



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

GRUPO DE FÍSICA TEÓRICA DA MATÉRIA CONDENSADA (GTMC)



LUAN VIEIRA DE CASTRO

TRANSPORTE BALÍSTICO EM DISPOSITIVOS DE GRAFENO NANOESTRUTURADOS

FORTALEZA

2015

LUAN VIEIRA DE CASTRO

**TRANSPORTE BALÍSTICO EM
DISPOSITIVOS DE GRAFENO
NANOESTRUTURADOS**

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

LUAN VIEIRA DE CASTRO

TRANSPORTE BALÍSTICO EM DISPOSITIVOS DE GRAFENO NANOESTRUTURADOS

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 10/07/2015

BANCA EXAMINADORA

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

Prof. Dr. Jeanlex Soares de Sousa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dra. Silvia Helena Roberto de Sena
Universidade Federal de integração internacional de
lusofonia Afro-Brasileira (Unilab)

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

C352p Castro, Luan Vieira de.
Transporte balístico em dispositivos de grafeno nanoestruturados / Luan Vieira de Castro. – Fortaleza, 2015.
??LastPage 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. Matéria Condensada. 2. Grafeno. 3. Nanofitas. 4. Transporte balístico. 5. Junção em Y. I. Título.

CDD:537.5

*Aos Meus Pais
e
etc..*

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Francisco e Maria, pela paciência e carinho com os quais me criaram. Aos meus familiares que conviveram comigo durante toda a minha vida.

Ao Prof. Milton Pereira Junior, pela orientação e disponibilidade para tirar dúvidas e discutir os resultados necessários para a realização dessa dissertação. Aos Professores Jeanlex Soares de Sousa e Silvia Helena Roberto de Sena, por aceitarem participar da banca examinadora desta dissertação e pelas valiosas dicas, ajudando na melhoria deste trabalho.

A todos os meus colegas e amigos do Departamento de Física da UFC, em especial aos colegas Duarte José, Gabriel Oliveira, João Paulo Nogueira, Eduardo Araújo, Ícaro Rodrigues, Diego Felix, Ravenna Rodrigues e Diego Rabelo.

A todos os professores do Departamento de Física que contribuíram para minha formação.

RESUMO

Nesta dissertação, estudamos as propriedades eletrônicas de nanoestruturas de grafeno submetidas a campos externos. Consideramos a aplicação de um campo elétrico uniforme transversal e um campo magnético uniforme perpendicular à estrutura. Utilizando um modelo Tight-binding com hopping de primeiros vizinhos, vimos como esses campos modificam a estrutura de bandas e a densidade local de estados (LDOS) do sistema. Em seguida, estudamos as propriedades de transporte das nanoestruturas. Consideramos transporte balístico devido ao longo livre caminho médio do grafeno. Através de um modelo numérico que consiste em resolver o Hamiltoniano Tight-binding no espaço real e combinar condições de contorno entre a região central e os reservatórios, calculamos os coeficientes de transporte para dois sistemas específicos: Primeiro, para uma nanofita de grafeno submetida a um campo elétrico transversal em uma região de extensão finita. Em seguida, para uma junção balística de três terminais (JBTT) de grafeno submetida a um campo elétrico transversal na região imediatamente adjacente à junção.

Palavras-chave: Matéria Condensada Grafeno Nanofitas Transporte balístico Junção em Y

ABSTRACT

In this dissertation, we studied the electronic properties of a graphene nanostructure under influence of external fields. We considered the application of an uniform transversal electric field and an uniform perpendicular magnetic field. Using a nearest-neighbor Tight-binding model, we investigated how those fields change the band structure and the local density of states (LDOS) of the system. Then, we studied the transport properties of nanostructures. We assumed ballistic transport due to the long mean free path of graphene. Through a numerical model that it consists in solving the Tight-binding Hamiltonian in real space and the combination of the boundary conditions between the central region and the reservoir, we calculated the transmission coefficients for two specific systems: First, for a graphene ribbon under the influence of a transversal electric field in a region of finite length; Next, for a three terminal ballistic junction (JBTT) of graphene under the influence of a transversal electric field in the region immediately before the junction.

Keywords: Condensed Matter. Graphene. Nanoribbons. Ballistic Transport. Y-Junction.

LISTA DE TABELAS

1	Coeficientes de $\tau_{n,n'}$	p. 45
---	---	-------

LISTA DE FIGURAS

- 1 Número de publicações sobre materiais baseados em carbono entre os períodos de 1960 e 2010. A curva vermelha mostra o número de publicações ao todo, enquanto as coloridas correspondem somente aos materiais correspondentes as respectivas cores nas figura. (Imagem adaptada de [3]) p. 17
- 2 Materiais de carbono estudados antes do grafeno: (a)Composto intercalado de grafite; (b) Fulereno; (c) Grafite e (d) Nanotubo de carbono. . . p. 19
- 3 Filmes de grafeno obtidos através de clivagem micromecânica:(a) Fotografia de uma amostra de multicamada de grafeno de 3 nm de espessura sobre um substrato de silício; (b) Imagem de microscópio de força atômica (AFM) de uma monocamada de grafeno. Figuras adaptadas de [1]. p. 20
- 4 (a) Imagem de microscópio de escaneamento de elétron (SEM) óptico de monocamada de grafeno obtida através de CVD com crescimento de 24h; (b) Fotografia de uma amostra de 5 mm de grafeno obtida com tempo de crescimento de 48h. Figuras adaptadas de [9]. p. 21
- 5 (a) Imagem de SEM de um dispositivo com backgate de SiO_2 ; (b) Micrografia ótica de um dispositivo com "top gate" e backgate; (c) Imagem de SEM falsamente colorida de um dispositivo de grafeno em suspensão. Imagens adaptadas de [1] ,[11] ,[12]. p. 22
- 6 Ilustração esquemática de um detector de sequenciamento de DNA de grafeno. Imagem obtida em:[21]. p. 23
- 7 A ordenação específica do grafeno e o fato dos dois átomos da base possuírem a mesma energia interna permitem uma relação de dispersão cônica: (a) Estrutura cristalina do grafeno, mostrando célula unitária e vetores de rede; (b) Célula hexagonal na rede recíproca do grafeno. . . p. 26

8	(a) - (b) Espectro de energia para a folha de grafeno com hopping entre os primeiros e segundos vizinhos; (c) - (d) Mapa de contorno para as energias na primeira zona de Brillouin considerando aproximação de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.	p. 27
9	Imagem ARPES da estrutura de bandas do grafeno crescido através de uma superfície de <i>SiC</i> . Imagem adaptada de [24]	p. 29
10	Espectro de energia próximo a um dos cones de Dirac.	p. 29
11	(a) Representação do sistema utilizado para calcular a condutividade Hall; (b) Condutividade σ_{xy} e resistividade ρ_{xx} no regime Hall como funções da concentração de estados. Figuras adaptadas de [42]	p. 34
12	Transmissão através de uma barreira de potencial como função de k_x e k_y para $L = 50$ nm e $U_0 = 50$ meV. Figura adaptada de [28].	p. 36
13	Níveis de Landau no Grafeno em função do campo Elétrico. Imagem adaptada de [32].	p. 41
14	Dois tipos de nanofitas mais estudados, armchair e zigzag, com as respectivas células unitárias em destaque.	p. 43
15	Representação esquemática dos dois métodos de obtenção de nanofitas de grafeno apresentados aqui: (a) <i>Plasma Etching</i> ; (b) Desempacotamento (<i>unzipping</i>) de nanotubos. Fig. (b) adaptada de [35].	p. 44
16	(a), (b) e (c): Relação de dispersão para nanofitas de grafeno <i>armchair</i> com larguras de 35, 36, e 37 linhas respectivamente; (d) e (f) Densidade local de estados (ldos) para nanofita armchair de largura de 30 linhas com energias de 0 eV e 2 eV.	p. 47
17	(a) e (b): Relação de dispersão para nanofitas de grafeno zigzag com larguras de 21 e 5 linhas; (c) e (d) Densidade local de estados (LDOS) para nanofita zigzag de largura de 21 linhas e energias de 0 eV e 1 eV, respectivamente.	p. 48

18	(a)-(c):Espectro de nanofitas armchair com 35 linhas submetidas a campo elétrico uniforme transversal. (a): Fita submetida a campo de $0.1V/nm$;(b): Fita submetida a campo de $0.4V/nm$;(c): Fita submetida a campo de $1V/nm$. (d) e (e): Densidade Local de Estados (LDOS) da fita submetida a um campo elétrico de $1V/nm$ para as energias $E = 2t$ e $E = -2t$, respectivamente.	p. 50
19	(a)-(c):Espectro de nanofitas zigzag com 21 linhas submetidas a campo elétrico uniforme transversal. (a): Fita submetida a campo de $0.1V/nm$;(b): Fita submetida a campo de $0.4V/nm$;(c): Fita submetida a campo de $1V/nm$. (d) e (e): Densidade Local de Estados (LDOS) da fita submetida a um campo elétrico de $1V/nm$ para as energias $E = t$ e $E = -t$, respectivamente.	p. 51
20	Espectro de energia de nanofitas de grafeno submetidas à um campo de 79 T. (a) - (c): Nanofitas armchair com espessuras de 34 (≈ 4.3 nm), 70(≈ 10.0 nm) e 149 (≈ 21.1 nm) linhas, respectivamente. (d) - (f): Nanofitas zigzag com espessura de 20 (≈ 4.3 nm), 40 (≈ 10.0 nm) e 86 (≈ 21.1 nm) linhas, respectivamente.	p. 53
21	Espectro de energia para nanofitas de grafeno submetidas a campo elétrico de 0.4 V/nm e campo magnético de 79 T com (a) bordas armchair de 34 linhas e (b) bordas zigzag de 21 linhas.	p. 54
22	(a) Representação de uma fita quasi-unidimensional presa a dois reservatórios à potenciais químicos diferentes. (b) Representação da relação de dispersão mostrando qual região contribui para o transporte para $T = 0$	p. 58
23	Representação esquemática de um sistema onde a probabilidade média de partículas serem injetadas no sistema pela direita é T e pela esquerda é T'.	p. 59
24	Sistema coerente mostrando os modos de propagação nas fitas, ambos, em direção ao sistema e saindo dele, para uma dada energia.	p. 62
25	Rede quadrada simples com quadro átomos na região de espalhamento e dois átomos por célula unitária.	p. 64
26	Condutância em função da energia para dois casos de nanofitas: (a) semicondutora de largura 18.10 nm e (b) condutora de 18.25 nm.	p. 66

27	Representação esquemática do sistema.	p. 67
28	Resultados para uma fita de grafeno submetida a um campo elétrico numa região de largura $W = 14.2$ nm: (a) Condutância em função da energia para fitas de espessura $L = 1.42$ nm e valores de campo $ \vec{\alpha} = 0.5, 2, 4$ V/nm; (b) Condutância para fita de espessura $L = 18.25$ nm e valores de campo $ \vec{\alpha} = 0.1, ,$ V/nm; (c) Relação de dispersão para nanofita de largura $L = 1.42$ nm e valores de campo $ \vec{\alpha} = 2$ e 4 V/nm; (d)	p. 68
29	Condutância para nanofita de espessura 1.42 nm submetida a campo elétrico de 2 V/nm para diferentes valores de largura da região de campo elétrico.	p. 69
30	Representação esquemática da junção balística de três terminais. . . .	p. 71
31	(a) Condutância e Reflectância para JBTT de Largura $L = 18.24$ nm com quinas da forma da Fig. 30(b); (b) Condutância para JBTT de largura $L = 17.68$ nm com quinas da forma da Fig. 30(c).	p. 72
32	Diferença entre as condutâncias no braço direito (G_+) e no braço esquerdo (G_-) em função da energia para diferentes valores de campo elétrico: (a) 0.017 V/nm; (b) 0.035 V/nm; e (c) 0.07 V/nm.	p. 73
33	Resultados para JBTT: Diferença entre as condutâncias para uma JBTT em função do campo elétrico para energias de (a) 10 meV e (b) 20 meV, respectivamente; (c) - (d): LDOS da JBTT para os pontos destacados com (c) e (d) da figura (a).	p. 74
34	Mapa de contorno para uma JBTT de grafeno de espessura $L = 18.24$ nm para a condutância em função da energia e do campo elétrico do sistem (Energia em unidades de t e campo em unidades de a_0/t , com t/ea_0 , com e a carga eletrônica e a_0 uma distância interatômica).	p. 75
35	Representação de uma partícula clássica através de uma região com campo elétrico uniforme com colisões elásticas com as paredes do sistema.	p. 76
36	(a) Condutância para uma fita de grafeno de espessura $L = 18.24$ nm submetida a um campo de 0.07 V/nm; (b) Condutância para uma JBTT com fitas de espessura $L = 18.24$ nm submetida a um campo de 0.07 V/nm.	p. 76

LISTA DE SÍMBOLOS

t	Hopping entre primeiros vizinhos no grafeno
t'	Hopping entre segundos vizinhos no grafeno
$\theta(x)$	Função degrau (1 se x maior que zero, zero se x menor que zero)

LISTA DE SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
CNPq	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
HOPG	Highly Ordered Pyrolytic Graphene (Grafeno Pirolítico Altamente Orientado)
AFM	Atomic Force Microscopy (Microscópio de Força Atômica)
CVD	Chemical Vapor Deposition (Deposição de Vapor Químico)
SEM	Scanning Electron Microscopy (Microscópio de Escaneamento de Elétron)
MOSFET	Metalic Oxide Semiconductor Field Effect Transistor (Transistor de Efeito de Campo baseado em óxido metálico semicondutor)
ARPES	Angle Resolved Photoemission Spectroscopy (Espectroscopia de fotoemissão de ângulo resolvido)
LDOS	Local Density of States (Densidade local de estados)
2DEG	2 Dimensional Electron Gas (Gás de Elétrons Bidimensional)
JBTT	Junção Balística de três terminais

SUMÁRIO

1	CONCEITOS PRELIMINARES	p. 17
1.1	Um Pouco de História	p. 18
1.2	Obtenção Experimental	p. 19
1.3	Metódos Experimentais	p. 19
1.3.1	Fabricação de Dispositivos	p. 21
1.4	Aplicações	p. 22
1.5	Sumário	p. 23
2	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS	p. 25
2.1	Modelo Tight-binding para folha infinita	p. 25
2.2	Transição entre a aproximação Tight-binding e o modelo de Dirac . . .	p. 29
2.3	Campo Magnético sobre a Folha de Grafeno	p. 32
2.3.1	Efeito Hall Quântico no Grafeno	p. 34
2.4	Campo Elétrico sobre a folha de Grafeno	p. 35
2.4.1	Tunelamento de Klein	p. 35
2.4.2	Campo Elétrico Uniforme	p. 37
2.5	Campos Elétrico e Magnético Transversais	p. 39
3	NANOFITAS DE GRAFENO	p. 42
3.1	Fabricação de Nanofitas	p. 42
3.2	Modelo Tight-binding para a nanofita	p. 44
3.3	Campo Elétrico sobre a nanofita de Grafeno	p. 49

3.4	Campo Magnético sobre a nanofita de Grafeno	p. 52
3.5	Campo Elétrico e Magnético sobre a nanofita de grafeno	p. 54
4	TRANSPORTE EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS	p. 55
4.1	Caracterização de Sistemas Mesóscopicos	p. 55
4.2	Formalismo de Transporte	p. 57
4.2.1	Contatos	p. 57
4.2.2	Fórmula de Landauer	p. 58
4.2.3	Fórmula de Landauer-Buttiker	p. 60
4.3	Modelo Numérico	p. 61
4.3.1	Matriz de Espalhamento	p. 61
4.3.1.1	Exemplo: Poço unidimensional	p. 62
4.3.2	Kwant: Explicando o funcionamento	p. 63
4.4	Coeficientes de transporte para nanofitas	p. 66
4.4.1	Nanofita ideal	p. 66
4.4.2	Nanofita com campo elétrico uniforme	p. 67
5	JUNÇÕES BALÍSTICAS DE TRÊS TERMINAIS	p. 70
5.1	Propriedades de uma JBTT	p. 70
5.2	Coeficientes de Transmissão	p. 72
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	p. 78
	REFERÊNCIAS	p. 80

1 CONCEITOS PRELIMINARES

Grafeno é uma estrutura feita de átomos de carbono que se caracteriza por ser essencialmente bidimensional. Em 2004, o grupo liderado por Geim e Novoselov conseguiu sintetizar a primeira amostra de grafeno em laboratório [1]. A partir de então, houve um grande crescimento no interesse da comunidade científica sobre o assunto (a Fig. 1 mostra o número de publicações até 2011) tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Grafeno destaca-se por exibir muitas propriedades interessantes, quando comparado a outros materiais bidimensionais. Dentre elas, destaca-se a possibilidade de transporte balístico, que será explorada nesta dissertação. Antes, no entanto, façamos uma revisão a respeito da física dos materiais baseados em carbono anterior ao grafeno.

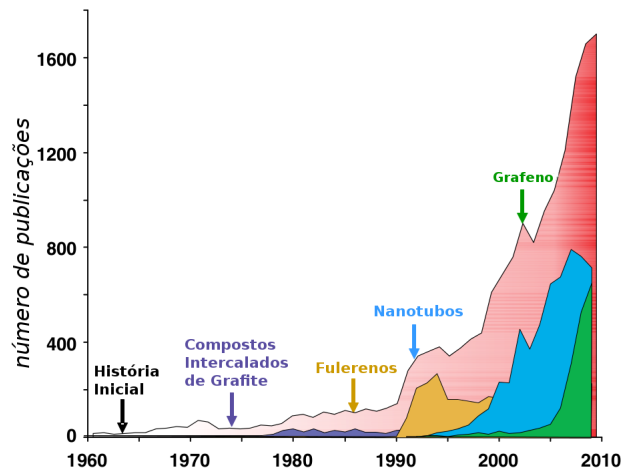


Figura 1: Número de publicações sobre materiais baseados em carbono entre os períodos de 1960 e 2010. A curva vermelha mostra o número de publicações ao todo, enquanto as coloridas correspondem somente aos materiais correspondentes as respectivas cores nas figura. (Imagem adaptada de [3])

1.1 Um Pouco de História

Carbono é um dos materiais mais abundantes no universo. Como quase todos os elementos teve sua origem nas estrelas. Ele apresenta dois isótopos (número de neutrons diferentes) estáveis: C^{12} (98.9% do carbono encontrado na natureza) e C^{13} (1.1%)[2]. Dentre seus vários alótropos (formas estruturais diferentes), o mais estável, e um dos mais estudados desde os tempos antigos, é, sem dúvida, o grafite. Este pode ser caracterizado como várias camadas de grafeno empilhadas uma acima da outra mantidas unidas através de fracas ligações de Van der Waals. Ele se apresenta em diferentes formas como na forma cristalina, forma amorfa e na forma de grafite pirolítico altamente orientado (HPOG) que é utilizada para obter grafeno. Os primeiros cálculos teóricos da estrutura de bandas do grafeno foram realizados por Wallace em 1947 [4] com o objetivo de entender as propriedades eletrônicas do grafite.

Indo um pouco mais à frente, foram estudados os chamados compostos intercalados de grafite, assim chamados por que correspondem a uma ou algumas camadas de grafeno intercaladas com algum outro material. Dependendo do material intercalado, os átomos de carbono podem servir como receptores ou doadores de elétrons para o material intercalante [5]. Nessas estruturas tridimensionais pode-se conseguir, inclusive, a combinação de uma camada de grafite, grafeno, com as camadas do material intercalante.

Já em 1985, foi descoberto o fulereno C_{60} , o primeiro alótropo de carbono molecular. Fulereno é um arranjo tridimensional de átomos de carbono fechado como uma bola de futebol com 20 hexágonos e 12 pentágonos. Outras estruturas também são observadas como C_{70} e C_{80} . A descoberta desse material elevou o aumento de interesse no estudo de materiais feitos de carbono. Em seguida, foi achada uma conexão entre as moléculas de C_{60} e C_{70} e entre C_{70} com C_{80} e assim sucessivamente o que levou a idealização do que viria a ser os nanotubos de carbono de parede simples. Esse material foi encontrado experimentalmente em 1993 [6]. Estruturalmente, ele pode ser pensado como uma folha de grafeno enrolada na forma de um cilindro, as propriedades eletrônicas, como o nanotubo ser condutor ou semicondutor, dependendo da forma em que o nanotubo é enrolado.

Na Fig. 2 estão representadas todas as formas de carbono apresentadas até agora. Vale a pena ressaltar que, devido a forma das ligações entre os átomos (hibridização sp^2 que será discutida mais a frente), grafeno é utilizado como ponto de partida para se entender as propriedades físicas de todos esses materiais. Na próxima seção falaremos sobre as formas de obtenção experimental do grafeno.

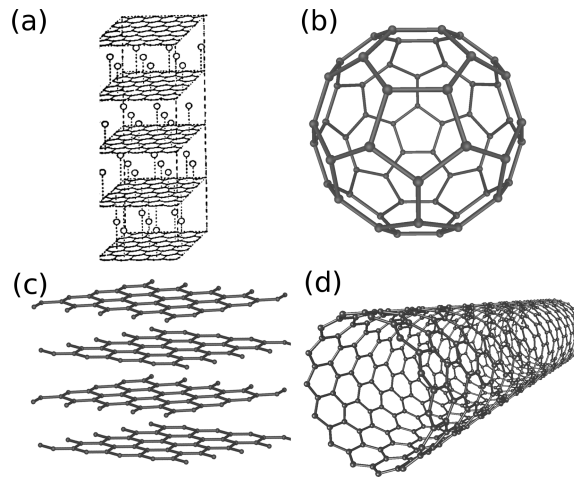


Figura 2: Materiais de carbono estudados antes do grafeno: (a) Composto intercalado de grafite; (b) Fulereo; (c) Grafite e (d) Nanotubo de carbono.

1.2 Obtenção Experimental

Antes do trabalho de Geim e Novoselov, acreditava-se que a fabricação de grafeno e outros materiais bidimensionais seria impossível devido a um argumento dado por Landau e Peierls, e depois estendido por Mermim [7], de que a temperatura de fusão desses materiais decresce com a espessura e, portanto, esses materiais muito finos tenderiam a se quebrar em estruturas menores. Esse argumento pode ser eliminado, considerando-se que as estruturas 2D são extraídas de materiais 3D, mantendo as fortes ligações atômicas sem a possibilidade de quebra. Nesta seção, discutiremos brevemente sobre duas formas de obtenção do grafeno, sendo elas o método da clivagem micromecânica [1] e o método da deposição química em fase de vapor (CVD) [9]. Em seguida, falaremos sobre algumas formas de fabricação de dispositivos de grafeno.

1.3 Métodos Experimentais

A clivagem micromecânica foi o primeiro método para obtenção de grafeno e, em teoria, é bastante simples. Considera-se uma amostra de grafite (Na verdade, uma amostra de grafite pirolítico altamente orientado) e realiza-se a clivagem, isto é, uma exfoliação mecânica das camadas de grafite. Isso faz com que as fracas ligações de van der Waals entre camadas de grafite sejam desfeitas. Esse método consegue realizar amostras de alta qualidade. No entanto, tem a desvantagem de estar limitado a amostras de dezenas de

micrômetros (Fig. 3) e não ser um método aplicável em escala industrial. Uma alternativa a esse método corresponde a exfoliação química em que uma amostra de grafite na fase líquida é exposta a um solvente, podendo este ser aquoso ou não aquoso. A utilização de um procedimento conhecido como sonicação, que consiste na propagação de ondas sonoras dentro do solvente, favorece a exfoliação das camadas de grafite.

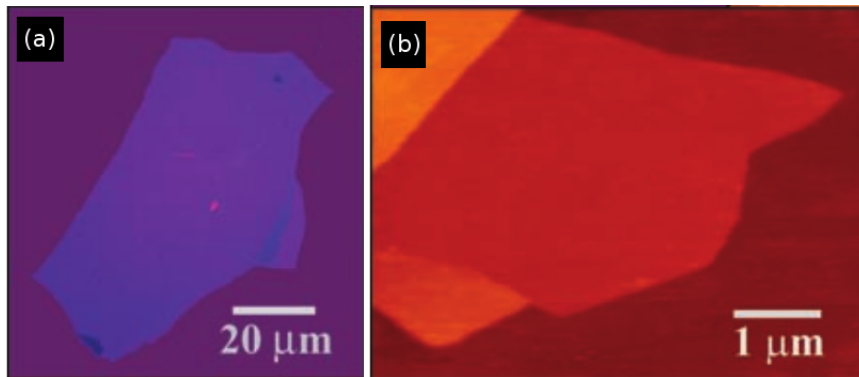


Figura 3: Filmes de grafeno obtidos através de clivagem micromecânica: (a) Fotografia de uma amostra de multicamada de grafeno de 3 nm de espessura sobre um substrato de silício; (b) Imagem de microscópio de força atômica (AFM) de uma monocamada de grafeno. Figuras adaptadas de [1].

O método de CVD é uma outra alternativa ao método da exfoliação. Esse método permite que se obtenha amostras de grafeno com alto grau de pureza e com comprimentos que chegam à ordem de milímetros. Um problema ascende, no entanto, devido a existência de defeitos na fita obtida através desse processo, o que modifica as propriedades eletrônicas do grafeno formado. Uma alternativa para contornar essa dificuldade é encontrada em [9], onde uma nova rota é tomada em que se diminui a densidade de nucleação no estágio inicial. Basicamente, coloca-se uma mistura de reagentes gasosos num ambiente adequado com um substrato. Através dos processos químicos, o material desejado vai depositando-se sobre a superfície do substrato. No caso do grafeno, é realizada uma catalise com a deposição em cobre numa mistura de gases Ar , H_2 e CH_4 , sendo o último a fonte de carbono. Esse método é mais vantajoso, pois permite um controle maior das amostras através do controle das reações. Normalmente como o material depositado é metálico, além da deposição química, deve ser considerada uma segunda etapa em que há a transferência do grafeno da camada metálica para um substrato isolante [10]. Essa parte do processo pode ser tão trabalhosa quanto a parte da deposição em si. Portanto, uma das principais dificuldades no uso do método de CVD é o custo devido ao consumo de energia necessária à extração do metal. A Fig. 4 mostra imagens de amostras obtidas através desse processo.

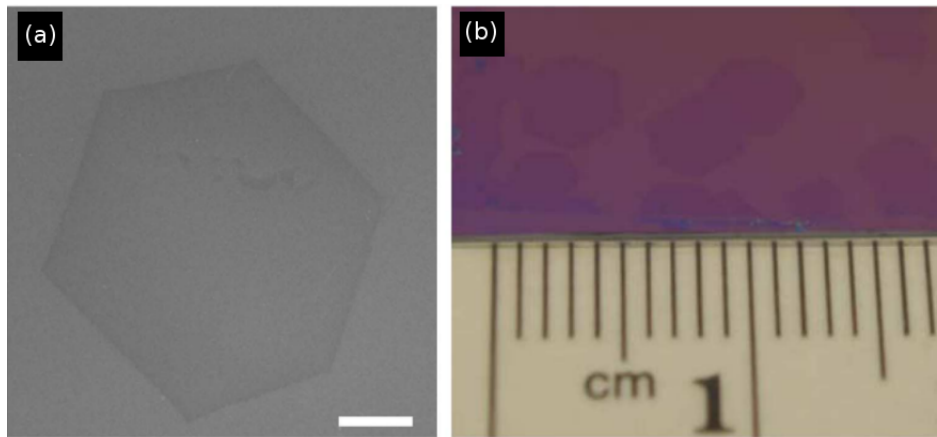


Figura 4: (a) Imagem de microscópio de escaneamento de elétron (SEM) óptico de monocamada de grafeno obtida através de CVD com crescimento de 24h; (b) Fotografia de uma amostra de 5 mm de grafeno obtida com tempo de crescimento de 48h. Figuras adaptadas de [9].

1.3.1 Fabricação de Dispositivos

Do ponto de vista das aplicações, é importante saber fabricar dispositivos como transistores, retificadores, sensores, fotodetectores, entre outros. Uma das formas mais comuns é a deposição do grafeno sobre um dispositivo de base, conhecido na literatura como *backgate*. Os contatos são criados litograficamente sobre o *backgate* possibilitando medidas das propriedades eletrônicas do grafeno. Normalmente é utilizado SiO_2 como substrato, sendo que outros materiais, como Nitreto de Boro, também são utilizados. Medidas em Nitreto de Boro, inclusive, permitem melhorar a mobilidade eletrônica do material. Também pode ser adicionado um *Top gate* a amostra. Como o nome sugere *Top gate* seria uma camada de substrato adicionada acima do material. Isso é interessante pois permite um controle da densidade eletrônica local do sistema [11] (ver 3.9). Uma última forma de fabricação de dispositivos é a de grafeno em suspensão, ou seja, sem a presença de um substrato. A motivação de se utilizar esse método é que ele permite que se elimine qualquer efeito que possa ser originado da presença de um substrato. A medida mais alta da mobilidade eletrônica no grafeno foi feita utilizando-se o material em suspensão, chegando essa a $200000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [12]. A Fig. 5 mostra uma visão esquemática desses três tipos de dispositivos. Essas formas de montagem são eficientes para medidas específicas e visam futuras aplicações em dispositivos eletrônicos. Na próxima seção falaremos sobre as potenciais aplicações de grafeno.

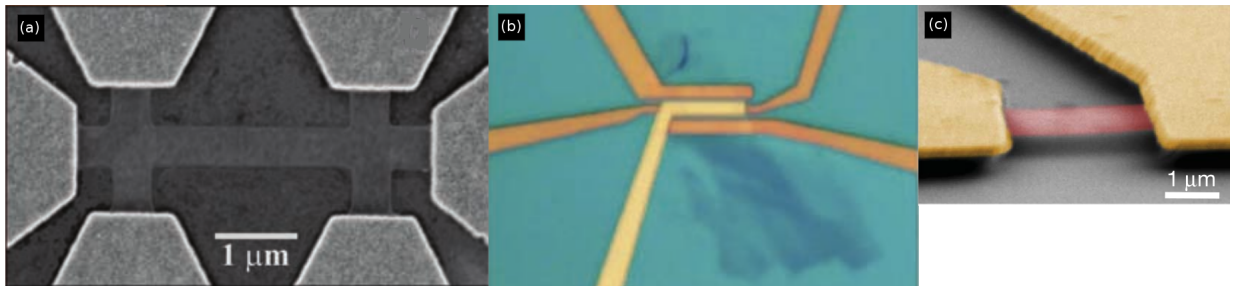


Figura 5: (a) Imagem de SEM de um dispositivo com backgate de SiO_2 ; (b) Micrografia ótica de um dispositivo com "top gate" e backgate; (c) Imagem de SEM falsamente colorida de um dispositivo de grafeno em suspensão. Imagens adaptadas de [1], [11], [12].

1.4 Aplicações

Por muito tempo o uso de transistores de efeito de campo baseados em óxidos metálicos semicondutores MOSFET (metallic oxide semiconductor field effect transistor) tem sido suficiente para o melhoramento de dispositivos lógicos digitais. Isto por que a constante melhora se dava com a constante miniaturização dos dispositivos. No entanto, há um consenso na comunidade sobre estes sistemas estarem aproximando-se de um limite. Portanto, há a necessidade de procurar possíveis candidatos a substitutos para os atuais MOSFETs. Um desses candidatos sendo, é claro, o grafeno [13]. Grafeno apresenta-se como um candidato promissor principalmente por duas características: sua alta mobilidade eletrônica e o fato de ser bidimensional. Pode-se argumentar que, com relação ao tamanho, é possível se obter dispositivos de até 2 nm para os atuais MOSFETs [14], o que é um tamanho considerável. No entanto, há uma deteriorização da mobilidade eletrônica para esses materiais nessa escala de comprimento. Grafeno tem a propriedade de ter intrinsecamente um átomo de espessura e possuir alta mobilidade eletrônica devido às suas propriedades de simetria. Uma dificuldade ascende, no entanto, da necessidade de abertura de um *gap* (No grafeno a banda de valência toca a banda de condução; Ver Cap.3). Um *gap* pode ser inserido no sistema considerando-se nanoestruturas [15, 16], bicamadas [17] ou a aplicação de strain na amostra [18]. Infelizmente, o surgimento do *gap* leva à diminuição da mobilidade eletrônica do material e até agora não foi possível contornar essa dificuldade. Não resta dúvida, no entanto, da potencial utilidade de grafeno em circuitos lógicos.

Grafeno também apresenta propriedades ópticas interessantes, como absorção independente do comprimento de onda de 2,3% [19] para incidência normal da luz e transparência quando a energia é menor que o dobro da energia de fermi [20]. Isto leva a

aplicações interessantes como em fotodetectores. Devido a sua alta mobilidade eletrônica, fotodetectores de grafeno podem trabalhar num intervalo de frequências mais amplo do que o dos fotodetectores atuais baseados em *InGaAs* e *Ge*. Outra aplicação pode ser encontrada na fabricação de células solares, em que grafeno pode substituir as atuais células feitas de óxido de índio e estanho [20].

Sendo bidimensional, grafeno possui uma grande área superficial. Portanto, ele é bastante sensível ao meio. Assim, quando uma única molécula de gás é adsorvida numa folha de grafeno, ocorre uma mudança na resistividade local do gás, o que torna possível sua detecção. Logo, grafeno tem como aplicação natural a fabricação de sensores, como sensores de gás e sensores de campo magnético, por exemplo [20]. Também devido a sua alta sensibilidade química, grafeno pode levar a um grande número de sensores biológicos servindo futuramente para detectar níveis de glicose, hemoglobina, colesterol e até ser utilizado no sequenciamento de DNA [22](Fig. 6).

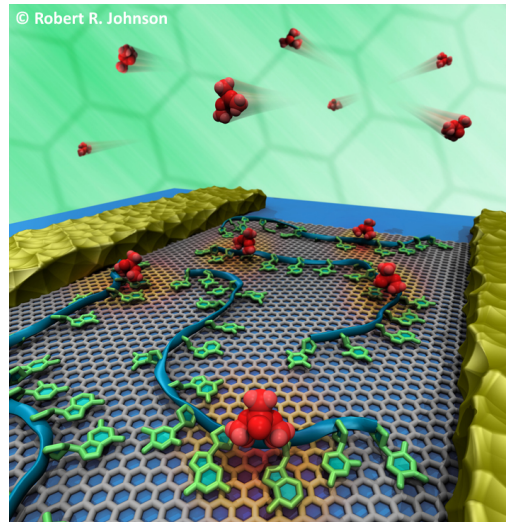


Figura 6: Ilustração esquemática de um detector de sequenciamento de DNA de grafeno. Imagem obtida em:[21].

1.5 Sumário

O conteúdo restante dessa dissertação estará disposto da seguinte forma:

No **capítulo 2** serão apresentadas as principais propriedades da rede de grafeno. Utilizaremos um modelo Tight-binding para calcular a estrutura de bandas e descreveremos as principais propriedades da propagação de elétrons sobre a folha de grafeno, tais como

os elétrons se comportarem como partículas relativísticas em baixas energias. Descreveremos em seguida, dentro dessa aproximação de baixas energias, alguns efeitos da aplicação de campos elétrico e magnético externos ao sistema.

No **capítulo 3** realizaremos os cálculos de estrutura de bandas para as nanofitas de grafeno. Estudaremos os dois tipos principais de borda, armchair e zigzag, e estudaremos o efeito das bordas sobre os estados e níveis de energia do sistema. Também consideraremos o efeito da aplicação de campo: elétrico, magnético e elétrico-magnético simultâneos.

No **capítulo 4** descreveremos o formalismo de transporte balístico. Apresentaremos fórmula de Landauer-Buttiker que descreve o transporte de sistemas nesse regime na situação mais geral em que o sistema está conectado a vários reservatórios. Em seguida, faremos uma descrição da matriz de espalhamento e apresentaremos o modelo numérico para determinar os elementos da matriz de espalhamento e, portanto, os coeficientes. Finalizaremos o capítulo apresentando os resultados obtidos para o transporte numa fita de grafeno.

No **capítulo 5** apresentaremos os resultados obtidos para um sistema de três terminais. Consideraremos fitas metálicas igualmente espaçadas angularmente. Mostraremos resultados para os coeficientes de transmissão num sistema sujeito a um campo elétrico.

Por fim, no **capítulo 6** serão apresentadas as conclusões e perspectivas para esse trabalho.

2 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS

Começemos com a estrutura cristalina. Ele está representada na Fig. 7. A rede do grafeno é uma rede de bravais triangular com dois átomos (representados pelas cores azul e vermelha) na base, o que forma uma estrutura hexagonal convencional. Os vetores de rede são dados por:

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

Aqui a é a distância entre vizinhos mais próximos dada por $a \approx 0.142 \text{ nm}$. A rede recíproca é igualmente uma rede hexagonal com vetores de rede dados por:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (2.2)$$

Quando átomos de carbono unem-se na formação de uma estrutura cristalina, a formação dessas ligações é feita no intuito de maximizar a superposição entre as funções de onda para uma minimização da energia. Desse modo, através de um processo conhecido como hibridização, em uma estrutura planar de átomos de carbono, forma-se uma ligação muito forte chamada de ligação σ ou sp^2 entre o orbital s e os orbitais p_x e p_y na camada de valência. O orbital p_z restante permanece praticamente inerte formando um orbital espalhado pela rede que é conhecido como um orbital π . Esse orbital é de extrema importância, pois é através dele que se dá o transporte eletrônico ao longo da fita de grafeno.

2.1 Modelo Tight-binding para folha infinita

O espectro de energia para a banda π no grafeno pode ser calculado através de um modelo Tight-binding simples. Para isso, considera-se que a correção na energia para a estrutura cristalina é pequena em relação à energia do orbital atômico e que a função

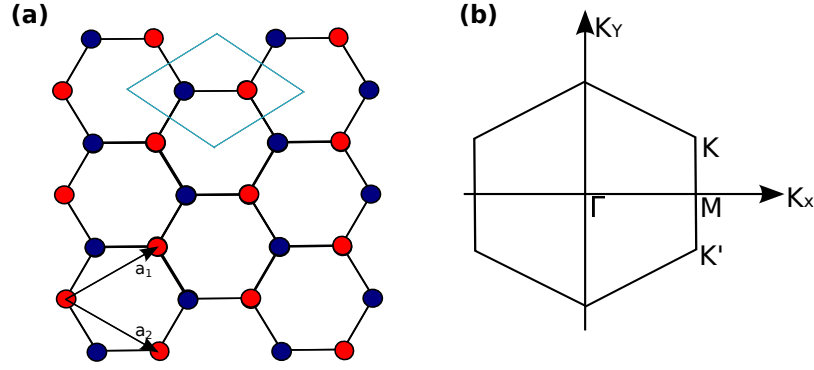


Figura 7: A ordenação específica do grafeno e o fato dos dois átomos da base possuírem a mesma energia interna permitem uma relação de dispersão cônica: (a) Estrutura cristalina do grafeno, mostrando célula unitária e vetores de rede; (b) Célula hexagonal na rede recíproca do grafeno.

de onda próxima a um sítio é aproximadamente a função de onda do orbital atômico. Dessa forma, há uma superposição apreciável somente para sítios vizinhos. Chamamos de energia de hopping t a integral que dá a energia correlação entre os sítios vizinhos. Dessa forma, podemos escrever o seguinte Hamiltoniano Tight-binding para o sistema:

$$\hat{H} = \sum_i \epsilon_0 (|i, A\rangle \langle i, A| + |i, B\rangle \langle i, B|) - \sum_{\langle i, j \rangle} t_{ij} (|i, A\rangle \langle j, B| + H.c) \quad (2.3)$$

Os operadores $|i\rangle \langle j|$ atuam sobre o espaço das posições na rede e ϵ_0 representa a energia no sítio da rede. Por conveniência colocamos $\epsilon_0 = 0$. Também é assumido que $t_{ij} = t$ seja constante ao longo da rede para todos os sítios. Como foi comentado acima, a rede hexagonal não forma uma rede Bravais e, portanto, precisamos de uma solução que faça distinção entre os sítios na subrede A e os sítios na subrede B. Seja $|\psi_A\rangle$ a função de onda localizada num sítio A e $|\psi_B\rangle$ a função de onda localizada num sítio B. Estamos levando em consideração somente funções de onda localizadas nas bandas π . Procuramos como solução uma função da forma:

$$|\Psi\rangle = c_A |\psi_A\rangle + c_B |\psi_B\rangle \quad (2.4)$$

Onde é necessário que as funções Ψ_A e Ψ_B satisfaçam o teorema de Bloch¹. Para o sítio A, os vetores diferença entre as posições para dois sítios vizinhos são dados por:

$$\vec{\delta}_1 = a(-1, 0), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}). \quad (2.5)$$

¹O teorema de Bloch diz que as soluções para o Hamiltoniano de uma partícula submetida a um potencial periódico são funções da forma: $\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u(\vec{r})$, onde $u(\vec{r})$ tem a periodicidade da rede cristalina

Substituindo a solução dada pela Eq. 2.4 na Hamiltoniana 2.3, obtemos a solução:

$$H|\Psi\rangle = -t \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle\langle j|(c_A|\psi_A\rangle + c_B|\psi_B\rangle) = -t \sum_{P.V} c_A|i\rangle\langle j|\psi_A\rangle + c_B|i\rangle\langle j|\psi_B\rangle = E|\Psi\rangle \quad (2.6)$$

A multiplicação do lado direita da equação por $\langle\Psi_A|$ e $\langle\Psi_B|$ leva a duas equações lineares que podem ser escritas da seguinte forma matricial:

$$E \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = -t \begin{pmatrix} 0 & S(\vec{k}) \\ S^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix}, \quad (2.7)$$

onde a função $S(\vec{r})$, dada por $S(\vec{k}) = \sum_i e^{\vec{k}\cdot\vec{\delta}_i}$ é o fator de estrutura (Na passagem acima foi aplicado o Teorema de Bloch e estamos considerando que as funções de onda sejam normalizadas). Resolvendo a equação de autovalores, obtemos os valores das possíveis auto energias:

$$E(\vec{k}) = \pm t|S(\vec{k})| = \pm\sqrt{3 + f(\vec{k})}, \quad (2.8)$$

onde a função $f(\vec{k})$ é dada por $f(\vec{k}) = 2\cos(\sqrt{3}k_y a) + 4\cos(\sqrt{3}k_y a/2)\cos(3k_x a/2)$. O

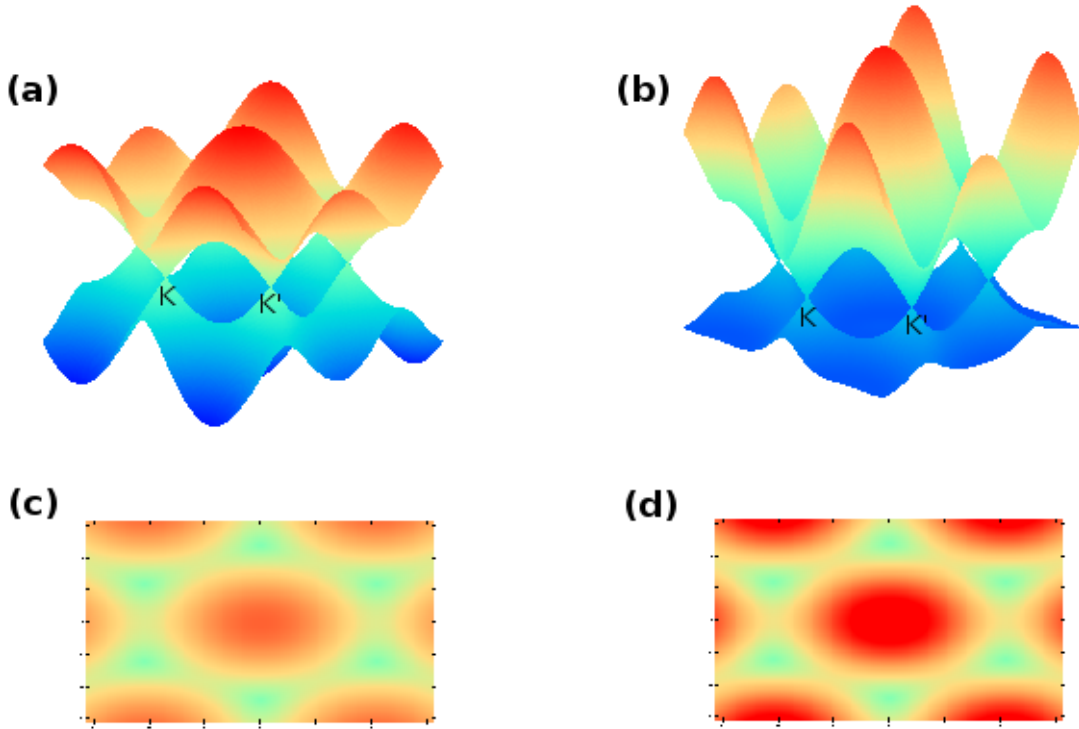


Figura 8: (a) - (b) Espectro de energia para a folha de grafeno com hopping entre os primeiros e segundos vizinhos; (c) - (d) Mapa de contorno para as energias na primeira zona de Brillouin considerando aproximação de primeiros e segundos vizinhos, respectivamente.

espectro de energia da Eq. 2.7 está representado na Fig. 8(a). As duas bandas se tocam em um conjunto de pontos dentro da zona de Brillouin. Existem dois grupos de pontos inequivalentes que são dados por:

$$\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \quad \vec{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad (2.9)$$

ou qualquer translação por vetor de rede recíproca deles. Próximo a um desses pontos, num regime de baixas energias, a estrutura de bandas do grafeno apresenta um perfil cônico, de forma análoga a relação entre energia e momento para uma partícula livre relativística sem massa. Mais a frente mostraremos essa analogia de forma mais concreta.

É interessante observar a simetria entre a banda de cima (banda de condução) e a banda de baixo (banda de valência). Essa simetria é um dos principais fatores para a alta mobilidade eletrônica do grafeno. A inclusão de hoppings de ordem mais alta ordem, no entanto, quebra essa simetria. Com efeito, com um termo de hopping entre segundos vizinhos t' , a energia para um elétron no modelo Tight-binding passa a ser dada por:

$$E(\vec{k}) = \pm\sqrt{3 + f(\vec{k})} + t'f(\vec{k}) \quad (2.10)$$

Vemos claramente da Eq. 2.10 que $E(\vec{k}) \neq E(-\vec{k})$, isto é, não há simetria entre a banda de condução e a banda de valência. Na Fig. 8(b) esta representada a relação de dispersão com segundos vizinhos, onde colocamos o valor de $t' = 0.2t$ para reforçar o efeito do termo adicional. Esse termo, no entanto, é bastante pequeno. Cálculos de primeiros princípios[23] para os hopping dão $t = 2.97$ eV e $t' = 0.073$ eV. Portanto, mesmo com a inclusão dos termos adicionais, ainda há uma grande simetria entre as bandas.

A estrutura de bandas para o grafeno pode ser observada experimentalmente através de um procedimento conhecido como ARPES (Angle resolved photoemission spectroscopy). Nessa técnica, fótons são espalhados pela rede cristalina e a informação sobre a direção e intensidade do momento e a energia permite que se obtenha distribuição de energias na superfície de Fermi para cristalina. Na Fig. 9 está representada a primeira observação da estrutura de bandas do grafeno através desse procedimento[24]. A banda de condução não é visto na figura, uma vez que, no grafeno, a superfície de Fermi é composta pela banda de valência completamente preenchida.

Na próxima seção será mostrado que com uma aproximação de baixas energias o Hamiltoniano do grafeno cai no Hamiltoniano de Dirac para partículas sem massa.

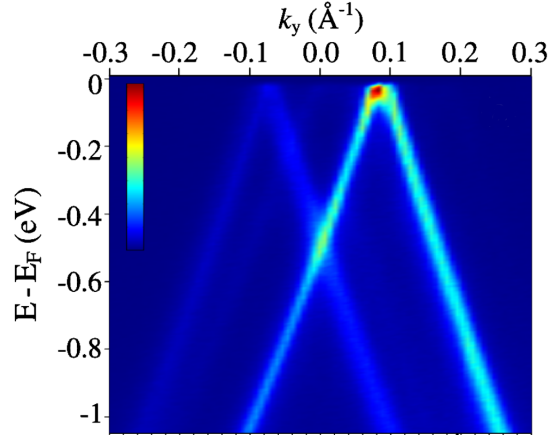


Figura 9: Imagem ARPES da estrutura de bandas do grafeno crescido através de uma superfície de *SiC*. Imagem adaptada de [24]

2.2 Transição entre a aproximação Tight-binding e o modelo de Dirac

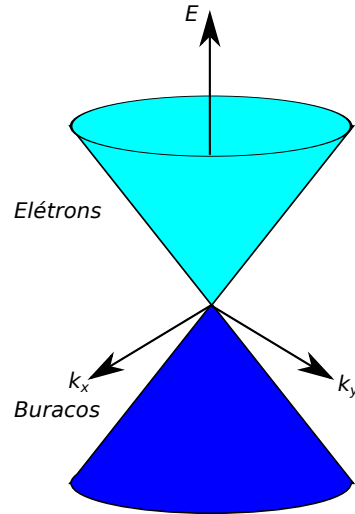


Figura 10: Espectro de energia próximo a um dos cones de Dirac.

Como foi comentado na última seção, o espectro de energia para a folha de grafeno apresenta um perfil cônico em baixas energias (Fig. 10) que se assemelha a relação energia e momento entre partículas relativísticas sem massa. Essa aproximação pode ficar ainda mais clara quando aproximamos a Hamiltoniana 2×2 obtida na última seção em baixas energias em torno dos pontos $\vec{K}$ ou $\vec{K}'$. Assim considerando a função $S(\vec{k})$ podemos fazer

uma expansão em Taylor próxima de $\vec{K}$ ou $\vec{K}'$:

$$S(\vec{k}) \approx S(\vec{K}) + (\vec{k} - \vec{K}) \cdot \frac{\partial S(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \Big|_{\vec{k}=\vec{K}} \quad (2.11)$$

ou

$$S(\vec{k}) \approx S(\vec{K}') + (\vec{k} - \vec{K}') \cdot \frac{\partial S(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \Big|_{\vec{k}=\vec{K}'}$$

Podemos ver substituindo na expressão que: $S(\vec{K}) = S(\vec{K}') = 0$. Calculando as derivadas de $S(\vec{k})$ e substituindo da Eq. 2.11 na Eq. 2.8, obtemos a seguinte representação matricial em torno de $\vec{K}$:

$$\hat{H}_{\vec{K}} \approx \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & (k_x - ik_y)e^{i\frac{5\pi}{6}} \\ (k_x + ik_y)e^{-i\frac{5\pi}{6}} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

e em torno do vetor $\vec{K}'$:

$$\hat{H}_{\vec{K}'} \approx \frac{3at}{2} \begin{pmatrix} 0 & (k_x + ik_y)e^{-i\frac{5\pi}{6}} \\ (k_x - ik_y)e^{i\frac{5\pi}{6}} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

onde fizemos uso da notação $\vec{k} - \vec{K} \rightarrow \vec{k}$ e $\vec{k} - \vec{K}' \rightarrow \vec{k}$ para $\vec{K}$ e $\vec{K}'$, respectivamente. As exponenciais podem ser retiradas realizando-se uma transformação unitária na Hamiltoniana. Definindo $v_F = 3at/2\hbar$ como sendo a velocidade Fermi e fazendo uso da notação:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

As Eq.'s 2.12 e 2.13 podem ser reescritas da seguinte forma:

$$\hat{H}_{\vec{K}} = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \quad \hat{H}_{\vec{K}'} = v_F \vec{\sigma}^* \cdot \vec{p} \quad (2.15)$$

Onde $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ representa o momento cristalino em torno de um dos pontos $\vec{K}$ e $\vec{K}'$. A Eq. 2.15 é idêntica ao Hamiltoniano de Dirac para partículas sem massa se substituirmos a velocidade da luz por v_F . Podemos ainda substituir o momento $\vec{p}$ para obtermos a representação da Eq. 2.15 na representação do espaço. Isto é, fazendo $p_i = -i\hbar\partial_{x_i}$, obtemos as seguintes equações de autovalores para os vales $\vec{K}$ e $\vec{K}'$:

$$-i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad -i\hbar v_F \vec{\sigma}^* \cdot \nabla \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}). \quad (2.16)$$

A função de onda $\Psi(\vec{r})$ é para ser entendida como $\Psi(\vec{r}) = (\psi_A(\vec{r}), \psi_B(\vec{r}))^T$, um vetor coluna de duas componentes, e $\psi_{A(B)}$ representa a amplitude de probabilidade de um elétron ser encontrado na subrede A ou B. Dessa forma, as subredes A e B exercem o mesmo papel que as componentes de spin na eletrodinâmica. Por isso, $\Psi(\vec{r})$ é chamado de um pseudospinor. Os pseudospinores próximos a um dos cones podem ser obtidos

resolvendo-se a Eq. 2.16:

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}} \begin{pmatrix} e^{-i\theta_{\vec{k}}/2} \\ e^{i\theta_{\vec{k}}/2} \end{pmatrix} e^{\pm \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad \Psi_{\vec{K}'} = \Psi_{\vec{K}}^* \quad (2.17)$$

Onde escolhemos a constante de normalização de tal forma que a função de onda seja normalizada em um quadrado de lados L_x e L_y e os sinais de mais e menos correspondem a elétrons ou buracos com autoenergias dadas por $E = \pm \hbar v_F |\vec{k}|$. A constante $\theta_{\vec{K}}$ é dada por $\theta_{\vec{K}} = \arctan(k_x/k_y)$.

Uma outra propriedade importante dos elétrons de Dirac no grafeno é a quiralidade $\hat{q}$. Ela é definida como a projeção do spin da partícula sobre a direção do momento $\vec{p}$, isto é:

$$\hat{q} = \vec{\sigma} \cdot \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}. \quad (2.18)$$

É fácil de ver da própria definição da quiralidade que os autoestados da Hamiltoniana 2.16 (ou 2.15) são igualmente autoestados do operador de quiralidade:

$$\hat{q}\Psi(\vec{r}) = \pm \frac{1}{2}\Psi(\vec{r}). \quad (2.19)$$

Os sinais significam que estados eletrônicos correspondem a estados com quiralidade positiva, isto é, com pseudospin apontando na direção do momento, e buracos correspondem a estados com quiralidade negativa, pseudospin apontando na direção oposta ao momento.

Para finalizar esta seção, podemos calcular a densidade de estados para a folha de grafeno. Por definição, a densidade de estados é dada por:

$$N(E) = 2 \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \delta(E - E(\vec{k})) \quad (2.20)$$

O fator de 2 é devido ao spin (neste caso, o spin real da partícula) e a integral é tomada ao longo da primeira zona de Brillouin. Para um valor de $E(\vec{k})$ pequeno a relação de energia é praticamente cônica e o valor de E depende unicamente do módulo do vetor de onda $\vec{k}$. Assim, podemos reescrever a Eq. 2.20 em coordenadas polares e substituir o limite de integração em $|\vec{k}|$ sobre todo o espaço uma vez que as contribuições significativas vem somente da vizinhança de um dos cones. Assim:

$$N(E) = 2 \int_0^\infty d|\vec{k}| |\vec{k}| \delta(E - E(|\vec{k}|)) = \frac{2|\vec{k}|}{\pi dE/d|\vec{k}|} = \frac{2E}{\pi \hbar^2 v_F^2} \quad (2.21)$$

Na próxima seção, seguindo o modelo de Dirac, veremos o efeito de um campo magnético aplicado na folha de grafeno sobre os autoestados do sistema.

2.3 Campo Magnético sobre a Folha de Grafeno

Campo magnético pode ser incluindo através de uma transformação de Peierls [25]. No modelo Tigh-Binding, isso se apresenta como uma fase dependente do potencial vetor no parâmetro de hopping:

$$t \rightarrow te^{\frac{ie}{\hbar} \int \vec{A}(\vec{r}) \cdot d\vec{l}}, \quad (2.22)$$

onde a integral de linha deve ser tomada do sítio inicial para o sítio final e $\vec{A}$ é o potencial vetor, dado em termos do campo magnético $\vec{B}$ por $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$. Na aproximação de baixas energias do modelo de Dirac, isso se apresenta como uma mudança no termo envolvendo o momento:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}). \quad (2.23)$$

Nesta seção, usaremos a substituição da Eq. 2.23 para achar os autovalores e autoestados de energia para um elétron no grafeno na presença de um campo magnético. Focaremos nossa atenção somente para elétrons próximos a um ponto (a abordagem sendo análoga em torno de pontos $\vec{K}'$). Usaremos a substituição 2.22 para achar o espectro de energia de nanofitas de grafeno na próxima seção. Substituindo 2.23 em 2.16, chegamos a seguinte equação de autovalores:

$$-i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot (\nabla - e/\hbar c \vec{A}(\vec{r})) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (2.24)$$

Vamos considerar o efeito de um campo magnético uniforme perpendicular a nanofita $\vec{B} = (0, 0, B)$ que pode ser alcançado através do seguinte potencial vetor $\vec{A} = (-By, 0, 0)$. Substituindo isso na Eq. 2.24, obtemos:

$$\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \partial_y + eBy/c - i\partial_x \\ -\partial_y - eBy/c - i\partial_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Pela escolha do potencial vetor, podemos optar por uma solução com dependência periódica na direção y, isto é $\psi_i(x, y) = \psi_i e^{ik \cdot \vec{r}}$ ($i = A, B$). Fazendo uso da definição do comprimento magnético $l_B = \sqrt{\hbar c / eB}$ e fazendo a substituição de y na variável adimensional $\bar{y}$:

$$\bar{y} = \frac{y}{l_B} - kl_B, \quad (2.26)$$

obtemos a seguinte equação:

$$\begin{pmatrix} 0 & (\partial_{\bar{y}} + \bar{y})/\sqrt{2} \\ (\partial_{\bar{y}} - \bar{y})/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Onde a função ϵ é definida em termos da energia por $\epsilon = E/(\sqrt{2}\hbar v_F l_B)$. Podemos definir o seguinte par de operadores:

$$\begin{aligned}\hat{O} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_{\bar{y}} + \bar{y}), \\ \hat{O}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\partial_{\bar{y}} - \bar{y}).\end{aligned}\tag{2.28}$$

É fácil de ver pela definição que $[O, O^\dagger] = 1$. Portanto, os operadores 2.28 representam operadores de destruição e criação de um oscilador harmônico unidimensional. O operador número de forma usual é definido por $\hat{N} = \hat{O}\hat{O}^\dagger$. Portanto, aplicando na segunda componente da Eq. 2.27 o operador $\hat{O}^\dagger$, obtemos:

$$\hat{O}\hat{O}^\dagger\psi_A = \hat{N}\psi_A = \epsilon^2\psi_A,\tag{2.29}$$

com o valor de ψ_B dado por:

$$\psi_B = \frac{1}{\epsilon}O^\dagger\psi_A\tag{2.30}$$

Podemos ver da Eq. 2.29 que as funções de onda ψ_A são autoestados do operador número (o mesmo valendo para ψ_B). Sendo n inteiro um autovalor do operador número temos portanto $\epsilon = \sqrt{n}$ o que implica que as autoenergias são dadas por:

$$E = \sqrt{2n}\hbar v_F l_B = \sqrt{2neBv_F^2/c}.\tag{2.31}$$

Os autoestados também podem ser obtidos. Para $n = 0$, o que implica em $\epsilon = 0$, a Eq. 2.27 pode ser resolvida colocando-se $\psi_A = 0$ e $\psi_B = \Psi_0(\bar{y})$ o estado fundamental do oscilador harmônico, isto é:

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_0(\bar{y}) \end{pmatrix} e^{ikx}\tag{2.32}$$

Para os estados com $n \neq 0$ as Eq.'s 2.29 e 2.30 dão as seguintes soluções para o sistema:

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_n(\bar{y}) \\ \Psi_{n+1}(\bar{y})/\sqrt{n+1} \end{pmatrix} e^{ikx}\tag{2.33}$$

Ψ_n corresponde a n -éssima solução do oscilador harmônico.

Para o vale $\vec{K}'$ é possível mostrar que as equações levam as mesmas autoenergias. Portanto, o sistema apresentado possui degenerescência quadruplica levando em consideração também a degenerescência de spin. Os autoestados de energia apresentados aqui correspondem aos níveis de Landau. No entanto, em contraste com os níveis de Landau para um cristal 2D convencional, os níveis de Landau aqui crescem com a raiz quadrada de B e, por conta disso, apresentam um espaçamento não-uniforme. Além disso há a presença de um estado de energia zero para $n = 0$. Esse estado apresenta ainda a característica de ser

topologicamente protegido, isto é, ele é robusto com relação a inomogenidades aplicadas ao sistema[26]. Todas as características apresentadas aqui são consequência do caráter relativístico dos elétrons se propagando no grafeno e além disso podem ser alcançados experimentalmente. Uma última observação pode ser feita em relação a validade do nosso modelo, baseado na substituição 2.23. Ele é válido contanto que seja desconsiderada a possibilidade de transições interbandas. Pode ser mostrado que contanto que o comprimento magnético l_B seja muito maior do que a , o que é violado somente para campos muito altos, nossa aproximação é válida.

2.3.1 Efeito Hall Quântico no Grafeno

Um dos resultados mais surpreendentes obtidos que comprovam o comportamento relativístico das partículas no grafeno é a medida da condutividade Hall. Num sistema sobre a influência de campos magnético e elétrico perpendiculares, o efeito Hall é um fluxo de partículas na direção perpendicular a corrente elétrica. No regime Hall quântico, se os níveis eletrônicos são preenchidos até uma certa energia, devido a presença de impurezas, os únicos estados que contribuem para a condutividade do sistema são os estados correspondentes a níveis de Landau. Estados entre níveis de Landau permanecem localizados, fenômeno conhecido como localização de Anderson. Podemos obter o valor da conduti-

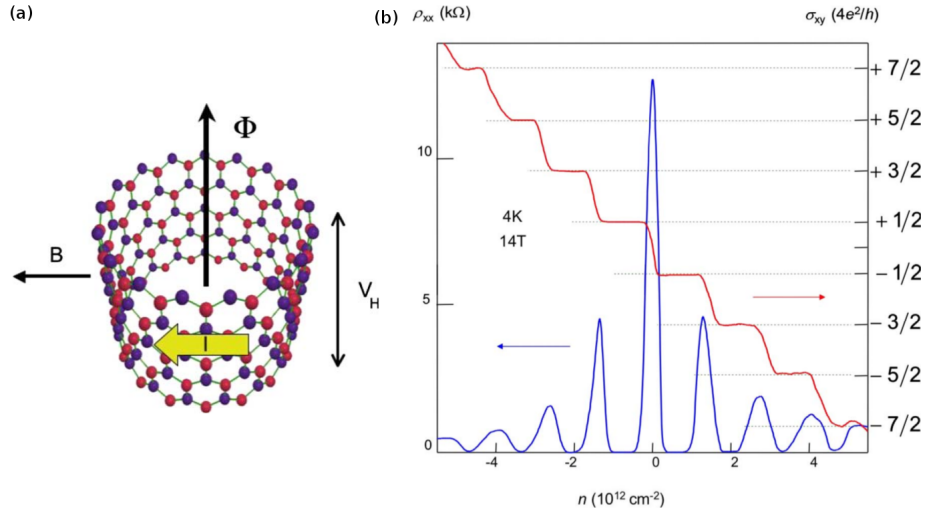


Figura 11: (a) Representação do sistema utilizado para calcular a condutividade Hall; (b) Condutividade σ_{xy} e resistividade ρ_{xx} no regime Hall como funções da concentração de estados. Figuras adaptadas de [42]

vidade utilizando a representação da Fig. 11, onde o campo magnético é perpendicular a folha em todo ponto, a direção x é tangente ao círculo e a condutividade Hall σ_{xy} é a

condutividade perpendicular a direção x. Seguindo esse modelo é possível mostrar que a condutividade é dada por[42]

$$\sigma_{xy} = \frac{I}{V_H} = \frac{1}{V_H} \frac{c\delta E}{\delta\phi}. \quad (2.34)$$

Aqui, V_H , como mostrado na Fig. 11, é a diferença de potencial entre as bordas, E é a energia e ϕ o fluxo do campo magnético sobre o loop da fita. Para uma variação de um quantum de fluxo $\delta\phi = hc/e$ a mudança de energia correspondente é $\delta E = \pm g_S g_v (N + 1/2)eV_H = 4(N + 1/2)eV_H$. O fator $1/2$ é uma consequência do caráter relativístico dos níveis de Landau no grafeno. Como o estado com $n = 0$ é compartilhado tanto por elétrons como por buracos, ele contribui com $1/2$ na medida da condutância. Portanto, temos:

$$\sigma_{xy} = \pm(4N + 1)\frac{e^2}{h}. \quad (2.35)$$

Na Fig. 11(b) está representada a condutividade σ_{xy} , bem como a resistividade ρ_{xx} para esse sistema.

Na próxima seção, veremos como incluir o efeito de um campo elétrico no grafeno e algumas das principais consequências de um campo elétrico no sistema.

2.4 Campo Elétrico sobre a folha de Grafeno

Podemos incluir o efeito de um campo elétrico na nossa abordagem através da inclusão de um potencial eletroestático ϕ (dado em termos do campo elétrico por $\phi = -\int \vec{E} \cdot d\vec{l}$), uma vez que não estamos tomando grandezas que variam no tempo. Vamos nos limitar a estudar as soluções próximas a um vale $\vec{K}$. A inclusão é feita da mesma forma que na equação de Schrödinger:

$$-i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}) + \phi(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}). \quad (2.36)$$

Um das principais diferenças do grafeno, em relação a outros materiais bidimensionais é que não se pode aprisionar elétrons no grafeno através de um potencial puramente eletroestático. Ilustraremos esse efeito através do paradoxo de Klein na próxima seção.

2.4.1 Tunelamento de Klein

Vamos considerar um potencial eletroestático definido ao longo da direção x pela função $\phi = U_0(1 - \theta(|x| - L/2))$, isto é, o potencial ϕ é U_0 dentro de uma região de largura L em torno da origem e zero fora. Seguiremos a solução apresentada em [28].

Como ϕ não possui dependência na direção y , a solução ao longo da direção y corresponde a ondas planas. Assim, podemos escrever, utilizando separação de variáveis, a seguinte solução: $\Psi_{A(B)}(x, y) = e^{ik_y y} \psi_{A(B)}(x)$. A solução para as três regiões é a mesma dada pela Eq. 2.17, sendo que: para $x < -L/2$, vamos considerar uma solução correspondendo à uma onda incidente e refletida; para $-L/2 \leq x \leq L/2$ o valor de E deve ser substituído por $E - U_0$; e para $x > L/2$ consideramos somente uma onda transmitida. Isto é podemos escrever a nossa solução da seguinte forma:

$$\psi_A = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < -L/2 \\ A_1 e^{i\alpha x} + A_2 e^{-i\alpha x} & -L/2 \leq x \leq L/2 \\ Te^{ikx} & x > L/2 \end{cases} \quad (2.37)$$

As funções k e α são dadas por $k = L\sqrt{(E/\hbar v_F)^2 - k_y^2}$ e $\alpha = L\sqrt{((E - U_0)/\hbar v_F)^2 - k_y^2}$. A probabilidade de um elétron incidente através da região com $x < -L/2$ ser transmitido é dada pelo módulo quadrado do coeficiente T . Podemos encontrar o valor de T utilizando as condições de continuidade em $x = -L/2$ e em $x = L/2$. Assim, aplicando as condições obtemos:

$$T = \frac{(g_+ - g_-)(f_+ - f_-)e^{-i\alpha}}{(g_+ - f_+)(g_- - f_-)e^{2ik} - (g_+ - f_-)(g_- - f_+)}, \quad (2.38)$$

onde temos $g_{\pm} = (k_y \pm ik)\hbar v_F/(E - U_0)$ e $f_{\pm} = (k_y \pm i\alpha)\hbar v_F/E$. A função $|T|^2$ está plotada na figura 12 como função de k_y e k para os valores de $U_0 = 50$ meV e 50 nm. É interessante observar que para incidência normal sobre a barreira, que corresponde a fazer $k_y = 0$, a transmissão é sempre máxima. Além disso, para outros valores do ângulo de incidência ocorrem valores em que a transmissão torna-se 1 novamente. Esse fenômeno é

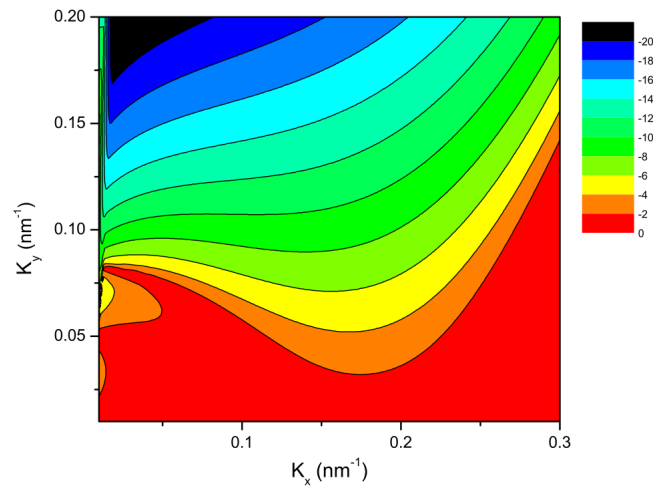


Figura 12: Transmissão através de uma barreira de potencial como função de k_x e k_y para $L = 50$ nm e $U_0 = 50$ meV. Figura adaptada de [28].

conhecido como tunelamento de Klein. Apesar de termos tratado do caso mais simples de uma barreira de potencial, é possível mostrar que esse fenômeno também se manifesta em campos inhomogêneos, sendo mais uma evidência do caráter relativístico dos portadores de carga no grafeno. Na próxima subseção, consideraremos o efeito de um campo elétrico no comportamento dos elétrons a baixas energias no grafeno.

2.4.2 Campo Elétrico Uniforme

Para o caso de um campo elétrico uniforme na direção y , temos um potencial eletrostático dado por $\phi(x, y) = U_0 y$, com U_0 constante. Novamente, como o potencial independe de uma das coordenadas, nesse caso a coordenada x , o momento ao longo dessa direção é um bom número quântico e podemos escrever: $\Psi(x, y) = e^{ikx}\psi(y)$. Assim ficamos com a seguinte equação para o sistema em torno do vale $\vec{K}$:

$$\begin{pmatrix} U_0 y & \hbar v_F(k - \partial_y) \\ \hbar v_F(k + \partial_y) & U_0 y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

A equação em torno do vale $\vec{K}'$ é a mesma equação acima se substituirmos a ordem das componentes dos pseudospinor². Vamos realizar uma transformação unitária sobre o sistema, dada pela matriz U definida por:

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

a fim de obtermos uma representação mais simples para o Hamiltoniano 2.39. Sobre a aplicação desse operador, obtemos a seguinte Hamiltoniana transformada:

$$\hat{H}' = U \hat{H} U^\dagger = \begin{pmatrix} U_0 y - i\hbar v_F \partial_y & -i\hbar v_F k \\ i\hbar v_F k & U_0 y + i\hbar v_F \partial_y \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Agora temos uma nova equação de autovalores para o sistema dada por $\hat{H}'\Psi(y)' = E\Psi(y)'$ e $\Psi(y)'$ é dada por $\Psi(y)' = U\Psi(y)$. Definindo $\epsilon = E/\hbar v_F$ e $u_0 = U_0/\hbar v_F$, ficamos com o seguinte par de equações:

$$\begin{aligned} -i\partial_y \psi'_A + u_0 y \psi'_A - ik\psi'_B &= \epsilon \psi'_A \\ i\partial_y \psi'_B + u_0 y \psi'_B + ik\psi'_A &= \epsilon \psi'_B \end{aligned} \quad (2.42)$$

²Fazemos essa observação por que consideraremos condições específicas sobre as soluções para determinar o efeito do campo sobre as auto-energias. Essas condições envolvem as soluções nos dois vales.

Se considerarmos uma aproximação $k = 0$, o que equivale a dizer que a onda não se propaga ao longo da direção perpendicular ao campo, as equações 2.42 tornam-se desacopladas. A solução é obtida de maneira direta:

$$\psi'_A = c_1 e^{i(\epsilon y - u_0 y^2/2)}; \quad \psi'_B = c_2 e^{-i(\epsilon y - u_0 y^2/2)}; \quad k \approx 0. \quad (2.43)$$

A solução para $\hat{H}$ é obtida aplicando-se a transformada inversa $U^\dagger$ sobre a solução 2.43. Dessa forma, obtemos:

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_1 e^{i(\epsilon y - u_0 y^2/2)} + c_2 e^{-i(\epsilon y - u_0 y^2/2 - i\theta)} \\ c_1 e^{i(\epsilon y - u_0 y^2/2)} - c_2 e^{-i(\epsilon y - u_0 y^2/2 - i\theta)} \end{pmatrix} e^{ikx}. \quad (2.44)$$

Fatores constantes multiplicando o mesmo termo em ambas componentes foram integrados na constante multiplicativa. Para o vale $\vec{K}'$, a solução é idêntica a apresentada acima com ψ_A e ψ_B trocados. Obtemos a seguinte solução:

$$\Psi_{\vec{K}'}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} c_3 e^{i(\epsilon y - u_0 y^2/2)} + c_4 e^{-i(\epsilon y - u_0 y^2/2 - i\theta)} \\ c_3 e^{i(\epsilon y - u_0 y^2/2)} - c_4 e^{-i(\epsilon y - u_0 y^2/2 - i\theta)} \end{pmatrix} e^{ikx}. \quad (2.45)$$

A solução fica em função das novas constantes c_3 e c_4 a serem determinadas. Podemos também aplicar condições de contorno sobre as soluções e ver como isso influencia nas autoenergias do sistema. Vamos considerar condições de contorno para o sistema limitado ao longo da direção do campo elétrico com bordas armchair que serão definidas no capítulo 3 (Ver Fig. 14). Pode ser mostrado [29] que estas condições de contorno para esse tipo de borda, sendo L a largura do sistema ao longo da direção do campo, são dadas por:

$$\begin{aligned} \Psi_{A,\vec{K}}(-L/2) &= \Psi_{A,\vec{K}'}(-L/2) \\ \Psi_{B,\vec{K}}(-L/2) &= \Psi_{B,\vec{K}'}(-L/2) \\ \Psi_{A,\vec{K}}(-L/2) &= e^{2\pi i\nu} \Psi_{A,\vec{K}'}(L/2) \\ \Psi_{B,\vec{K}}(-L/2) &= e^{2\pi i\nu} \Psi_{B,\vec{K}'}(L/2) \end{aligned} \quad (2.46)$$

A constante $\nu = 0, \pm 2/3$. Substituindo-se as soluções 2.44 e 2.45 em 2.46, obtemos a seguinte condição:

$$e^{i(\epsilon L + u_0 L^2/4)} = e^{2\pi i\nu} e^{\epsilon L - u_0 L^2/4}, \quad (2.47)$$

o que leva a seguinte expressão para as autoenergias:

$$\epsilon = \frac{\pi}{L}(2m + \nu) \leftrightarrow E = \frac{\hbar v_F}{L}(m + \frac{\nu}{2}), \quad (2.48)$$

para m inteiro. Da expressão acima, vemos que, para $k = 0$, a energia, dentro da aproximação de Dirac, com as condições de contorno especificadas torna-se independente do

campo elétrico.

Podemos encontrar a solução completa para k diferente de zero. Para isso, substituímos a segunda equação 2.42 na primeira. Obtemos assim, o seguinte par de equações:

$$\begin{aligned} [\partial_y^2 + (\epsilon - u_0 y)^2 + i u_0 - k^2] \psi'_A &= 0 \\ \psi'_B &= -\frac{1}{k} (\partial_y - i u_0 y + i \epsilon) \psi'_A \end{aligned} \quad (2.49)$$

A equação diferencial 2.49 pode ser resolvida aplicando-se o método de Frobenius. As soluções obtidas são as chamadas funções cilíndricas parabólicas [30]. Existem duas soluções independentes correspondendo a soluções pares ou ímpares. Elas são dadas por:

$$\begin{aligned} \psi'_A &= e^{-i(\epsilon - u_0 y)^2 / 2u_0} {}_1F_1(ik^2/4u_0 + 1/2; 1/2; i(\epsilon - u_0)^2/u_0) \\ \psi'_B &= e^{-i(\epsilon - u_0 y)^2 / 2u_0} {}_1F_1(ik^2/4u_0 + 3/2; 3/2; i(\epsilon - u_0)^2/u_0) \end{aligned} \quad (2.50)$$

Aqui, a função ${}_1F_1$ é a função hipergeométrica confluyente [30]. Podemos novamente aplicar a transformada inversa, voltar para o sistema original e aplicar as condições de contorno do problema.

2.5 Campos Elétrico e Magnético Transversais

Vamos discutir nessa seção o efeito da aplicação de campos elétrico transversal e magnético perpendicular simultâneos sobre a folha de grafeno. Enunciaremos somente os principais resultados da aplicação dos campos sobre a folha de grafeno. A solução completa pode ser encontrada nas referências: [31] [32].

A inclusão dos campos é feita da mesma forma que nas seções anteriores, onde adicionamos o quadripotencial $(\vec{A}, \phi)$, separadamente, na equação de Dirac:

$$-i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot (\nabla - e/\hbar c \vec{A}(\vec{r})) \Psi(\vec{r}) + \phi(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}). \quad (2.51)$$

Faremos uso do mesmo Gauge para o potencial vetor, $\vec{A}(\vec{r}) = (-By, 0, 0)$ e do potencial elétrico, $\phi(\vec{r}) = U_0 y$. Nosso tratamento pressupõe que $U_0 \geq ev_F B/c$. Utilizando a definição dos operadores de criação e destruição O e $O^\dagger$ apresentadas na equação 2.28, chegamos a uma nova equação de autovalores para o sistema:

$$\begin{pmatrix} A_E(O + O^\dagger) & A_B O \\ A_B O^\dagger & A_E(O + O^\dagger) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (2.52)$$

Onde, os valores de A_E , A_B e E_0 são dados por: $A_E = U_0 l_B / \sqrt{2}$, $A_B = \sqrt{2} \hbar v_F / l_B$ e

$E_0 = -(E + U_0 l_B^2 k)$. Devemos diagonalizar a Eq. 2.52 para encontrarmos os autovalores e as autofunções num campo cruzado. Isso é feito em [32] separando o problema em duas equações de autovalores. Primeiro, notamos que as combinações de $\hat{H}$ e $\hat{\hat{H}} = \sigma_z \hat{H} \sigma_z$ dadas por $\hat{H} + \hat{\hat{H}}$ e $\hat{H} - \hat{\hat{H}}$ podem ser separadas em uma parte escalar mais uma matriz real e que, portanto, uma combinação linear destes irá satisfazer a mesma propriedade, isto é:

$$\mu(\hat{H} + \hat{\hat{H}}) + \nu\hat{H}\hat{\hat{H}} = J\hat{1} + K; \quad (2.53)$$

Segundo, aplicamos o operador 2.53 num autoestado de $\hat{H}$, com $\mu = E_0$ e $\nu = -1$, o que nos leva a uma nova equação dada por:

$$(J\hat{1} + K) |\psi\rangle = E_0^2. \quad (2.54)$$

Da Eq. 2.54, podemos ver que a solução pode ser escrita como o produto externo de dois termos:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

onde $|\phi\rangle$ é a solução da equação escalar J e $(u \ v)^T$ é a solução da equação de autovalores K . Um cuidado deve ser tomado ao resolver-se a Eq. 2.54, pois seus autovalores são E_0^2 e não E_0 . Portanto, soluções com E_0 e $-E_0$ são degeneradas e precisam ser diferenciadas. Prosseguindo com a solução da Eq. 2.54, fazendo a distinção entre os estados degenerados e substituindo E_0 e E é possível mostrar que ela gera o seguinte conjunto de autovalores de energia:

$$E = -U_0 l_B^2 k \mp \frac{(A_B^2 - 4A_E^2)^{3/4}}{A_B^{1/2}} \sqrt{n}. \quad (2.56)$$

Novamente temos na solução 2.56 o aparecimento dos níveis de Landau com a quantização dada por n , onde n é inteiro. Vemos, no entanto, que, além de um desvio do nível zero de Landau por $-U_0 l_B^2 k$, a frequência ciclotrônica $\Omega_C = (A_B^2 - 4A_E^2)^{3/4}/A_B^{1/2}$ passa a depender do campo elétrico, o que é completamente diferente em relação ao caso não-relativístico. Como uma consequência, para o valor crítico de campo elétrico satisfazendo a relação $u_0 = ev_F B$, a frequência ciclotrônica vai a zero e portanto os níveis de Landau colapsam para um ponto como está representado na Fig. 13.

No próximo capítulo, estudaremos algumas das propriedades eletrônicas das nanofitas de grafeno que serão as unidades básicas para as heteroestruturas balísticas estudadas nessa dissertação. Em particular, focaremos nas propriedades das nanofitas sobre a aplicação de campos elétrico e magnético externos, como os abordados nesse capítulo. O entendimento dessas propriedades servirá para compreendermos as propriedades de transporte desses

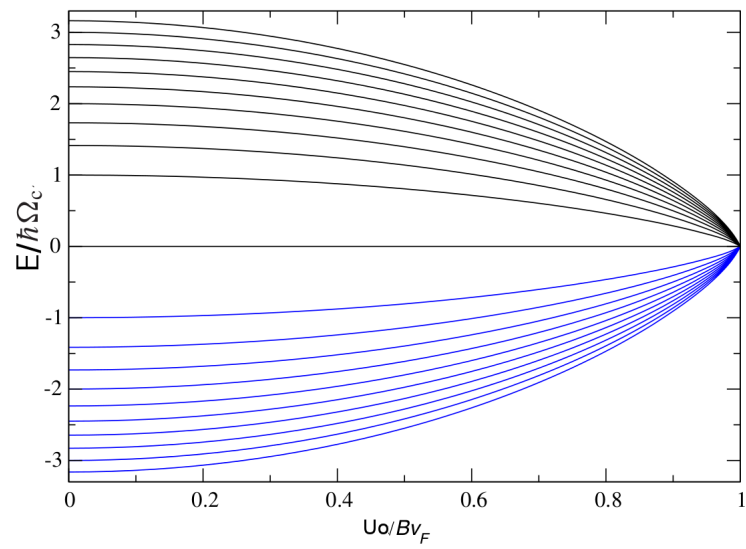


Figura 13: Níveis de Landau no Grafeno em função do campo Elétrico. Imagem adaptada de [32].

sistemas.

3 NANOFITAS DE GRAFENO

Nanofitas são definidas como heteroestruturas unidimensionais, isto é, possuem periodicidade ao longo de uma direção e são limitadas ao longo da direção perpendicular. A borda da nanofita, em geral, pode ter uma forma arbitrária. Vamos focar nos dois tipos de borda mais simples, a saber bordas *armchair* e *zigzag*, que são rotacionadas uma da outra cristalograficamente de 30° . Na Fig. 14 estão representados esses dois casos de nanofita. Também destacamos a célula unitária para cada uma das geometrias. Como veremos mais adiante, o fato de confinarmos o sistema ao longo de uma direção traz muitas propriedades novas. Nanofitas possuem, por exemplo, *gap* dependendo do número de linhas. Esse *gap*, no entanto, decresce com o aumento da largura da nanofita e *gaps* apreciáveis podem ser obtidos somente com fitas de largura da ordem de nanômetros, o que é muito difícil de ser obtido e, portanto, dificulta as aplicações eletrônicas. Outras características das nanofitas serão apresentadas mais adiante. Vamos falar inicialmente sobre as possibilidades de realização experimental das nanofitas.

3.1 Fabricação de Nanofitas

Um dos processos de fabricação de nanofitas consiste na utilização de plasma para eliminar partes indesejadas do material (conhecida como *plasma etching*) e criar estruturas como nanofitas. Nesse processo, é necessário que se utilize uma máscara colocada sobre o material para delimitar as partes que não serão eliminadas do substrato. No trabalho realizado por Han et al.[33], por exemplo, hidrogênio-silsesquioxano é utilizado para formar a máscara, o que permite realização de nanofitas com espessura variando de 10 a 100 nm. Outros tipos de máscara permitem que se obtenha valores menores de espessura. Por exemplo, no trabalho de Bai et al.[34] foram utilizados nanofios de ouro como máscaras. Isso permitiu a obtenção de nanofitas com tamanho de 2 a 3 nm (Fig. 16 (a)).

Uma outra forma de obtenção de nanofitas é através de um processo de abertura de nanotubos de carbono (Fig. 15 (b)). Já existem vários métodos utilizados para realizar-

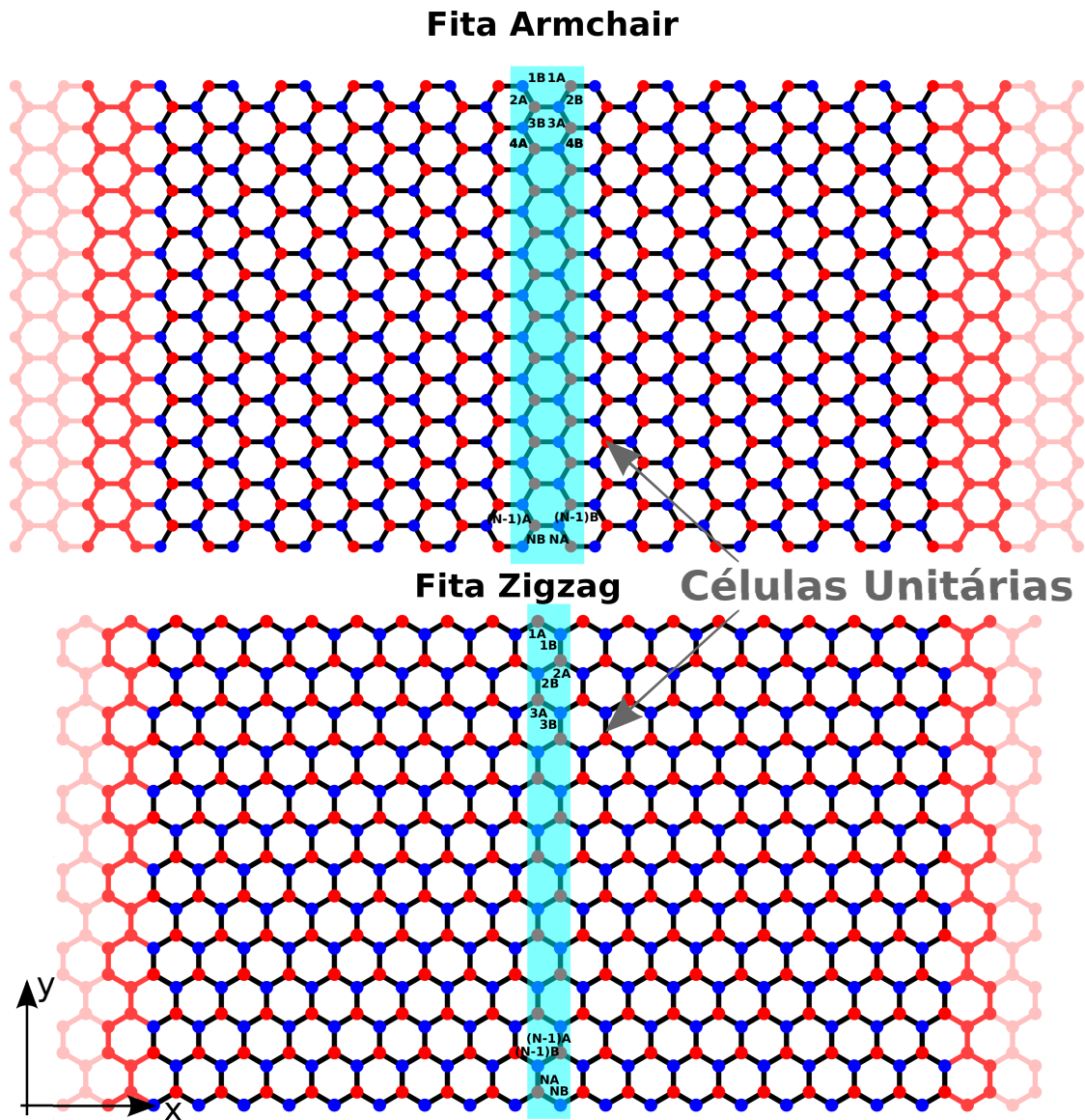


Figura 14: Dois tipos de nanofitas mais estudados, armchair e zigzag, com as respectivas células unitárias em destaque.

se esta abertura. Um deles, utiliza uma suspensão de nanotubos de carbono em ácido sulfúrico seguido de um tratamento com permanganato de potássio, o que leva ao desembrulhamento do nanotubo[35]. Outro método utiliza um processo de sonicação, onde coloca-se primeiro o nanotubo em contato com ar a 500° C num processo conhecido como calcinação que permite a remoção de impurezas e oxidação dos sítios com defeito seguido pela sonicação¹ em que o nanotubo é desembrulhado dando origem à nanofita[36].

¹Consiste no uso da energia das ondas sonoras.

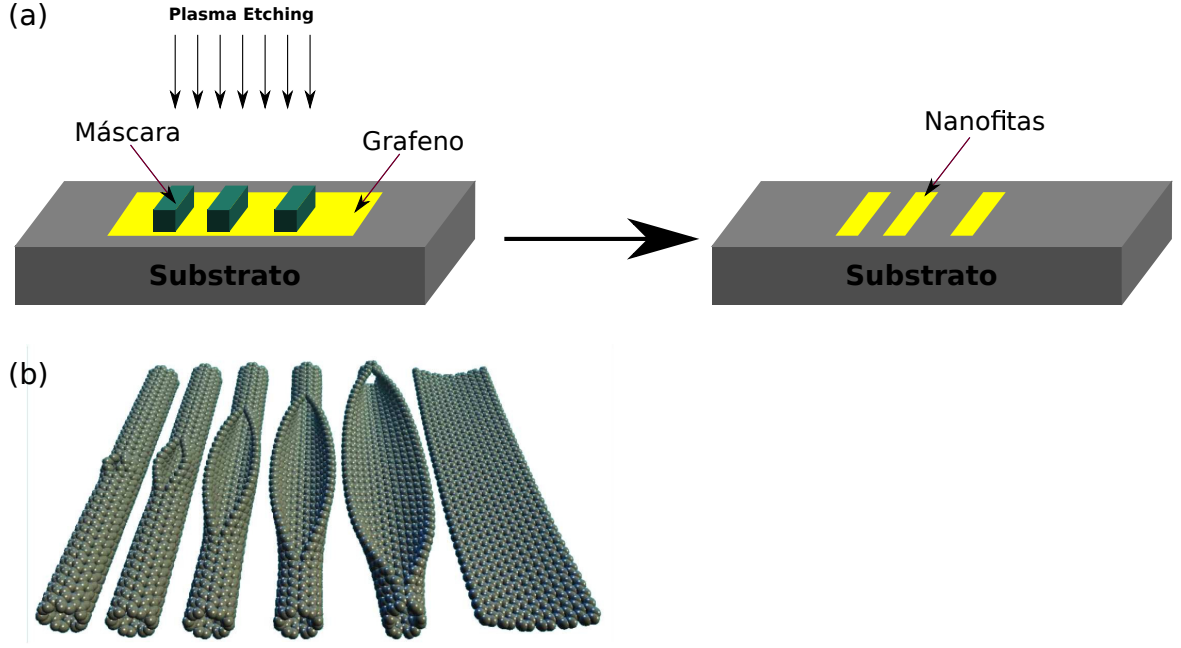


Figura 15: Representação esquemática dos dois métodos de obtenção de nanofitas de grafeno apresentados aqui: (a) *Plasma Etching*; (b) Desempacotamento (*unzipping*) de nanotubos. Fig. (b) adaptada de [35].

3.2 Modelo Tight-binding para a nanofita

Os primeiros cálculos Tight-Binding para nanofitas de grafeno foram realizados por Nakada et al. em 1996 [37] com interesse em identificar as principais consequências da existência das bordas nos estados do grafite. Quando considerarmos nanofitas, é mais conveniente substituir o somatório sobre os sítios da rede apresentado na Eq. 2.3 por um somatório sobre as linhas e célula unitária, uma vez que agora o sistema é limitado ao longo de uma das direções (direção y na Fig. 14). As linhas são caracterizadas de formas diferentes para os dois tipos de geometria básica apresentadas acima. No caso de bordas *armchair*, cada linha de átomos, corresponde a uma linha. No caso *zigzag*, no entanto, uma linha corresponde a um par de linhas com átomos do tipo A e B adjacentes (Como pode ser visto da Fig. 14 considerando-se, por exemplo, os sítios 1A e 1B).

Para encontrar o espectro de energia para o sistema podemos utilizar o fato de que as linhas de átomos são infinitas e periódicas (Com periodicidade dada através das células unitárias). Assim, podemos realizar uma transformada de Fourier sobre os *Ket's* de estado, $|i\rangle$, ao longo dessa direção. Portanto, temos:

$$|i, n, A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_k e^{ikx_i} |k, n, A\rangle; \quad (3.1)$$

$$|j, n, B\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{k'} e^{ik'x_j} |k', n, B\rangle. \quad (3.2)$$

Aqui, N_c representa o número de átomos na célula unitária, que é igual para os sítios A e B. Também escolhemos representar os *ket's* não só por sua posição no espaço, real ou de fase, mas também pela posição da linha. Substituindo as expressões 3.1 e 3.2 no Hamiltoniano 2.3, chegamos a seguinte expressão para o Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\frac{t}{N_c} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \sum_{n,n'} (e^{ikx_i} e^{-k'x_j} |k, n, A\rangle \langle k', n', B| + H.c) \quad (3.3)$$

Podemos simplificar essa expressão utilizando a condição de ortonormalidade das transformadas de Fourier. Realizamos um série de manipulações sobre a Eq. 3.3 e chegamos a seguinte expressão para a Hamiltoniana.

$$\hat{H} = -t \sum_{k,n,n'} (\tau_{n,n'} |k, n, A\rangle \langle k, n, B| + H.c), \quad (3.4)$$

onde o coeficiente $\tau_{n,n'}$ vem da condição de estarmos considerando somente uma soma sobre os primeiros vizinhos e é dado por:

$$\tau_{n,n'} = \begin{cases} \alpha\delta_{n,n'} + \beta\delta_{n,n'-1} + \gamma\delta_{n,n'+1} & (bordas \text{ armchair}) \\ \beta\delta_{n,n'} + \gamma\delta_{n,n'\pm 1} & (bordas \text{ zigzag}) \end{cases} \quad (3.5)$$

Os coeficientes α , β e γ são dados pela seguinte tabela: Para o caso *zigzag*, o sinal de cima

	Armchair	Zigzag
α	$t_0 e^{ik_x a}$	0
β	$t_0 e^{ik_x a/2}$	$2t_0 \cos(\sqrt{3}k_x a/2)$
γ	$t_0 e^{ik_x a/2}$	t_0

Tabela 1: Coeficientes de $\tau_{n,n'}$.

(baixo) na Eq. 3.5 representa linhas ímpares (pares). Calculamos os elementos de matriz na representação de momento para o Hamiltoniano dados por $H_{nn'} = \langle k, n, A| \hat{H} |k, n, B\rangle$ ou $H_{nn'} = \langle k, n, B| \hat{H} |k, n, A\rangle$ e chegamos a seguinte representação matricial:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & T_0 \\ T_0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

Com a matriz T_0 dada por:

$$T_0 = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \beta & \alpha & \gamma & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \gamma & \alpha & \beta & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \beta & \alpha & \gamma & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Correspondentemente, os valores das autoenergias permitidas para o sistema são obtidas calculando-se os autovalores da Eq. 3.6.

Nas Fig.'s 16(a),(b) e (c) está representado o espectro de energia para a nanofita *armchair* correspondente à 35, 36 e 37 linhas de átomos e nas Fig. 17(a) e (b) para nanofitas *zigzag* com 34 e 4 linhas. Nos gráficos plotamos a energia, em unidades do parâmetro de *hopping*, versus o número de onda em unidades de $1/a$, onde a é a distância interatômica. Vemos que, para o caso de bordas *armchair*, existem três situações distintas, sendo uma condutora (Fig. 16(a)) e duas semicondutoras (Fig.'s 16(b) e (c)). É possível mostrar que sempre que o número de linhas é dado por um termo da forma $N = 3M - 1$, onde M é um inteiro, a fita é condutora². Outra característica importante das nanofitas *armchair* é que o *gap* de energia decresce com o aumento da largura da nanofita, como pode ser observado na Fig. 16(d). Esse resultado também pode ser obtido analiticamente [38]. Com efeito, é possível mostrar que o *gap* Δ_a para as nanofitas é dado pela seguinte expressão:

$$\Delta_a = \begin{cases} 0 & N = 3M - 1, \\ 2t[1 + \cos(3M\pi/(3M + 1))] & N = 3M, \\ 2t[1 + \cos((3M + 1)\pi/(3M + 2))] & N = 3M + 1. \end{cases} \quad (3.8)$$

Portanto, o *gap* torna-se zero quando a espessura da fita tende a infinito. Outra característica do espectro para as nanofitas *armchair* é que podemos obtê-lo do espectro da folha infinita de grafeno tomando valores discretos de k_y que serão projetados sobre o plano E versus k_x . Esse resultado, que é análogo ao resultado para nanotubos de carbono, é devido ao fato de que, para nanofitas *armchair*, o vetor de onda ao longo da direção de propagação é independente do vetor de onda transversal.

O espectro de energia das nanofitas também nos permite obter diversas outras propriedades do sistema. Por exemplo, a densidade local de estados (LDOS), que corresponde

²E, portanto, semicondutora quando o número de linhas for da forma $3M$ e $3M + 1$.

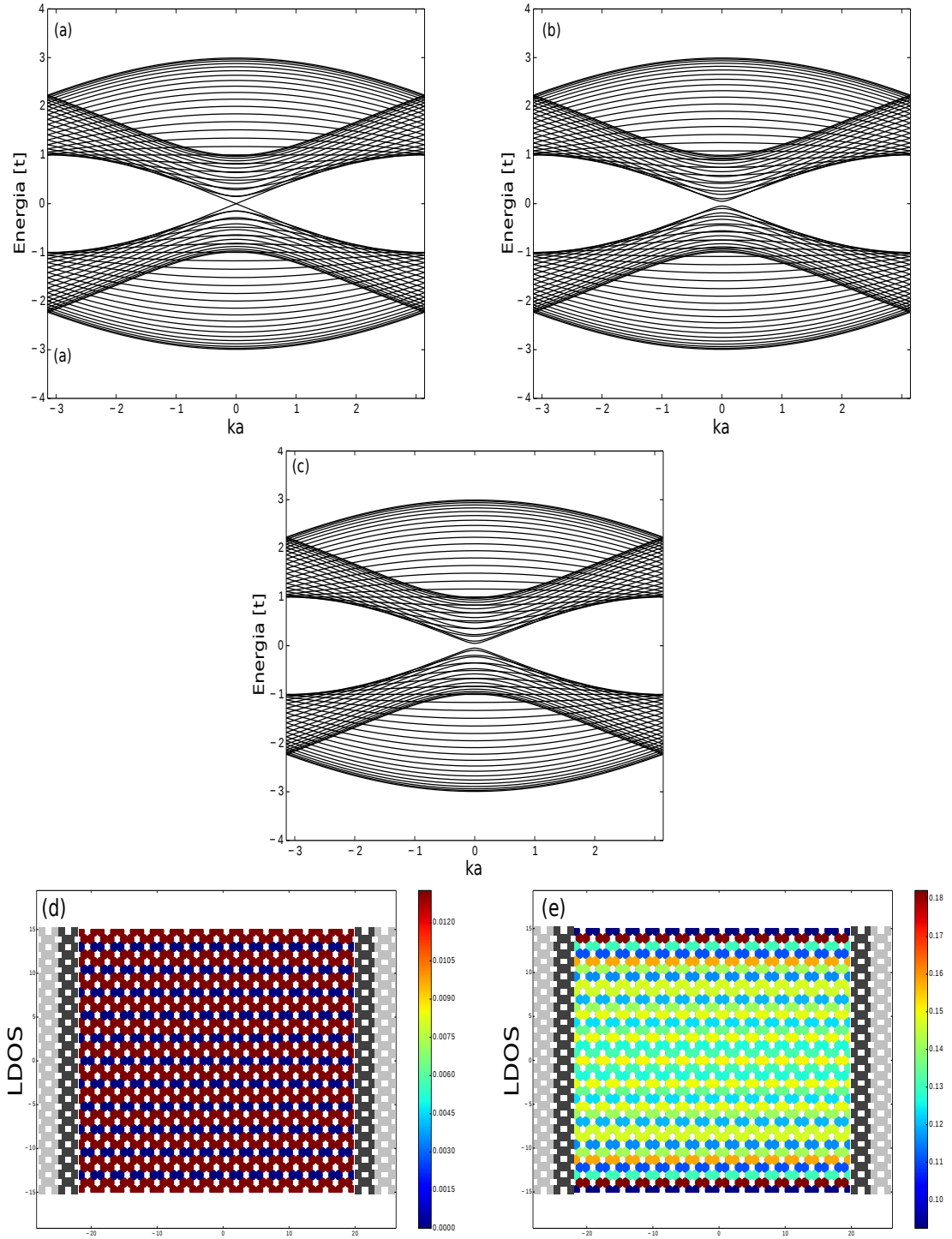


Figura 16: (a), (b) e (c): Relação de dispersão para nanofitas de grafeno *armchair* com larguras de 35, 36, e 37 linhas respectivamente; (d) e (f) Densidade local de estados (ldos) para nanofita armchair de largura de 30 linhas com energias de 0 eV e 2 eV.

a uma medida espacial da densidade do sistema, é dada pela seguinte expressão:

$$LDOS(E, x) = 2 \sum_n \int \frac{dk}{2\pi} |\langle x | \Psi_{k,n} \rangle|^2 \delta(E - E_{k,n}), \quad (3.9)$$

onde a soma em n varia sobre todas as bandas permitidas para uma energia e a integral vai sobre os valores permitidos de energia. Na Fig. 16(e) e (f) está representada a ldos para nanofita de grafeno com 35 linhas a dois valores específicos de energia: $E = 0$ eV e $E = 5,6$ eV. Vemos que os estados para nanofita armchair são espalhados ao longo da fita, o que corresponde a não-localização de estados no sistema perfeito.

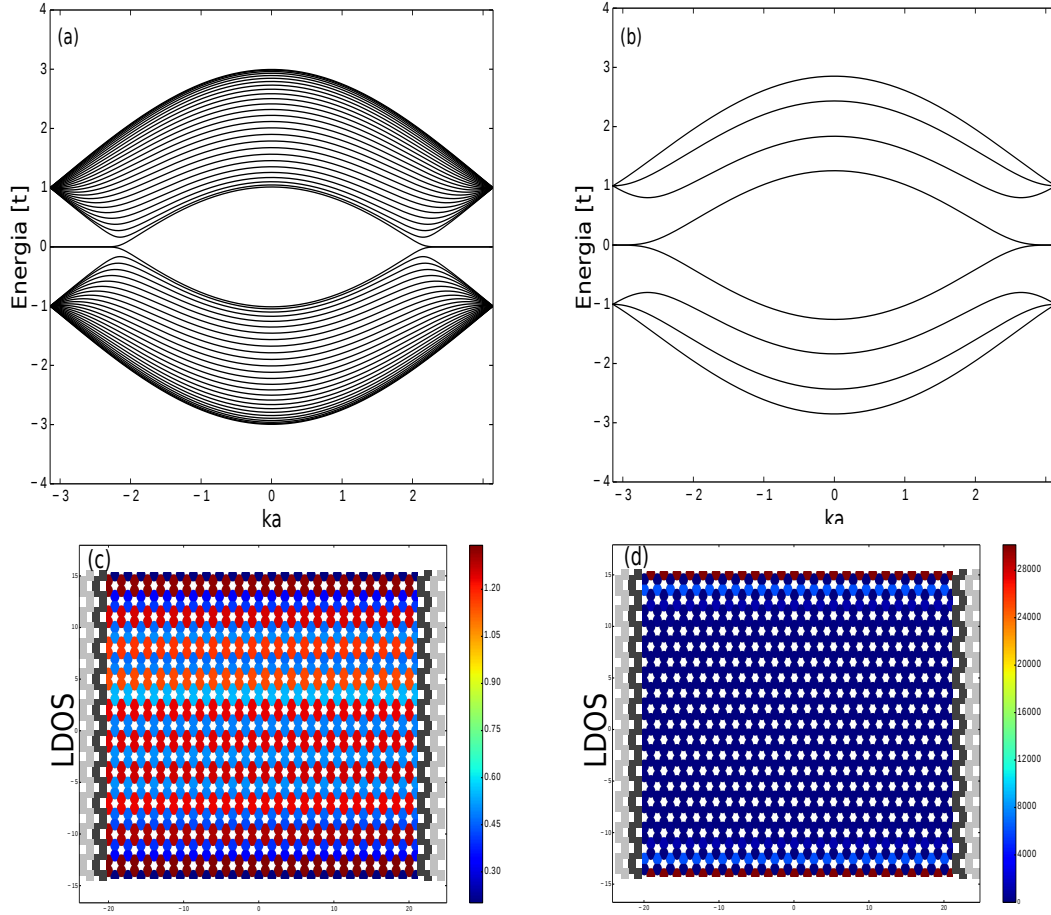


Figura 17: (a) e (b): Relação de dispersão para nanofitas de grafeno zigzag com larguras de 21 e 5 linhas; (c) e (d) Densidade local de estados (LDOS) para nanofita zigzag de largura de 21 linhas e energias de 0 eV e 1 eV, respectivamente.

Para o caso de nanofitas com bordas zigzag, a fita é sempre condutora. O base da banda de condução e a topo da banda de valência (O nível de Fermi é localizado em $E = 0$) é degenerado em um intervalo próximo de $-\pi$ e π e, à medida que a largura da fita torna-se maior, esse intervalo de degenerescência torna-se mais plano compreendendo as regiões entre $-\pi \leq ka \leq -2\pi/3$ e $2\pi/3 \leq ka \leq \pi$. Como consequência, fitas zigzag não podem ser obtidas do espectro para folha infinita e isso tem a ver com o fato de que o momento transversal depende do momento ao longo da direção de propagação[38].

Os estados planos para fitas zigzag estão relacionados com localização ao longo das bordas. Isso pode ser evidenciado ao analisarmos a Fig. 17(d) que mostra a LDOS para nanofita zigzag a energia de Fermi $E = 0$. Vemos que a densidade local de estados é praticamente zero ao longo da fita com picos bastante elevados ao longo das bordas. Estados de borda são bastante robustos. Na situação geral, em que temos uma mistura de bordas armchair e zigzag, mesmo quando a parte correspondente a bordas zigzag é mínima ainda há a existência de estados de bordas. Esses estados de bordas são responsáveis por muitas propriedades interessantes de nanofitas zigzag, como polarização de spin e ferrimagnetismo [38].

Na próxima seção consideraremos o efeito da aplicação de um campo uniforme sobre as nanofitas e quais as principais modificações em suas propriedades eletrônicas.

3.3 Campo Elétrico sobre a nanofita de Grafeno

De forma análoga à que foi feita para o caso do grafeno infinito na aproximação de baixas energias, nesta seção vamos considerar a aplicação de um campo elétrico uniforme perpendicular ao comprimento do sistema com potencial da forma $V(y) = u_0 y$ sobre as nanofitas. Resultados idênticos aos apresentados aqui podem ser encontrados em [39]-[41]. O campo Elétrico pode ser incluído na nossa abordagem adicionando o seguinte termo para o Hamiltoniano 2.3:

$$\sum_i V(y)(|i, A\rangle \langle i, A| + |i, B\rangle \langle i, B|). \quad (3.10)$$

Na realidade, a aplicação de um campo elétrico deve distorcer as ligações nas bordas e modificar o valor do parâmetro de hopping. No entanto, na nossa abordagem vamos assumir que ambos permanecem constante e que o efeito do campo elétrico é unicamente dado pela expressão 3.10. Substituindo os valores das transformadas dadas pelas Eq.'s 3.1 e 3.2, esse termo torna-se:

$$\sum_{k,n} V(y_n)(|k, n, A\rangle \langle k, n, A| + |k, n, B\rangle \langle k, n, B|). \quad (3.11)$$

A adição desse termo corresponde a inclusão de uma matriz diagonal $2N \times 2N$ na Eq. 3.6, cujos termos são dados por $V_{nn} = V(y_n)$.

No caso das nanofitas armchair, plotamos o espectro de energia na Fig. 18 para uma fita condutora de 35 linhas. Vemos que a aplicação do campo elétrico leva a uma grande mudança do espectro em baixas energias com o surgimento de minicones de Dirac

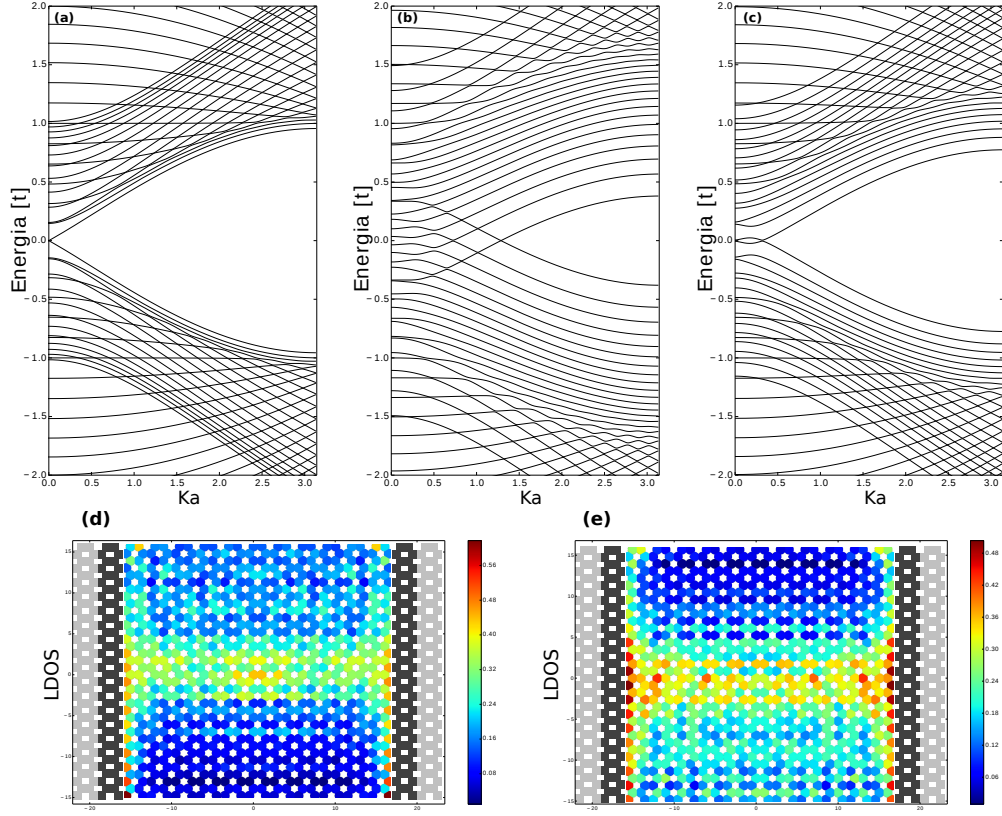


Figura 18: (a)-(c):Espectro de nanofitas armchair com 35 linhas submetidas a campo elétrico uniforme transversal. (a): Fita submetida a campo de $0.1V/nm$; (b): Fita submetida a campo de $0.4V/nm$; (c): Fita submetida a campo de $1V/nm$. (d) e (e): Densidade Local de Estados (LDOS) da fita submetida a um campo elétrico de $1V/nm$ para as energias $E = 2t$ e $E = -2t$, respectivamente.

com pequenos gaps ao longo da zona de Brillouin. A forma dependendo da intensidade do campo elétrico. Vemos também que a aplicação do campo elétrico leva a um efeito análogo ao efeito stark sobre a nanofita. Os estados com energia mais baixas, degenerados dentro de um certo intervalo, separam-se com aplicação do campo elétrico e sofrem um desvio de energia com o valor dependendo da intensidade do campo. Temos ainda que a aplicação de um campo elétrico modifica a concavidade das bandas de energias, sendo responsável por uma mudança da massa efetiva dos elétrons.

Nas Fig.'s 18(c) e (d), representamos a LDOS para a nanofita armchair submetida a um campo de $0.0098 V/nm$ com os valores de energia $E = 2t$, correspondente a elétrons, e $E = -2t$, correspondentes a buracos. Vemos que para um valor alto de campo como esse os estados de elétron e buracos localizam-se em bordas opostas sobre a fita.

O caso das nanofitas de borda *zigzag* está representado na Fig. 19. Um primeiro

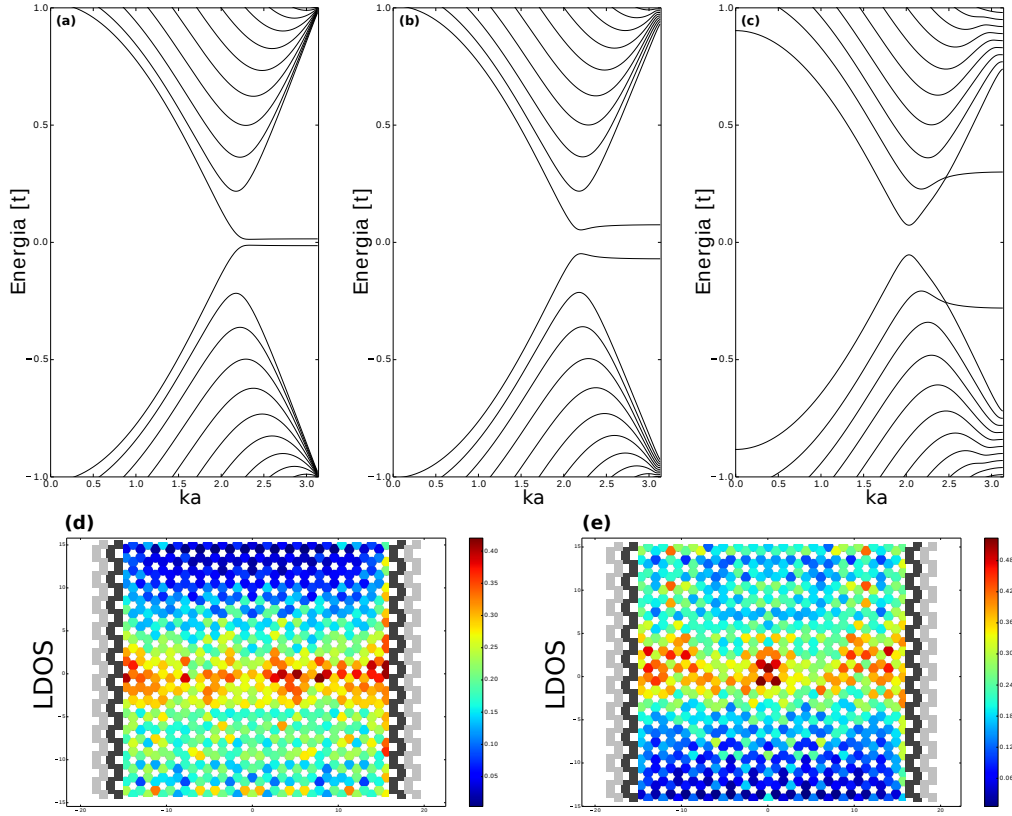


Figura 19: (a)-(c):Espectro de nanofitas zigzag com 21 linhas submetidas a campo elétrico uniforme transversal. (a): Fita submetida a campo de $0.1V/nm$; (b): Fita submetida a campo de $0.4V/nm$; (c): Fita submetida a campo de $1V/nm$. (d) e (e): Densidade Local de Estados (LDOS) da fita submetida a um campo elétrico de $1V/nm$ para as energias $E = t$ e $E = -t$, respectivamente.

observação que podemos tirar da figura é que a aplicação do campo elétrico uniforme quebra a degenerescência dos estados de borda observada na seção 3.2. Além disso, à princípio, o gap torna-se maior quanto maior a intensidade do campo. Vemos que a aplicação do campo elétrico, assim como no caso das bordas *armchair*, muda a forma das bandas de energia, o que implica uma modificação massa efetiva e velocidade de grupo na nanofita.

Também representamos LDOS para o caso das nanofitas zigzag (Fig.'s 19(d) e (e)). Vemos que o mesmo resultado para as nanofitas *armchair* é obtido para as nanofitas *zigzag*, isto é, para certos valores de campo, os estados correspondentes a elétrons e buracos localizam-se em bordas opostas.

Na próxima seção, veremos como aplicar um campo magnético e como isto influencia o espectro de energia e o comportamento dos portadores de carga sobre o sistema.

3.4 Campo Magnético sobre a nanofita de Grafeno

Veremos nessa seção, como a inclusão de um campo magnético uniforme perpendicular à nanofita influencia no cálculo das propriedades do sistema. Como foi explicado na seção 2.3, isso pode ser feito realizando-se uma substituição nos parâmetros de *hopping*. Dessa forma, a Hamiltoniana para o sistema com o campo magnético aplicado torna-se:

$$\hat{H} = -t \sum_{i,j} (e^{i \frac{2\pi}{hc} \int_{\vec{r}_i}^{\vec{r}_j} \vec{A} \cdot d\vec{l}} |i, A\rangle \langle j, B| + H.c.). \quad (3.12)$$

Aqui, $\Phi_0 = hc/e$ é o quantum de fluxo do campo magnético. Realizamos as mesmas substituições apresentadas nas Eq.'s 3.1 e 3.2 e, assim, a Eq. 3.12 toma a seguinte forma:

$$\hat{H} = - \sum_{k,n,n'} \tau_{n,n'}^1 (|k, n, A\rangle \langle k, n', B| + H.c.), \quad (3.13)$$

onde a função $\tau_{n,n'}^1$ é dada por:

$$\tau_{n,n'}^1 = t \sum_{\langle i,j \rangle} e^{i \frac{2\pi}{\phi_0} \int_{\vec{r}_i}^{\vec{r}_j} \vec{A} \cdot d\vec{l}} e^{ik(x_i - x_j)} \quad (3.14)$$

Na Eq. 3.14 acima, usamos a notação $\langle, \rangle$ para denotar que a soma é realizada somente sobre os primeiros vizinhos do sistema. Seguindo a simetria translacional do sistema ao longo da direção x, utilizamos o gauge para o potencial vetor dado por $\vec{A} = (-By, 0, 0)$. Em posse da Eq. 3.14, obtemos a matriz $2N \times 2N$ que representa o sistema e novamente resolvemos a equação de autovalores para obter o espectro de energia do sistema.

O efeito da aplicação do campo magnético encontra-se representado na Fig. 20. A figura mostra o espectro de energia para fitas de diferentes largura. Consideramos em todos os casos fitas submetidas a um fluxo magnético $\phi = 2\pi\phi_0$, o que equivale a um campo magnético³ de 79 T. Vemos que um dos principais efeitos da aplicação do campo magnético é uma planificação das bandas de energias independente do tipo de borda. Esse efeito serve como uma assinatura do surgimento dos níveis de Landau. Mais, vemos que o espaçamento entre as bandas planas é não-uniforme, o que é uma característica dos níveis de Landau para o grafeno. Esses estados são duplamente degenerados para energias diferentes de zero e podemos obter novamente a condutividade Hall para o grafeno fazendo uma contagem dos estados de borda para elétrons (ou buracos)[42]. Nesse caso, para um dado valor de potencial químico, os estados que contribuem são dados por $2N+1$, onde N é um inteiro e o fator 2 vem da dupla degenerescência dos estados com energia diferente de

³Estamos utilizando um valor de campo magnético bastante elevado para destacar o efeito do campo magnético no espectro de energia da nanofita.

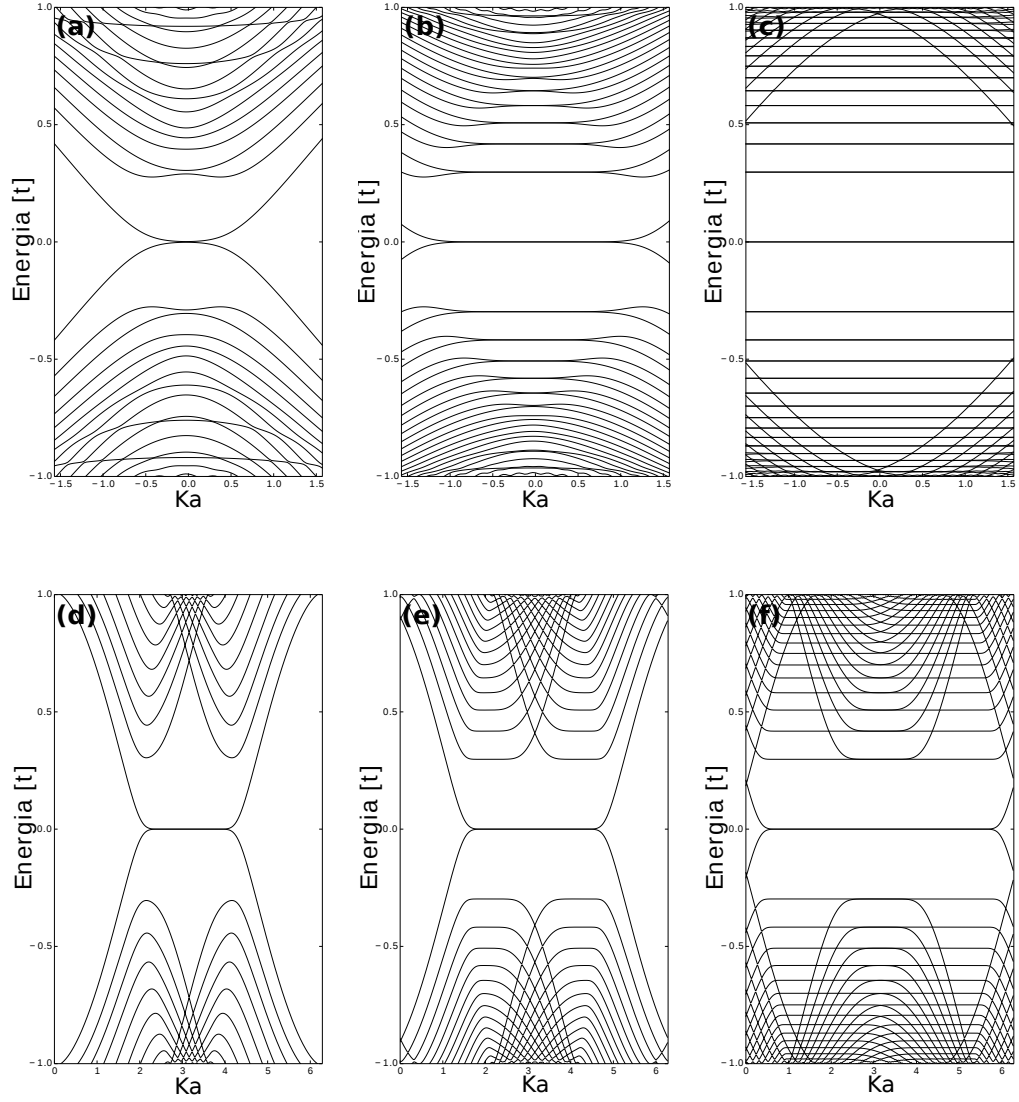


Figura 20: Espectro de energia de nanofitas de grafeno submetidas à um campo de 79 T. (a) - (c): Nanofitas armchair com espessuras de 34 (≈ 4.3 nm), 70 (≈ 10.0 nm) e 149 (≈ 21.1 nm) linhas, respectivamente. (d) - (f): Nanofitas zigzag com espessura de 20 (≈ 4.3 nm), 40 (≈ 10.0 nm) e 86 (≈ 21.1 nm) linhas, respectivamente.

zero. Cada estado desses contribui com um valor de e^2/h para a condutividade e obtemos novamente (levando em consideração o *spin*):

$$\sigma_{xy} = \pm 2 \frac{e^2}{h} (2N + 1). \quad (3.15)$$

Na próxima seção, discutiremos brevemente o efeito da aplicação de campos elétrico e magnético simultâneos sobre a nanofita de grafeno.

3.5 Campo Elétrico e Magnético sobre a nanofita de grafeno

Por fim, podemos considerar a ação simultânea de um campo elétrico uniforme transversal e um campo magnético perpendicular à fita de grafeno, bastando que adicionemos os termos apresentados nas seções 3.3 e 3.4 conjuntamente. Os resultados estão sumarizados na Fig. 21. Vemos que a aplicação dos campos simultaneamente, para ambos tipos

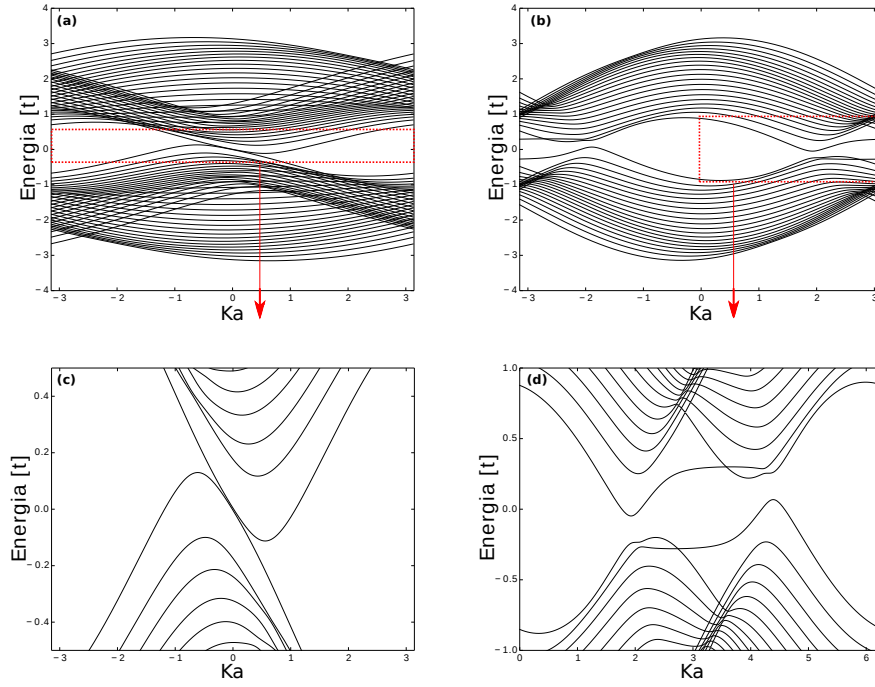


Figura 21: Espectro de energia para nanofitas de grafeno submetidas a campo elétrico de 0.4 V/nm e campo magnético de 79 T com (a) bordas armchair de 34 linhas e (b) bordas zigzag de 21 linhas.

de borda, quebra a simetria de Dirac, isto é, a simetria entre os estados com valores de k negativo e positivo. Podemos ter um *insight* à respeito desse comportamento considerando a propagação de elétrons ao longo das bordas. Elétrons com valores de k positivo propagam-se ao longo de uma borda, enquanto elétrons com k negativo propagam-se ao longo da borda oposta⁴. Um campo elétrico transversal empurra as partículas para uma das bordas e, portanto, cria uma assimetria entre estados com valores de k negativo e positivo. Vemos também, da Fig. 21, a formação parcial de níveis de Landau. Eles são distorcidos pela presença do campo elétrico, em acordo com o que havíamos verificado resolvendo o Hamiltoniano de Dirac.

⁴Esses estados propagantes ao longo da borda são os chamados 'skipping orbits'.

4 TRANSPORTE EM SISTEMAS MESOSCÓPICOS

Neste capítulo vamos finalmente iniciar o estudo de propriedades de transporte de sistemas balísticos de grafeno. O capítulo está dividido em duas partes principais. Na primeira parte, vamos caracterizar os tipos de transporte e desenvolver o modelo teórico utilizado para estudar sistemas mesoscópicos e calcular os coeficientes de transmissão. Na segunda parte, introduziremos o modelo numérico e explicaremos como ele calcula os coeficientes de transmissão. Todos os resultados numéricos apresentados foram realizados utilizando-se o Kwant¹ [43], programa para cálculo de propriedades de transporte em sistemas tight-binding. Finalizaremos o capítulo apresentando o cálculo da condutância para alguns sistemas simples.

4.1 Caracterização de Sistemas Mesoscópicos

Sistemas cujas as dimensões são maiores do que dimensões microscópicas, como as de átomos e moléculas, mas menores do que dimensões macroscópicas, na escala de centímetro, são chamados de sistemas mesoscópicos[46]. Para esse tipo de sistema não é observado o comportamento clássico ideal e chegamos ao ponto em que a lei de Ohm deixa de ser válida. Na realidade, é esperado que um sistema apresente comportamento ohmico quando os três comprimentos característicos, comprimento de onda de Broglie, livre caminho médio e comprimento de relaxação de fase, são muito menores que as dimensões do sistema. De outra forma, obtemos outro tipo de regime como o regime difusivo, em que a corrente é proporcional ao gradiente da densidade de partículas(transporte ocorre com partículas fluindo da região de maior concentração para menor concentração), ou balístico, em que consideramos que as partículas são espalhadas somente pelos contornos do sistema.

¹Kwant é um pacote iterativo para Python de livre acesso e está disponível para download em : <http://http://kwant-project.org/>.

O livre caminho médio, por si só, é muito importante para a caracterização de sistemas balísticos. Sabemos que num cristal real existem vários centros espalhadores, como fônons e impurezas, que interagem com os elétrons da rede dificultando sua passagem ao longo do cristal. Quando espalhado, um elétron pode emergir dessas colisões com completa perda de informação à respeito do momento antes da interação. Assim, podemos definir o tempo de relaxação de momento τ_m pela seguinte expressão:

$$\tau_m = \frac{\tau_c}{\alpha_m}, \quad (4.1)$$

onde τ_c na Eq. 4.1 é definido como o tempo de colisão, isto é, o tempo entre colisões com o espalhador, e α_m é um parâmetro que caracteriza a efetividade de perda de momento durante a colisão ($\alpha_m = 1$ (100%) quando todo momento é perdido durante a colisão e 0 (0%) quando nenhum momento é perdido). O livre caminho médio é definido em termos do tempo de relaxação de momento por:

$$L_m = v_F \tau_m \quad (4.2)$$

e corresponde à distância média percorrida antes da perda de informação a respeito do momento da partícula. No caso do comprimento de relaxação de fase, um cuidado maior deve ser tomado para caracteriza-lo. Definimos o tempo de relaxação de fase τ_ϕ , de forma análoga ao tempo de relaxação de momento, como o tempo médio levado para um elétron que propaga-se ao longo do cristal perder informação a respeito da fase de sua função de onda. A princípio, poderíamos pensar que τ_ϕ teria uma dependência como a apresentada na Eq. 4.1. No entanto, este não é o caso. Para entendermos como determinar o tempo de relaxação de fase, precisamos distinguir entre espalhadores estáticos e dinâmicos. Espalhadores estáticos, isto é, impurezas ou defeitos que não vibram, não contribuem para a aleatorização de fase do sistema. Isto pode ser visto pelo fato de que esses termos unicamente irão adicionar uma fase global para todo o sistema e, portanto, não poderá ser responsável pela interferência de partes do sistema entre si. Já espalhadores dinâmicos, com átomos da rede vibrando, podem gerar uma fase aleatória em uma parte do sistema e, portanto, fazer com que elas interfiram. Para o caso de um gás de elétrons bidimensional, isto é, elétrons sob a influência do potencial cristalino da rede, é possível mostrar [47] que o tempo de relaxação de fase é dado por:

$$\frac{\hbar}{\tau_\phi} \approx \frac{\Delta^2}{E_F} \left[\ln \left(\frac{E_F}{\Delta} \right) + cte \right]. \quad (4.3)$$

Na expressão acima, E_F é a energia de Fermi e $\Delta = E - E_F$ representa quão acima o elétron se encontra do nível de Fermi. Quanto ao comprimento de relaxação de fase,

também devemos ter cuidado ao caracterizá-lo. Para sistema com uma grande mobilidade eletrônica, que corresponde ao caso do grafeno, ele é simplesmente dado por;

$$L_\phi = v_F \tau_\phi \quad (4.4)$$

Recentemente, medidas realizadas sobre grafeno crescido sobre uma superfície de carbeto de silício [44] obtiveram comportamento balístico sobre uma escala maior que 10 micrometros. Isto significa que elétrons no grafeno propagam-se sobre tais largas distâncias coerentemente e, portanto, exibem comportamento balístico. Na próxima seção, desenvolveremos o modelo teórico para o cálculo das propriedades de transporte em sistemas balísticos.

4.2 Formalismo de Transporte

4.2.1 Contatos

Na Fig. 22(a) representamos o sistema estudado, uma fita quasi-unidimensional onde vamos assumir transporte balístico, em contato com dois reservatórios diferentes com potenciais químicos dados por μ_1 e μ_2 com $\mu_1 \neq \mu_2$. É assumido que os reservatórios possuem um número muito maior de estados permitidos que o sistema colocado entre eles e, portanto, servem como fontes de elétrons para o mesmo. Vamos considerar o sistema no limite degenerado que corresponde a fazer a temperatura do sistema tender a zero. Neste caso, a distribuição de elétrons f nos reservatórios, que é uma função suavemente distribuída à temperatura $T \neq 0$, tende a uma função degrau $f(E) = \theta(E - \mu_i)$. Isto equivale a dizer que, a temperatura zero, os elétrons nos reservatórios estão preenchidos até uma energia igual ao potencial químico do reservatório².

Outra hipótese muito importante que assumiremos para o desenvolvimento do modelo teórico é que não há reflexão nos contatos, isto é, um elétron que propaga-se ao longo do sistema será completamente transmitido ao encontrar a interface entre os reservatórios. Pode ser mostrado que isso é verdade desde que assumamos que o nível de Fermi nos reservatórios que estão equilíbrio seja bem maior que a base da banda. Logo, podemos inferir que os estados propagando-se para direita, com k positivo, estão em "equilíbrio"³ com μ_1 e os estados propagando-se para esquerda, com k negativo, estão em equilíbrio

²Neste regime também o transporte é sempre coerente e não precisamos com complicações devido a efeito de interferência.

³Colocamos as aspas para destacar o fato de que o sistema como um todo não está em equilíbrio, uma vez que há fluxo de elétrons ao longo do mesmo.

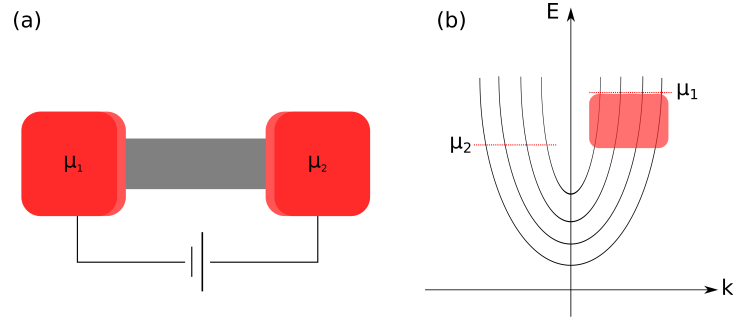


Figura 22: (a) Representação de uma fita quasi-unidimensional presa a dois reservatórios à potenciais químicos diferentes. (b) Representação da relação de dispersão mostrando qual região contribui para o transporte para $T = 0$.

com μ_2 . O transporte resultante sobre o sistema será sobre o intervalo entre μ_1 e μ_2 . Na próxima subseção, mostraremos como podemos calcular a corrente ao longo de um sistema com dois contatos e mostraremos a fórmula de Landauer para um sistema de forma arbitrária.

4.2.2 Fórmula de Landauer

Considerando o sistema apresentado na subseção anterior, vamos calcular a corrente entre os contatos. De maneira ilustrativa, as bandas de energia para um sistema com vários modos estão representadas na Fig. 22(b), onde colocamos em destaque níveis de Fermi dos contatos μ_1 e μ_2 . Como estamos utilizando contatos sem reflexão, podemos substituí-los na nossa abordagem por uma continuação infinita do sistema, uma vez que um elétron com k positivo continuará propagando-se sem reflexão. Para um dado modo m e um dado estado, a contribuição dos elétrons propagando-se para a direita na corrente é dada por nev , onde n é a densidade eletrônica, e é a carga eletrônica e v a velocidade de grupo para o correspondente estado. Portanto, a corrente total considerando-se todos os modos m e os valores de k permitidos é dada por:

$$I_+ = \frac{e}{L\hbar} \sum_{k,m} \frac{\partial E}{\partial k}, \quad (4.5)$$

onde utilizamos que o fato de que a velocidade v é dada por $v = 1/\hbar \partial E / \partial k$ e $n = 1/L$, onde L é a dimensão do sistema. Assumindo condições de contorno periódicas, podemos substituir o somatório apresentado acima por uma integral sobre os valores de k e assim obtemos:

$$I_+ = \frac{2e}{h} \sum_m \int \frac{\partial E}{\partial k} dk = \frac{2e}{h} \int_{\mu_2}^{\mu_1} M(E) dE. \quad (4.6)$$

A função $M(E)$ acima definida representa o número de modos no sistema. Assumindo que $M(E)$ é constante dentro do intervalo entre μ_1 e μ_2 obtemos a expressão para a corrente:

$$I_+ = \frac{2e}{h} M(\mu_1 - \mu_2) = \frac{2e^2 M}{h} \frac{\Delta\mu}{e} = G_c \frac{\Delta\mu}{e}. \quad (4.7)$$

A constante G_c definida na Eq. 4.7 corresponde a condutância do sistema. Vemos que pela expressão acima a corrente cresce em etapas à medida que a energia cresce, uma vez que o número de modos aumenta. Além disso, vemos da expressão 4.7 que a resistência $R_c = G_c^{-1}$ é diferente de zero, isto é, apesar do sistema ser balístico sem nenhum tipo de espalhamento, há uma resistência intrínseca associada à ele. Uma vez que nada acontece no interior do sistema, esta resistência está associada aos contatos. De fato, a transferência dos elétrons de uma região com um número grande de modos acessíveis para uma região de pouco modos é responsável pelo surgimento dessa resistência.

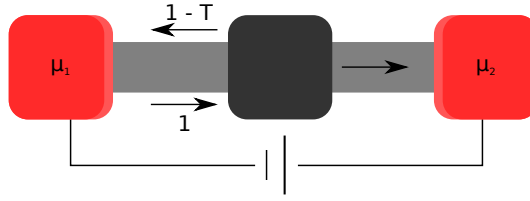


Figura 23: Representação esquemática de um sistema onde a probabilidade média de partículas serem injetadas no sistema pela direita é T e pela esquerda é T' .

Iremos agora considerar o sistema representado na Fig. 23. Nesta, temos que uma região central, que chamaremos de região de espalhamento, está conectada aos dois reservatórios através dos dois canais representados na figura. Novamente consideramos que a transmissão dos elétrons do sistema para os reservatórios é sempre 100% o que significa que podemos substituir as fitas finitas conectando a região de espalhamento por fitas semi-infinitas. No entanto, a probabilidade de tunelamento das fitas para a região central não é sempre 100%. Chamamos de T a média de transmissão e assumimos que ela é a mesma em ambos os lados do sistema. Considerando a abordagem degenerada, a contribuição para corrente é dada novamente somente pelos elétrons com k positivo com as energias compreendidas entre μ_1 e μ_2 . Temos, então:

$$I_{1+} = \frac{2e}{h} M(\mu_1 - \mu_2) \quad (4.8)$$

para a corrente transmitida diretamente através do reservatório. Desde que T é a probabilidade de transmissão, temos que a parte dessa corrente que é transmitida através da

região de espalhamento é dada por:

$$I_2 = \frac{2e}{h}MT(\mu_1 - \mu_2). \quad (4.9)$$

Por outro lado, há a probabilidade $R = 1 - T$ de reflexão e portanto a corrente total no lado esquerdo é dada por:

$$I_1 = I_{1+} - I_{1-} = \frac{2e}{h}M(\mu_1 - \mu_2) - \frac{2e}{h}(1 - T)M(\mu_1 - \mu_2) = I_2 = \frac{2e}{h}MT(\mu_1 - \mu_2), \quad (4.10)$$

ou seja a corrente é a mesma ao longo de todo o sistema. A expressão apresentada nas Eq.'s 4.9 e 4.10 corresponde a fórmula de Landauer para corrente elétrica no limite de temperatura zero. Uma vez que saibamos como determinar a probabilidade de transmissão ao longo do sistema podemos determinar a corrente que passa em cada elemento do mesmo. Fazendo $\Delta V = (\mu_1 - \mu_2)/e$, a voltagem entre os dois reservatórios, podemos reescrever a Eq. 4.10 da seguinte forma:

$$I = \frac{2e}{h}MT(\mu_1 - \mu_2) = \frac{2e^2}{h} \frac{M}{1 + (1 - T)/T} \Delta V = \frac{\Delta V}{R_c + R_S}. \quad (4.11)$$

Aqui, $R_c = h/2e^2M$ como definido anteriormente é a resistência associada com os contatos e definimos $R_S = h(1 - T)/2e^2MT$ como a resistência associada à presença do sistema. A fórmula acima apresenta as características corretas para descrição de sistemas balísticos. Mais ainda, tomando o limite em que tratamos os elétrons como partículas clássicas a Eq. 4.11 retoma o resultado correto da lei de Ohm[46].

4.2.3 Fórmula de Landauer-Buttiker

Na seção anterior, mostramos como calcular a corrente atravessando sistemas mesoscópicos ligados a dois reservatórios que servem como fontes de elétrons para o sistema. No entanto, em experimentos⁴ e no caso da junção balística em Y, que vamos discutir mais adiante, utilizamos uma região central em contato com vários reservatórios. Precisamos saber, portanto, como estender o que foi feito até agora para o caso em que estamos lidando com um sistema com vários contatos. Isto foi realizado por Buttiker em 1988 [48]. Ele notou que não há diferença qualitativa entre os terminais e, portanto, podemos tratar todos eles da mesma forma. Para um sistema com N reservatórios com potenciais químicos μ_i ($i = 1, \dots, N$) a corrente total sobre a fita conectada ao reservatório i é obtida tomando-se uma analogia com o caso de dois reservatórios e somando-se a contribuição para a corrente de cada reservatório j sobre a fita conectada ao reservatório i. Isto resulta

⁴Por exemplo, no caso da medida de voltagem Hall

na seguinte expressão:

$$I_i = \frac{2e}{h} \sum_j T_{ij} \mu_i - T_{ji} \mu_j. \quad (4.12)$$

A soma acima é realizada sobre todo os reservatórios. T_{ij} representa a transmissão da fita i para a fita j e T_{ji} da fita j para i . Definimos a condutância da fita i para j como $G_{ij} = (2e^2/h)T_{ij}$ e $V_i = \mu_i/e$. Quando todos os potenciais químicos são iguais a zero, não há fluxo de elétrons e, portanto, a corrente deve ser igual a zero. Logo, para que isso seja verdade, a Eq. 4.12 demanda que a seguinte relação seja satisfeita:

$$\sum_i G_{ij} = \sum_i G_{ji} \quad (4.13)$$

Essa expressão é conhecida como relação de reciprocidade e utilizando-a podemos reescrever a Eq.4.12 da seguinte forma:

$$I_i = \sum_j G_{ji}(V_i - V_j). \quad (4.14)$$

Definindo um modelo para o cálculo dos coeficientes de transmissão, podemos demonstrar outras propriedades do mesmo. É possível mostrar, por exemplo, que no caso em que o transporte é coerente, isto é, no caso em que os elétrons seguem trajetórias em que não há perda de coerência de fase, os coeficientes satisfazem a seguinte relação⁵:

$$[G_{ij}]_{+B} = [G_{ji}]_{-B}. \quad (4.15)$$

Na próxima seção, definiremos matriz de espalhamento e mostraremos como obter os coeficientes de transporte através da mesma.

4.3 Modelo Numérico

4.3.1 Matriz de Espalhamento

Vamos agora estabelecer uma maneira de determinar os coeficientes de transporte encontrados na seção anterior. Para uma dada energia, existem vários modos de propagação nas fitas e esses modos correspondem a elétrons propagando-se em direção ao

⁵Tomando a equação de Schoringer com a partícula submetida a um campo magnético temos:

$$\hat{H} = \frac{(i\hbar\nabla + e\vec{A}/c)^2}{2m}\Psi(\vec{r}) + e\phi\Psi(\vec{r}).$$

Se invertermos a direção do campo magnético e tomarmos o complexo conjugado a equação acima permanece invariante. Tomar o complexo conjugado, no entanto, é equivalente a transpor os coeficiente G_{ij} de onde segue naturalmente Eq. 4.15.

sistema ou aos reservatórios. Podemos relacionar as amplitudes dos modos propagando-se para o sistema com a amplitude dos modos propagando-se para os reservatórios. À matriz que relaciona essas amplitudes dá-se o nome de matriz de espalhamento ou matriz S . Por exemplo, sendo $(a_1, a_2, a_3, \dots)$ as amplitudes saindo no sistema e $(b_1, b_2, b_3, \dots)$ as

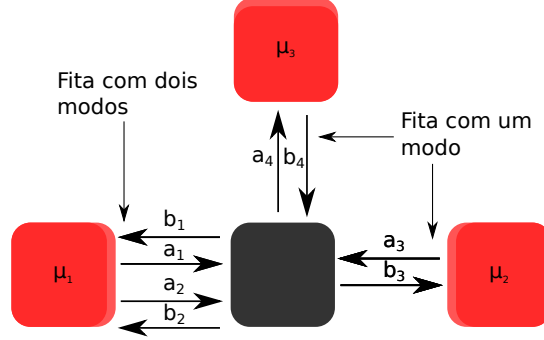


Figura 24: Sistema coerente mostrando os modos de propagação nas fitas, ambos, em direção ao sistema e saindo dele, para uma dada energia.

amplitudes entrando, temos a seguinte relação:

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ a_3 \\ a_2 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & s_{33} & s_{32} & s_{31} \\ \cdots & s_{23} & s_{22} & s_{21} \\ \cdots & s_{13} & s_{12} & s_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ b_3 \\ b_2 \\ b_1 \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

Os elementos s_{mn} correspondem as amplitude de espalhamentos do modo m para o modo n . A correspondente transmissão de m para n é dada por: $T_{mn} = |s_{mn}|^2$. Podemos deduzir algumas propriedades da matriz S . Por exemplo, para que a conservação da corrente de probabilidade seja mantida, a matriz S deve satisfazer a condição de unitariedade. É fácil de ver porque isto é verdade. Sendo $[a]$ e $[b]$ as matrizes colunas correspondentes aos modos saindo e entrando na Eq. 4.16, a conservação de probabilidade exige que $[a]^\dagger [a] = [b]^\dagger [b] = [a]^\dagger S^\dagger S [a]$. Portanto $S^\dagger S = 1$, o que é a condição de unitariedade. A transmissão do contato i para o contato j é obtida somando-se a transmissão de todos os modos de i para j :

$$T_{ij} = \sum_{m \in i} \sum_{n \in j} |s_{mn}|^2. \quad (4.17)$$

4.3.1.1 Exemplo: Poço unidimensional

Para ilustrarmos como calcular os elementos da matriz S , consideremos o caso simples unidimensional de um poço finito de altura U_0 compreendido entre $L/2$ e $-L/2$ em

torno da origem. Neste caso, as duas regiões estendendo-se de $-\infty$ a $-L/2$ e $L/2$ a ∞ correspondem as fitas e o poço corresponde à região central. Podemos resolver a equação de Schrödinger nas duas regiões. As soluções correspondentes a esta equação são ondas planas da forma $e^{\pm ikx}$ com $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ fora do poço e $e^{\pm iqx}$ com $q = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$ dentro do poço. Assim, considerando a onda incidente de $-\infty$, esta pode ser espalhada de volta para o mesmo estado na fita original ou ser transmitida para a fita estendendo-se para ∞ . Neste caso temos a solução:

$$\Psi(x) = e^{ikx} + s_{11}e^{-ikx} \quad x < 0 \quad \text{e} \quad \Psi(x) = s_{21}e^{ikx} \quad x > 0. \quad (4.18)$$

De forma análoga, podemos considerar a onda incidente vindo de $+\infty$ e obter os outros elementos da matriz de espalhamento. Para encontrar os coeficientes aplicamos as condições de continuidade da função de onda e da derivada no contorno e obtemos:

$$s_{11} = s_{22} = \frac{U_0}{i\hbar v - U_0} \quad s_{12} = s_{21} = \frac{i\hbar v}{i\hbar v - U_0}, \quad (4.19)$$

onde utilizamos a notação $v = \hbar k/m$. Como estamos lidando com um sistema unidimensional e que, portanto, possui somente um modo de propagação, a transmissão da primeira fita para a segunda ou da segunda para a primeira é simplesmente obtida tomando o módulo quadrado de s_{12} , isto é:

$$T_{12} = T_{21} = \frac{(\hbar v)^2}{(\hbar v)^2 + U_0^2}. \quad (4.20)$$

4.3.2 Kwant: Explicando o funcionamento

Kwant é capaz de gerar resultados de alta performance, com bastante flexibilidade e generalidade. Para isso, sua execução é dividido em duas etapas. Na primeira, é definido um Hamiltoniano tight-binding em linguagem de alto nível de uma forma simples e eficiente. Em seguida, este Hamiltoniano é transformado para uma representação de baixo nível. A segunda etapa consiste em utilizar o Hamiltoniano transformado para realizar-se os cálculos numéricos e determinar as diversas propriedades do sistema, como estrutura de bandas, coeficientes de transporte, densidade de estados, etc. Este procedimento em duas etapas é otimizado pela utilização do algoritmo de dissecção aninhada [45] (do inglês *nested dissection*) pelo Kwant que permite encontrar-se uma maneira de evitar os zeros no tratamento de soluções de matrizes esparsas, isto é, matrizes com uma grande quantidade de elementos iguais a zero, como é o caso da Hamiltoniana para o sistema explicado abaixo.

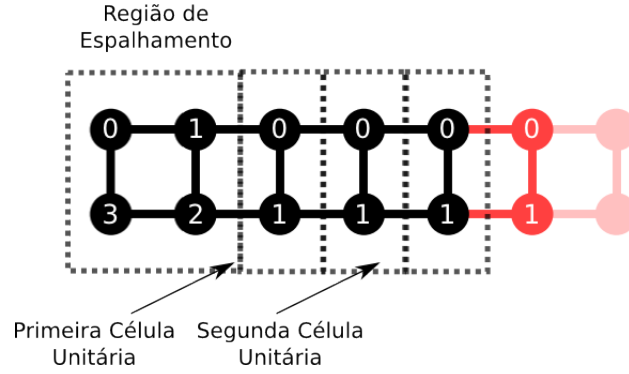


Figura 25: Rede quadrada simples com quatro átomos na região de espalhamento e dois átomos por célula unitária.

Vamos mostrar agora como o problema é resolvido no Kwant através do método das funções de onda de espalhamento (algo muito parecido com o que foi feito na seção anterior para o caso da poço unidimensional). Descrevemos um sistema arbitrário definindo uma região central em contato com várias fitas semi-infinitas que, como já havia sido explicado, substituem os reservatórios de elétrons onde assumimos que não há reflexão. O Hamiltoniano tight-binding genérico, em primeira quantização, pode ser escrito da seguinte forma:

$$\hat{H} = \sum_{ij} H_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (4.21)$$

A Hamiltoniana acima é discretizada em termos dos graus de liberdade internos do sistema. Assim, $|i\rangle$ pode representar posição, spin, etc. Para ilustrar a solução do problema, vamos considerar o caso mais intuitivo de uma única fita ligada ao sistema. O caso mais geral pode ser remetido a este, desde que considere-se as várias fitas como uma única fita disjunta. Dessa forma, podemos arranjar a seguinte representação matricial para o Hamiltoniano 4.21:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \ddots & V_L & & \\ V_L^\dagger & H_L & V_L & \\ & V_L^\dagger & H_L & V_{LS} \\ & & V_{SL}^\dagger & H_S \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

Os blocos de matriz H_L correspondem à Hamiltoniana em cada célula unitária da fita e H_S corresponde à Hamiltoniana da região central de espalhamento. Os termos diagonais correspondem aos termos de acoplamento: V_{LS} da primeira célula unitária para o sistema e V_L entre células unitárias da fita. Por exemplo, para a rede quadrada representada na

Fig. 25, as matrizes H_S e V_{SL} são dadas por:

$$H_S = \begin{pmatrix} H_{00}^S & H_{01}^S & 0 & H_{03}^S \\ H_{10}^S & H_{11}^S & H_{12}^S & 0 \\ 0 & H_{21}^S & H_{22}^S & H_{23}^S \\ H_{30}^S & 0 & H_{32}^S & H_{33}^S \end{pmatrix} \quad V_{SL} = \begin{pmatrix} 0 & H_{01}^{LS} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{12}^{LS} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

e as matrizes H_L e V_L são dadas por:

$$H_L = \begin{pmatrix} H_{00}^L & H_{01}^L \\ H_{10}^L & H_{11}^L \end{pmatrix} \quad V_L = \begin{pmatrix} H_{00}^L & 0 \\ 0 & H_{11}^L \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

A função de onda é dada por $\Psi_n = (\phi_n(0), \phi_n(1), \dots)^T$, onde $\phi_n(i)$, para $i > 0$, correspondem as soluções na i -ésima célula unitária e $\phi_n(0)$ corresponde as soluções na região de espalhamento. Para resolver o problema apresentado pela Hamiltoniana 4.22 podemos utilizar o fato de que as fitas são semi-infinitas e, portanto, procurar soluções nas fitas da forma $\Psi(i)_n = (\lambda)^j \chi_n$. Aplicando esta solução na equação de Schrödinger $\hat{H}\Psi = E\Psi$, obtemos a seguinte equação de autovalores para χ_n :

$$(V_L^\dagger \lambda^{-1} + H_L + V_L \lambda) \chi_n = E \chi_n. \quad (4.25)$$

Pela requerimento de normalização das soluções devemos ter $|\lambda| \leq 1$. Os modos com $|\lambda| < 1$ correspondem a modos evanescentes, isto é, soluções que tende a zero no finito e as soluções com $|\lambda| = 1$ correspondentes a modos propagantes. Tomando o valor esperado do operador de corrente dado por:

$$\langle I \rangle = 2Im \langle \phi_n(j) | V_L | \phi_n(j-1) \rangle. \quad (4.26)$$

Podemos classificar os modos ondas propagantes de duas formas: ondas propagando-se para o sistema ($\langle I \rangle = 1$) e ondas saindo do sistema ($\langle I \rangle = -1$). Para determinar os elementos da matriz S de espalhamento, podemos escolher a solução nas fitas da seguinte maneira:

$$\Psi_n(i) = \phi_n i^+ + \sum_m S_{nm} \phi_m^-(i) + \sum_p C_{pn} \phi_p^{ev}(i). \quad (4.27)$$

Aqui, consideramos um único modo entrando que é espalhado para uma combinação dos outros modos possíveis. Os coeficientes S_{nm} correspondem ao elementos da matriz S de um modo n para os diversos modos m. A solução na região de espalhamento é encontrado resolvendo-se a equação de autovalores:

$$V_{SL}^\dagger \phi_n(1) + H_S \phi_n(0) = E \phi_n(0) \quad (4.28)$$

O problema de encontrar os coeficientes da matriz S é resolvido combinando-se as duas soluções, Eq. 4.27 e 4.28, na interface de separação. Assim, podemos encontrar as condutâncias aplicando-se a Eq. 4.17.

4.4 Coeficientes de transporte para nanofitas

Nesta seção, aplicaremos o modelo desenvolvido nas seções anteriores para determinar o coeficiente de transporte para as nanofitas de grafeno. Utilizaremos unicamente nanofitas com bordas armchair e estudaremos o caso ideal, a nanofita com a aplicação de um campo elétrico e com a aplicação de um campo magnético.

4.4.1 Nanofita ideal

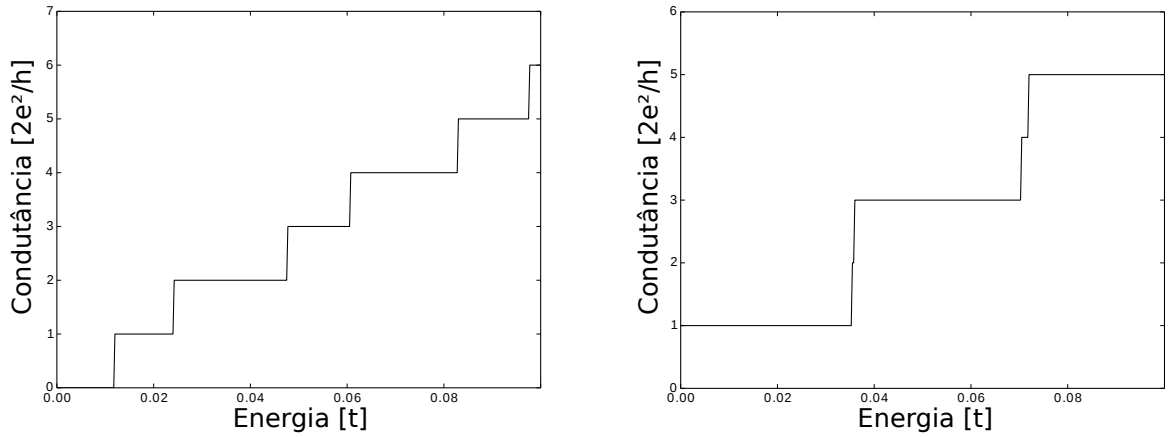


Figura 26: Condutância em função da energia para dois casos de nanofitas: (a) semicondutora de largura 18.10 nm e (b) condutora de 18.25 nm.

A Fig. 26 mostra a condutância para dois casos de nanofitas armchair ideais, condutora e semicondutora, onde tomamos ambas, região de espalhamento e nanofita de mesma espessura. Vemos claramente que a condutância exibe o comportamento esperado da Eq. 4.7, uma vez que sendo ambas, região de espalhamento e fitas, da mesma espessura, a transmissão é sempre igual à 1. Para o caso da nanofita semicondutora (Fig. 26(a)) a fita passa a transmitir somente a partir da energia correspondente ao gap da nanofita.

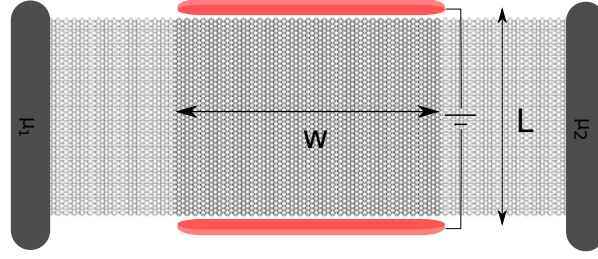


Figura 27: Representação esquemática do sistema.

4.4.2 Nanofita com campo elétrico uniforme

Na Fig. 28 representamos a condutância para nanofitas de grafeno metálicas com diferentes larguras e valores diferentes de campo elétrico aplicado. A região de espalhamento é definida como uma região quadrada sobre a qual aplicamos um campo elétrico uniforme. A mesma está ligada a duas fitas semi-infinitas cuja direção de periodicidade está ao longo da direção perpendicular ao campo elétrico. As fitas possuíam bordas *armchair*, assim como a região de espalhamento. A região de espalhamento é tomada como tendo espessura $W = 14.2 \text{ nm}$ (27). Na Fig. 28 (a) representamos o resultado para uma fita de largura $L = 1.42 \text{ nm}$, onde consideramos os valores de campo de 0.5 V/nm , 1 V/nm e 2 V/nm . Vemos que para valores baixos de campo o sistema ainda exibe o comportamento típico da condutância para a fita sem campo elétrico com o crescimento em degraus com os modos de energia. Há, no entanto, o surgimento de oscilações bem espaçadas que tornam-se mais amplas a medida que tomamos valores maiores de campo elétrico. Essas oscilações são características de ressonâncias entre os estados dentro do campo elétrico e os autoestados na fita de grafeno. Tais ressonâncias, conhecidas como oscilações de Fabry-perót, tem a propriedade de que o período depende inversamente do comprimento do poço (no caso, a largura da região de campo elétrico). Isto está evidenciado na Fig. 29, onde colocamos condutância em função da energia para diferentes larguras do sistema. Quando o campo elétrico torna-se grande o suficiente o padrão de crescimento em degraus torna-se menos pronunciado e vemos o surgimento de oscilações mais desordenadas na condutância, como pode ser visto para $|\vec{\alpha}| = 2 \text{ V/nm}$ no intervalo entre $0.04t \leq E \leq 0.1t$. Esse padrão está associado com a deformação da relação de dispersão na presença do campo elétrico como pode ser analisado através da Fig. 28 (c). Vemos ainda que o mesmo padrão oscilatório desordenado é observado no intervalo correspondendo a base da próxima banda de energia. Analisamos também a situação para uma fita larga de espessura $L = 18.24 \text{ nm}$ (28(b)). Vamos considerar a transmissão somente através do primeiro modo nas fitas e,

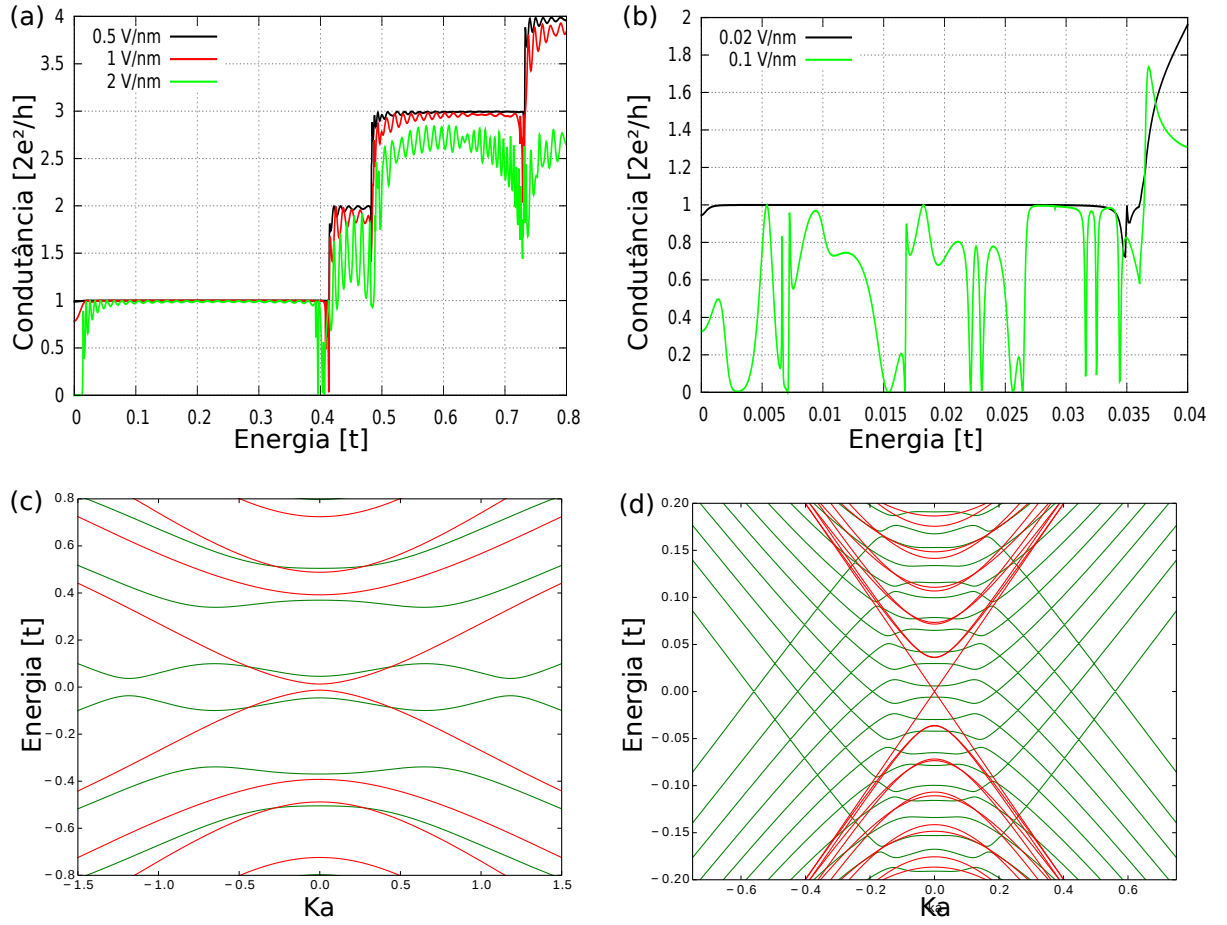


Figura 28: Resultados para uma fita de grafeno submetida a um campo elétrico numa região de largura $W = 14.2$ nm: (a) Condutância em função da energia para fitas de espessura $L = 1.42$ nm e valores de campo $|\vec{\alpha}| = 0.5, 2, 4$ V/nm; (b) Condutância para fita de espessura $L = 18.25$ nm e valores de campo $|\vec{\alpha}| = 0.1, ,$ V/nm; (c) Relação de dispersão para nanofita de largura $L = 1.42$ nm e valores de campo $|\vec{\alpha}| = 2$ e 4 V/nm; (d)

portanto, iremos nos limitar a região $E \leq 0.04t$. Para esse caso, vemos o surgimento de algumas oscilações mais desordenadas sobre o sistema. Além disso, vemos a presença de picos agudos de ressonância na condutância. Picos isolados dessa forma estão associados a confinamento. Uma vez que o sistema só transmite para este valor de energia em um intervalo próximo a essa energia, esse pico corresponde a um estado ligado no sistema. Uma consequência interessante é que a condutância vai a zero para essa energia e, portanto isso poderia ser utilizado para como chave em dispositivos fazendo variar a intensidade do campo elétrico transversal.

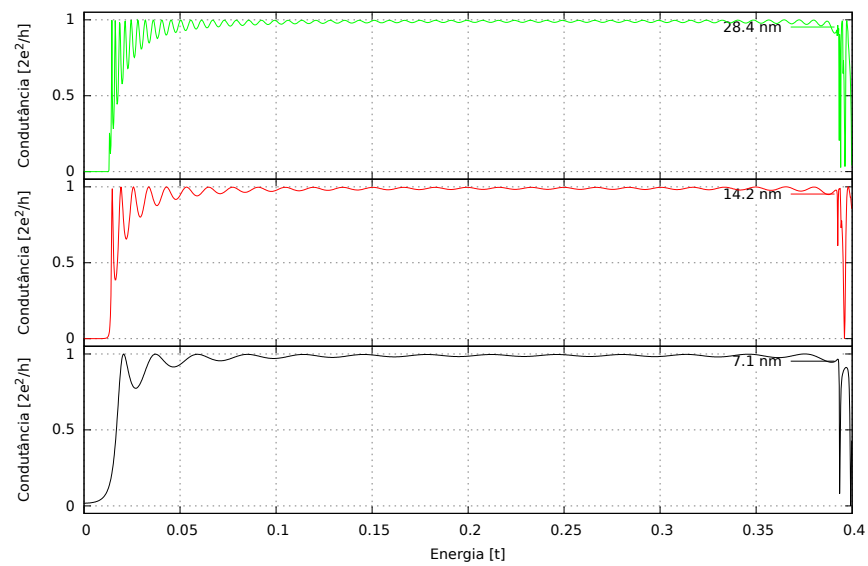


Figura 29: Condutância para nanofita de espessura 1.42 nm submetida a campo elétrico de 2 V/nm para diferentes valores de largura da região de campo elétrico.

5 JUNÇÕES BALÍSTICAS DE TRÊS TERMINAIS

Neste capítulo as propriedades de transporte das junções balísticas de três terminais (abreviadas por JBTT) serão estudadas. O sistema estudado está representado na Fig. 30. Ele consiste de três fitas metálicas armchair formando um ângulo de 120° entre si. O espaçamento angular foi escolhido para que o sistema seja naturalmente metálico ao longo de toda sua extensão. Um cuidado especial também deve ser feito ao considerarmos a largura das fitas. As Fig.'s 30 (b) e (c) mostram um zoom da região próxima a uma quina. Vemos que, para a largura correspondente a Fig.30(b), há o surgimento de bordas zigzag ao redor da quina. Mostraremos que isso tem forte influência na condutância para o sistema. Quando a largura do sistema satisfaz o tipo de borda representado na Fig. 30(c), vemos que o sistema permanece sempre armchair. Mostraremos principalmente os resultados para esta condição específica. Consideramos a fita central correspondente à região de onde os elétrons partem e a aplicação de um campo elétrico uniforme na região anterior aos dois braços de saída. Os resultados apresentados aqui novamente baseiam-se no método numérico apresentado na seção 3 do capítulo 4. Todos os resultados numérico foram obtidos utilizando-se o Kwant.

5.1 Propriedades de uma JBTT

As JBTT's foram estudadas pela primeira vez por *Palm et al* [49] em analogia com o ramo em Y ótico. Neste caso, considerou-se uma abordagem em termos de propagação de um pacote de ondas sobre uma JBTT feita de uma 2DEG formada entre camadas semicondutoras de *GaAr* e *AlGaAr*. Uma das formas de se operar uma JBTT é através de um modo passivo de duas entradas. Neste modo de operação, aplica-se uma diferença de potencial entre os dois braços inferiores e mede-se qual a resposta sob o braço superior. No regime em que os coeficientes de transmissão são constantes em função da energia, o

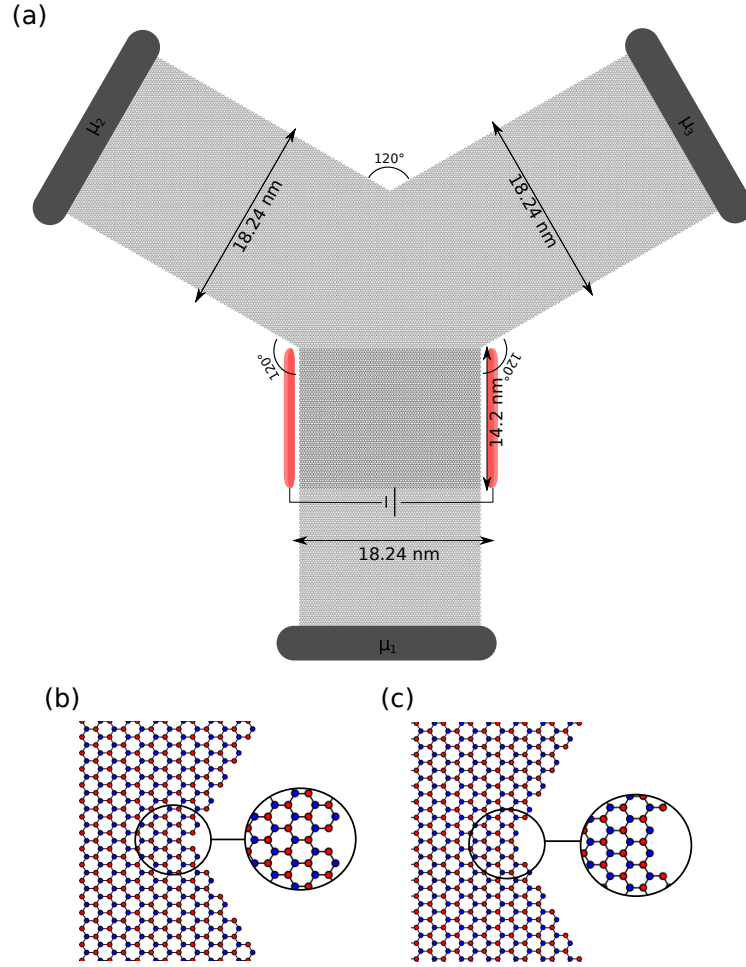


Figura 30: Representação esquemática da junção balística de três terminais.

potencial de saída é simplesmente a média do potencial aplicado entre os dois braços superiores. Para situação mais realística em que isso deixa de ser verdade, sobre a aplicação de uma pequena diferença de potencial V , é possível mostrar que o desvio da média deste potencial de saída V_s é dado por:

$$V_c = -\frac{1}{2}\alpha V^2 + \mathcal{O}(V^4) \quad (5.1)$$

onde o valor de α é dado por:

$$\alpha = -\frac{\int G_c \frac{\partial^2 f}{\partial E^2} dE}{\int G_c \frac{\partial f}{\partial E} dE}. \quad (5.2)$$

O campo não-linear dado pela equação 5.1 permite a possibilidade de aplicação da JBTT em vários sistemas como em um retificador de sinal. Mostraremos na próxima seção os principais resultados para uma JBTT de grafeno sujeita a um campo elétrico em um dos braços. Na conclusão, apontaremos os principais aplicações que podem ser obtidas dos

resultados apresentados.

5.2 Coeficientes de Transmissão

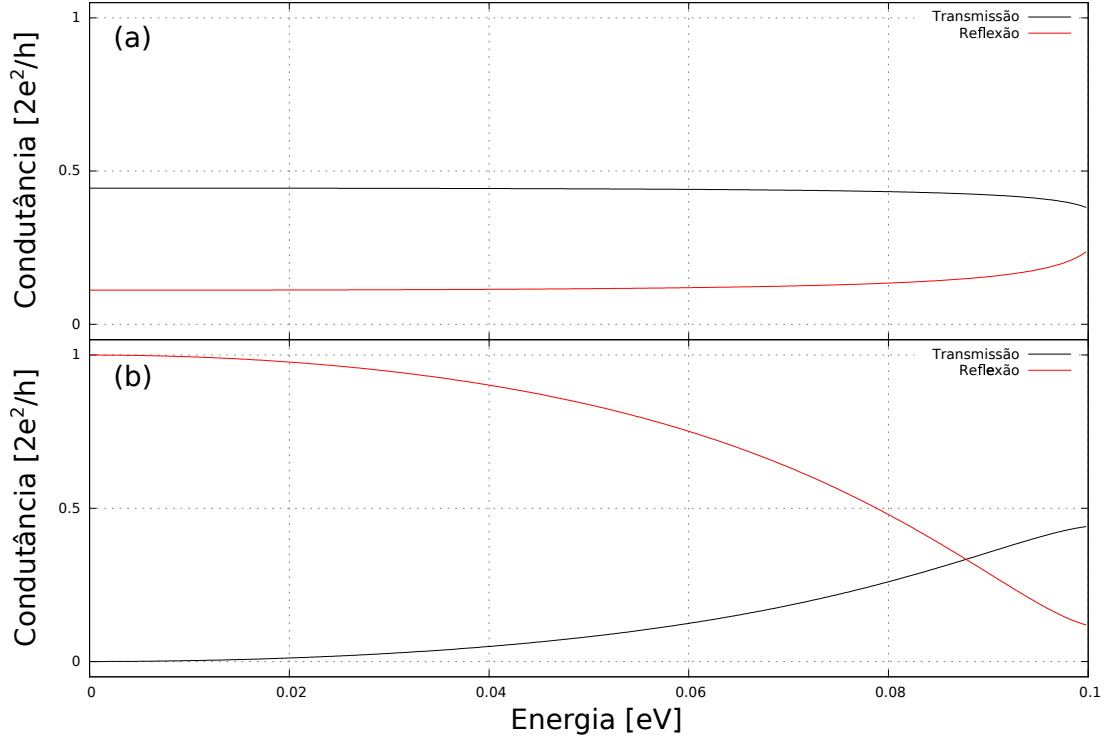


Figura 31: (a) Condutância e Reflectância para JBTT de Largura $L = 18.24$ nm com quinas da forma da Fig. 30(b); (b) Condutância para JBTT de largura $L = 17.68$ nm com quinas da forma da Fig. 30(c).

Vamos inicialmente considerar o efeito das diferentes bordas sobre a condutância do sistema. Vemos nas Fig.'s 31 (a) e (b) a condutância e a reflectância sem campo elétrico (através de qualquer braço, uma vez que agora o sistema é simétrico) para os sistemas representados nas Fig.'s 30 (b) e (c), respectivamente. Para o caso da JBTT com a geometria da quina especificada pela Fig. 30(b), vemos que o sistema apresenta o comportamento balístico esperado com a condutância se dividindo igualmente entre os dois braços. Vemos que $G \approx 0.5G_0$, onde $G_0 = 2e^2/h$ (quantum de condutância). A pequena reflexão pode ser associada ao potencial das quinas da junção. Já para o caso da Fig.30(c), vemos um comportamento bastante diferente do apresentado para o sistema da Fig. (b). Isso mostra como a existência de imperfeições nas bordas modifica o comportamento balístico esperado do sistema. Vemos que a presença de bordas zigzag nas bordas do sistema faz com que a condutância vá a zero para valores pequenos de

energias. Podemos atribuir isso a presença de estados localizados que não contribuem para o transporte.

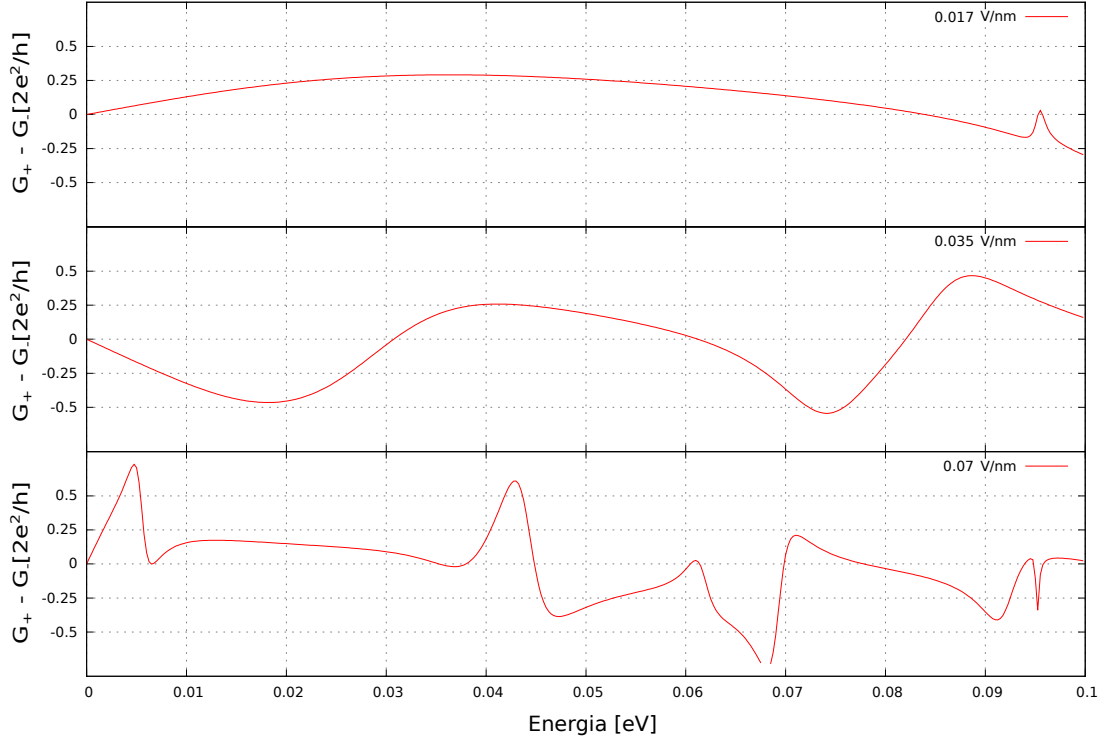


Figura 32: Diferença entre as condutâncias no braço direito (G_+) e no braço esquerdo (G_-) em função da energia para diferentes valores de campo elétrico: (a) 0.017 V/nm; (b) 0.035 V/nm; e (c) 0.07 V/nm.

A partir de agora, vamos considerar todos os sistemas com bordas dadas pela Fig. 30 (b) e, portanto, com o comportamento balístico esperado. Na Fig. 32 representamos a diferença entre as condutâncias nos dois braços da JBTT (G_+ para o braço da direita e G_- para o braço da esquerda) como função da energia. Consideramos a aplicação de um campo elétrico sobre a região sombreada da figura apontado na direção esquerda. Para um valor de campo pequeno (Fig. 32 (b)) vemos que as partículas, os elétrons, são completamente transmitidas, como era de se esperar, para a direção oposta ao campo, isto é para o braço da direita. Isto é caracterizado pela valor quase sempre positivo da diferença de condutâncias apresentado na figura. No entanto, a medida que tomamos valores mais intensos de campo elétrico, vemos o surgimento de inversões na condutância, isto é, a condutância do braço esquerdo do sistema torna-se maior do que para o braço direito em determinados intervalos de energia. Representamos o mesmo resultado na Fig. 33, onde, agora, fixamos a energia e variamos a intensidade do campo elétrico sobre a região anterior aos braços do sistema. Os resultados mostram a diferença de condutâncias para $E = 10$ e 20 meV. Esses resultados mostram que também para uma energia fixada a

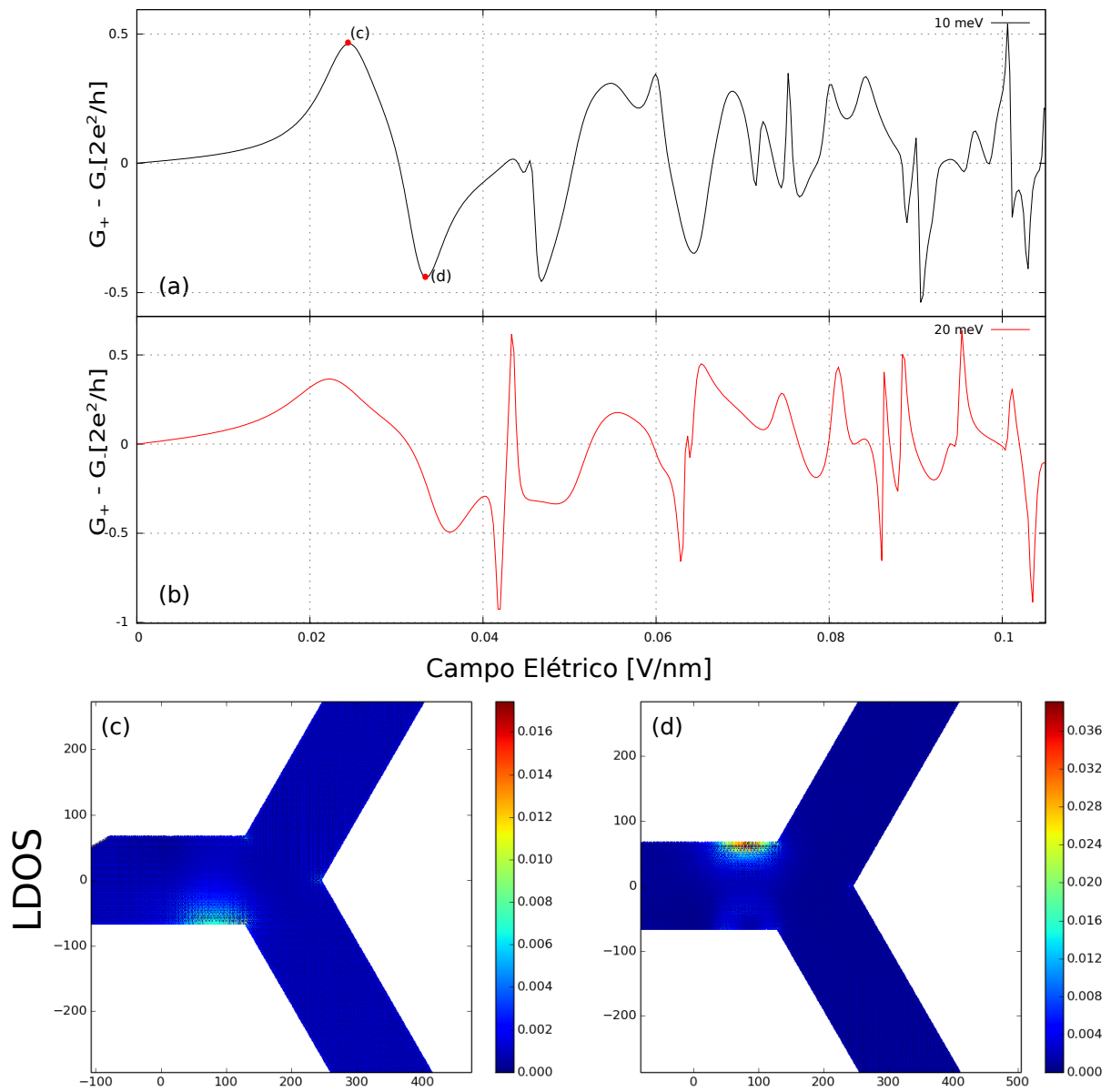


Figura 33: Resultados para JBTT: Diferença entre as condutâncias para uma JBTT em função do campo elétrico para energias de (a) 10 meV e (b) 20 meV, respectivamente; (c) - (d): LDOS da JBTT para os pontos destacados com (c) e (d) da figura (a).

condutância oscila como função do campo elétrico. Vemos que essas oscilações tornam-se mais irregulares a medida que tomamos valores mais intensos do campo elétrico aplicado. Na Fig. 33 (c) e (d) mostramos a densidade local de estados próxima a junção para os dois pontos destacados da Fig. 33 (a). Vemos que a densidade local de estados é mais intensa de um dos lados em relação ao outro dependendo da intensidade do campo elétrico. Por fim, a Fig. 34 mostra um mapa de contorno da condutância para o braço direito da JBTT como função da energia e do campo elétrico. Uma informação adicional

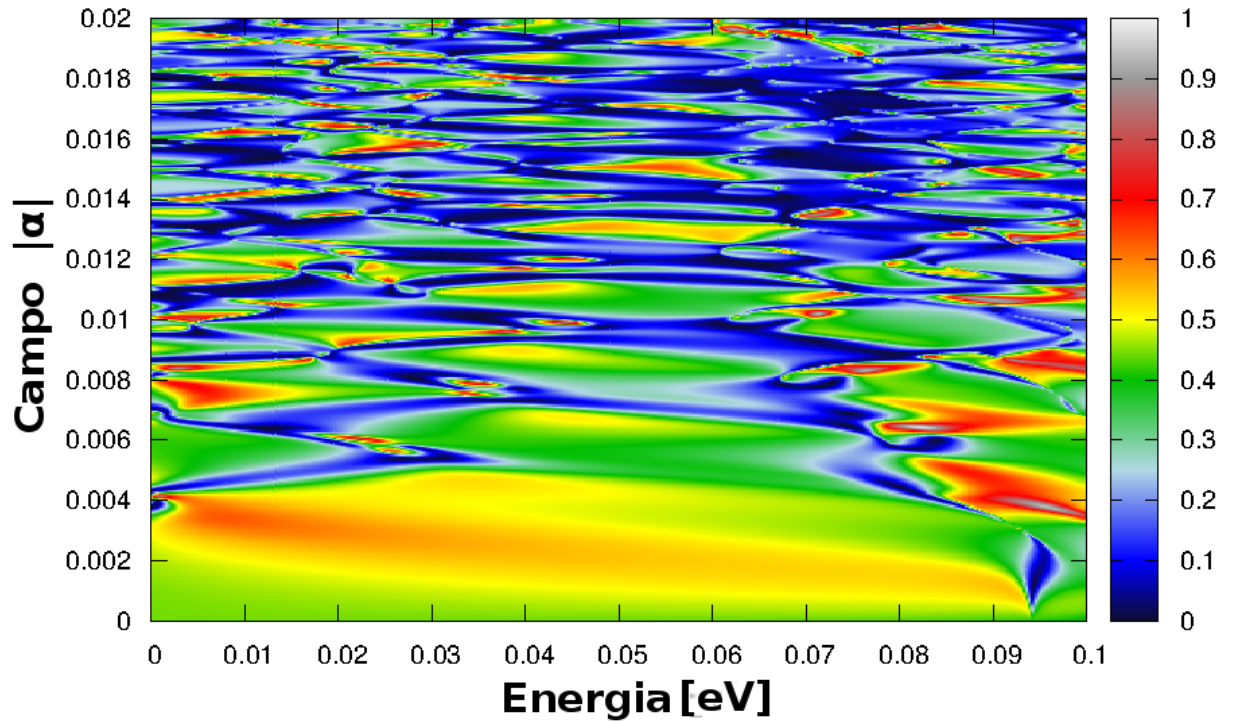


Figura 34: Mapa de contorno para uma JBTT de grafeno de espessura $L = 18.24$ nm para a condutância em função da energia e do campo elétrico do sistema (Energia em unidades de t e campo em unidades de a_0/t , com t/ea_0 , com e a carga eletrônica e a_0 uma distância interatômica).

que podemos obter desse gráfico é que quando tomamos valores intensos de campo elétrico as oscilações na condutância passam a ser bastante desordenadas como função da energia. Podemos entender o porque dessas oscilações considerando que, na região da junção, há um acoplamento dos modos das duas fitas de saída. Dependendo da energia e da intensidade do campo elétrico, a onda incidente acopla-se com um modo localizado na fita direita ou esquerda o que leva a condutância maior em uma ou outra das fitas. Esse é, assim como no caso da fita, um efeito de ressonância. Devemos, no entanto, levar em consideração não só a ressonância entre os estados dentro da região do campo elétrico, mas também a ressonância com os estados dentro da região de acoplamento.

O comportamento do sistema pode ser comparado com aquele de uma partícula clássica atravessando uma região clássica de mesma geometria que o sistema. Apesar de não ser uma descrição estritamente correta, isso serve para mostrar que mesmo do ponto de vista clássico esse comportamento já era esperado. Assumimos comportamento balístico no sentido clássico, isto é, que ao encontrar uma parede a partícula sofre uma colisão elástica e portando a componente da velocidade na direção normal a parede é

invertida. A fig. 35 ilustra o que acontece. Dependendo da intensidade do campo elétrico e da energia, o que determina o número de colisões com as paredes, a partícula pode emergir com velocidade vertical positiva ou negativa. Com dois canais, como os da Fig. 30 imediatamente após a região de campo elétrico, ela será transmitida para o canal de cima ou de baixo, dependendo do sinal da velocidade da partícula.

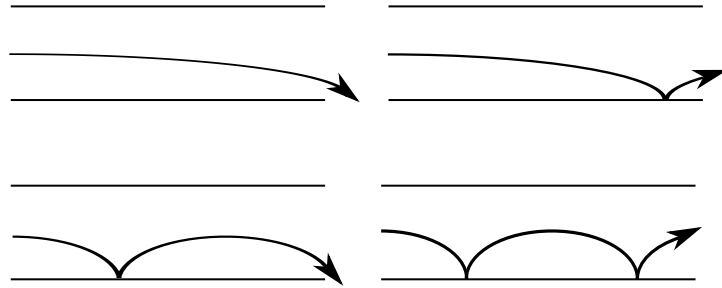


Figura 35: Representação de uma partícula clássica através de uma região com campo elétrico uniforme com colisões elásticas com as paredes do sistema.

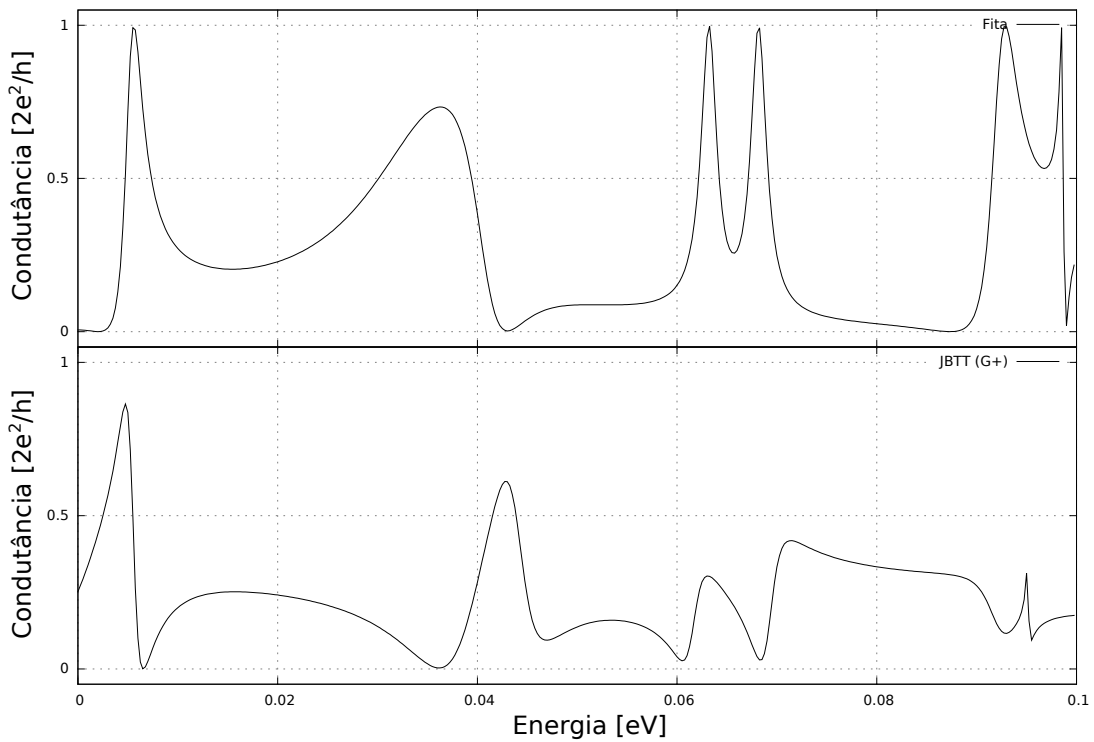


Figura 36: (a) Condutância para uma fita de grafeno de espessura $L = 18.24$ nm submetida a um campo de 0.07 V/nm; (b) Condutância para uma JBT com fitas de espessura $L = 18.24$ nm submetida a um campo de 0.07 V/nm.

Por fim, a Fig. 36 mostra uma comparação entre a condutância para um dos braços da JBT de espessura $L = 18.24$ nm, sujeita a um campo elétrico de 0.07 V/nm através de uma região de largura $L = 14$ nm, e uma nanofita de igual espessura sujeita às mesmas

condições de campo elétrico. Vemos que o perfil da condutância através da JBTT segue aproximadamente aquele apresentado para a nanofita. Isso mostra que a transmissão se dá através de ressonâncias entre a região de campo elétrico com o sistema. Vemos que a presença da junção altera o transporte de carga. Para $E < 0.005$ t, a condutância da junção é significativamente maior do que no caso da fita. Para energias maiores observa-se um comportamento oscilatório da condutância. Além disso, observa-se uma curiosa inversão do perfil da condutância: para $E \approx 0.035$ t, por exemplo, a nanofita apresenta um máximo na condutância, enquanto a JBTT possui um mínimo. Inversões semelhantes ocorrem para outros valores de energia. Portanto, pode-se concluir que tais oscilações são causadas pelo efeito combinado da geometria da junção com as ressonâncias induzidas pela presença do campo transversal.

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Inicialmente, neste trabalho foi realizada uma revisão sobre as propriedades de nanoestruturas de grafeno. Consideramos o sistema sujeito a campos elétricos e magnéticos (primeiro, os dois campos em separado e, em seguida, os dois em conjunto). Para o caso de um campo elétrico transversal somente, temos o surgimento de um overlap entre estados de valência e condução devido ao efeito Stark, que se caracteriza pela presença de mini cones de Dirac na relação de dispersão. Para o caso de um campo magnético perpendicular à fita, temos o surgimento de níveis de borda de Landau que são caracterizados principalmente por estados de energia constante na relação de dispersão. Por fim, foi considerada a ação conjunta de campos elétricos e magnéticos. Neste caso, a relação de dispersão mostra uma assimetria entre os estados de k positivo e k negativo caracterizado pela quebra de simetria de reversão temporal no sistema.

Na segunda parte estudamos as propriedades de transporte de nanoestruturas de grafeno. Consideramos uma fita simples sujeita a um campo elétrico transversal uniforme ao longo de uma região de largura finita. Vimos que, para larguras pequenas da fita, o sistema exibe o comportamento típico de oscilações de Fabry-Perót com o surgimento de máximos e mínimos de ressonância bem espaçados ao longo do sistema. Ao considerarmos sistemas mais largos, vimos o surgimento de alguns picos mais estreitos com o corte da condutância para alguns valores de energia. Isso permite que o sistema possa ser utilizado para chaveamento de dispositivos, por exemplo. Para uma junção balística de três terminais, observamos que a aplicação de um campo elétrico imediatamente no plano adjacente aos dois braços da junção (Fig. 32) não leva necessariamente ao comportamento em que os elétrons são completamente desviados para um dos braços do sistema. Observamos oscilações na condutância que tornam-se mais acentuadas a medida que tomamos valores mais intensos de campo elétrico. Essas oscilações surgem como decorrência de ressonâncias entre estados incidentes com os estados na região do campo elétrico e na

junção. Um efeito interessante dessas oscilações é que elas permitem uma mudança na direção da corrente por uma pequena mudança da intensidade do campo elétrico, como pode ser visto dos pontos c e d da Fig. 33(a). Isso permite que a JBTT também possa ser utilizado no processo de chaveamento de circuito.

Nos resultados apresentados nessa dissertação, consideramos o sistema no regime degenerado, isto é, com temperatura igual a zero. Uma possível extensão desse trabalho será considerar as mudanças geradas pelo efeito da temperatura no sistema. Podemos estender os resultados apresentados aqui para outras geometrias de nanoestruturas de grafeno e para outros tipos campo aplicados. Também podemos considerar a aplicação dos cálculos de transporte e propriedades eletrônicas para outros materiais bidimensionais, como o Nitreto de Boro e o Fósforo negro.

REFERÊNCIAS

- [1] Novoselov, K. S., A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science 306, 666.(2004)
- [2] Katsnelson, M. I. *Graphene: Carbon in Two Dimensions* United Kingdom: Cambridge University Press, 2012
- [3] Dresselhaus, M. S., *Fifty years in studying carbon-based materials* Physica Scripta 2012, 014002. (2012)
- [4] Wallace, P. R. *The Band of Graphite*, Physical Review 71,622.(1947)
- [5] Eklund, P. C., Dresselhaus, G., Dresselhaus, M. S. *Raman scattering from in-plane lattice modes in low-stage graphite-alkali-metal compounds* Physical Review B 16, 3330.(1977)
- [6] Iijima, S., Ichihashi, T. *Single-Shell Carbon Nanotubes of 1-nm Diameter* Nature 363, 603-5.(1993)
- [7] Geim, A. K. Novoselov, K. S. *The rise of Graphene* Nature 6, 183-191.(2007)
- [8] Zhu, L., Zhao, X., Li, Y., Yu, X., Li, C., Zhang, Q. *High-quality production of graphene by liquid-phase exfoliation of expanded graphite* Materials Chemistry and Physics 137, 984-990 (2013.)
- [9] Zhou, H., Yu, W. J., Liu, L., Chen, Y., Huang, X., Liu, Y., Wang, Y., Huang, and Duan, X. *Chemical vapor deposition growth of large single crystals of monolayer and bilayer graphene* Nature Communications 4, 2096. (2013)
- [10] Choi, J. I. *Graphene Transfer: A stamp for all substrates* Nature Nanotechnology 8, 311-312. (2013)
- [11] Williams, J. R., DiCarlo, M., Marcus C. M. *Quantum Hall Effect in a Gated Controlled p-n Junction of Graphene* Science 317, 638. (2007)
- [12] Bolotin, K. I., Ghahari F., Shulman, M. D., Stormer, H. L., Kim, P. *Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene* Nature 462, 196 (2010)
- [13] Schwierz, F. *Graphene Transistors* Nature Nanotechnology 5,487-496 (2010)
- [14] Aberg, I., Hoyt, J. L. *Hole Transport in UTB MOSFETs in Strained-Si Directly on Insulator With Strained-Si Thickness Less Than 5 nm*
- [15] Filho, R. N. C., *Graphene ribbons with a line of impurities: Opening of a gap* Physical Review B 76, 193409 (2007).

- [16] Raza, H. *Edge and passivation effects in armchair graphene nanoribbons* Physical Review B 84, 165425 (2011).
- [17] Castro, E. V., Novoselov, K. S., Morozov, S. V., Peres, N. M. R., Santos, J. M. B. L., Nilsson, J., Guinea, F., Geim, A. K., Castro, A. H. N. *Biased Bilayer Graphene: Semiconductor with a Gap Tunable by the Electric Field Effect* Physical Review Letters 99, 216802 (2007)
- [18] Sena, S. H. R. *Transporte e Estados Confinados de Portadores de Carga em Nanoestruturas de Grafeno* Dissertação (Mestrado em Física), Universidade Federal do Ceará (2007)
- [19] Nair, R. R., Blake, P., Grigorenko, A. N., Novoselov, K. S., Booth, T. J., Stauber, T., Peres, N. M. R., Geim, A. K. *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene* Science 320, 1308 (2008).
- [20] Novoselov, K. S., Fal'ko, V. I., Colombo, L., Gellert, P. R., Schwab, M. G, Kim, K. *A roadmap for graphene* Nature 192, 490 (2012)
- [21] Robert Johnson *http://www.physics.upenn.edu/~robertjo/gallery/*
- [22] Lu, Y., Goldsmith, B. R., Kybert, N. J., Jhonson, A. T. C. *DNA-decorated graphene chemical sensors* Applied Physics Letters 97, 083107 (2010).
- [23] Reich, S., Maultzsch, J., Thomsem, C. *Tight-binding description of graphene* Physical Review B 66, 035412 (2002).
- [24] Sprinkle, M., Siegel, D., Hu, Y., Hicks, J., Tejeda, A., Taleb-Ibrahimi A., Le Fèvre P., Bertran, F., Vizzini, S., Enriquez, H., Chiang, S., Soukiassian, P., Berger, C., de Heer, W. A., Lanzara, A., Conrad, E. H. *First Direct Observation of a Nearly Ideal Graphene Band Structure* Physical Review Letters 103, 226803 (2009).
- [25] Sakurai, J. J., Napolitano, J. *Mecânica Quântica Moderna* São Paulo: Bookman companhia editora LTDA, (2013).
- [26] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I., Grigorieva, I. V., Dubonos, S. V., Firsov, A. A. *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene* Nature 438, 197 (2005).
- [27] Neto, A. H. C., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselo, K. S., Geim, A. K. *The electronic properties of graphene* Review of Modern Physics 81, 109 (2009)
- [28] Pereira Jr, J. M., Peeter, F. M., Chaves, A., Farias, G. A. *Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene* Semiconductor Science and Technology 25, 033002 (2010)
- [29] Brey, L., Fertig, H. A. *Electronic States of Graphene Nanoribbons* Physical Review B 73, 235411 (2006)
- [30] Abramowitz, M, Stegun, I. A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* New Yourk: Dover press (1965).

- [31] Lukose, V., Shankar, R., Baskaran, G. *Novel Electric Field Effects on Landau Levels in Graphene* Physical Review Letters 98, 116802 (2007).
- [32] Peres, N. M. R., Castro, E. V. *Algebraic solution of a graphene layer in transverse electric and perpendicular magnetic fields* Journal Physics: Condensate Matter 19, 406231 (2009).
- [33] Han, M. Y., Ozyilmaz, B., Zhang, Y., Kim, P. *Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons* Physical Review letters 98, 206805 (2007).
- [34] Bai, J., Duan, X., Huang, Y. *Rational Fabrication of Graphene Nanoribbons Using a Nanowire Etch Mask* Nano Letters 9, 2083-2087 (2009).
- [35] Kosynkin, D. V., Higginbotham, A. L., Sinitskii, A., Lomeda, J. R., Dimiev, A., Price, A. K., Tour, J. M. *Longitudinal unzipping of carbon nanotubes to form graphene nanoribbons* Nature 458, 872 (2009).
- [36] Jiao, L., Wang, X., Diankov, G., Wang, H., Dai, H. *Facile synthesis of high-quality graphene nanoribbons* Nature Nanotechnology 5, 321 (2010).
- [37] Nakada, M., Fujita, M., Dresselhaus, G., Dresselhaus, M. S. *Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence* Physical Review B, 54, 24 (1996).
- [38] Wakabayashi, K., Sasaki, K., Nakanishi, T., Enoki, T. *Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions* Science and Technology of Advanced Materials 11, 054504 (2010).
- [39] Chang, C. P., Huang, Y. C., Lu, C. L., Ho, J. H., Li, T. S., Lin, M. F. *Electronic and optical properties of a nanographite ribbon in an electric field* Carbon 44, 508 (2006)
- [40] Roslyak, O., Gumbs, G., Huang, D. *Graphene nanoribbons in criss-crossed electric and magnetic fields* Philosophical Transactions of The Royal Society A 368, 5431 (2010)
- [41] Novikov, D. S. *Transverse Field Effect in Graphene Ribbons* Physical Review Letters 99, 056802 (2007)
- [42] Neto, A. H. C., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., Gueim, A. *The electronic properties of graphene* Reviews of Modern Physics 81, 109 (2009).
- [43] Groth, C. W., Wimmer, M., Akhmerov, A. R., Waintal, X. *Kwant: a software package for quantum transport* New Journal of Physics 16, 063065 (2014).
- [44] Baringhaus, J., Ruan, M., Edler, F., Tejeda, A., Sicot, M., Ibrahimi, A., Li, A., Jiang, Z., Conrad, E. H., Berger, C., Tegemkamp, C., de Heer, W. A. *Exceptional ballistic transport in epitaxial graphene nanoribbons* Nature 349, 506 (2014).
- [45] George, A. *Nested Dissection of a Regular Finite Element Mesh* Journal of American Analysis 10, 2 (1973).
- [46] Datta, S. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* United Kingdom: Cambridge University Press, (1995).

- [47] Giuliani, G. F., Quinn, J. J. *lifetime of a quasi particle in a two-dimensional electron gas* Physical Review B 26, 8 (1982).
- [48] Buttiker, M., *Symmetry of Electrical Conduction* Journal of Research and Development - IBM 32, 3 (1988).
- [49] Palm, T., Thylén, L. *Analysis of an electron wave y branch switch* Applied Physics Letter 60, 237 (1992).
- [50] Xu, H. Q. *Electrical properties of three-terminal ballistic junctions* Applied Physics Letters 78, 14 (1991).