i\phi} e^{ik_x D} + 2ib \frac{s}{s'} e^{i(\phi-\theta)} \sin(q_x D), \quad (2.47)$$

que juntamente com a Eq. (2.45) nos leva a

$$e^{iq_x D} - te^{ik_x D} = \frac{ibe^{-i\phi} \sin(q_x D)}{\cos \phi} \left(1 - \frac{s'}{s} e^{i(\phi-\theta)} \right). \quad (2.48)$$

Dividindo a Eq. (2.48) por Eq. (2.43), termo a termo, encontramos

$$t = \frac{ss' e^{i(q_x-k_x)D} \cos(\phi) \cos(\theta)}{ss' \cos(\phi) \cos(\theta) + ie^{iq_x D} \sin(q_x D) [s' s \cos(\phi - \theta) - 1]}. \quad (2.49)$$

Podemos obter uma relação mais clara se usarmos a identidade trigonométrica $\cos(\phi - \theta) = \cos(\phi) \cos(\theta) + \sin(\phi) \sin(\theta)$, no denominador, podendo este ser reescrito da seguinte forma

$$s' s \cos(\phi) \cos(\theta) [1 + ie^{iq_x D} \sin(q_x D)] - ie^{iq_x D} \sin(q_x D) [1 - s' s \sin(\phi) \sin(\theta)]. \quad (2.50)$$

Como $e^{-iq_x D} = \cos(q_x D) - i \sin(q_x D)$, temos que $1 + ie^{iq_x D} \sin(q_x D) = e^{iq_x D} \cos(q_x D)$, que é exatamente o termo que aparece multiplicando $s' s \cos(\phi) \cos(\theta)$.

Finalmente, obtemos o coeficiente de transmissão t :

$$t = \frac{e^{-ik_x D}}{\cos(q_x D) + i \sin(q_x D) [\tan(\theta) \tan(\phi) - s' s \sec(\theta) \sec(\phi)]}. \quad (2.51)$$

A probabilidade de transmissão, $T = |t|^2$, assume a forma

$$T(\phi) = \frac{1}{\cos(q_x D)^2 + \sin(q_x D)^2 [\sec(\theta) \sec(\phi) - s s' \tan(\theta) \tan(\phi)]^2}. \quad (2.52)$$

A figura 11 mostra a dependência angular da probabilidade de transmissão em coordenadas polares. Uma simples inspeção na Eq. (2.52) nos leva a concluir que a condição de ressonância é $q_x D = n\pi$, com $n = 0, \pm 1, \dots$, onde a barreira torna-se "transparente" ($T = 1$). Portanto, os máximos de transmissão, obtidos através dessa condição, dependem da intensidade da barreira. Entretanto, para incidência normal, $\phi = \theta = 0$, temos $T = 1$, independente dos parâmetros que caracterizam a barreira de potencial. Tal resultado é uma característica única de fermions de Dirac de massa nula e está diretamente relacionado ao paradoxo de Klein da eletrodinâmica quântica [3]. É interessante notar que, ao contrário dos elétrons não relativísticos, a transmissão continua perfeita mesmo para $V \gg E$, no caso da incidência normal, resultado que pode ser verificado através da aproximação da expressão para T nesse limite

$$T(\phi) \approx \frac{\cos(\phi)^2}{1 - \cos(q_x D)^2 \sin(\phi)^2}. \quad (2.53)$$

Esse tunelamento perfeito pode ser entendido através da conservação do pseudoespino. De fato, uma reflexão leva a uma troca $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$. Desde que os portadores de carga no grafeno são partículas quirais, uma reflexão no momento linear equivale a uma reflexão no pseudoespino. Entretanto, o Hamiltoniano do sistema não permite uma troca de pseudoespino. Assim, um elétron movendo-se para a direita pode ser espalhado somente para um estado eletrônico movendo-se para a direita ou para um estado de buraco movendo-se para a esquerda [3].

Um aspecto importante, que nem sempre é discutido ou enfatizado no contexto do tunelamento de Klein, é o fato de que, apesar dos elétrons serem transmitidos com probabilidade 1, para incidência normal, suas funções de onda adquirem uma fase que depende da intensidade e do comprimento da região de potencial. Tal fase, que é independente da energia da partícula incidente, pode ser calculada através da análise da Eq. (2.51).

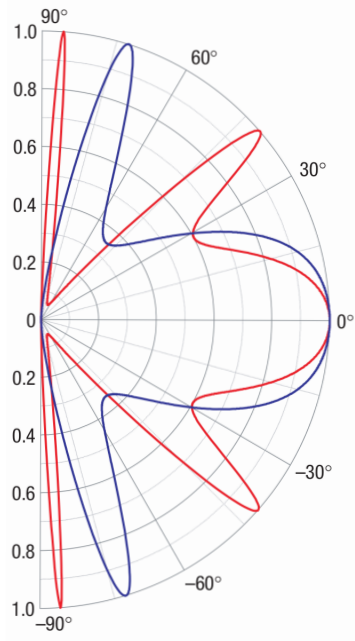


Figura 11: Probabilidade de transmissão através de uma barreira de potencial de 100 nm de comprimento como função do ângulo de incidência para $V = 200$ meV (curva vermelha) e $V = 285$ meV (curva azul) [3].

Admitindo, agora, o caso da incidência normal: $\theta \rightarrow 0$, $\phi \rightarrow 0$ obtemos

$$t = \frac{e^{-ik_x D}}{\cos(q_x D) - i s' s \sin(q_x D)}. \quad (2.54)$$

Considerando o caso de uma barreira de potencial maior que a energia do elétron, temos $s = 1$ e $s' = -1$, Logo

$$t = e^{-i(q_x + k_x)D} \longrightarrow t = e^{-i[(V-E)/(\hbar v_F) + E/(\hbar v_F)]D}, \quad (2.55)$$

onde, $E = \hbar v_F k_x$, desde que $k_y = 0$ para o caso em questão. Assim

$$t = e^{-iVD/(\hbar v_F)}. \quad (2.56)$$

Conclui-se que, apesar do tunelamento ser 100% eficiente, a função de onda final do elétron não é exatamente a mesma de um elétron que se propagou em uma região com $V = 0$. A diferença se manifesta na forma de uma fase devido a barreira, dada pela Eq. (2.56).

2.2 Nanofitas de grafeno

As nanofitas de grafeno são estruturas obtidas a partir de cortes em folhas de grafeno, privilegiando uma dada direção. Desde que a dinâmica dos portadores de carga é confinada em uma das direção do plano, vários modos com vetores de onda bem definidos surgem. Tais modos dependem das condições de contorno que, por sua vez, estão relacionadas com o formato das bordas do sistema. Dessa forma, as propriedades eletrônicas das nanofitas de grafeno dependem fortemente do formato de suas bordas.

2.2.1 Propriedades gerais

Ao contrário do caso da folha de grafeno infinita, algumas nanofitas apresentam um gap, dependendo do tipo de borda e de sua espessura. A estrutura de bandas e a densidade de estados correspondentes às nanofitas de grafeno, com bordas zigzag e armchair [Fig. (2)], calculadas através do modelo tight-binding, são esquematizadas na Fig. 12 para espessuras diferentes [36]. Se definirmos o número N , onde N é o número de linhas de átomos para o caso armchair (subredes A e B são contidas na mesma linha) e o número de linhas em zigzag (subredes A e B também são contidas na mesma linha) para o outro tipo de borda, podemos escrever as espessuras como $W_{am} = (\sqrt{3}/2)(N - 1)a$, para o caso armchair, e $W_{zz} = (3N/2 - 1)a$, para o caso zigzag ($a = 1.42 \text{ \AA}$).

Para o caso armchair o topo da banda de valência e o fundo da banda de condução estão localizados em $k = 0$. É interessante notar que, para tais nanofitas, a espessura determina se o sistema é metálico ou semicondutor, como mostram as figuras 12(d)-(f). Em geral, o sistema é metálico se $N = 3M - 1$, com $M = 1, 2, \dots$. Para as nanofitas semicondutoras, o gap decresce com o aumento do número de linhas, tendendo ao zero, como no caso da folha infinita.

Para nanofitas zigzag, estados de energia nula estão presentes em torno dos pontos $k = \pm\pi$ (assumindo $a = 1$), Fig. 12(d)-(f). Os estados eletrônicos correspondentes a tais bandas, não presentes em nanofitas do tipo armchair, são localizados nas bordas do sistema [36]. Tais estados estão presentes em nanoestruturas de grafeno mesmo que não existam bordas perfeitamente zigzag. De fato, um tipo de borda geral que não seja paralela às bordas armchair pode suportar estados de borda com energia nula. Cálculos numéricos tem demonstrado tal comportamento [37].

Certos aspectos relacionados às propriedades eletrônicas das nanofitas de grafeno podem ser estudados, de uma maneira mais simples, através da aproximação de Dirac,

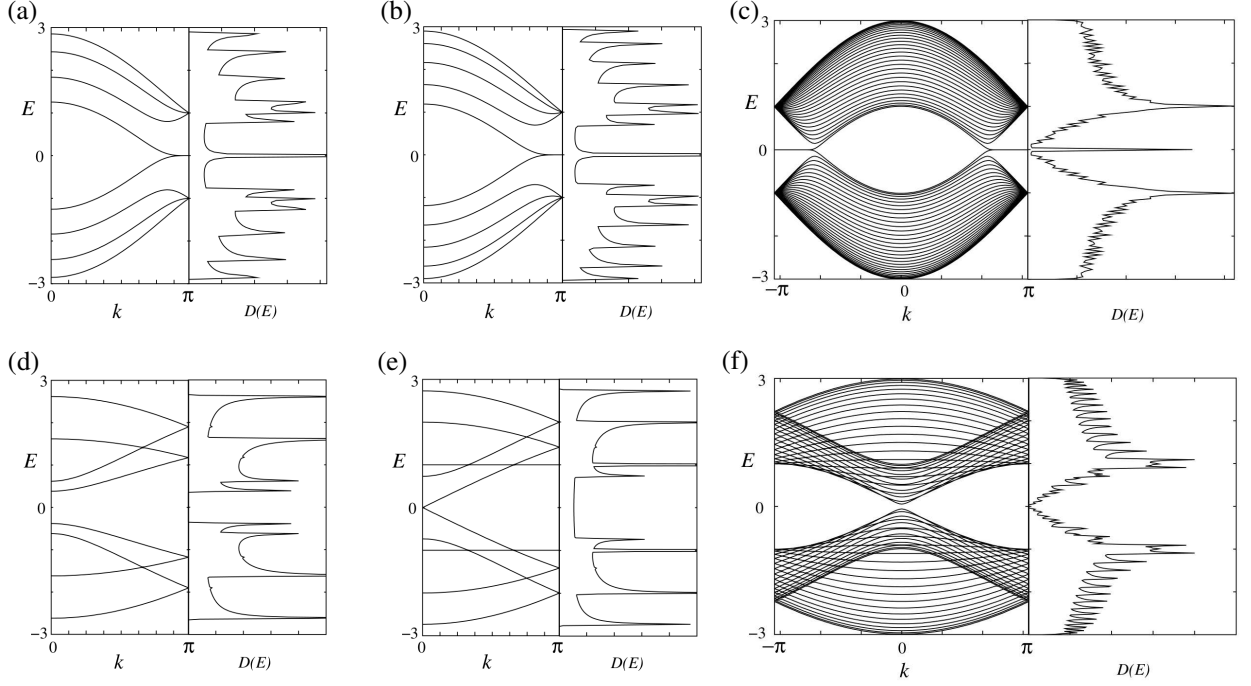


Figura 12: Estrutura de bandas e densidade de estados de nanofitas de grafeno com bordas zigzag (a)-(c), e armchair (d)-(f). (a) e (d) $N = 4$, (b) e (e) $N = 5$, (c) e (f) $N = 30$.

apresentada na seção anterior, desde que condições de contorno apropriadas sejam estabelecidas, correspondentes aos diferentes tipo de bordas. No que segue, derivamos o espectro de energias e os estados eletrônicos para nanofitas do tipo armchair [38].

2.2.2 Nanofitas armchair no limite de Dirac

O Hamiltoniano de Dirac em torno dos pontos \vec{K} e \vec{K}' , respectivamente, são

$$\mathcal{H}_{\vec{K}} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.57)$$

$$\mathcal{H}_{\vec{K}'} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x + ik_y \\ k_x - ik_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

As funções de onda, no espaço real, para as subredes A e B, respectivamente, são

$$\Psi_A(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\psi_A(\vec{r}) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}}\psi'_A(\vec{r}), \quad (2.59)$$

$$\Psi_B(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\psi_B(\vec{r}) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}}\psi'_B(\vec{r}) \quad (2.60)$$

Suponhamos que a nanofita tenha espessura W e seja infinita na direção x , como mostrado na Fig. 13. Nesse caso, a solução mais geral tem a forma $\psi(x, y) = \phi(y)\exp(ik_x x)$,

onde $\phi(y)$ é um espinor de duas componentes: $\phi_A(y)$ e $\phi_B(y)$. Assim, a equação de Dirac, em torno do ponto \vec{K} , toma a forma

$$\begin{pmatrix} 0 & k_x - \partial_y \\ k_x + \partial_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} \phi_A(y) \\ \phi_B(y) \end{pmatrix}, \quad (2.61)$$

onde $\epsilon = E/\hbar v_F$. A equação acima dá origem a duas equações acopladas, assim como no caso de uma folha de grafeno infinita, que geram as duas equações

$$\partial_y^2 \phi_B = -(\epsilon^2 - k_x^2) \phi_B, \quad (2.62)$$

$$\phi_A = \frac{1}{\epsilon} (k_x - \partial_y) \phi_B. \quad (2.63)$$

As soluções para ϕ_B e ϕ'_B , são encontradas facilmente

$$\phi_B = Ae^{ik_n y} + Be^{-ik_n y}, \quad (2.64)$$

$$\phi'_B = Ce^{ik_n y} + De^{-ik_n y}, \quad (2.65)$$

onde $k_n = \sqrt{\epsilon^2 - k_x^2}$. As condições de contorno nas bordas da nanofita, localizadas em $y = 0$ e em $y = W$, são

$$\Psi_A(y = 0) = \Psi_A(y = W) = \Psi_B(y = 0) = \Psi_B(y = W) = 0, \quad (2.66)$$

desde que sítios de ambas as subredes estão presentes em ambas as bordas para a nanofita em questão.

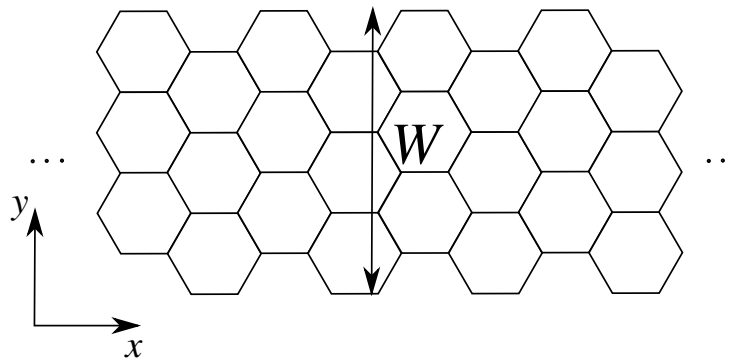


Figura 13: Nanofita armchair com espessura W . O sistema é considerado infinito na direção x , enquanto possui um número finito de linhas de átomos na direção y .

As condições de contorno juntamente com a Eq. (2.59) e Eq. (2.60) resumem-se a

$$\phi_\mu(0) + \phi'_\mu(0) = 0, \quad (2.67)$$

$$e^{-iKW/\sqrt{3}}\phi_\mu(W) + e^{iKW/\sqrt{3}}\phi'_\mu(W) = 0, \quad (2.68)$$

onde $\mu = A, B$ e $K = 2\pi/3a$, de acordo com Eq. (2.3). Assim, utilizando a Eq. (2.64) e Eq. (2.65), obtem-se

$$0 = A + B + C + D \quad (2.69)$$

$$0 = Ae^{i(k_n - K/\sqrt{3})W} + Be^{-i(k_n + K/\sqrt{3})W} + Ce^{i(k_n + K/\sqrt{3})W} + De^{-i(k_n - K/\sqrt{3})W}. \quad (2.70)$$

As condições de contorno são satisfeitas com as escolhas: $A = -D$ e $B = C = 0$. Tais valores levam a $\sin[(k_n - K/\sqrt{3})W] = 0$, de forma que

$$\epsilon = \pm\sqrt{k_x^2 + k_n^2}, \quad (2.71)$$

$$\Psi_n(\vec{r}) = A \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_n} \end{pmatrix} e^{i(k_x + K)x} \sin\left(\frac{n\pi}{W}y\right), \quad (2.72)$$

onde $k_n = n\pi/W + K/\sqrt{3}$, $\theta_n = \arctan(k_n/k_x)$ e $\Psi_n = (\Psi_A \ \Psi_B)^T$. É interessante notar que a escolha $B = -C$ e $A = D = 0$, também satisfaz as condições de contorno. Porém, nesse caso, encontramos $\sin[(k_n + K/\sqrt{3})W] = 0$, que leva a $k_n = n\pi/W - K/\sqrt{3}$. Dessa forma, o espectro de energias é diferente daquele correspondente ao primeiro caso, ambos apresentando um comportamento semicondutor. O gap pode ser calculado tomando a diferença de energia entre as bandas de condução e de valência para $k_x = 0$ e assume um valor proporcional a $1/W$, enfatizando o fato de que o mesmo decresce com o aumento da espessura da nanofita, tendendo a zero no caso de uma folha infinita.

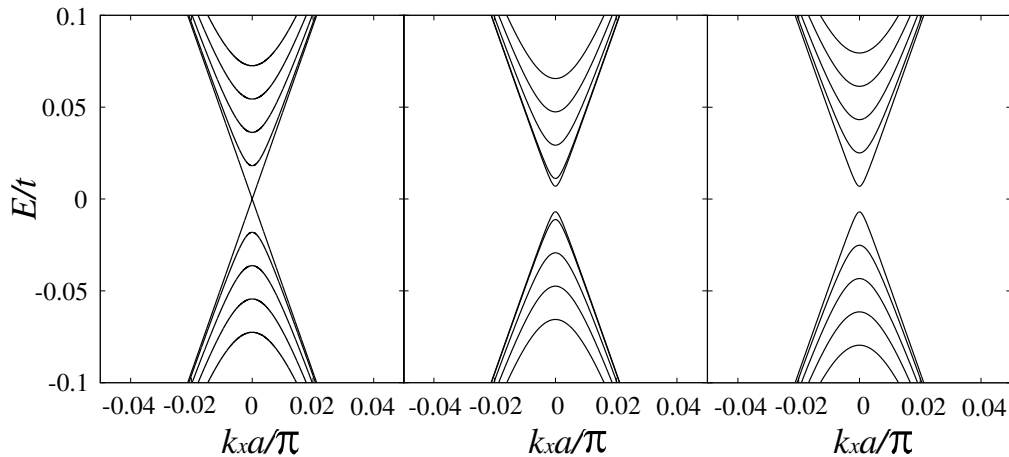


Figura 14: Espectro de energias para nanofitas armchair com diferentes espessuras no limite de Dirac, com $N = 299$ (esquerda), 300 (meio) e 301 (direita), respectivamente.

Um terceiro caso pode ser obtido observando que, como discutido na seção 2.2.1, nanofitas com espessura tais que $N = 3M - 1$, com $M = 1, 2, \dots$, apresentam comportamento metálico. Assim, podemos escrever para o caso metálico: $k_n = n\pi/W$, com n inteiro.

Os espectros de energia para os três casos possíveis, no limite de Dirac, para nanofitas armchair são apresentados na Fig. 15. Vale a pena notar que, para as três relações de dispersão apresentadas, o estado eletrônico, correspondente ao modo n , Eq. (2.72), mantém a mesma forma (a diferença vem somente através de k_n).

2.2.3 Tunelamento de Klein em uma nanofita armchair

Consideremos agora uma barreira de potencial de comprimento D e intensidade V em uma nanofita armchair. Discutiremos os efeitos causados na probabilidade de transmissão pela introdução de bordas armchair no sistema da seção 2.1.4.

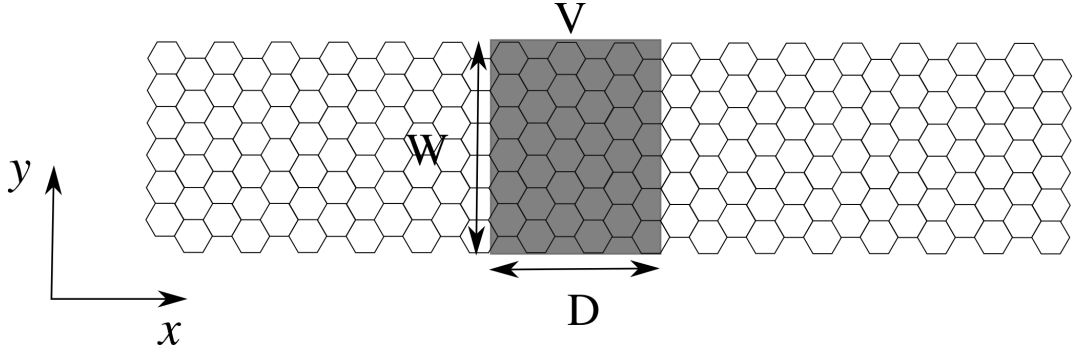


Figura 15: Barreira de potencial quadrada de comprimento D e intensidade V em uma nanofita armchair de espessura W , considerada infinita na direção x .

O sistema é esquematizado na Fig. 14. Admitindo que a barreira de potencial ocupa o intervalo $0 < x < D$, exigimos as condições de continuidade dos espinores, Eq. (2.72), nas interfaces entre a barreira e a nanofita, como anteriormente.

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi_n} \end{pmatrix} \sin\left(\frac{n\pi}{W}y\right) + \sum_m r_{nm} \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi_m} \end{pmatrix} \sin\left(\frac{m\pi}{W}y\right) = \\ \sum_m \left[a_{nm} \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta_m} \end{pmatrix} + b_m \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta_m} \end{pmatrix} \right] \sin\left(\frac{m\pi}{W}y\right), \end{aligned} \quad (2.73)$$

$$\begin{aligned} \sum_m \left[a_{nm} \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{iq_m D} + b_{nm} \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-iq_m D} \right] \sin\left(\frac{m\pi}{W}y\right) = \\ \sum_m t_{nm} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} \sin\left(\frac{m\pi}{W}y\right), \end{aligned} \quad (2.74)$$

onde r_{nm} e t_{nm} ⁴ referem-se aos coeficientes de reflexão e de transmissão do modo n ao

⁴Por comodidade, consideramos $t_{nm}e^{ik_x D} \rightarrow t_{nm}$ [veja Eq. (2.38)].

modo m , respectivamente. Os parâmetros ϕ_n e θ_n , são tais que

$$\phi_n = \arctan\left(\frac{k_n}{k_x}\right), \quad \theta_n = \arctan\left(\frac{k_n}{q_n}\right), \quad (2.75)$$

com $q_n = \sqrt{(E - V)^2/(\hbar v_F)^2 - k_n^2}$ e $k_x = \sqrt{E^2/(\hbar v_F)^2 - k_n^2}$. As somas sobre todos os modos possíveis, \sum_m , podem ser eliminadas através das propriedades de ortogonalidade da função seno.

$$\frac{2}{W} \int_0^W \sin\left(\frac{n\pi}{W}y\right) \sin\left(\frac{m\pi}{W}y\right) dy = \delta_{nm}. \quad (2.76)$$

Assim, as equações (2.73) e (2.74) assumem a forma

$$\begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi_n} \end{pmatrix} + r_n \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi_n} \end{pmatrix} = a_n \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta_n} \end{pmatrix} + b_n \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta_n} \end{pmatrix}, \quad (2.77)$$

$$a_n \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta_n} \end{pmatrix} e^{iq_n D} + b_n \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta_n} \end{pmatrix} e^{-iq_n D} = t_n \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi_n} \end{pmatrix}, \quad (2.78)$$

onde $r_n = r_{nn}$ e $t_n = t_{nn}$, desde que as deltas, δ_{nm} , exigem que um modo pode transmitir ou refletir somente para ele mesmo. As equações acima tem o mesmo formato que as equações (2.37) e (2.38) e, portanto, o coeficiente e a probabilidade de transmissão são dados por

$$t_n = \frac{1}{\cos(q_n D) + i \sin(q_n D) [\tan(\theta_n) \tan(\phi_n) - s' s \sec(\theta_n) \sec(\phi_n)]}, \quad (2.79)$$

$$T_n = \frac{1}{\cos(q_n D)^2 + \sin(q_n D)^2 [\tan(\theta_n) \tan(\phi_n) - s' s \sec(\theta_n) \sec(\phi_n)]^2}. \quad (2.80)$$

Figura 16 apresenta as probabilidades de transmissão como função da intensidade da barreira de potencial V , cuja espessura é tomada como $D = 22.72$ nm, para os quatro primeiros modos em uma nanofita armchair metálica de espessura $W = 110.48$ nm, para elétrons de energia $E = 0.09$ eV.

A transmissão apresenta um perfil geral oscilatório para $n \neq 0$, com valor máximo ($T = 1$) para $q_n D = N\pi$, com $N = 0, 1, 2, \dots$, como no caso anterior. Mais ainda, os mínimos de transmissão decrescem com o aumento da intensidade da barreira de potencial e tendem a ficar constantes para valores de V específicos que dependem o modo em questão (para $n = 3$, por exemplo, os mínimos tendem a valores constantes para $V \approx 0.17$ eV, como mostra a Fig. 16).

É importante observar que os valores de potencial utilizados na Fig. 16 são tais que

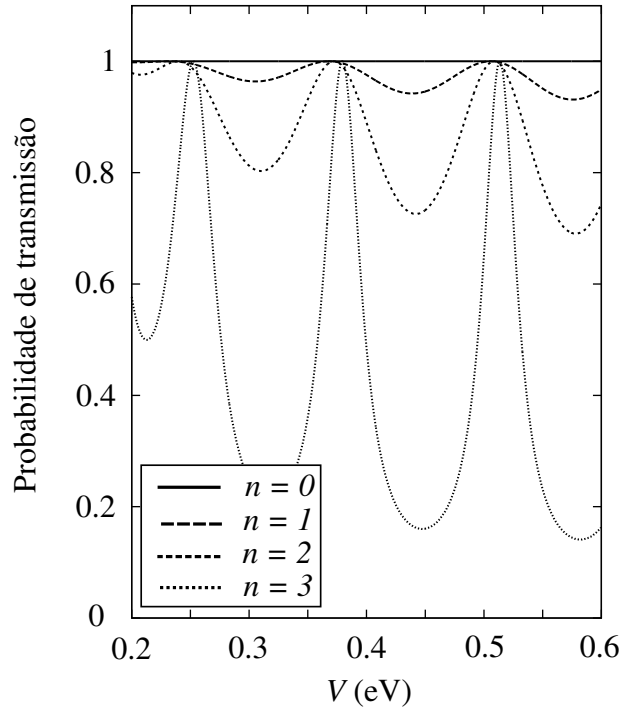


Figura 16: Probabilidade de transmissão em função do potencial para uma nanofita armchair metálica. As várias curvas correspondem às transmissões dos diferentes modos (correspondentes aos diferentes valores de n).

$V > E$. O coeficiente de transmissão para a condição de ressonância é $t_n = (-1)^N = e^{-iq_n D}$, com $N = 0, 1, 2, \dots$. Além disso, observa-se que a transmissão do modo $n = 0$ é 100% eficiente, não importante as dimensões da barreira de potencial. O coeficiente de transmissão, para esse caso, é $t_0 = \exp(-iq_0 D)$, onde o número q_0 não guarda informação sobre a espessura da nanofita para, ao contrário dos casos $n \neq 0$ onde os mínimos de transmissão são alterados com a mudança de W . De um ponto de vista matemático, podemos entender tal comportamento de uma maneira bem simples: A dependência em W , para uma nanofita metálica, vem na forma $k_n = n\pi/W$, de forma que a probabilidade de transmissão é independente da espessura da nanofita para $n = 0$ e não para os casos restantes.

Consequências interessantes surgem quando analisamos a transmissão em nanofitas armchair semicondutoras. Para tais casos $k_n = n\pi/W \pm K/\sqrt{3}$ e, portanto, $k_n \neq 0$, para todos os modos possíveis. Assim, T_n apresenta um perfil oscilante mesmo para o modo $n = 0$, em contraste com o caso metálico. Portanto, a probabilidade de transmissão de nanofitas armchair semicondutoras através de uma barreira de potencial depende fortemente da espessura da mesma. O perfil oscilante, para o caso em questão, também apresenta ressonâncias para $q_n D = N\pi$, com $N = 0, 1, 2, \dots$, como pode ser observado através de Eq. (2.80), onde o coeficiente de transmissão, Eq. (2.79), se resume a $t_n = e^{-iq_n D}$.

Concluimos que a transmissão através de uma barreira de potencial em uma nanofita armchair metálica é independente da espessura do sistema e das dimensões da barreira para o modo $n = 0$, enquanto que depende fortemente das dimensões envolvidas no sistema para todos os outros casos e, da mesma forma de no caso do tunelamento em uma monocamada de grafeno, a função de onda final, para transmissão 100% eficiente, ganha uma fase que depende dos parâmetros que definem a barreira.

2.3 Anéis quânticos de grafeno

As propriedades advindas da natureza ondulatória dos elétrons vem mostrando sua importância em nanodispositivos eletrônicos. Em particular, a coerência de fase da função de onda eletrônica é de grande importância para dispositivos baseados em interferência quântica [39]. Assim, os anéis quânticos constituem uma classe importante de sistemas de baixa dimensionalidade onde a interferência quântica pode ser observada experimentalmente. Tais sistemas, que tem sido estudados no contexto de semicondutores, ambos teoricamente e experimentalmente, podem ser facilmente produzidos através de CVD, como apresentado anteriormente no contexto do grafeno, Fig. 6(e)-(i).

Os estados eletrônicos de anéis quânticos de grafeno dependem fortemente da geometria e dos diferentes tipos de bordas que o mesmo pode possuir. Como consequência, estudos teóricos direcionados a tais sistemas tem como base o modelo tight-binding, que não permite encontrar soluções analíticas para as autoenergias e autoestados do sistema [40]. Entretanto, um modelo simples permite a obtenção de expressões analíticas para os níveis de energia e também a descrição de alguns aspectos físicos de anéis quânticos de grafeno sem a adição de complicações advindas das bordas e da espessura de tais anéis [41]. O bom acordo entre o modelo simplificado e o modelo tight-binding, para anéis com bordas e geometrias específicas, é discutido com mais detalhes em [42]. No que segue, descrevemos o modelo analítico para anéis quânticos de grafeno.

2.3.1 Modelo simplificado para anéis quânticos de grafeno

A dinâmica dos portadores de carga no grafeno, no limite de baixas energias, pode ser descrita através do Hamiltoniano de Dirac

$$\mathcal{H} = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}. \quad (2.81)$$

Consideremos agora, como modelo simplificado, um anel circular unidimensional de raio R cujos estados eletrônicos são autoestados do Hamiltoniano (2.81). Tal Hamiltoniano pode ser reescrito em coordenadas polares como

$$\mathcal{H} = -i\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \Pi^* \\ \Pi & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.82)$$

com $\Pi = e^{i\phi}[\partial/\partial\phi + (i/r)\partial/\partial r]$. Desde que o anel é assumido unidimensional, o momento radial deve ser nulo. Portanto, da definição do operador momento radial em coordenadas cilíndricas

$$\vec{p}_r = \frac{1}{2}(\vec{p} \cdot \hat{r} + \hat{r} \cdot \vec{p}) = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2R}, \quad (2.83)$$

onde \vec{r} é o vetor unitário na direção radial e R é o raio do anel, obtemos, no limite $\hat{p}_r \rightarrow 0$ e $r \rightarrow R$, $\partial/\partial r \rightarrow -1/2R$ [42]. Assim,

$$\mathcal{H} = i\frac{\hbar v_F}{R} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi}(1/2 + i\partial/\partial\phi) \\ e^{i\phi}(1/2 - i\partial/\partial\phi) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.84)$$

Os autoestados e as autoenergias do Hamiltoniano (2.84), que são encontrados facilmente, são

$$\Psi_n(\phi) = \begin{pmatrix} A_n e^{in\phi} \\ iB_n e^{i(n+1)\phi} \end{pmatrix}, \quad (2.85)$$

$$E_n = \pm \frac{\hbar v_F}{R} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.86)$$

respectivamente, onde $n = 0, 1, 2, \dots$ e A_n e B_n são constantes. Na presença de um campo magnético perpendicular ao plano do anel os níveis de energia são tais que podem ser obtidos, a partir da Eq. (2.86), fazendo $n \rightarrow n + \Phi/\Phi_0$, onde Φ é o fluxo magnético no anel e $\Phi_0 = h/e$ é quantum de fluxo magnético. Tal resultado pode ser entendido através da condição de quantização da mecânica quântica antiga

$$\oint pdq = nh, \quad (2.87)$$

onde $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e a integração, para nosso caso específico, é feita em torno do anel. Dessa forma, podemos escrever

$$\int_0^{2\pi} kRd\theta = 2\pi n + \gamma, \quad (2.88)$$

sendo γ um fator de fase. Para o caso do grafeno, $\gamma = \pm\pi \pm 2\pi\Phi/\Phi_0$, correspondendo a soma da fase de Berry, devido a rotação de 2π do pseudoespinor em torno do circuito, com a fase de Aharanov-Bohm, $2\pi\Phi/\Phi_0$, devido ao fluxo magnético no anel. Os sinais \pm

dependem da orientação com que o circuito é percorrido.

Sendo kR constante no circuito com $k = E_n/\hbar v_F$, encontramos os níveis de energia dados pela Eq. (2.86) com $n \rightarrow n + \Phi/\Phi_0$. O mesmo resultado pode ser encontrado de maneira mais rigorosa através de resolução da equação de Dirac, Eq. (2.81), na presença de um campo magnético, que corresponde a substituição $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$, sendo \vec{A} o potencial vetor que corresponde a um campo magnético perpendicular ao anel.

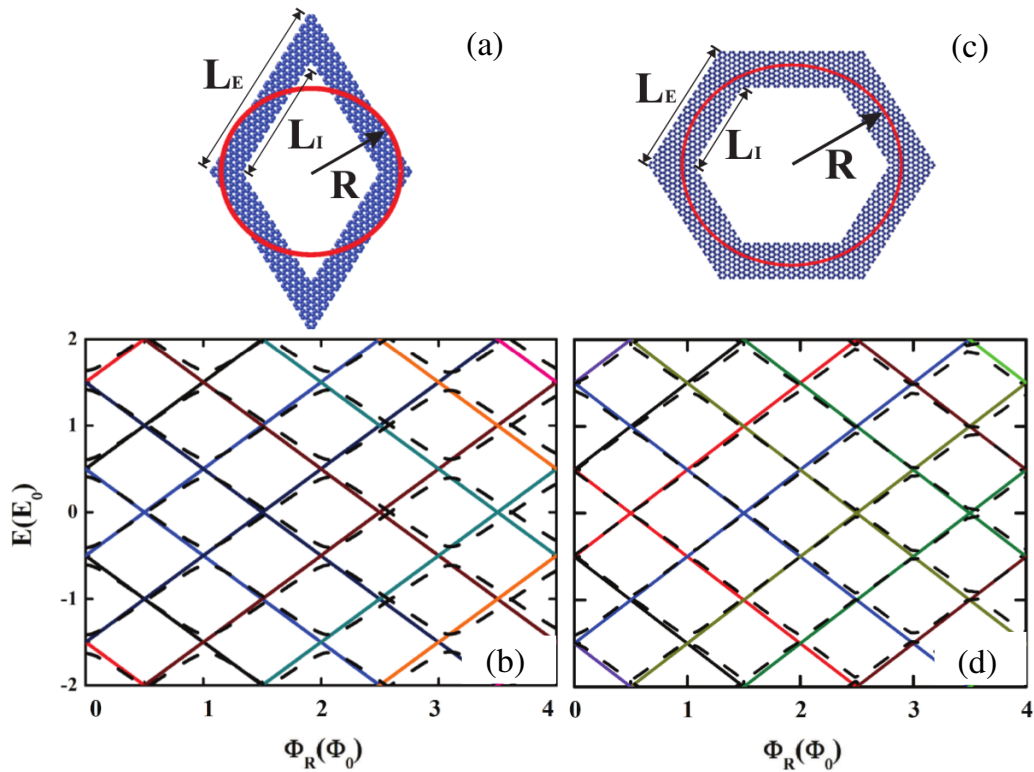


Figura 17: Anéis quânticos (a) losangular ($L_E = 6.9$ nm e $L_I = 4.9$ nm) e (a) hexagonal ($L_E = 6.1$ nm e $L_I = 4.1$ nm), ambos com bordas armchair, juntamente com um anel unidimensional de raio (a) 3.2 nm e (b) 4.7 nm, respectivamente. (b) e (d) Espectro de energias obtido do modelo simplificado (curvas solidas) e do modelo tight-binding (curvas tracejadas), para os sistemas das figuras (a) e (b), respectivamente [42].

Pela Eq. (2.86) observa-se que os níveis de energia são igualmente espaçados e dependem inversamente do raio do anel, mesmo na presença de uma campo magnético. A comparação entre tais resultados e àqueles obtido através do modelo tight-binding para anéis de pequena espessura mostra uma concordância para alguns sistemas com geometrias específicas. Figura 17 apresenta uma comparação entre o espectro de energia para anéis quânticos losangulares e hexagonais, calculado a partir do modelo tight-binding, e o de um anel unidimensional cujo raio, para o caso da geometria hexágona, é dado por

$$R = \sqrt{\frac{3\sqrt{3}}{2\pi}} \left(\frac{L_E + L_I}{2} \right), \quad (2.89)$$

onde L_E e L_I são definidos de acordo com a Fig. 17. Em geral, R é o raio da circunferência cuja área é igual a de um hexágono, ou losango, cujo lado é dado por $(L_E + L_I)/2$.

É importante observar que a comparação entre os modelos tight-binding e o analítico, apresentada na Fig. 17, é feita no contexto de anéis quânticos cujas espessuras dos braços são pequenas comparadas ao tamanho da estrutura. Para anéis mais largos, existe uma forte dependência entre a energia e o campo magnético [42], levando a divergências entre os dois modelos. Anéis com bordas zigzag apresentam estados de borda e não são bem descritos a partir do modelo apresentado. Assim, é importante observar que a natureza armchair das bordas do sistema tem um caráter crucial na concordância entre os resultados, desde que, devido a ausência de estados de borda, elétrons tendem a ficar no meio dos braços do anel, que corresponde a uma localização no perímetro de um anel unidimensional cujo raio é dado pela Eq. (2.89), no caso da geometria hexagonal.

3 TRANSPORTE ELETRÔNICO EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

A natureza ondulatória dos elétrons é comumente manifestada através do transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos. Os últimos são sistemas cujas dimensões estão entre as escalas microscópicas e macroscópicas. Em particular, é esperado que o transporte em nanoestruturas de grafeno, tais como nanofitas e anéis quânticos, apresente propriedades peculiares devido ao comportamento "ultrarelativístico" dos portadores de carga no regime de baixas energias. Neste capítulo introduziremos um método para a descrição do transporte eletrônico, conhecido como formalismo de Landauer, no qual a corrente é expressa através da probabilidade de transmissão do dispositivo.

3.1 Transporte balístico

Em geral, uma amostra relativamente grande de um semicondutor convencional não é livre de impurezas e de defeitos. Dessa forma, a aplicação de uma voltagem em tais sistemas induz uma corrente que consiste em elétrons atravessando o material em um regime difusivo [Fig. 18(a)]. A partícula colide várias vezes, ao longo do material, com quaisquer tipos de centros espalhadores que possa encontrar pelo caminho. Assim, podemos definir um dos parâmetros físicos mais importantes para a descrição da qualidade de uma amostra de um material semicondutor: o comprimento de espalhamento, ℓ_e . Também conhecido como livre caminho médio, ℓ_e é a distância média entre os centros espalhadores distribuídos aleatoriamente em um material, tais como impurezas, defeitos de rede, e fônons. De uma maneira mais rigorosa, o livre caminho médio é a distância que o elétron percorre antes que seu momento inicial seja completamente alterado como consequência do espalhamento.

A resistência elétrica de uma material está diretamente relacionada ao livre caminho

médio. No silício, por exemplo, $\ell_e \approx 1$ nm, de forma que, em uma amostra relativamente grande do material, os elétrons encontram um grande número de centros espalhadores ao atravessar o mesmo. Nesse sentido, o material apresenta um comportamento Ôhmico, onde a resistência pode ser escrita em termos da resistividade do material.

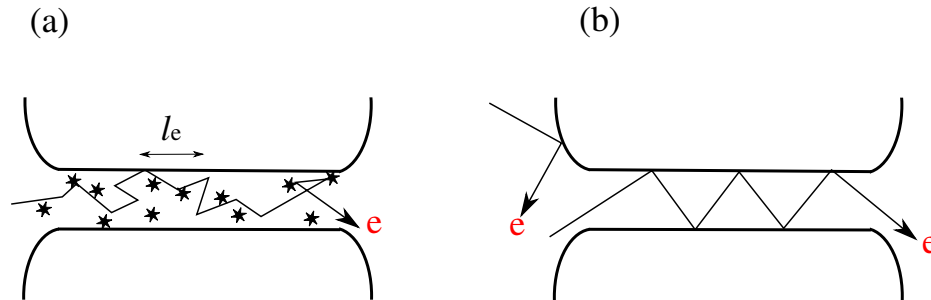


Figura 18: (a) Transporte difusivo e (b) transporte balístico.

Os avanços tecnológicos, nas últimas décadas, tem permitido a fabricação de dispositivos cujas dimensões são menores que ℓ_e . Dessa forma, os elétrons são espalhados apenas pelos contornos do sistema, comportando-se como bolas de bilhar [Fig. 18(b)]. Nesse regime de transporte, conhecido como balístico, a condução não depende das propriedades de espalhamento mas somente da estrutura de bandas e da geometria do sistema [43]. Por não existirem processos de espalhamento, a não ser com as bordas do sistema, muitos acreditaram que não deveria existir resistência em um dispositivo balístico, levando a uma resistividade nula. Entretanto, percebeu-se que as propriedades de transporte em tais sistemas são completamente diferentes daquelas presentes em dispositivos Ôhmicos. Propriedades locais, tais como resistividade e condutividade, não podem ser definidas nesse contexto. Somente propriedades não locais, tais como resistência e condutância, levam a uma descrição que está de acordo com os resultados experimentais.

Em particular, devido ao caráter "ultrarelativístico" dos portadores de carga de baixas energias no grafeno, o *zitterbewegung* atua como uma desordem intrínseca, levando a um regime de transporte pseudodifusivo, onde, mesmo na ausência de quaisquer processos de espalhamento (regime balístico), existe uma condutividade mínima da ordem de e^2/h [44].

Além do livre caminho médio, ℓ_e , existem outros comprimentos relevantes para a descrição do transporte quântico. O comprimento de relaxação de fase, ℓ_ϕ , é a distância média que o elétron percorre antes que a fase inicial de sua função de onda seja alterada. Em geral $\ell_e < \ell_\phi$, de forma que um regime de transporte entre o difusivo e o balístico pode

ser introduzido. No regime de transporte difusivo quântico as dimensões do dispositivo são maiores que ℓ_e , mas menores que ℓ_ϕ . Assim, o momento dos portadores de carga de carga são distribuídos ao acaso, enquanto que a fase inicial é conservada. Assim como em ótica, coerência de fase dá origem a efeitos de interferência quântica que resultam no controle da condução no dispositivo.

Uma vez que a resistência de um semiconductor macroscópico está diretamente ligada ao número de centros espalhadores no sistema, é natural questionar se um dispositivo balístico, no qual, por definição, os portadores de carga não são espalhados por defeitos, impurezas ou fônons, deveria apresentar alguma resistência. De fato, para um condutor macroscópico, a condutância é dada por

$$G = \sigma \frac{W}{L}, \quad (3.1)$$

onde L e W são as dimensões de um condutor bidimensional de acordo com a Fig. 19 e σ é a condutividade do material. Se tal comportamento ôhmico fosse válido para L tendendo a valores cada vez menores, então esperaríamos um crescimento indefinido para a condutância ou, de forma análogo, uma resistência, $R = 1/G$, cada vez mais próxima de zero.

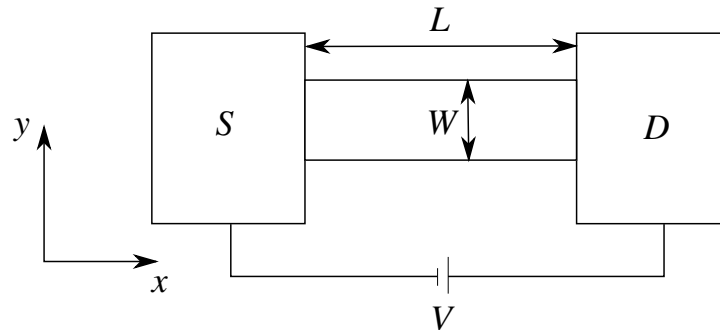


Figura 19: Um condutor bidimensional de comprimento L e espessura W conectado a dois contatos (S e D) aos quais é imposto uma diferença de potencial V .

Experimentalmente, observa-se que a condutância tende a um valor fixo quando L torna-se muito menor que o caminho livre médio. Portanto, a conclusão é que realmente existe uma resistência elétrica não nula em dispositivos balísticos e que o comportamento ôhmico não é mais válido em tais escalas, levando a existência de novas propriedades de transporte. O formalismo mais comumente usado para descrever as novas propriedades relacionadas ao transporte eletrônico em tais escalas (mesoscópicas) é conhecido como o formalismo de Landauer. Nas próximas seções discutiremos brevemente alguns aspectos importante de tal formalismo.

3.2 A formula de Landauer

Considere um dispositivo de forma arbitrária, representado por um quadrado na Fig. 20, conectado a dois reservatórios de elétrons (contatos), S e D , através de dois conectores. Se os potenciais químicos dos reservatórios, μ_1 e μ_2 , forem feitos distintos, que pode ser alcançado facilmente através da aplicação de uma diferença de potencial $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$ por uma bateria, o sistema entrará em desequilíbrio e uma corrente I pode ser detectada através dos contatos. O problema fundamental é relacionado ao cálculo do valor da corrente.

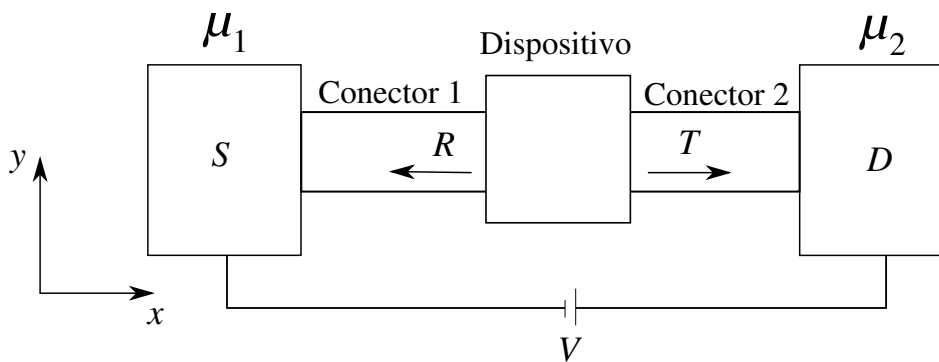


Figura 20: Um dispositivo acoplado a dois contatos (S e D) através de dois conectores. A aplicação de uma diferença de potencial, $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$, faz com que os elétrons atravessem o dispositivo, com probabilidade T , gerando uma corrente elétrica.

Os conectores são basicamente fios quânticos ideais. Dessa forma, o confinamento na direção y leva a uma quantização da componente do vetor de onda nessa direção, $k_y = k_n$ (seção 2.2.2 apresenta um exemplo claro no contexto do grafeno). Assim, o estado em um dado conector é a superposição de todos os modos possíveis

$$\Psi = \sum_n c_n e^{iq_n x} \Lambda_n(y), \quad (3.2)$$

onde q_n é a componente do vetor de onda na direção x para uma dada energia E . As funções Λ_n , satisfazem as condições de contorno impostas pelo confinamento na direção y e são ortonormais: $\int_0^W \Lambda_n^* \Lambda_{n'} dy = \delta_{n,n'}$ ¹. Os coeficiente c_n são números complexos.

A aplicação de uma voltagem V entre os contatos faz com que os portadores de carga desloquem-se para regiões de menor potencial químico (admitindo que $\mu_1 > \mu_2$, de S para D). Dessa forma, admitindo que a probabilidade de transmissão através do dispositivo seja T , a corrente elétrica pode ser calculada através da corrente de probabilidade dos estados no conector 2 (Somente os elétrons que são transmitidos contribuem para a corrente).

¹Para uma nanofita de grafeno com bordas armchair, por exemplo, $\Lambda_n = \sqrt{2/W} \sin(n\pi y/W)$

A corrente total é a soma das correntes de cada modo. Assim, para a corrente devido a transmissão do modo n , no conector 1, para o modo m , no conector 2, segue

$$J_{n \rightarrow m} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi_m^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_m \right), \quad (3.3)$$

onde Im refere-se à parte imaginária. Assim, desde que

$$\psi_m = t_{nm} e^{iq_m} \Lambda_m(y), \quad (3.4)$$

onde t_{nm} é o coeficiente de transmissão no modo n para o modo m , tem-se

$$J_{n \rightarrow m} = \frac{q_m \hbar}{m} t_{nm} t_{nm}^* \Lambda_m(y) \Lambda_m^*(y). \quad (3.5)$$

A corrente elétrica é $I_{n \rightarrow m} = e \int_0^W J_{n \rightarrow m} dy$, onde e é a carga elétrica. Portanto, devido à ortonormalização dos Λ 's, temos

$$I_{n \rightarrow m} = e \frac{q_m \hbar}{m} T_{nm}. \quad (3.6)$$

Desde que $k_m \hbar / m = (1/\hbar)(\partial E / \partial q_m)$ e assumindo que os portadores de carga são fermions e, portanto, devemos multiplicar o resultados por 2 (devido a contribuição do spin), temos

$$I_{n \rightarrow m} = \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial q_m} T_{nm}. \quad (3.7)$$

A corrente total é dada pela soma das correntes de todos os modos, no conector 1, para todos os outros modos no conector 2 : $I = \sum_n \sum_m I_{n \rightarrow m}$. Assumindo condições de contorno periódicas na direção x podemos converter a soma em q_m (\sum_m) em uma integral $\int dq_m / 2\pi$. Logo

$$I = \sum_n \frac{2e}{\hbar} \int dq_m \frac{\partial E}{\partial q_m} T_n \longrightarrow I = \sum_n \frac{2e}{\hbar} \int_{\mu_2}^{\mu_1} T_n dE. \quad (3.8)$$

Assumindo que T_n seja aproximadamente constante sobre o intervalo $\mu_1 - \mu_2$, temos

$$I = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n \left(\frac{\mu_1 - \mu_2}{e} \right) \longrightarrow I = \left(\frac{2e^2}{h} \sum_n T_n \right) V, \quad (3.9)$$

sendo V a diferença de potencial entre os contatos. O fator de proporcionalidade entre I e V é a condutância

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n. \quad (3.10)$$

A Eq. (3.10), conhecida como a fórmula de Landauer, permite a análise das propri-

idades de transporte de sistemas mesoscópicos através de cálculo de transmissões. Em particular, para um fio quântico balístico [Fig. 19], a transmissão é 100% eficiente, ou seja $T_n = 1$. A condutância é, portanto

$$G = \frac{2e^2}{h}M, \quad (3.11)$$

onde M é o número total de modos transversais ocupados no canal. Assim, guias de onda de elétrons, possuem resistência não nula mesmo na ausência de impurezas, fônons e defeitos de rede. Tal resistência, conhecida como resistência de contato, tem origem nas reflexões que surgem quando o pequeno número de modos transversais no guia de onda é combinado com o gigantesco número de modos dos contatos [45].

A quantização da condutância, Eq. (3.11), foi demonstrada experimentalmente no contexto de contatos de ponto quânticos². Para um fio quântico de espessura W razoavelmente grande, o número de modos propagantes pode ser escrito como $M = k_f W/\pi$, onde k_f é o vetor de onda de fermi. Assim, o número de modos é proporcional à espessura do sistema. Os resultados experimentais em semicondutores foram publicados em 1988 [46]. Os contatos de ponto quânticos foram utilizado para criar uma constrição. Dessa forma, o decrescimo da espessura W da constrição levava a um decrescimo na condutância em passos discretos de altura $2e^2/h$. Isso é exatamente o que se espera de Eq. (3.11), desde que M é um inteiro. Embora W varie continuamente o número de modos M varia em passos discretos.

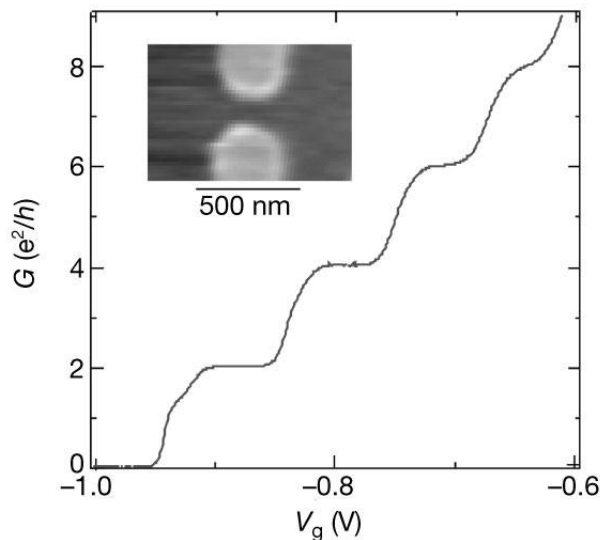


Figura 21: Condutância de uma constrição, destacada no canto superior esquerdo da figura, como função de sua espessura (controlada por uma voltagem) V_g [47].

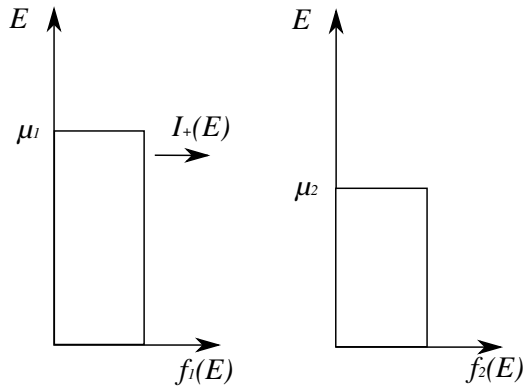
²Quantum point contacts (QPC)

O resultado apresentado em Fig. 21 não somente demonstra a existência de uma resistência de contato mas também que condução é transmissão. Além disso, enfatiza a realidade dos modos transversais no contexto de condutores de pequenas espessuras.

3.3 Condutância para temperatura não nula

A derivação da formula de Landauer, Eq. (3.10), foi simplificada pela consideração do caso de temperatura nula, $\mathcal{T} = 0$ K. Para temperaturas não nulas, a distribuição dos elétrons nos dois contatos é alterada de acordo com a dependência da distribuição de Fermi-Dirac, $f_i(E) = (1 + \exp((E - \mu_i)/k_B\mathcal{T}))^{-1}$, com a temperatura.

(a) $T = 0$ K



(b) $T \neq 0$ K

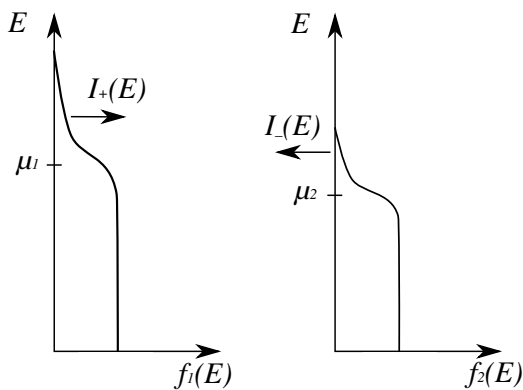


Figura 22: Distribuição de energias dos contatos 1 (esquerda) e 2 (direita) para (a) $\mathcal{T} = 0$ K e (b) $\mathcal{T} \neq 0$ K.

Para derivarmos a expressão da corrente dependente da temperatura, devemos primeiramente entender o mecanismo básico por trás do transporte eletrônico. Assim, tomemos primeiramente o caso $\mathcal{T} = 0$ K. A distribuição dos elétrons nos dois reservatórios é repre-

sentada ena Fig. 22(a). Como enfatizado anteriormente, a aplicação de uma voltagem V , que corresponde a uma diferença de potencial químico entre os reservatórios, causa um desequilíbrio no sistema fazendo com que exista um fluxo líquido de partículas da região de maior potencial químico para a de menor. Numa situação de equilíbrio $\mu_1 = \mu_2$, que corresponderia a $V = 0$, não existiria uma corrente líquida através do sistema: O fluxo de partículas de S para D seria balanceado pelo fluxo de D para S . De fato, mesmo na situação $\mu_1 > \mu_2$, haveria uma compensação das contribuições para $E < \mu_2$ em ambos os reservatórios, de forma que a contribuição líquida, não balanceada, seria devido somente aos valores de energia no range $\mu_2 < E < \mu_1$.

Matematicamente, podemos reescrever a Eq. (3.8) de forma a levar em consideração os fluxos dos contatos 1 para o 2 e do contato 2 para o 1.

$$I = \frac{2e}{h} \int_0^{\mu_1} T(E) f_1(E) dE - \frac{2e}{h} \int_0^{\mu_2} T(E) f_2(E) dE, \quad (3.12)$$

onde $T(E) = \sum T_n(E)$. As transmissões que aparecem nas integrais ³, para um sistema com apenas dois conectores, são iguais (Assumindo que não existam espalhamentos inelásticos dentro do dispositivo[48]). Assim, de uma forma geral, levando em conta as contribuições das correntes para ambos os conectores, temos

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) [f_1(E) - f_2(E)] dE. \quad (3.13)$$

Portanto, observando que a função de Fermi para $\mathcal{T} = 0$ K tem a forma da função escada [Fig. 22(a)], a diferença $f_1(E) - f_2(E)$ é igual a 1 para $\mu_2 < E < \mu_1$ e zero caso contrário. Dessa forma, recuperamos Eq. (3.8) levando em consideração os fluxos para ambos os reservatórios.

A Eq. (3.13) tem a vantagem de ser válida mesmo para temperaturas não nulas. De fato, a distribuição de fermi de ambos os reservatórios, para esse caso, é esquematizada na Fig. 22(b), onde fica claro que as contribuições de D para S tem papel importante.

Observando que

$$f_1(E) - f_2(E) = - \int_{\mu_2}^{\mu_1} \frac{d}{dE'} f(E - E') dE', \quad (3.14)$$

podemos reescrever a Eq. (3.13) na forma

$$I = \frac{1}{e} \int_{\mu_2}^{\mu_1} G(E') dE', \quad (3.15)$$

³Transmissão de $S \rightarrow D$ na primeira integral e $D \rightarrow S$ na segunda

onde

$$G(E') = -\frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) \frac{d}{dE'} f(E - E') dE. \quad (3.16)$$

Se a função $G(E)$ for independente da energia no intervalo $\mu_2 < E < \mu_1$, Eq. (3.15) leva a $I = GV$, com $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$. Nesse caso, dizemos que a resposta é linear e a condutância é dada por

$$G = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right) dE. \quad (3.17)$$

É importante discutir sobre o limite de validade da Eq. (3.17). A condição para a resposta linear (Eq. (3.16) constante no intervalo de integração da Eq. (3.15)) aparenta não ser aplicável para a maioria dos casos de interesse, desde que, em geral, a transmissão pode variar de maneira arbitrária (dependendo do dispositivo). Para baixas temperaturas quando ℓ_ϕ é suficientemente longo, efeitos de interferência quântica podem levar a um perfil de transmissão com varios picos de ressonância característicos de condutores com multiplas fontes de espalhamento. Dessa forma, a transmissão varia rapidamente com a energia e a função G , Eq. (3.16), pode não ser constante no intervalo desejado. No zero absoluto, por exemplo, a função $-(\partial f/\partial E)$ é uma delta de Dirac. Tal comportamento faz com que Eq. (3.16) resulte em Eq. (3.10), e assim, desde que a transmissão varia rapidamente com a energia, o intervalo $\mu_1 - \mu_2$ teria que ser consideravelmente pequeno para que o integrando em Eq. (3.15) fosse considerado constante. O efeito da tempe-

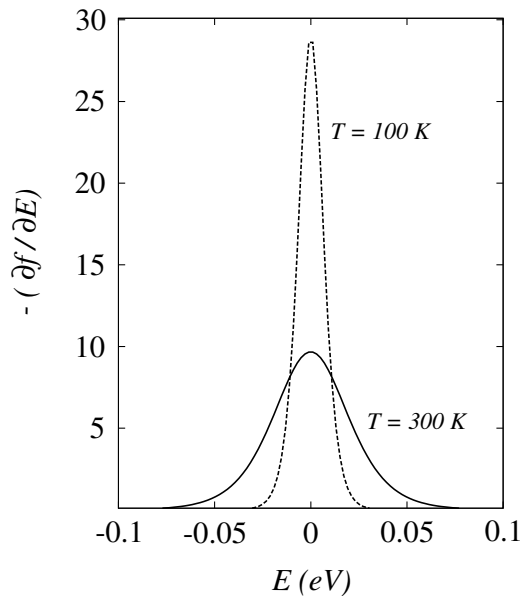


Figura 23: Derivada da função de fermi para $\mathcal{T} = 100$ K (curva tracejada) e $\mathcal{T} = 300$ K (curva contínua).

ratura é "espalhar" a delta de Dirac [Fig. 23] produzindo uma função G mais suave que

varie somente na escala de energia térmica $k_B\mathcal{T}$. Portanto, embora a transmissão oscile rapidamente, a resposta é linear contanto que o intervalo de integração da Eq. (3.15)(ou seja, a voltagem aplicada eV) seja menor que $k_B\mathcal{T}$. De fato, $\mu_1 - \mu_2$ é sempre mantido menor que a energia térmica para assegurar o regime de resposta linear em experimentos mesoscópicos. Para sistemas cuja transmissão já é relativamente "suave", o regime de resposta linear pode ser alcançado para voltagens maiores. Portanto, o critério geral para a resposta linear é que a função obtida pela resolução da integral da transmissão com a derivada da função de fermi, Eq. (3.16), seja constante no intervalo de energia

$$\mu_1 - \mu_2 \ll k_B\mathcal{T} + \epsilon_c, \quad (3.18)$$

onde ϵ_c , conhecida como energia de correlação [48], tem relação com o intervalo de energia no qual a transmissão é razoavelmente constante.

3.4 Matriz de espalhamento

Nas seções anteriores vimos como a corrente pode ser expressa em termos da probabilidade de transmissão. Nesta seção, iremos discutir brevemente a relação entre a função de transmissão e a matriz de espalhamento (matriz S) para condutores coerentes (Aqueles cujas dimensões são menores que ℓ_ϕ , como discutido anteriormente). Um condutor coerente pode ser caracterizado, para uma dada energia, por uma matriz S que relaciona as amplitudes das ondas que deixam a região de espalhamento com àquelas correspondentes às que incidem sobre a mesma. Como exemplo, podemos tomar o caso unidimensional do espalhamento de uma partícula por uma barreira de potencial quadrada. As amplitudes da onda espalhada, $\psi_e = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$, podem ser relacionadas com as amplitudes da onda incidente, $\psi_i = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$, através de uma equação matricial:

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

onde os elementos da matrix de espalhamento, s_{ij} , guardam informação sobre as amplitudes de transmissão e reflexão (no exemplo específico $s_{11} = r$ e $s_{12} = t'$, $s_{21} = t$ e $s_{22} = r'$ com $T = |t|^2$, $R = |r|^2$ as probabilidades de transmissão e reflexão, respectivamente).

Pode-se mostrar que, de forma a assegurar a conservação da corrente, a matrix S tem que ser unitária. Tal propriedade pode ser demonstrada facilmente observando que as correntes que entram e saem da região de espalhamento são proporcionais aos quadrados dos módulos das amplitudes correspondentes [48]. De fato, de acordo com o exemplo dado,

a relação $T + R = 1$ surge naturalmente através da unitariedade da matrix S .

Na prática, o cálculo da matriz S para o caso de espalhamentos múltiplos torna-se complicado. Uma solução para esse problema é dividir a região de espalhamento geral em seções cujas matrizes S_i individuais possam ser calculadas mais facilmente e então combiná-las de forma a obter a matriz S composta. Como exemplo, a matriz de espalhamento para uma barreira de potencial dupla pode ser calculada através de duas matrizes S , cada uma correspondendo a uma única barreira de potencial.

As matrizes de espalhamento individuais são tais que $A_1 = S^{(1)}B_1$ e $A_2 = S^{(2)}B_2$, onde $A_i(B_i)$ são matrizes coluna cujos elementos são as amplitudes das ondas em regiões específicas de acordo com a Eq. (3.19). A matriz S do sistema total é tal que $C = SD$, com C e D representado matrizes coluna cujos elementos são as amplitudes das ondas que saem e entram no sistema total, respectivamente. Os elementos da matriz S total, s_{ij} , são dados através dos elementos das matrizes $S^{(m)}$ das regiões individuais, $s_{ij}^{(m)}$, através das equações

$$t = t^{(2)}[I - r'^{(1)}r^{(2)}]^{-1}t^{(1)}, \quad t' = t'^{(1)}[I - r^{(2)}r'^{(1)}]t^{(2)} \quad (3.20)$$

$$r = r^{(1)} + t'^{(1)}r^{(2)}[I - r'^{(1)}r^{(2)}]^{-1}t^{(1)}, \quad r' = r'^{(2)} + t^{(2)}[I - r'^{(1)}r^{(2)}]^{-1}r'^{(1)}t'^{(2)}, \quad (3.21)$$

onde $s_{11} = r$, $s_{12} = t'$, $s_{21} = t$, $s_{22} = r'$, sendo I a matriz identidade (para o caso de sistemas com vários modos transversais) [?].

3.5 Modelo computacional

Nesta seção, apresentaremos um método computacional, baseado no modelo tight-binding, para o cálculo das propriedades de transporte de um dispositivo de forma arbitrária. Por simplicidade, estudaremos primeiramente o caso unidimensional. A extensão para sistemas bidimensionais, ou até mesmo tridimensionais, segue naturalmente.

3.5.1 Modelo unidimensional

Estudaremos o modelo tight-binding para uma região central (dispositivo) acoplado a apenas um conector. De fato, um número arbitrário de conectores pode ser pensado, sem perda de generalidade, como apenas um conector efetivo com seções disjuntas [49]. O sistema é representado por uma cadeia unidimensional de sítios rotulados por um índice i , onde $i = -\infty, \dots - 1, 0, 1, \dots, N$. Dessa forma, admitimos que o conector corresponde aos sítios onde $i \leq -1$ e o sistema aos sítios $i = 0, \dots, N$.

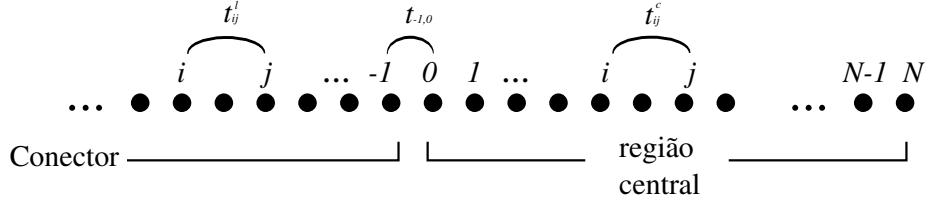


Figura 24: Modelo tight-binding unidimensional simplificado. Os sítios $i \leq -1$ correspondem ao conector, enquanto que os restantes representam a região central do dispositivo.

O hamiltoniano do sistema é dado por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{lc}, \quad (3.22)$$

onde \mathcal{H}_l , \mathcal{H}_c e \mathcal{H}_{lc} são sub-Hamiltonianos para o conector⁴, região central, e para o acoplamento entre esses, respectivamente. Podemos escrevê-los como

$$\mathcal{H}_l = \sum_{ij} t_{ij}^l l_i^\dagger l_j, \quad (3.23)$$

$$\mathcal{H}_c = \sum_{ij} t_{ij}^c c_i^\dagger c_j, \quad (3.24)$$

$$\mathcal{H}_{lc} = \sum_{ij} t_{ij}^{lc} c_i^\dagger l_j + H.c., \quad (3.25)$$

onde c_i (c_i^\dagger) e l_j (l_j^\dagger) são os operadores de destruição (criação) no sítio i da parte central e no conector do dispositivo, respectivamente. Os parâmetros de hopping das diferentes regiões são especificados com um índice (c , l ou lc , de acordo com as equações acima). Se $i = j$ nas somas das Eq. (3.23) e Eq. (3.24), denotamos $t_{ii}^m = \epsilon_i^m$, onde $m = l, c$, a energia no sítio i da região m .

O estados eletrônicos, na linguagem de segunda quantização, para o conector e para a região central, são

$$|\psi^l\rangle = \sum_j a_j l_j^\dagger |0\rangle, \quad (3.26)$$

$$|\psi^c\rangle = \sum_j b_j c_j^\dagger |0\rangle, \quad (3.27)$$

respectivamente, onde $|0\rangle$ representa o vácuo. Para facilitar a análise, supomos que os índices de todas as somas sejam contados no mesmo range, $-\infty \leq j \leq N$. Com essa convenção, temos $a_0 = a_1 = \dots = a_N = 0$, desde que os coeficiente definem o estado do conector. De forma análoga, tem-se $\dots = b_{-2} = b_{-1} = 0$.

⁴O índice l no Hamiltoniano do conector refere-se à palavra "lead", termo comumente usado na literatura.

A equação de Schödinger para o sistema (conector + região central), $\mathcal{H}|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle$, onde $|\psi\rangle = |\psi^l\rangle + |\psi^c\rangle$, assume a forma

$$\sum_{ijn} [t_{ij}^l l_i^\dagger l_j + t_{ij}^c c_i^\dagger c_j + t_{ij}^{lc} (c_i^\dagger l_j + l_i^\dagger c_j)] (a_n l_n^\dagger + b_n c_n^\dagger) |0\rangle = \sum_n (a_n l_n^\dagger + b_n c_n^\dagger) |0\rangle. \quad (3.28)$$

Os operadores fermiônicos de criação e destruição obedecem as regras usuais de anticomutação: $\{c_m, c_n^\dagger\} = \delta_{mn}$, $\{l_m, l_n^\dagger\} = \delta_{mn}$ e $\{\} = 0$ para todas as outras combinações.

Após algumas manipulações algébricas, Eq. (3.28) pode ser reescrita como

$$\sum_i [(A_i) l_i^\dagger + (B_i) c_i^\dagger] |0\rangle = \sum_i [(a_i \epsilon) l_i^\dagger + (b_i \epsilon) c_i^\dagger] |0\rangle, \quad (3.29)$$

onde

$$A_i = \sum_n (a_n t_{in}^l + b_n t_{in}^{lc}), \quad (3.30)$$

$$B_i = \sum_n (a_n t_{in}^{lc} + b_n t_{in}^c). \quad (3.31)$$

Os estados $|i\rangle$ e $|j\rangle$, com $c_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle$ ou $l_i^\dagger |0\rangle = |i\rangle$, são tais que $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Portanto, os coeficientes dos estados $|i\rangle$ e $|j\rangle$ em ambos os lados de Eq. (3.29) são iguais:

$$a_i \epsilon_i^l + \sum_{n \neq i} (a_n t_{in}^l + b_n t_{in}^{lc}) = \epsilon a_i, \quad (3.32)$$

$$b_i \epsilon_i^c + \sum_{n \neq i} (b_n t_{in}^c + a_n t_{in}^{lc}) = \epsilon b_i. \quad (3.33)$$

Para uma melhor visualização, assumiremos o hopping apenas entre os vizinhos mais próximos. Assim, as Eq. (3.32) e Eq. (3.33) tomam a forma

$$a_i \epsilon_i^l + a_{i+1} t_{i,i+1}^l + a_{i-1} t_{i,i-1}^l + b_{i+1} t_{i,i+1}^{lc} + b_{i-1} t_{i,i-1}^{lc} = \epsilon a_i, \quad (3.34)$$

$$b_i \epsilon_i^c + b_{i+1} t_{i,i+1}^c + b_{i-1} t_{i,i-1}^c + a_{i+1} t_{i,i+1}^{lc} + a_{i-1} t_{i,i-1}^{lc} = \epsilon b_i, \quad (3.35)$$

com $i = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, N$. O conjunto de equações acima pode ser reescrito em forma matricial

$$\begin{pmatrix} H_l & V_{lc} \\ V_{lc}^\dagger & H_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}, \quad (3.36)$$

onde $A = [\dots a_{-3} \ a_{-2} \ a_{-1}]^T$, $B = [b_0 \ b_1 \ \dots \ b_N]^T$, e

$$H_l = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & t_{-3,-4}^l & \epsilon_{-2}^l & t_{-3,-2}^l & & \\ & & t_{-2,-3}^l & \epsilon_{-2}^l & t_{-2,-1}^l & \\ & & & t_{-1,-2}^l & \epsilon_{-1}^l & \\ & & & & & \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

$$H_c = \begin{pmatrix} \epsilon_0^c & t_{0,1}^c & & & & \\ t_{1,0}^c & \epsilon_1^c & t_{1,2}^c & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & t_{N-1,N-2}^c & \epsilon_{N-1}^c & t_{N-1,N}^c \\ & & & & t_{N,N-1}^c & \epsilon_N^c \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

são matrizes tridiagonais para o conector e para a região central, respectivamente. A matriz V_{lc} é dada por

$$V_{lc} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & \dots & \\ t_{-1,0}^{lc} & 0 & \dots & \end{pmatrix}, \quad (3.39)$$

e representa o acoplamento entre a região central e o conector. Como discutido anteriormente, os conectores são considerados ideais, de forma que suas propriedades não dependem da posição. Assim, como consequência da periodicidade translacional, os coeficientes da Eq. (3.26) são dados $a_j = e^{ikx_j} + r e^{-ikx_j}$, onde k é previamente conhecido⁵ e r é o coeficiente de reflexão (para o caso específico que estamos considerando). Tal coeficiente pode ser calculado, juntamente com os números b_j (Eq. (3.27)), através da condição de contorno para a função de onda da região central e do conector, o que corresponde a resolver a Eq. (3.36).

3.5.2 generalização para sistemas 2D e 3D

Para sistemas mais gerais (2D, ou até mesmo 3D), o Hamiltoniano da Eq. 3.36), é generalizado para

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & V_l & & & \\ V_l^\dagger & H_l & V_l & & \\ & V_l^\dagger & H_l & V_{lc} & \\ & & & V_{lc}^\dagger & H_c \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

⁵Para fermions de Dirac de massa nula, temos $k = E/\hbar v_F$ com E previamente especificado, por exemplo.

onde H_c e H_l são os Hamiltonianos para a região central e para uma dada célula unitária do conector, respectivamente. V_l é uma matriz que representa o hopping de uma célula unitária para outra, ambas pertencentes ao conector, enquanto V_{lc} é a matriz que representa o hopping do conector para a região central. Os formatos das matrizes dependem da dimensionalidade do sistema. No caso bidimensional ainda na aproximação de vizinhos mais próximos, por exemplo, termos extras correspondentes aos hoppings nas outras dimensões devem ser adicionados, resultando em uma matriz pentadiagonal. É importante observar que o número de hoppings mais próximos também influencia na forma das matrizes (Eq. (3.32) e Eq. (3.32)).

A função de onda correspondente ao modo transversal n para uma dada célula unitária j do conector tem a forma

$$\psi_n(i) = \phi_n^{+k}(i) + \sum_m S_{nm} \phi_m^{-k}(i), \quad (3.41)$$

com ondas planas entrando ($\phi_n^{+k}(i)$) e saindo ($\phi_m^{-k}(i)$) da célula unitária i . Os coeficiente da soma, S_{nm} ⁶, são tais que $|S_{nm}|^2$ representa a probabilidade de transmissão do modo transversal m para o modo transversal n . De uma maneira geral, a formula de Landauer por ser escrita como

$$G = \frac{2e^2}{h} \sum_{n,m} |S_{nm}|^2. \quad (3.42)$$

O método brevemente apresentado nessa seção é uma prévia do modelo recentemente desenvolvido e disponibilizado gratuitamente na forma de um pacote para Python, conhecido como kwant, para cálculos numéricos em sistemas tight-binding com ênfase nas propriedades de transporte quântico [49].

⁶São os elementos da matrix de espalhamento

4 TRANSPORTE ELETRÔNICO EM ANÉIS QUÂNTICOS DE GRAFENO

Como consequência de suas incríveis propriedades eletrônicas, o grafeno, uma monocamada de átomos de carbono arranjados em uma estrutura do tipo favo-de-mel, tem sido considerado um substituto promissor ao silício em futuras aplicações em nanodispositivos eletrônicos. Entretanto, a ausência de gap no espectro de energias, juntamente com a natureza quiral dos portadores de carga na estrutura, leva a uma transmissão perfeita dos elétrons normalmente incidentes através de barreiras de potencial. Tal fenômeno, conhecido como tunelamento de Klein, impossibilita a construção de cópias de transistores de Silício em grafeno, por exemplo, desde que seria impossível interromper a corrente. A abertura de um gap de uma maneira controlável seria, então, necessária.

Neste capítulo, demonstraremos a possibilidade de obtenção de um dispositivo de controle de corrente elétrica, em uma monocamada de grafeno, sem a necessidade da presença de um gap intrínseco no espectro de energias, explorando efeitos de interferência em anéis quânticos no regime de transporte balístico. A viabilidade de dispositivos mesoscópicos baseados em efeitos de coerência de fase é fundamentada no fato de que estruturas de grafeno apresentam comprimentos de relaxação de fase relativamente grandes, e que trabalhos recentes tem sugerido a possibilidade do uso de contatos para o controle da fase relativa entre elétrons transportados através dos braços de anéis quânticos de grafeno de forma a obter efeitos de transistor [50].

Neste trabalho, o tunelamento de Klein, que tem sido visto como uma dificuldade a ser superada em dispositivos eletrônicos baseados em grafeno, está por trás dos princípios básicos de funcionamento do interferômetro aqui proposto. Dessa forma, o trabalho aqui desenvolvido está entre uma das primeiras aplicações tecnológicas do tunelamento de Klein, que tem sido estudado mais do ponto de vista acadêmico, mas que tem atraído grande interesse recentemente devido a possibilidade de observação experimental em mo-

nocamada de grafeno.

É importante mencionar que, durante todo o trabalho, os resultados numéricos foram obtidos através do pacote recentemente desenvolvido para o cálculo de propriedades eletrônicas e de transporte, Kwant [49].

4.1 Sistema e suas ressonâncias

A Fig. 25 apresenta um esboço do dispositivo aqui estudado. O anel quântico tem a forma hexagonal e pode ser pensado como sendo composto por nanofitas de grafeno com bordas armchair metálicas. É assumido que todas as ligações pendentes (*dangling bonds*) nas bordas das estrutura são terminadas por átomos de Hidrogênio a assim não contribuem para os estados eletrônicos próximos ao nível de Fermi. Os dois canais, de entrada e de saída, são nanofitas com a mesma espessura dos braços do anel e são representadas por pontos vermelhos. As regiões A , B e C , representadas por pontos coloridos, que não os vermelhos, são regiões onde encontram-se barreiras de potencial cujas espessuras são W_A , W_B e W_C , respectivamente. As dimensões do sistema são caracterizadas por dois números: L e W , onde o primeiro representa o comprimento interno de um dos braços do anel e o segundo representa a espessura dos mesmos e dos conectores. Como visto anteriormente, para que o sistema apresente comportamento metálico devemos escolher $W = \sqrt{3}a(N - 1)/2$, com $N = 3M - 1$ sendo M um inteiro.

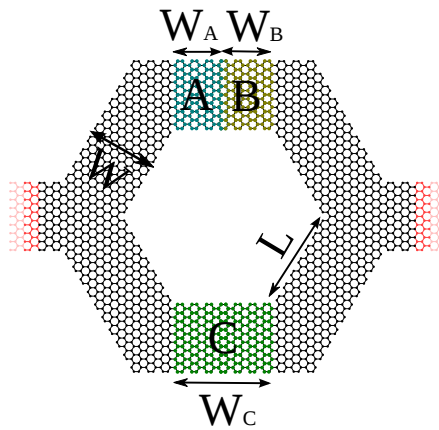


Figura 25: Esboço do interferômetro proposto: Uma anel hexagonal, acoplado a conectores, de entrada e de saída, infinitos (representados pelos sítios vermelhos), com três regiões de potenciais não nulos, produzidos por eletrodos, representados pelas regiões A , B , no braço superior, e C , no braço inferior do anel.

A escolha do formato particular das bordas e o do próprio dispositivo em sí pode ser

entendida através da referência [42], onde foi mostrado que os estados eletrônicos de tais anéis assemelham-se àqueles de fermions de Dirac sem massa em um anel unidimensional cujo raio depende de forma específica das dimensões do hexágono original, como discutido na seção 2.3. De fato, o tipo de borda em questão não permite estados ali localizados, fazendo com que exista uma maior probabilidade dos elétrons encontrarem-se na região central dos braços da estrutura. No caso do anel unidimensional a componente radial da corrente é nula, o que leva a acreditar que tal sistema seja uma escolha adequada para a descrição de anéis quânticos de pequena espessura na aproximação de Dirac. Dessa forma, tem-se uma indicação de que os efeitos de bordas não são relevantes para a descrição das propriedades de transporte nesses sistemas. Anéis quânticos de grafeno losangulares também podem ser descritos através de um modelo simplificado, como discutido na seção 2.3, porém, iremos nos focar no cálculo das propriedades de anéis hexagonais. Propriedades semelhantes dever ser esperadas para anéis com a outra geometria. É importante mencionar que a menor variação nas bordas da estrutura da Fig. 25 altera o perfil de transmissão. Porém, a física por trás dos resultados mais básicos, que serão apresentados aqui, permanece a mesma.

Do ponto de vista experimental, anéis quânticos de grafeno com bordas bem definidas podem ser crescidos através de CVD [seção 1.3]. Podemos também citar a litografia por feixe de elétrons, que pode ser uma alternativa mais direta para a fabricação de tais dispositivos [seção 1.3]. Entretanto, a última pode ter uma pequena desvantagem sobre o controle das bordas de tais sistemas, que pode, possivelmente ser remediada através da identificação da orientação das mesmas em uma dada amostra. Assim, espera-se que os futuros avanços permitam a fabricação de dispositivos com bordas controladas.

Investigaremos agora as probabilidades de transmissão através de tal sistema como função da energia do elétron incidente na ausência de potenciais externos ($V_A = V_B = V_C = 0$). A Fig. 26 apresenta os resultados para essa quantidade para sistemas com diferentes dimensões.

Na Fig. 26(a), as transmissões são calculadas para sistemas com uma dada espessura, $W = 5,96$ nm, para vários valores de comprimento L [veja Fig. 25], enquanto que em Fig. 26(b) as transmissões são calculadas para sistemas com comprimento fixo, $L = 9,94$ nm, para várias espessuras W . Em todos os casos, observam-se transmissões não nulas mesmo para $E = 0$, o que enfatiza o caráter metálico do sistema. Ressonâncias através do sistema são encontradas, como pode ser visto através dos picos onde $T = 1$ para vários valores da energia dos elétrons. Os resultados mostram que as energias onde os

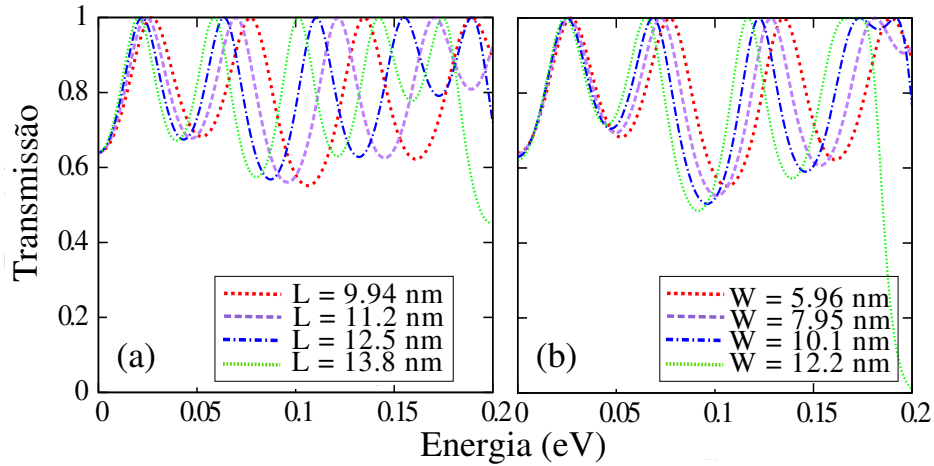


Figura 26: Probabilidade de transmissão como função da energia em tal sistema, considerando $V_A = V_B = V_C = 0$, (a) para diferentes valores do comprimento L com uma espessura fixada $W = 5,96$ nm, e (b) para diferentes valores de espessura W com comprimento fixo $L = 9,94$ nm.

picos ocorrem diminuem com o acréscimo de ambos L e W . Os máximos são quase igualmente espaçados, que é uma característica remanescente do espectro de energias de anéis quânticos hexagonais armchair, cujos níveis de energia podem ser previstos, com boa aproximação, através da expressão analítica, Eq. (2.86), onde o raio do anel R , dado pela Eq. (2.89), pode ser reescrito em função das dimensões W e L . Dessa forma, as energias do anel podem ser escritas de forma aproximada como

$$E_n = \left(\frac{3\sqrt{3}}{2\pi} \right)^{-1/2} \frac{\hbar v_F (n + 1/2)}{(L + W/\sqrt{3})}, \quad (4.1)$$

onde fica evidente a dependência com os parâmetros L e W . De fato, podemos entender os resultados numéricos apresentados em Fig. 26 analiticamente através das propriedades de transmissão através de um anel unidimensional.

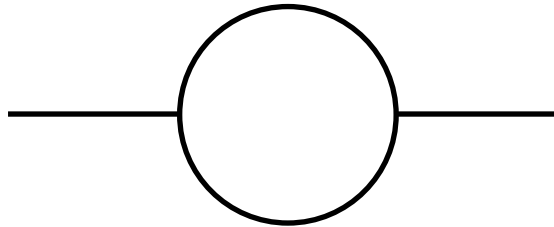


Figura 27: Sistema simplificado para a descrição do sistema representado na figura 25.

Considere um anel unidimensional acoplado a dois conectores também unidimensionais representado na figura 27. A condutância de tal sistema pode ser calculada através de considerações simples [48]. Assim, considere que a junção tripla (interseção entre um

conector e os dois braços do anel) em cada extremidade do anel possa ser descrita por uma matriz de espalhamento com a forma

$$S = \begin{pmatrix} c & \sqrt{\epsilon} & \sqrt{\epsilon} \\ \sqrt{\epsilon} & a & b \\ \sqrt{\epsilon} & b & a \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

onde a , b , c e ϵ são números reais. De forma a garantir a unitariedade da matriz dada, $S^\dagger S = I$, as seguintes relações seguem: $c^2 = 1 - 2\epsilon$, $a = (1 - c)/2$ e $b = (1 + c)/2$. Assim, a matriz S pode ser especificada através de apenas um único parâmetro c . É importante observar, pela forma da matriz de espalhamento, que a transmissão para apenas um dos braços é caracterizada apenas por ϵ , enquanto que as reflexões são dadas em termos de a , b e c . A transmissão através do anel é obtida através da combinação das matrizes S correspondentes aos braços do anel e pode ser obtida através da Eq. (3.20):

$$t = [\sqrt{\epsilon} \quad \sqrt{\epsilon}] \left[I - \begin{pmatrix} P & 0 \\ 0 & P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P & 0 \\ 0 & P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \right]^{-1} \begin{bmatrix} \sqrt{\epsilon} \\ \sqrt{\epsilon} \end{bmatrix}, \quad (4.3)$$

onde $P = e^{i\theta}$ sendo θ a mudança de fase ao longo de um dos braços do anel. Tal fator de fase deve ser considerado desde que assumimos coerência de fase. Os cálculos resultam em

$$t = \frac{2\epsilon P}{(1 - c^2 P^2)}, \quad (4.4)$$

que leva a uma transmissão dada por

$$T = \frac{(1 - c^2)^2}{1 + c^4 - 2c^2 \cos(2\theta)}. \quad (4.5)$$

O valor de θ pode ser obtido através do seguinte argumento: As ondas planas que atravessam o anel pelos braços contribuem com termos na forma e^{ikx} . Sendo $x = R\phi$ para o anel, onde $0 \leq \phi \leq \pi$ em cada braço individualmente e R é o raio do mesmo, observa-se que o elétron percorre o braço inferior da estrutura no sentido anti-horário enquanto que o braço superior é percorrido no sentido horário. Assim, a diferença de fase é tal que $e^{i(\pi kR - (-\pi)kR)} = e^{i2\pi kR}$, resultando em $2\theta = 2\pi kR$. No caso do grafeno, também temos que considerar a fase de Berry. O braço inferior contribue com $\pi/2$ (rotação do pseudoespinoer no sentido anti-horário) e o superior com $-\pi/2$ (rotação do pseudoespinoer no sentido horário), de forma que a diferença de fase é π . Portanto, para o grafeno temos $2\theta = 2\pi kR + \pi$, com $k = E/\hbar v_F$.

Um último detalhe diz respeito ao cálculo do parâmetro c . Esse pode ser obtido através das propriedades de simetria da junção tripla do hexágono com o conector [veja

Fig. 25]. Figura 28 é um esboço da junção tripla. Os ângulos entre os canais são todos iguais a 120° , o que assegura o formato armchair das bordas. Devido à simetria do sistema, podemos admitir que as probabilidades de transmissão do conector para os braços superior e inferior ($|B_2/A_1|^2$ e $|B_3/A_1|^2$, respectivamente) são iguais. Da mesma forma $|B_1/A_2|^2 = |B_3/A_2|^2 = |B_1/A_3|^2 = |B_2/A_3|^2$. Podemos também argumentar que todas as reflexões serão iguais. Portanto, a matriz S para a junção tem a seguinte forma

$$S = \begin{pmatrix} r & t & t \\ t & r & t \\ t & t & r \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

enfatizando o fato de que $c = a$ de acordo com a Eq. (4.2). Assim, desde que a condição de unitariedade de S resultou em $a = (1 - c)/2$, obtemos $c = 1/3$.

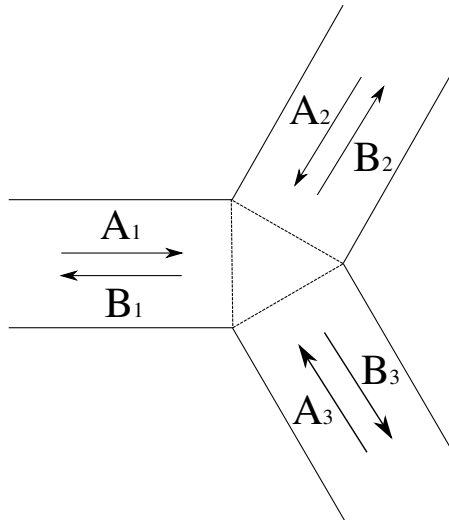


Figura 28: Junção tripla correspondente a conexão entre um conector e os dois braços do anel hexagonal [veja Fig. 25]. As amplitudes que entram na região de espalhamento (região triangular) são representadas pela letra A enquanto que as de saída são representadas pela letra B .

A Fig. 29 mostra uma comparação entre os resultados analítico, Eq. (4.5), e numérico para um anel quântico de grafeno hexagonal com espessura $W \ll L$ ($W \approx 0.54$ nm e $L = 44.4$ nm). A excelente concordância nos permite tirar conclusões acerca das propriedades do anel hexagonal de grafeno com base no modelo unidimensional. É importante acrescentar, dentre outros motivos, que a validade dos resultados consiste no fato de que, apesar dos conectores do modelo simplificado apresentarem apenas um modo transversal, desde que o modelo consiste em conectores unidimensionais, o intervalo de energias para os resultados numéricos correspondem somente ao primeiro modo transversal das nanofitas armchair (conectores).

Os máximos de transmissão, de acordo com a expressão 4.5, ocorrem quando $2\theta = 2n\pi$, com $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Portanto, segue: $2\pi ER/\hbar v_F + \pi = 2n\pi \rightarrow E = (\hbar v_F/R)(n + 1/2)$, que são exatamente os níveis de energia do anel quântico, Eq. (2.86)¹. A probabilidade de transmissão atinge um máximo quando a energia da partícula incidente se iguala com um dos níveis de energia da região de espalhamento. Tal resultado é uma característica geral da transmissão através sistemas que possuem níveis de energia discretos e é conhecido como tunelamento ressonante [?]. Para sistemas com maiores espessuras,

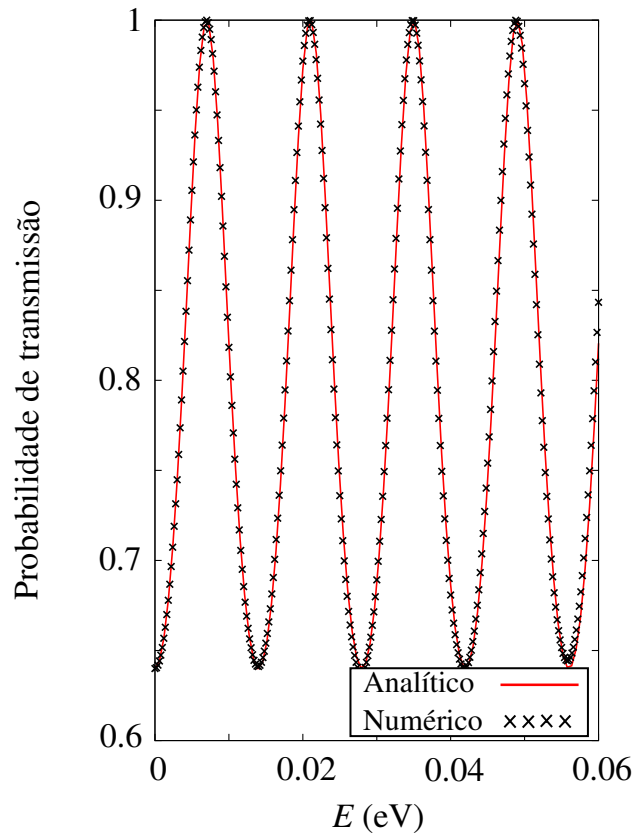


Figura 29: Comparação entre as probabilidades de transmissão analítica (curva contínua), calculada através da Eq. (4.5) para um anel circular unidimensional de raio $R \approx 47$ nm, e numérica (pontos), calculada para o sistema esboçado em Fig. 25 com $W \ll L$ ($W \approx 0.54$ nm e $L = 44.4$ nm).

como os dos resultados da Fig. 25, as oscilações regulares apresentadas na Fig. 29 são levemente distorcidas, de forma que o modelo simplificado para o transporte através do anel circular deixa de ser uma boa aproximação para resultados quantitativos. Entretanto, as características qualitativas obtidas a partir do modelo simplificado podem ser extendidas ao caso de sistemas com maiores espessuras. Assim, além do tunelamento ressonante, podemos citar o fato de que a transmissão para $E = 0$ não é um máximo, como aconteceria

¹De fato $(\hbar v_F/R)(n - 1/2)$ pode ser reescrito como $(\hbar v_F/R)(n + 1/2)$, desde que n assume valores inteiros negativos e positivos

no caso de um anel quântico descrito através da equação de Schrödinger². Tal resultado é uma consequência da fase de Berry que surge devido a rotação do pseudoespino durante a travessia do anel, como discutido anteriormente. Tal fase dá origem ao fator de $1/2$ adicional ao índice n nos níveis de energia do anel quântico, resultando em $E \neq 0$ para todo n . Assim, $E = 0$ não é uma ressonância do sistema, levando a $T(0) \neq 1$. Tal característica também está presente nos resultados obtidos para anéis hexagonais de maiores espessuras [veja Fig. 25].

4.2 Condutância dependente do potencial

Investigaremos agora a primeira ressonância de um sistema com $L = 44.4$ nm e $W = 18.3$ nm, que corresponde a $E = 6.25$ meV, na presença de barreiras de potencial. Daqui em diante, esses serão os valores de comprimento e espessura considerados em todos os resultados.

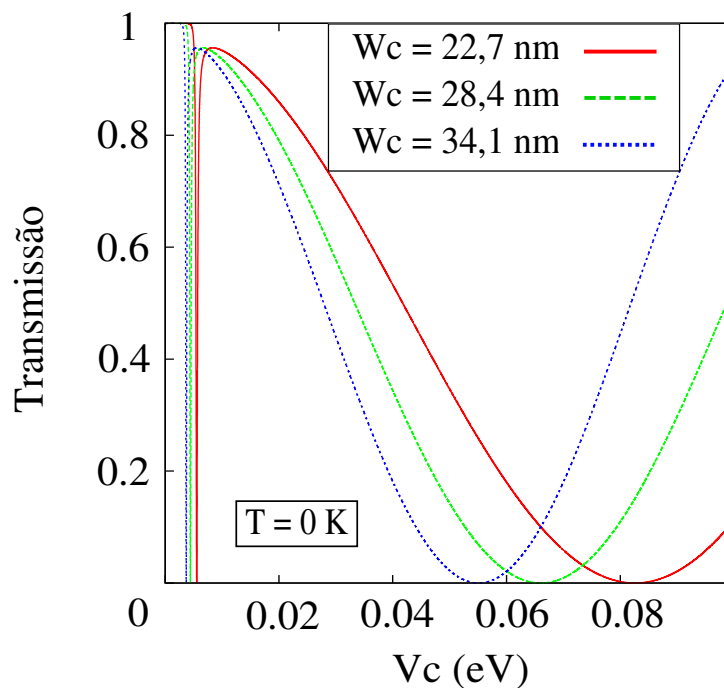


Figura 30: Probabilidade de transmissão como função da intensidade da barreira de potencial V_C na região C [veja Fig. 25], com $W = 18.3$ nm, para $V_A = V_B = 0$, considerando diferentes espessuras da barreira: $W_C = 22.7$ nm (curva contínua), $W_C = 28.4$ nm (curva tracejada) e $W_C = 34.1$ nm (curva pontilhada).

Primeiramente, tomemos $V_A = V_B = 0$ e manipulemos V_C , de forma a observar as

²As energias para o qual ocorreriam máximos de transmissão seriam dadas por $E = n^2 \hbar^2 / 2mR^2$, que correspondem aos níveis de energia do anel quântico isolado.

possíveis variações na condutância de tal sistema. As probabilidades de transmissão para tal situação são mostradas como função de V_C na Fig. 30, onde diferentes valores de W_C [veja Fig. 25], $W_C = 22.7$ nm (curva contínua), $W_C = 28.4$ nm (curva tracejada) e $W_C = 34.1$ nm (curva pontilhada), foram considerados.

A transmissão apresenta picos, onde $T = 0$ em torno de $V_C = E$, para todos os casos. Tal comportamento pode estar relacionado ao fato de que a probabilidade de reflexão no tunelamento de Klein tende a $R = 1$, para elétrons normalmente incidentes, quando a intensidade da barreira de potencial é próxima da energia do elétron. Tal transmissão nula não é controlável por parâmetros externos. Entretanto, existe um padrão oscilatório em cada curva, levando a pontos de transmissão nula para valores específicos do potencial, V_{min} , que são controláveis através de W_C , como mostrados nas diferentes curvas em Fig. 30. Argumentamos que tais mínimos de transmissão são consequências da interferência quântica destrutiva produzida pela diferença de fase entre elétrons atravessando o anel pelos dois caminhos possíveis. A fase adicional é consequência do tunelamento de Klein para elétrons que tunelam a barreira de potencial no braço inferior da estrutura e é dada pela Eq. (2.56). Assim, um mínimo de transmissão ocorrerá sempre que a diferença de fase entre os dois caminhos atingir o valor π . Ou seja

$$V_{min} = \frac{\pi \hbar v_F}{W_C}. \quad (4.7)$$

Uma comparação entre os valores V_{min} numericamente obtidos e àqueles previstos pela expressão analítica Eq. (4.7) é apresentada na Fig. 31. A boa concordância entre tais resultados nos leva a acreditar que a fase adquirida no tunelamento de Klein está por trás dos mínimos de transmissão obtidos em tal sistema. A concordância torna-se ainda melhor com o acréscimo de W_C . Portanto, de forma a prever os valores de V_{min} com uma maior precisão através da expressão analítica, Eq. (4.7), precisaria-se tomar sistemas com grandes valores de L , de forma a acomodar barreiras de potencial mais largas.

Os resultados apresentados na Fig. 30 podem ser entendidos através do modelo simplificado descrito na seção anterior. De fato, devido à simetria do sistema, podemos assumir que as transmissões dos conectores para os diferentes braços do anel são iguais, como discutido anteriormente. Assim, o coeficiente de transmissão total através da estrutura, no conector de saída, é a soma dos coeficientes de transmissão de cada braço do anel. Desde que a barreira de potencial contribui com uma fase adicional somente no braço inferior, devido ao tunelamento de Klein, podemos escrever a transmissão total como $T_{tot} = |t_1 + t_2|^2$, onde t_1 é o coeficiente de transmissão pelo caminho 1 (braço superior)

e t_2 é o correspondente ao caminho 2 (braço inferior), ambos para uma dada energia. A fase adicional após o tunelamento nos permite escrever $t_2 = t_1 e^{i\delta}$ com $\delta = VW_C/\hbar v_F$. Portanto, a transmissão total através do anel é $T_{tot} = 2T_1(1 + \cos \delta)$. Sendo $T_{tot} = 1$ para $V = 0$, para $E = 6.25$ meV, tem-se: $T_{tot} = (1 + \cos \delta)/2$ para a dada energia. A função $T_{tot}(V)$ apresenta exatamente o mesmo comportamento oscilatório mostrado na Fig. 30, exceto pelos picos em torno de $V = E$ (desde que não investigamos os detalhes envolvidos no tunelamento). Podemos ainda prever os mínimos através dessa equação: $T_{tot} = 0$ quando $\cos \delta = -1$, resultando em $V_{min} = n\pi\hbar v_F/W_C$ [Eq. (4.7)].

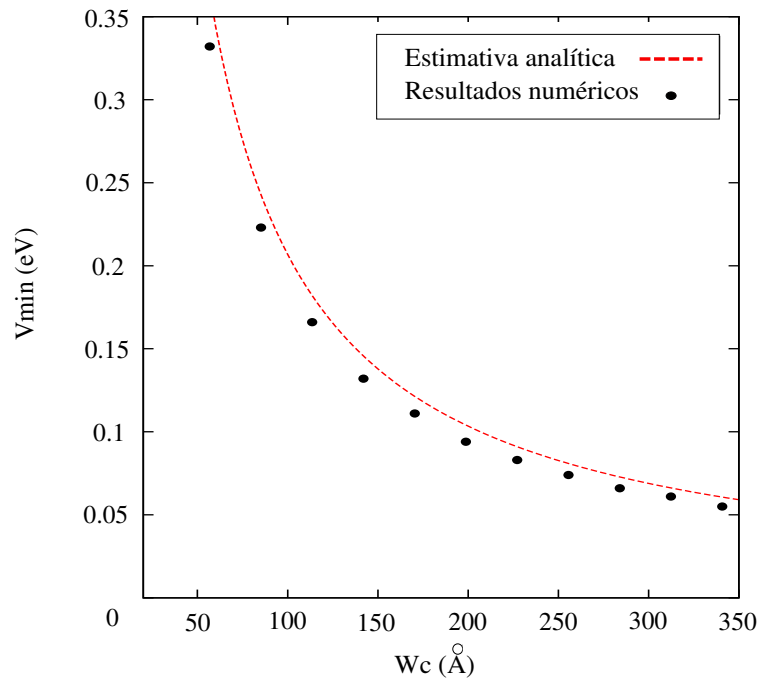


Figura 31: Comparação entre os valores de V_{min} , onde a probabilidade de transmissão atinge um mínimo $T = 0$, obtidos numericamente (símbolos) e analiticamente (curva tracejada).

A observação de que a condutância do sistema está diretamente ligada ao conceito de interferência quântica tem implicações importantes. Primeiramente, a fase adquirida no tunelamento de Klein é proporcional ao produto entre V_C e W_C . Assim, a diferença de fase para elétrons que tomam diferentes caminhos e, portanto, a corrente através do dispositivo, pode ser controlada pela modulação de V_C , assumindo W_C fixo. Conseqüentemente, um dispositivo de controle de corrente elétrica, onde a condutância é facilmente controlada através de potenciais eletrostáticos, pode ser facilmente obtido em grafeno. É importante observar que o tunelamento de Klein, que é por muitas vezes visto como uma dificuldade no campo de aplicações do grafeno, é fundamental para o funcionamento de um dispositivo baseado nas ideias apresentadas nesse trabalho.

Uma vez que a interferência quântica pode ser manipulada facilmente através de barreiras de potencial, a introdução de um gap torna-se desnecessária para o controle do transporte de cargas através de tais sistemas. Dessa forma, resolve-se o problema do corte da corrente em grafeno sem a necessidade da abertura de um gap.

Podemos observar, através dos resultados apresentados na Fig. 30, que a razão *on/off*, isto é, a razão entre a corrente que passa através do dispositivo no modo ligado (on) e aquela que vaza pelo dispositivo no modo desligado (off), é relativamente alta (da ordem de 10^7 , de acordo com as simulações numéricas). Entretanto, as probabilidades de transmissão apresentadas até então, podem ser diretamente relacionadas à condutância somente para o caso do zero absoluto ($\mathcal{T} = 0$ K). Para temperaturas não nulas, Eq. (3.13) deve ser utilizada para os cálculos das propriedades de transporte do sistema. Para $\mathcal{T} = 77$ K (que corresponde a temperatura do nitrogênio líquido, facilmente alcançada em laboratório), em particular, observa-se que Eq. (3.18) é razoavelmente satisfeita, de forma que a formula correspondente à resposta linear do sistema, Eq. (3.17), pode ser utilizada para obter os resultados apresentados na Fig. 32.

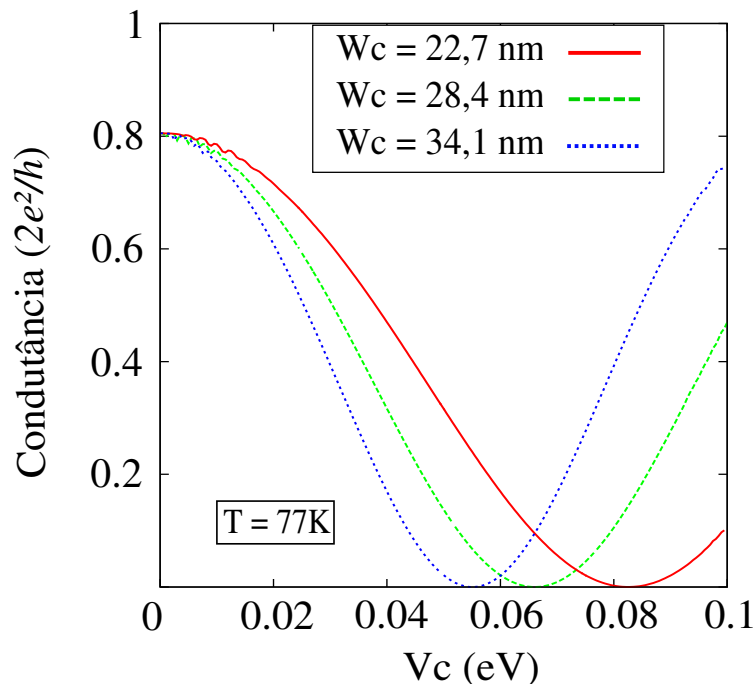


Figura 32: Probabilidade de transmissão como função da intensidade da barreira de potencial V_C na região C [veja Fig. 25], com $\mathcal{T} = 77$ K (temperatura do Nitrogênio líquido), com $W = 18.3$ nm, para $V_A = V_B = 0$, considerando diferentes espessuras da barreira: $W_C = 22.7$ nm (curva contínua), $W_C = 28.4$ nm (curva tracejada) e $W_C = 34.1$ nm (curva pontilhada).

Os picos em torno de $V_C = E$, para onde a transmissão tendia abruptamente a zero

no caso $\mathcal{T} = 0$ K [veja Fig. (30)], desaparecem devido à integração da probabilidade de transmissão com a derivada da distribuição de Fermi-Dirac. Portanto, tal zero de transmissão não é apenas não controlável por parâmetros externos, como discutido anteriormente, mas é também desnecessário para a operação de tal dispositivo à $\mathcal{T} \neq 0$ K. Entretanto, o primeiro mínimo de transmissão previsto pela mudança de fase devido ao tunelamento de Klein, Eq. (4.7), permanece inalterado. Isso significa que, embora o valor máximo da condutância tenha diminuído, devido à integração, assumindo um valor $\approx 0.8(2e^2/h)$, a razão *on/off* permanece alta (da ordem de 10^4 para o primeiro mínimo de condutância. Para os outros mínimos, tem-se *on/off* da ordem de $\approx 10^3$, de acordo com as simulações numéricas). Para fins de comparação, trabalhos experimentais sugerem que transistores de efeito de campo fabricados a partir de bicamadas de grafeno apresentam razão *on/off* relativamente altas da ordem 10^3 à $\mathcal{T} = 20$ K [51]. É importante salientar que as razões *on/off* obtidas nesse trabalho servem como um limite máximo teórico para tais sistemas, podendo o valor exato ($\approx 10^5$) não ser rigorosamente verificado experimentalmente como consequência de influências tais como as de impurezas, de substratos e etc. Assim, espera-se que os valores medidos sejam menores que o previsto. Entretanto, os resultados sugerem uma razão de duas ordens de grandeza maior, à $\mathcal{T} = 77$ K, que o valor apresentado na referência [51] à $\mathcal{T} = 20$ K. Dessa forma, mesmo com uma possível diminuição de duas ordens de grandeza, consequente de fatores experimentais, espera-se que a razão *on/off* ainda continue relativamente alta.

Para o caso da temperatura ambiente, $\mathcal{T} \approx 300$ K, tem-se uma distribuição de energias em torno da energia de Fermi, E_F , cuja espessura está em torno de $k_B\mathcal{T} \approx 0.026$ eV. Isso significa que, embora para configurações específicas da energia de Fermi e do potencial a transmissão seja nula, a condutância continuará a ser finita nesses casos, devido as contribuições dos elétrons com energias em torno de E_F . Entretanto, os mínimos de transmissão apresentados na Fig. 30 são bastante suaves, de forma que nas vizinhanças dos mínimos, a probabilidade continua próxima de zero, e assim, a probabilidade de transmissão integrada na energia, que leva a condutância, continuaria bem próxima de zero levando a uma razão *on/off* alta mesmo à temperatura ambiente.

4.3 Portas lógicas em anéis quânticos de grafeno

Os resultados previamente apresentados indicam a possibilidade do design de dispositivos de controle de corrente elétrica em monocamada de grafeno, através de potenciais eletrostáticos, com razões *on/off* relativamente altas. Nesta seção, demonstraremos como

o dispositivo apresentado pode ser utilizado para o design de portas lógicas, que têm grande importância no campo de aplicações em nanodispositivos eletrônicos.

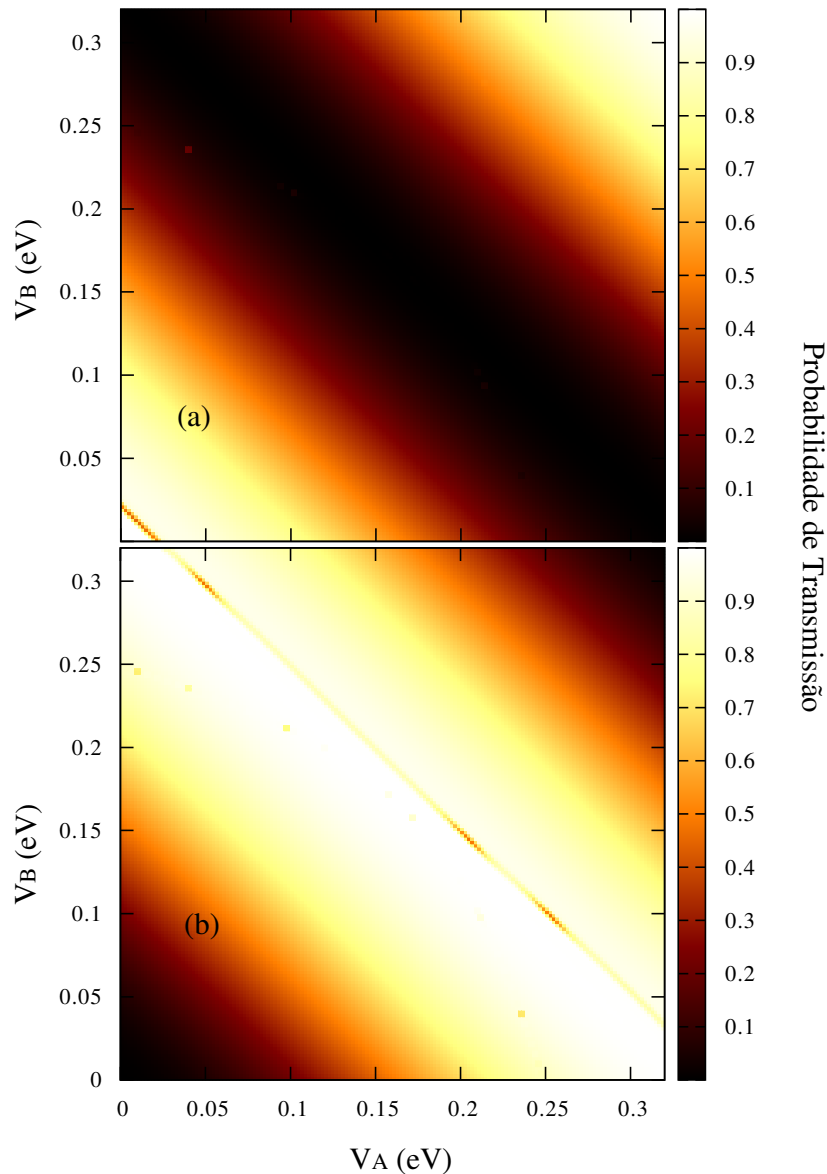


Figura 33: Mapas de contorno da probabilidade de transmissão como função das intensidades das barreiras de potencial V_A e V_B nas regiões A e B [veja Fig. 25], considerando espessuras $W_A = W_B = 5.7$ nm e $W_C = 11.4$ nm ($W_A = W_B = W_C/2$), para (a) $V_C = 0$ e (b) $V_C = V_{min} = 166$ meV.

A Fig. 33 apresenta a probabilidade de transmissão como função das intensidades dos potenciais nas regiões A e B [veja Fig. 25], para valores específicos de V_C . Inicialmente, supomos que V_A e V_B podem ser manipulados independentemente. Também assumimos, por simplicidade, o caso $\mathcal{T} = 0$ K (os argumentos serão facilmente generalizados para os casos onde $\mathcal{T} \neq 0$ K). O primeiro caso consiste em fazer $V_C = 0$ e observar como a transmissão varia em função de V_A e V_B . Pelos argumentos apresentados anteriormente,

quando todos os potenciais são nulos, a transmissão através do anel quântico é perfeita. A introdução de V_A e V_B introduz uma fase adicional na função de onda dos elétrons que atravessam o anel pelo caminho de cima, de forma que uma interferência quântica produz um perfil oscilatório na condutância do sistema. Cada barreira de potencial no braço superior da estrutura contribui com um fator de fase proporcional à intensidade do potencial estabelecido na região correspondente. Assim, a fase total devido as duas barreiras é igual a soma das fases individuais levando em conta cada barreira separadamente. Os resultados numéricos para tal situação são apresentados na Fig. 33(a), onde fica evidente o caráter oscilatório da transmissão.

Em uma segunda situação seleciona-se $V_C = V_{min}$ a fim de observar o comportamento da probabilidade de transmissão em função dos potenciais V_A e V_B . Nesse caso, a transmissão é nula quando $V_A = V_B = 0$, desde que a fase adquirida no caminho correspondente ao braço inferior do anel, devido ao tunelamento de Klein na barreira de potencial C , é igual a π . Dessa forma, a modulação dos potenciais nas regiões A e B altera a diferença de fase entre os caminhos levando a um perfil de transmissão oscilatório. O mapa apresentado na Fig. 33(b) mostra esse comportamento.

Esses resultados demonstram as primeiras possibilidades de aplicação do interferômetro apresentado na Fig. 25: porta lógica OR. Consideramos $W_A = W_B = W_C/2$ e selecionamos $V_C = V_{min}$. Inicialmente, com $V_A = V_B = 0$, não existe corrente, desde que a barreira de potencial no braço inferior é tal que a interferência é completamente destrutiva no conector de saída. Agora, se $V_A = 2V_{min}$ e $V_B = 0$, a diferença de fase relativa entre os elétrons que atravessam a estrutura pelos diferentes caminhos é nula, como resultado a probabilidade de transmissão alcança um máximo. Esse resultado também pode ser obtido se $V_B = 2V_{min}$ e $V_A = 0$, ou $V_A = V_B = V_{min}$. Portanto, se V_A ou V_B , ou ambos, forem selecionados, uma corrente elétrica poderá ser detectada. Como comentado previamente, pode-se controlar os valores críticos do potencial V_{min} através da largura da barreira de potencial.

É também possível usar o sistema apresentado com uma porta lógica AND: para tal proposito, consideramos $V_C = V_{min}$. Da mesma forma que anteriormente, não existe corrente elétrica se $V_A = V_B = 0$. Assim, se chamarmos V_{min}^c a intensidade do potencial no eletrodo A (B) para qual observa-se o segundo mínimo de transmissão quando $V_C = V_{min}$, a corrente pode atingir um mínimo se selecionarmos $V_A = 2V_{min}^c$ e $V_B = 0$ ou $V_B = 2V_{min}^c$ e $V_A = 0$. A única configuração possível para um máximo de transmissão seria $V_A = V_{min}$ e $V_B = V_{min}$ ao mesmo tempo. Tal comportamento é ilustrado na Fig. 33(b) pelo mapa

de contorno da probabilidade de transmissão como função dos potenciais nas regiões A e B com $V_C = V_{min}$ para $W_A = W_B = 5.7$ nm. Uma região de alta transmissão é observada quando $V_A = V_B = V_{min}$ ($T \approx 1$), enquanto que pequenos valores ($T \approx 0$) são encontrados para valores específicos dos potenciais.

AND ($V_C = V_{min}$)			NAND ($V_C = 0$)			OR ($V_C = V_{min}$)		
v_A	v_B	T	v_A	v_B	T	v_A	v_B	T
0	0	0	0	0	1	0	0	0
2α	0	0	2β	0	1	2	0	1
0	2α	0	0	2β	1	0	2	1
1	1	1	1	1	0	1	1	1
NOR ($V_C = 0$)			XOR ($V_C = V_{min}$)			XNOR ($V_C = 0$)		
v_A	v_B	T	v_A	v_B	T	v_A	v_B	T
0	0	1	0	0	0	0	0	1
2	0	0	2	0	1	2	0	0
0	2	0	0	2	1	0	2	0
1	1	0	α	α	0	β	β	1

Tabela 1: Configurações dos potenciais nas regiões A, B e C [veja Fig .25] para todas as portas lógicas que podem ser obtidas com tal estrutura.

Para sumarizar, podemos escrever todas as portas lógicas que podem ser obtidas através do sistema apresentado se definirmos $\alpha = V_{min}^c/V_{min}$, $\beta = V_{max}/V_{min}$, $v_A = V_A/V_{min}$ e $v_B = V_B/V_{min}$, onde V_{min}^c e V_{max} são os valores de $V_A(V_B)$ para o qual temos um segundo mínimo de transmissão quando $V_C = V_{min}$ e o segundo máximo quando $V_C = 0$, respectivamente.

5 CONCLUSÃO

Investigamos as propriedades de transporte eletrônico de anéis quânticos de grafeno sujeitos a potenciais eletrostáticos, no regime balístico. O sistema considerado consiste em um anel hexagonal, caracterizado pelas dimensões L (tamanho) e W (espessura) [Fig. 25], com bordas armchair acoplado a duas nanofitas, do mesmo tipo de bordas, que funcionam como conectores. A natureza metálica dos conectores e do sistema considerado juntamente com a geometria específica da estrutura em questão resultam em um perfil de transmissão oscilante cujos máximos estão diretamente relacionados aos níveis de energia do anel quântico isolado, mesmo para energia nula. Tais energias de ressonância puderam ser previstas aproximadamente através de um modelo simplificado que consiste na resolução da equação de Dirac, para elétrons no grafeno, em um anel circular unidimensional cujo raio depende das dimensões da estrutura hexagonal original. Dessa forma, mostrou-se que a transmissão através do sistema sempre pode ser tomada como a máxima dependendo apenas da introdução de uma diferença de potencial químico, previamente conhecida, entre os contatos. A introdução de um eletrodo em um dos braços do anel quântico, para uma dada energia, leva a um perfil de transmissão que oscila como função da intensidade do potencial aplicado resultando em uma condutância nula para valores específicos. Tal comportamento é consequência da natureza ultrarelativística dos portadores de carga no grafeno e está diretamente relacionado ao tunelamento de Klein. De fato, ao tunelar uma barreira de potencial com probabilidade 1 devido ao tunelamento de Klein, a função de onda do elétron adquire uma fase proporcional à intensidade da barreira. Dessa forma, o eletrodo pode ser ajustado de forma a obter uma diferença de fase de π entre elétrons que atravessam o sistema por diferentes caminhos, levando a uma interferência quântica completamente destrutiva e, portanto, a uma corrente nula através da estrutura. Tal efeito de interferência facilmente controlável proporciona a possibilidade de produção das portas lógicas AND, NAND, OR, NOR, XOR e XNOR em monocamada de grafeno sem necessidade da introdução de uma gap no material apresentando alta razão *on/off* mesmo à $\mathcal{T} = 77$ K.

REFERÊNCIAS

- [1] The official website of the Nobel prize (www.nobelprize.org)
- [2] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* 438, 201 (2005).
- [3] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nature Physics* 2, 620 (2006).
- [4] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* 81, 109 (2009).
- [5] M. Schneider, D. Faria, S. Viola Kusminskiy, and N. Sandler, *Phys. Rev. B* 91, 161407 (2015)
- [6] Charles A Stafford, David M Cardamone and Sumit Mazumdar, *Nanotechnology* 18, 424014 (2007)
- [7] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* 115, 485 (1959)
- [8] S. Das Sarma, Shaffique Adam, E. H. Hwang, and Enrico Rossi, *Rev. Mod. Phys.* 83, 407 (2011)
- [9] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* 71, 622 (1947)
- [10] N. D. Mermin, *Phys. Rev.* 176, 250 (1968)
- [11] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Science* 306, 666 - 669 (2004)
- [12] Andrea F. Young and Philip Kim, *Nature Physics* 5, 222 - 226 (2009)
- [13] Shklovskii, B.I and Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors* (Springer, Berlin, 1984)
- [14] Schrödinger. E., *Sitz. Preuß. Akad. Wiss. Phys.-Math.* 24, 418 (1930)
- [15] Tworzydło, J., Trouzettel, B., Titov, M., Rycerz, A. and Beenakker, C. W. J, *Phys. Rev. Lett.* 96, 246802 (2006)
- [16] Katsnelson, M. I., *Eur. Phys. J. B* 51, 157 (2006)
- [17] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I., Grigorieva, I. V., Dubonos, S. V. and Firsov, A. A., *Nature* 438, 197 (2005)
- [18] N. M. R. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* 73, 195411 (2006)
- [19] Frank Schwierz, *Nature Nanotechnology* 5, 487–496 (2010)

- [20] Boya Dai, Lei Fu, Zhiyu Zou, Min Wang, Haitao Xu, Sheng Wang and Zhongfan Liu, Nature Communications 2, Article number:522 (2011)
- [21] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, Science 320, 1308 (2008)
- [22] Fengnian Xia, Thomas Mueller, Rokhsana Golizadeh Mojarad, Marcus Freitag, Yuming Lin, James Tsang, Vasili Perebeinos and Phaedon Avouris, Nano Lett., 9 (3), 1039–1044 (2009)
- [23] Alexander V. Klekachev, Amirhasan Nourbakhsh, Inge Asselberghs, Andre L. Stesmans, Marc M. Heyns, and Stefan De Gendt, The Electrochemical Society Interface (Spring, 2013)
- [24] Xuesong Li, Carl W. Magnuson, Archana Venugopal, Rudolf M. Tromp, James B. Hannon, Eric M. Vogel, Luigi Colombo, and Rodney S. Ruoff, J. Am. Chem. Soc., 2011, 133 (9), pp 2816–2819
- [25] Teng Ma, Wencai Ren, Xiuyun Zhang, Zhibo Liu, Yang Gao, Li-Chang Yin, Xiu-Liang Ma, Feng Ding, and Hui-Ming Cheng, PNAS December 17, 2013 vol. 110 no. 51 20386-20391
- [26] Magdalena Huefner, Françoise Molitor, Arnhild Jacobsen, Alessandro Pioda, Christoph Stampfer, Klaus Ensslin, and Thomas Ihn, Phys. Status Solidi B, 246, No. 11–12, 2756–2759 (2009)
- [27] Atikur Rahman, Janice Wynn Guikema, Soo Hyung Lee, and Nina Marković, Phys. Rev. B 87, 08140 (2013)
- [28] Magdalena Huefner, Françoise Molitor, Arnhild Jacobsen, Alessandro Pioda, Christoph Stampfer, Klaus Ensslin and Thomas Ihn, New J. Phys. 12 043054 (2010)
- [29] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin, Solid state physics (Brooks Cole,1976)
- [30] Tsidilkovskii, I. M., Electron Spectrum of Gapless Semiconductors (Springer, Berlin, 1996)
- [31] Ando T, J. Phys. Soc. Japan 74 777 (2005)
- [32] Gamow G, Z phys. 51 204 (1928)
- [33] Esaki L, phys. Rev. 109 603 (1958)
- [34] Dirac P. A. M, Proc. R. Soc. Lond. 117 610
- [35] Klein O., Die reflexion von elektronen an einem potentialsprung nach der relativistischen dynamik von Dirac. Z. Phys. 53, 157–165 (1929).
- [36] Katsunori Wakabayashi et al, Sci. Technol. Adv. Mater. 11 054504 (2010)
- [37] Wakabayashi K, Takane Y and Sigrist M, Carbon 47 124 (2009)
- [38] L. Brey and H. A. Fertig Phys. Rev. B 73, 235411 (2006)

- [39] C. A. Stafford D. M. Cardamone and S. Mazumdar *Nanotechnology* 18 424014 (2007)
- [40] D. A. Bahamon A. L. C. Pereira and P. A. Schulz *Phys. Rev. B* 79 125414 (2009)
- [41] M. Zarenia, J. Milton Pereira, A. Chaves, F. M. Peeters, and G. A. Farias, *Phys. Rev. B* 81, 045431 (2010)
- [42] D. R. da Costa, Andrey Chaves, M. Zarenia, J. M. Pereira, Jr., G. A. Farias, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* 89, 075418 (2014)
- [43] Kees M. Schep, Paul J. Kelly, and Gerrit E. W. Bauer, *Phys. Rev. B* 57, 8907 (1998)
- [44] Katsnelson, M. I., *Eur. Phys. J. B* 51, 157-160 (2006)
- [45] H. van Houten, C.W.J. Beenakker, *Physics Today*, page 22 (1996)
- [46] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon *Phys. Rev. Lett.* 60, 848 (1988)
- [47] M. A. Topinka et al, *Nature* 410, 183-186 (2001)
- [48] Supriyo Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge University Press, 1997)
- [49] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, X. Waintal, *Kwant: a software package for quantum transport*, *New J. Phys.* 16, 063065 (2014).
- [50] J Munárriz et al, *Nanotechnology* 22 365201 (2011)
- [51] Fengnian Xia, Damon B. Farmer, Yu-ming Lin and Phaedon Avouris, *Nano Lett.*, 10 (2), pp 715–718 (2010)