



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

GRUPO DE TEORIA DA MATÉRIA CONDENSADA



LUCAS SAMIR RAMALHO CAVALCANTE

ESTADOS *SNAKE* E FILTROS DE VALE BASEADOS SOMENTE EM
TENSÃO MECÂNICA EM MONOCAMADAS DE GRAFENO

FORTALEZA

2016

LUCAS SAMIR RAMALHO CAVALCANTE

ESTADOS *SNAKE* E FILTROS DE VALE BASEADOS SOMENTE EM TENSÃO
MECÂNICA EM MONOCAMADAS DE GRAFENO

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

Orientador: Prof. Dr. Andrey Chaves.

Coorientador: Dr. Diego Rabelo da Costa.

FORTALEZA

2016

LUCAS SAMIR RAMALHO CAVALCANTE

ESTADOS *SNAKE* E FILTROS DE VALE BASEADOS SOMENTE EM TENSÃO
MECÂNICA EM MONOCAMADAS DE GRAFENO

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

Aprovada em 25/02/2016.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Andrey Chaves (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Dr. Diego Rabelo da Costa (Coorientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

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

Prof. Dr. Luiz Felipe Cavalcanti Pereira
Universidade Federal do Rio Grande do Norte (UFRN)

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

A000p Cavalcante, Lucas Samir Ramalho.
Estados *snake* e filtros de vale baseados somente em tensão mecânica em monocamadas de grafeno / Lucas Samir Ramalho Cavalcante. – Fortaleza, 2016.
62.:il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de Física, Fortaleza, 2016.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientação: Prof. Dr. Andrey Chaves.

1. tensão, 2. snake states, 3. filtro, 4. vale. I. Título.

CDD:000.0

*Aos meus pais que
tanto apoiaram e
incentivaram o meu
crescimento pessoal
e profissional.*

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por ter me dado a oportunidade de concluir esse trabalho nessa nova etapa da minha vida.

A meus pais, Francisco Cavalcante e Ana Clara, pelo apoio incondicional. Além de meus irmãos, Felipe e Isaac, pelo companheirismo e pela amizade construída durante toda minha vida.

A meus orientadores, Prof. Dr. Andrey Chaves e Prof. Dr. Gil de Aquino Farias, por todo ensino e dedicação oferecidos de forma tão brilhante e, ao mesmo tempo, humilde. Além dos professores presentes na banca examinadora dessa dissertação, em especial ao Dr. Diego Rabelo da Costa.

A todos os professores com os quais tive aula durante a pós-graduação.

A minha namorada, Lia Araújo, pelo apoio emocional e por todos os momentos de grande felicidade.

A meus colegas de laboratório, Duarte, Luan e Gabriel, pelos momentos de aprendizado.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

RESUMO

O grafeno possui diversas propriedades eletrônicas interessantes que o tornam um material decisivo para o futuro desenvolvimento de novos dispositivos. Uma delas é a existência de dois vales (de Dirac) em seu espectro eletrônico, o que abre a possibilidade de se fazer dispositivos vale-trônicos. Além disso, o grafeno também apresenta excelentes propriedades mecânicas, sendo o material mais fino já conhecido e, ainda assim, o mais forte já medido. A sua maleabilidade é uma propriedade fascinante, fazendo com que este material resista a altas tensões mecânicas. Mais ainda, tem se demonstrado que campos de tensão mecânica em grafeno podem ser mapeados em campos pseudo-magnéticos para elétrons no material. Isso, então, nos permite usar tensões mecânicas altas para ajustar as propriedades eletrônicas deste material e, assim, expandir seu leque de aplicações tecnológicas possíveis. Nesta dissertação, o transporte eletrônico através da direção paralela a uma barreira pseudo-magnética, produzida pela aplicação de uma tensão mecânica não uniforme em uma fita de monocamada de grafeno, é teoricamente investigado. Na região onde o campo pseudo-magnético troca de sinal, são observados estados do tipo *snake*, isto é, compostos por semi-órbitas com uma única direção de propagação, como esperado para o caso análogo de uma barreira desse tipo produzida por um campo magnético externo. Contudo, os campos pseudo-magnéticos apontam em direções opostas nos vales K e K', gerando correntes de estados snake com vales polarizados. Ao longo deste trabalho, discutimos como maximizar uma filtragem de vales baseada nesta polarização, através do ajuste de parâmetros que definem a distribuição de tensão ao longo da nanofita de grafeno.

Palavras-chave: tensão, snake states, filtro, vale.

ABSTRACT

Graphene exhibits several interesting electronic properties that make it a decisive material for the development of future devices. One of them is the existence of two (Dirac) valleys in its electronic spectrum, which enables the possibility of designing valley-tronic devices. Besides, graphene also exhibits great mechanical properties, being the thinnest material known to date and, still, the strongest yet measured. Its flexibility is a fascinating property, that makes it resist high mechanical stress. Moreover, it has been demonstrated that strain fields in graphene can be mapped into pseudo-magnetic fields for electrons in the layer. Thus, this allows us to use high strain fields to tune electronic properties of this material and, thereby, expand its set of possible technological applications. In this dissertation, the electronic transport along the direction parallel to a pseudo-magnetic barrier, induced by a non-uniform strain in a monolayer graphene nanoribbon, is theoretically investigated. In the region where the pseudo-magnetic field changes sign, we observe snake states, composed by semi-orbits with a single propagation direction, as expected for the analogous case of such a barrier induced by an ordinary external magnetic field. However, pseudo-magnetic fields point towards opposite directions in K and K' valleys, which yields valley polarized snake states currents. Throughout this work, we discuss how to maximize the valley-filtering effect based on such a polarization, by adjusting the parameters defining the strain distribution along the graphene nanoribbon.

Keywords: strain, snake states, filter, valley.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Estados alotrópicos do carbono em diferentes dimensões [1].	13
Figura 2 – Filmes de grafite. (a) Imagem de uma multi-camada de grafeno de 3 nm de espessura. (b) Imagem do microscópio de força atômica (AFM) de um floco perto de sua borda. A superfície marrom escura é o SiO_2 e a parte laranja corresponde a 3 nm de superfície acima do SiO_2 . (c) Imagem AFM de uma camada única de grafeno. (d) Imagem de um dispositivo experimental preparado a partir de camadas de grafeno através do microscópio eletrônico de varredura (SEM). (e) Representação esquemática do dispositivo em (d) [2].	14
Figura 3 – Imagem $1000 \text{ \AA} \times 1000 \text{ \AA}$ obtida à temperatura ambiente após aquecimento a 1230 K. Observa-se concentração de grafeno com algumas ilhas na parte inferior [3].	15
Figura 4 – À esquerda, processo de síntese, impressão e transferência de filmes de grafeno. À direita, processo de transferência de filmes de grafeno em larga escala [10].	15
Figura 5 – Exemplos de estruturas de grafeno, mostrando (linha de cima) imagens de microscópio de força atômica (AFM) e (linha de baixo) imagens de microscópio de força eletrostática (EFM). As imagens EFM produzem um contraste claro para o grafeno e um contraste escuro para SiC, promovendo, assim, um método simples de localizar as superfícies cobertas por grafeno. (a) Crescimento de fitas de grafeno ao longo de um grupo de bordas de fases de SiC com fases devido a pequenas falhas do cristal. (b) Crescimento de grafeno ao longo de uma superfície organizada de SiC que foi feita com 15 nm de profundidade. (c) Anéis de grafeno. (d) Organização de nanofitas de grafeno. [11]	16
Figura 6 – (a) Imagem de dispositivos fabricados sobre um <i>wafer</i> de grafeno de 2 polegadas. (b) Esquemática da visão transversal de um <i>top gated FET</i> de grafeno. [15]	17
Figura 7 – À esquerda, estrutura de uma célula fotovoltaica baseada em nanotubos de carbono de parede única (SWNT), com grafeno como ânodo e SWNT do tipo n como cátodo. À direita, diagrama de bandas da célula [16]. . .	18

Figura 8 – (a) Folha de cobre é enrolada ao redor de um tubo que será inserido em um reator. A imagem abaixo mostra o estágio no qual o sistema reage com uma mistura de gases de CH_4 e H_2 em altas temperaturas. (b) Transferência do filme de grafeno com a fita térmica para o substrato PET. (c) Transferência do sistema para um substrato PET de mais espessura. (d) Processo de inscrição dos eletrodos de prata. (e) Um painel grafeno/PET com alta flexibilidade. (f) Produto final conectado a um computador com software de controle. [17]	19
Figura 9 – Esquerda: Estrutura cristalina do grafeno composta de duas redes triangulares sobrepostas (\vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores unitários, e δ_i , com $i=1,2,3$, são os vetores de primeiros vizinhos). Direita: Zona de Brillouin correspondente. Os cones de Dirac estão localizados nos pontos K e K' [33].	22
Figura 10 – Dispersão eletrônica da estrutura de grafeno. A esquerda: Estrutura da bandas. A direita: Aproximação de um ponto de Dirac. [33]	25
Figura 11 – Níveis de Landau como função do campo magnético em uma monocamada de grafeno [1]	27
Figura 12 – Estrutura de nanofitas de grafeno com (a) bordas <i>armchair</i> e (b) bordas <i>zigzag</i> . Os retângulos pontilhados definem as células unitárias. N define a largura da fita e os marcadores x indicam os átomos de carbono que faltam nas bordas. [39]	28
Figura 13 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e a densidade de estados $D(E)$ para nanofitas <i>armchair</i> com larguras: (a) $N = 4$, (b) $N = 5$ e (c) $N = 30$. [39]	29
Figura 14 – Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e a densidade de estados $D(E)$ para nanofitas <i>zigzag</i> com larguras: (a) $N = 4$, (b) $N = 5$ e (c) $N = 30$. [39]	29
Figura 15 – Gráfico de densidade da dispersão de energia para: (a) região sem torção, (b) torção aplicada ao longo da direção <i>armchair</i> e (c) da direção <i>zigzag</i> [52].	34
Figura 16 – Geometria com simetria triangular de distorção com tensão normal à superfície.[24]	35
Figura 17 – (a) Exemplo de grafeno retangular deformado em arco. Os raios das bordas inferiores e superiores são R e $R+W$, respectivamente ($R = 5 \times L$). (b) Campo magnético efetivo, em Teslas, para a mesma nanofita deformada. As dimensões são $W = 200$ nm, $L = 192$ nm, e $R = 5 \times L = 960$ nm. A distorção máxima é de 10%. [32]	35

Figura 18	(a) Esboço de uma folha de grafeno tensionada: considerou-se uma amostra retangular de largura W e altura L , flexionada como um arco de círculo de raio R . A folha de grafeno não tensionada é mostrada como círculos abertos, para comparação. (b) Barreira magnética induzida por tensão, obtida flexionando-se a rede do grafeno apenas na região $y \geq 0$. [43] . . .	36
Figura 19	(a) Trajetórias no plano xy para pacotes de onda com momento inicial $k_y^0 = 0.02 \text{ \AA}^{-1}$ em torno de K (símbolos) e K' (curvas), para um elétron e um buraco respectivamente, considerando-se uma folha de grafeno flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1 \text{ \mu m}$ e um campo magnético externo $B = 0 \text{ T}$ (aberto, sólida) e 4.9 T (fechado, tracejada). As curvas azuis finas mostram os resultados para duas outras intensidades de campo magnético externo para o pacote em K . (b) Probabilidade de se encontrar a partícula em $y \geq 0$ como função do tempo, para pacotes de onda com as mesmas configurações que em (a). [43]	37
Figura 20	Perfil do campo magnético (a) Caso $\sigma = 1$. Para $B' \leq 0$, a propagação de pares de <i>snake states</i> em sentidos contrários é possível. (b) Caso $\sigma = -1$, com propagação unidirecional de <i>snake states</i> . [54]	38
Figura 21	Trajetória clássica de um <i>snake state</i> em uma região de campo magnético perpendicular à camada de grafeno, onde nos dois lados da figura temos campos magnéticos de sinais contrários. [53]	38
Figura 22	(a) Esquema de uma fita de grafeno torcida. O estresse é definido por círculos de raio R (pontilhado vermelho), que decai suavemente à zero para os locais de entrada e saída, de modo que a largura da região tensionada é definida por β . O mapa de cor indica os deslocamentos locais menores (regiões claras) e maiores (regiões escuras). A linha de átomos centrais (linha verde pontilhada) nunca é tensionada nessa configuração. (b) (cima) Esquematisação do perfil do campo pseudo-magnético induzido para uma configuração de tensão representativa (β, R_0) . (baixo) Visão transversal do campo pseudo-magnético ao longo das linhas localizadas nas regiões $y > 0$ (linha pontilhada roxa) e $y < 0$ (linha traçada azul) do sistema do painel de cima, considerando dois raios máximos diferentes, com $R_0^2 > R_0^1$	40
Figura 23	Estados energéticos para uma partícula de Dirac na presença de (pseudo) campo magnético. Resultados para K e K' são os mesmos para um campo magnético externo, enquanto que para um pseudo campo magnético, o espectro de K' (círculos vermelhos) difere daquele para o vale K	43

Figura 24	Trajeto�rias dos pacotes de onda de um electr�n que se propaga com momento nos vales K e K', iniciando-se nos pontos (x,y) dados por (1250 nm, 300 nm) (direita) e (-1250 nm, -300 nm) (esquerda). As setas indicam a dire�o de propaga�o ao longo das trajet�rias.	46
Figura 25	Densidades de probabilidade, como fun�o do tempo, de se encontrar electr�n antes (P_1), dentro (P_2), e depois (P_3) da regi�o tensionada com $\beta = 900$ e $R_0 = 10000 \text{ \AA}$, para um pacote de onda com $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$ ao redor do ponto K da zona de Brillouin. Os resultados de P_3 considerando o pacote ao redor de K' s�o mostrados para compara�o.	47
Figura 26	Polariza�o dos vales do pacote de onda ap�s a regi�o tensionada (a) como fun�o dos raios de tor�o R, para diferentes valores de β , (b) como fun�o da largura da regi�o tensionada β , para diferentes valores de raio.	50
Figura 27	Polariza�o de vales do pacote de onda que deixa a regi�o torcida como fun�o de sua energia, considerando (a) $\beta = 900$ e diferentes raios, e (b) $R_0 = 6000 \text{ \AA}$ e diferentes valores de β	51

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	Técnicas de fabricação de grafeno	14
1.1.1	CVD: Deposição química de vapor	14
1.1.2	Crescimento epitaxial em SiC	15
1.2	Aplicações	16
1.2.1	Transistores baseados em grafeno	17
1.2.2	Células solares baseadas em grafeno	17
1.2.3	Displays flexíveis baseados em grafeno	18
1.3	Motivação para a dissertação	19
1.4	Contribuição da dissertação	21
2	PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DO GRAFENO	22
2.1	Modelo tight-binding e equação de Dirac	23
2.2	Grafeno em um campo magnético homogêneo	26
2.3	Nanofitas de grafeno	28
3	EVOLUÇÃO TEMPORAL: MÉTODO SPLIT-OPERATOR	30
4	EFEITOS DE DISTORÇÃO EM NANOFITAS	33
4.1	Snake states	37
4.1.1	Solução analítica	41
4.1.2	Solução numérica	44
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	46
6	CONCLUSÃO	52
	APÊNDICE A – ARTIGOS PROVENIENTES DA TESE	53
	REFERÊNCIAS	61

1 INTRODUÇÃO

O carbono é o elemento base para toda a química orgânica, pois está presente em todas as formas de vida. Além disso, sua quantidade abundante na terra, combinada com um raio atômico reduzido, lhe permite formar cadeias múltiplas com o oxigênio (dióxido de carbono que é fundamental na fotossíntese), com o hidrogênio (hidrocarbonetos que são essenciais para o transporte através de combustíveis fósseis), e com muitos outros elementos, tornando-o muito importante para nossa sociedade através, também, de compostos inorgânicos.

A sua capacidade de se ligar de diferentes maneiras lhe permite formar uma grande variedade de estruturas com propriedades físicas distintas. Essas propriedades são resultado da dimensionalidade dessas estruturas. Os estados alotrópicos do carbono são substâncias de diferentes formatos compostas simplesmente por carbono: grafite, diamante, fulerenos, nanotubos e, o mais recentemente descoberto, grafeno. Estes estão representados na Fig. 1.

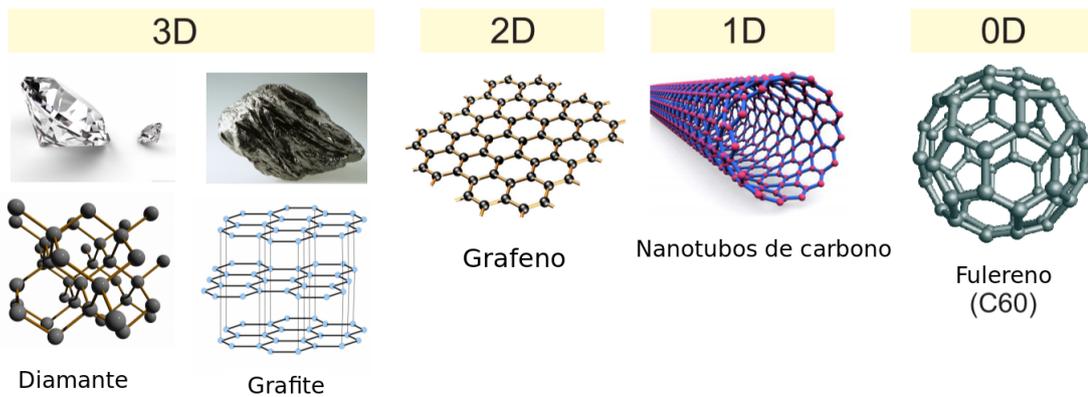


Figura 1: Estados alotrópicos do carbono em diferentes dimensões [1].

O grafeno é o nome dado a uma monocamada de átomos de carbono com geometria hexagonal em duas dimensões (2D). Este sistema é muito importante no estudo da física da matéria condensada devido sua geometria plana em relação aos outros alótropos do carbono, além de suas excelentes propriedades mecânicas e sua estrutura de bandas peculiar que serão discutidas posteriormente. Mais recentemente, tem se tornado alvo de pesquisas no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos após sua obtenção através da clivagem micromecânica do grafite em 2004, cujos resultados estão representados na Fig. 2 [2]. Esta técnica consiste em usar fita adesiva para descascar camadas de grafeno de uma massa de grafite altamente orientado e, em seguida, friccionar em um substrato de dióxido

de silício (SiO_2). Entretanto, tal método se tornou inviável para produção em larga escala, devido ao fato de que as camadas de carbono resultante desse método possuem características incontrolláveis, no que diz respeito a dimensões, deformações, qualidade das bordas e número de camadas.

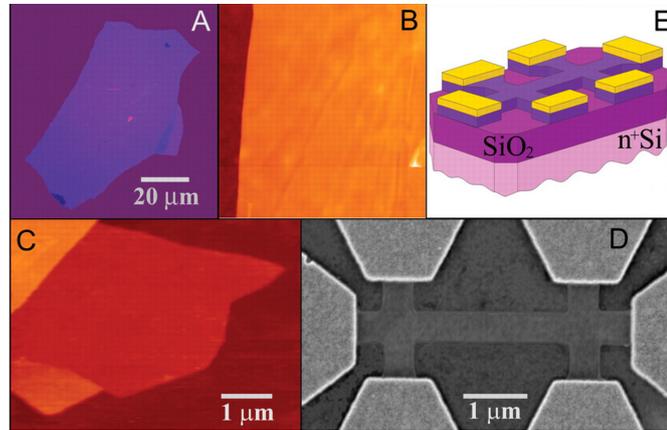


Figura 2: Filmes de grafeno. (a) Imagem de uma multi-camada de grafeno de 3 nm de espessura. (b) Imagem do microscópio de força atômica (AFM) de um floco perto de sua borda. A superfície marrom escura é o SiO_2 e a parte laranja corresponde a 3 nm de superfície acima do SiO_2 . (c) Imagem AFM de uma camada única de grafeno. (d) Imagem de um dispositivo experimental preparado a partir de camadas de grafeno através do microscópio eletrônico de varredura (SEM). (e) Representação esquemática do dispositivo em (d) [2].

Essa técnica extremamente simples e barata foi crucial para provar a possibilidade de se obter um cristal bidimensional, ao contrário do que se pensava há décadas. Outras técnicas de obtenção do grafeno, então, foram desenvolvidas com intuito mais direcionado à indústria da tecnologia, como: crescimento epitaxial através da deposição química de vapor de hidrocarbonetos (CVD) em substratos metálicos [3, 4], e através de decomposição térmica do SiC [5, 6, 7, 8, 9].

1.1 Técnicas de fabricação de grafeno

1.1.1 CVD: Deposição química de vapor

Na Fig. 3, observamos o resultado do crescimento de grafeno no substrato metálico Pt(111) através da decomposição de hidrocarbonetos. Podemos perceber que há formação de uma camada de grafeno ainda bem irregular com pequenas ilhas dispersas no substrato. Já na Fig. 4, vemos um processo bem mais elaborado da mesma técnica. Neste, o vapor químico de hidrocarbonetos é liberado em níquel reativo, entretanto, para resolver o problema da formação de muitas camadas de grafeno (grafite), finas camadas de níquel de espessura menor que 300 nm são depositadas em um substrato de SiO_2/Si usando um evaporador por feixe de elétrons. Em seguida, o material é aquecido a 1000°C e

resfriado após a reação de mistura dos gases para formar a camada de grafeno. Esta última etapa é crucial para a formação de camadas singulares e para a facilidade no momento de separação do substrato. Os materiais criados por esse processo já são utilizados em dispositivos flexíveis como o *touchscreen*.

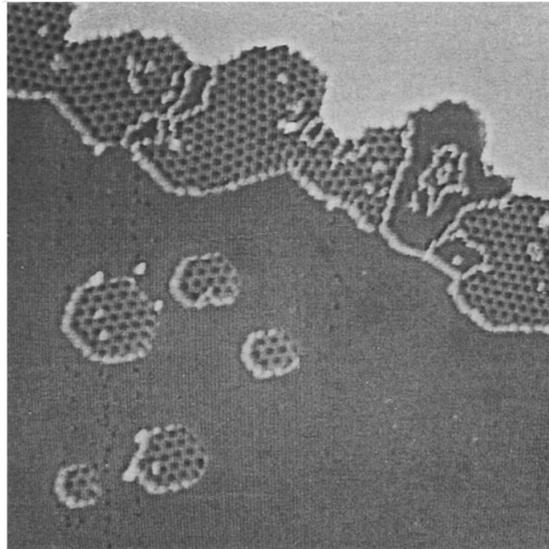


Figura 3: Imagem $1000 \text{ \AA} \times 1000 \text{ \AA}$ obtida à temperatura ambiente após aquecimento a 1230 K . Observa-se concentração de grafeno com algumas ilhas na parte inferior [3].

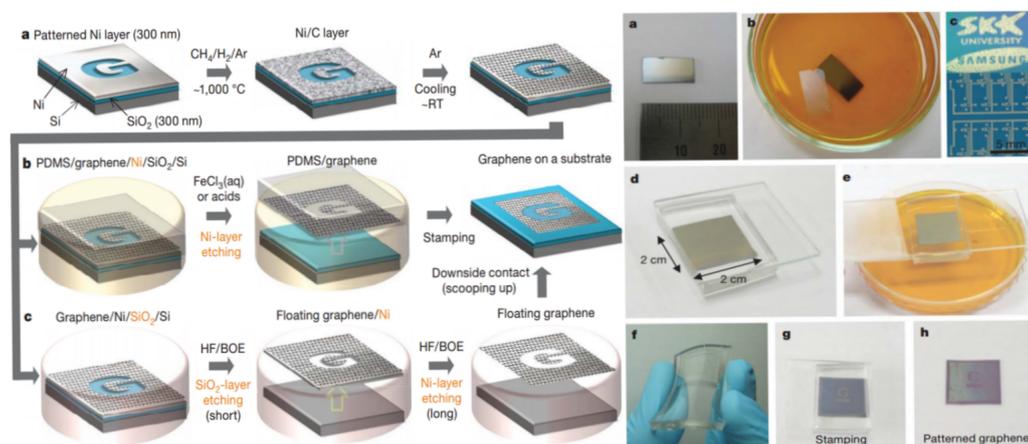


Figura 4: A esquerda, processo de síntese, impressão e transferência de filmes de grafeno. A direita, processo de transferência de filmes de grafeno em larga escala [10].

1.1.2 Crescimento epitaxial em SiC

Finalmente, o processo de crescimento epitaxial de grafeno em carbeto de silício está se mostrando o mais promissor no desenvolvimento de eletrônicos de grafeno em larga escala. Essa técnica consiste em uma decomposição térmica de carboneto de silício, no qual, através do aquecimento do substrato a temperaturas de 1500 K , há uma sublimação

do silício deixando camadas de grafeno [11]. Os resultados estão exemplificados na Fig. 5.

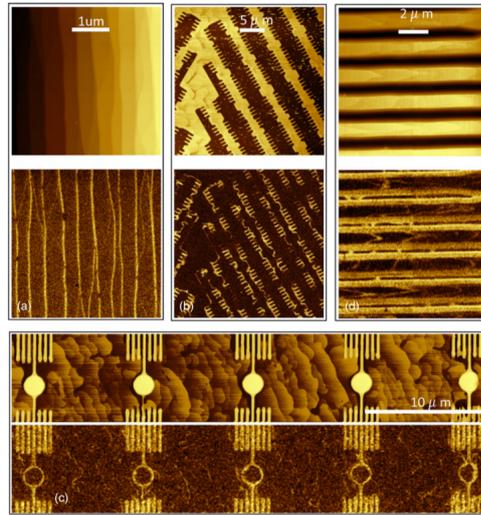


Figura 5: Exemplos de estruturas de grafeno, mostrando (linha de cima) imagens de microscópio de força atômica (AFM) e (linha de baixo) imagens de microscópio de força eletrostática (EFM). As imagens EFM produzem um contraste claro para o grafeno e um contraste escuro para SiC, promovendo, assim, um método simples de localizar as superfícies cobertas por grafeno. (a) Crescimento de fitas de grafeno ao longo de um grupo de bordas de fases de SiC com fases devido a pequenas falhas do cristal. (b) Crescimento de grafeno ao longo de uma superfície organizada de SiC que foi feita com 15 nm de profundidade. (c) Anéis de grafeno. (d) Organização de nanofitas de grafeno. [11]

Uma das principais vantagens é que no processo anterior havia necessidade de se retirar a camada de grafeno do substrato metálico e passá-la para outro substrato dielétrico, enquanto que nesse o SiC é um semicondutor de grande gap em suas bandas, o qual não é necessário ser retirado. Outra vantagem é a de que não há acumulação de impurezas abaixo da camada de grafeno durante o crescimento. Além disso, nesse método existe a possibilidade de controlar a direção de crescimento apenas cortando o substrato apropriadamente para o formato desejado.

1.2 Aplicações

A grande abundância do carbono na terra, os métodos já desenvolvidos para produção do grafeno, as excepcionais propriedades eletrônicas e ópticas altamente controláveis desse material [12, 13], como também, sua força e estabilidade térmica [14] tornam o grafeno um dos materiais mais promissores na revolução dos eletrônicos, dos sensores e dos dispositivos ópticos. Vejamos alguns exemplos de possíveis aplicações do grafeno.

1.2.1 Transistores baseados em grafeno

A alta mobilidade eletrônica do grafeno de $4 \times 10^4 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ à temperatura ambiente, chegando até a $2 \times 10^5 - 10^6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ a temperaturas mais baixas, é o fator essencial para o desenvolvimento de transistores de alta velocidade e de alta performance. Aliando essa característica à possibilidade de se ajustar a densidade de portadores de carga através do forte efeito de um campo elétrico tornou-se possível a criação de transistores FET (*Field Effect Transistor*) que trabalham em altas frequências baseados em grafeno [15].

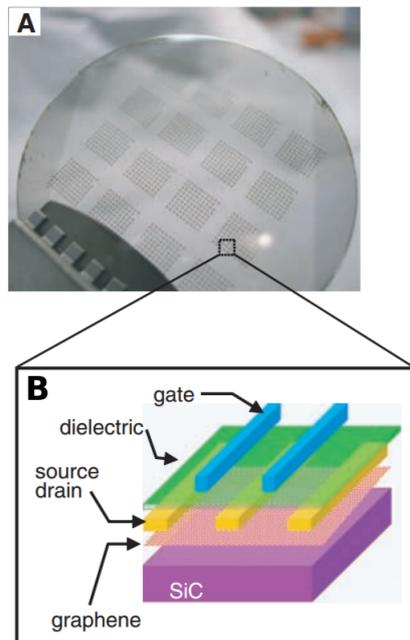


Figura 6: (a) Imagem de dispositivos fabricados sobre um *wafer* de grafeno de 2 polegadas. (b) Esquematização da visão transversal de um *top gated FET* de grafeno. [15]

Vemos na Fig. 6 um FET baseado em grafeno, onde os dois contatos, *source* e *drain*, estão conectados por uma camada de grafeno sobre um substrato de SiC (*back gate*). Através de um *gate* de voltagem variada acima do dispositivo pode-se variar a concentração de portadores de carga e, assim, controlar a corrente do dispositivo através do potencial do *top gate* V_{tg} .

1.2.2 Células solares baseadas em grafeno

Células solares são dispositivos que convertem luz em energia elétrica através do efeito fotovoltaico. Uma camada que absorve luz é colocada entre um ânodo e um cátodo transparentes. No momento em que fótons encontram o painel da célula, elétrons são excitados até encontrar um eletrodo. Para que o potencial criado seja cancelado, uma corrente induzida percorre a célula. Essa corrente é capturada fechando-se o ciclo de

produção de corrente elétrica.

Novas pesquisas [16] demonstram que é possível que todos os componentes da célula possam ser trocados por outros totalmente baseados em carbono: devido a sua alta condutividade e transparência, o grafeno tornou-se um excelente candidato para substituir os atuais materiais constituintes dos eletrodos das células solares, além disso, fulereno e nanotubos absorvem a luz gerando elétrons e buracos de acordo com a Fig. 7.

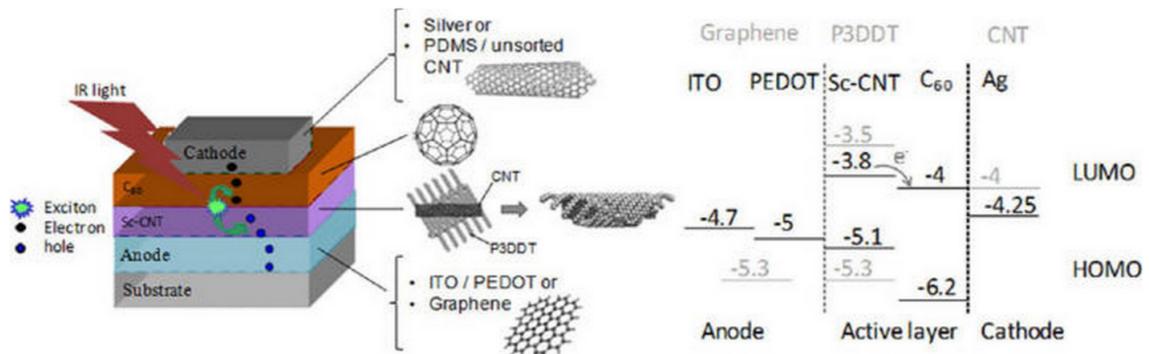


Figura 7: À esquerda, estrutura de uma célula fotovoltaica baseada em nanotubos de carbono de parede única (SWNT), com grafeno como ânodo e SWNT do tipo n como cátodo. À direita, diagrama de bandas da célula [16].

1.2.3 Displays flexíveis baseados em grafeno

A alta condutividade e transparência são características muito importantes que fazem do grafeno um material atrativo para produção de diodos de emissão de luz orgânicos (OLED). Substituir os eletrodos dos displays atuais, que são compostos por óxido de índio e estanho, os quais são tóxicos e caros, por camadas de grafeno dopadas faz com que a produção seja mais barata e torna possível o desenvolvimento de painéis *touchscreen* que suportam altos graus de torção.

Os *displays* flexíveis baseados em grafeno se tornaram viáveis após a descoberta de um novo método de crescimento de grafeno CVD que usa grandes folhas flexíveis de cobre na forma de um substrato cilíndrico no processo conhecido como *roll-to-roll* [17].

As etapas do processo estão representadas na Fig. 8. Primeiramente, o filme de grafeno é crescido pelo método CVD em uma folha cilíndrica de cobre. Então, o sistema é aquecido a 1000°C e colocado para reagir com uma mistura de gases de CH_4 e H_2 e, logo após, resfriado a temperatura ambiente (Fig. 8a). Na segunda etapa, o filme de grafeno no substrato de cobre é anexado a uma fita que se libera termicamente. Após se retirar a camada de cobre através de um removedor líquido, o filme é transferido ao substrato desejado com a ajuda de dois rolos aquecidos que retiram a fita unindo o grafeno à sua nova base, tereftalato de polietileno conhecido como PET, (Fig. 8b). Em seguida,

o material é adicionado a uma camada mais grossa do substrato PET (Fig. 8c), onde os eletrodos de prata serão escritos (Fig. 8d). Finalizando o processo, o painel altamente flexível (Fig. 8e) é conectado a um controlador de um laptop (Fig. 8f).

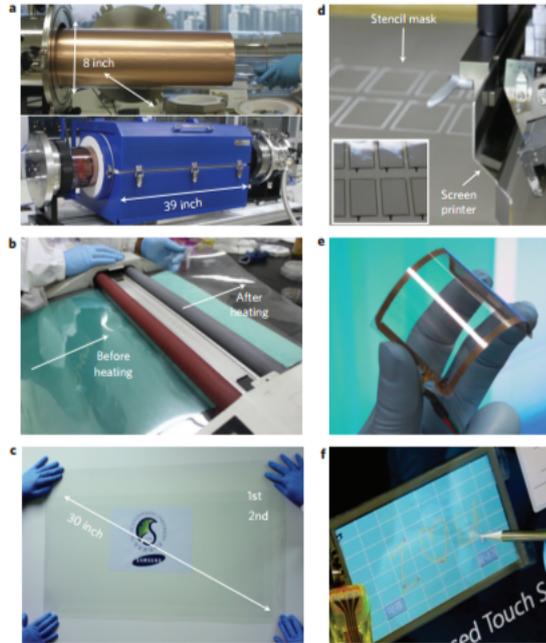


Figura 8: (a) Folha de cobre é enrolada ao redor de um tubo que será inserido em um reator. A imagem abaixo mostra o estágio no qual o sistema reage com uma mistura de gases de CH_4 e H_2 em altas temperaturas. (b) Transferência do filme de grafeno com a fita térmica para o substrato PET. (c) Transferência do sistema para um substrato PET de mais espessura. (d) Processo de inscrição dos eletrodos de prata. (e) Um painel grafeno/PET com alta flexibilidade. (f) Produto final conectado a um computador com software de controle. [17]

1.3 Motivação para a dissertação

O grafeno possui propriedades eletrônicas e mecânicas extraordinárias que oferecem novas possibilidades no desenvolvimento de tecnologias nunca antes encontradas em dispositivos baseados em outros materiais como o silício. A maior parte dessas propriedades eletrônicas é devida às bandas de valência e condução do grafeno que formam vales de formatos cônicos na zona de Brillouin, os quais, a baixas energias, encontram-se em pontos conhecidos como “pontos de Dirac”, devido à dispersão linear de energia em torno deles (em contraste com a dispersão quadrática, comum em semicondutores).

No espaço recíproco, há dois tipos não equivalentes de vales, o que sugere um novo grau de liberdade para o desenvolvimento de dispositivos além dos eletrônicos, cujo grau de liberdade é a carga, e dos spintrônicos, cujo grau de liberdade é o spin.

Com o intuito de se desenvolver uma possível “vale-trônica”, várias sugestões foram feitas, em busca de dispositivos capazes de filtrar vales no grafeno (*valleytronics*):

Rycerz et al. [18] demonstrou que combinações específicas de bordas armchair e zigzag em uma fita de monocamada de grafeno geram filtragem eficiente de vales. Massas efetivas induzidas por substratos não-uniformes também podem ser utilizadas para obtenção de polarização de vales, como mostrado nas Refs. [19, 20]. De maneira similar, em bicamadas de grafeno, filtragem de vales pode ser obtida através de configurações específicas de potenciais externos [21], ou de bordas com regiões de monocamadas de grafeno [22, 23].

Por outro lado, estudos recentes têm demonstrado que campos pseudo-magnéticos podem ser induzidos em grafeno através de configurações específicas de torção, pois uma torção mecânica não uniforme pode variar suavemente as distâncias interatômicas e, conseqüentemente, alterar o parâmetro de *hopping* do sistema. Esse efeito deforma a zona de Brillouin de modo a deslocar os cones de Dirac em direções opostas, lembrando o efeito gerado por um campo magnético, através da transformação de Peierls, aplicado perpendicularmente ao plano do grafeno. Já que, diferentemente dos campos magnéticos aplicados, os campos pseudo-magnéticos induzidos por torção apontam em direções opostas nos diferentes cones de Dirac [24], várias sugestões de filtros de vales baseados em tensão têm sido propostas na literatura, a maioria envolvendo a combinação desses campos induzidos com campos magnéticos e/ou elétricos aplicados [25, 26, 27, 28, 29].

De fato, filtros de vales baseados em torção são especialmente interessantes, por causa da habilidade do grafeno de resistir a grandes tensões mecânicas [30]. Além disso, campos pseudo-magnéticos muito grandes foram observados experimentalmente, por exemplo, em bolhas naturalmente formadas em sistemas de monocamada de grafeno com substrato de Pt [31].

Para que os efeitos do campo pseudo-magnético sejam apreciáveis no transporte de elétrons em uma nanofita este deve apontar na direção perpendicular ao plano do sistema. Para se obter um campo pseudo-magnético nesta direção, artigos recentes [24, 32] demonstraram que a geometria do sistema deve obedecer uma simetria de distribuição de torção que pode ser triangular ou circular. Esta citada por último possui implementação experimental bem mais simples e será utilizada como base no decorrer desse trabalho.

Assim, o questionamento que propomos responder ao longo desta dissertação é: Em uma região sem campos externos, qual o efeito de um campo pseudo-magnético produzido por uma tensão em formato de “S” sobre o transporte de elétrons em uma nanofita? A motivação para o questionamento se justifica, pois uma distorção em “S” equivale a duas distorções circulares adjacentes. Se cada distorção circular gera um campo pseudo-magnético em um sentido determinado pela direção de distorção, a estrutura em “S” sugerida aqui deve levar a uma barreira magnética ao longo do “S”. Essa previsão se

confirma em nossos cálculos *tight-binding*, como mostraremos nos capítulos que seguem. Seria possível então ajustar os parâmetros de distribuição deste estresse ao longo do grafeno de modo a se obter polarização dos vales?

1.4 Contribuição da dissertação

Neste trabalho, propomos um dispositivo de filtro de vales, feito de uma fita de monocamada de grafeno armchair (para se evitar os efeitos de borda), que, não depende especificamente de configurações diferenciadas de borda, substrato, massas induzidas, ou campos magnéticos externos. Desse modo, o dispositivo é totalmente baseado em um tipo particular de torção induzida, que gera uma barreira pseudo-magnética ao longo da largura da fita. É esperado obter essa torção através da utilização de substratos flexíveis.

Esta torção faz com que a fita deforme-se como um “S”. O formato de semi-círculos em direções opostas que forma esta configuração de distorção induz uma inversão de sinal do campo pseudo-magnético ao longo do “S”. A polarização de vales se origina então da combinação de dois aspectos importantes deste sistema: (i) o movimento **unidirecional** de estados *snake* ao longo da barreira pseudo-magnética, em analogia ao caso já conhecido de estados *snake* ao longo de barreiras de campos magnéticos aplicados, onde a direção de propagação depende do sinal do campo, e (ii) o fato de que a o campo pseudo-magnético que forma a barreira no nosso sistema aponta em direções opostas em cada vale K e K' . Essa combinação faz com que os elétrons se movam em órbitas semi-circulares que se propagam em direções opostas nos dois diferentes vales.

Com o intuito de verificar a eficácia de tal mecanismo de filtro de vales, nós investigaremos a propagação de pacotes de onda que descrevem elétrons neste sistema e calcularemos a probabilidade de transmissão destes pacotes de onda através da estrutura utilizando o modelo *tight-binding*. Investigaremos, então, a dependência da polarização dos estados de vales distintos com relação aos parâmetros do sistema, tais como raio de distorção e tamanho da região tensionada, através dos quais, discutiremos como maximizar a polarização sem a ajuda de campos externos. Nossos resultados demonstraram que a eficiência dessa polarização pode alcançar até 90% ao se promover condições específicas para o sistema, como veremos mais adiante.

2 PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DO GRAFENO

Como já foi mencionado, os átomos de carbono do grafeno estão organizados em uma rede hexagonal de acordo com a Fig. 9. Nesse tipo de geometria, não é possível descrever um sítio qualquer como uma combinação linear de dois vetores de base (em outras palavras, a rede hexagonal não é uma rede de Bravais). Entretanto, se analisarmos essa estrutura como redes triangulares superpostas, vemos que é possível descrever qualquer átomo do hexágono através de vetores de base a partir de dois tipos de sítios que chamaremos de A e B.

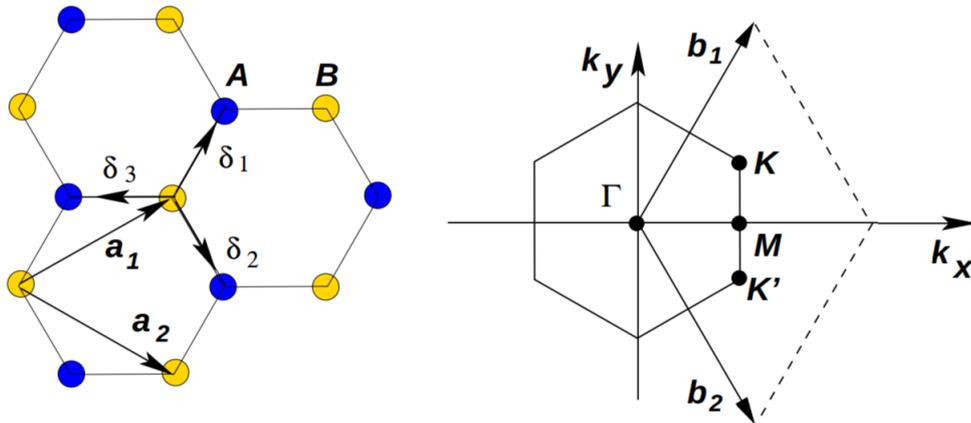


Figura 9: Esquerda: Estrutura cristalina do grafeno composta de duas redes triangulares sobrepostas (\vec{a}_1 e \vec{a}_2 são os vetores unitários, e δ_i , com $i=1,2,3$, são os vetores de primeiros vizinhos). Direita: Zona de Brillouin correspondente. Os cones de Dirac estão localizados nos pontos K e K' [33].

Os vetores unitários da rede são

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

onde $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ é a distância para os primeiros vizinhos. Cada átomo da subrede A é rodeado por 3 átomos da subrede B e vice-versa. Assim, a posição de cada vizinho de um sítio nessa estrutura pode ser descrita através dos seguintes vetores

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

Após definirmos a rede cristalina do grafeno, devemos analisá-la no espaço recíproco. A rede recíproca do grafeno também será descrita triangularmente, através dos

vetores

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

No lado direito da Fig. 9, vemos a zona de Brillouin do grafeno cujos pontos de simetria serão denominados K e K', dados por:

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

Estes pontos são conhecidos como pontos de Dirac porque, em baixas energias, elétrons localizados nessas *esquinas* da zona de Brillouin podem ser descritos como férmions de Dirac sem massa.

Para entender o comportamento de elétrons no grafeno utilizaremos o modelo teórico do tight-binding e, no caso de considerarmos apenas os estados de baixas energias, utilizaremos a equação de Dirac.

2.1 Modelo tight-binding e equação de Dirac

O modelo tight-binding considera interação apenas entre vizinhos próximos, assim, seu hamiltoniano será:

$$H_{TB} = -\tau \sum_{i,j} (a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i), \quad (2.5)$$

onde a_i (a_i^\dagger) e b_j (b_j^\dagger) aniquilam (criam) um elétron nos sítios mais próximos i e j das subredes A e B respectivamente, com parâmetro de *hopping* $\tau = 2.7$ eV.

Para o caso de uma rede infinita, podemos aplicar a transformação de Fourier ao hamiltoniano fazendo

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_k, \quad b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} b_{k'}. \quad (2.6)$$

Substituindo as Eqs. (2.6) na Eq. (2.5), obtemos

$$H_{TB} = -\sum_{i,j} \frac{\tau}{N} \left[\sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} a_k^\dagger b_{k'} + \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} b_{k'}^\dagger a_k \right], \quad (2.7)$$

que reescrevemos da seguinte maneira

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left[e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} a_k^\dagger b_{k'} + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i} e^{-i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} b_{k'}^\dagger a_k \right]. \quad (2.8)$$

Sabemos que cada sítio do grafeno está rodeado por 3 outros que distam do

primeiro de acordo com os vetores da Eq. (2.2), assim, ao mantermos o valor de i e variarmos os valores de j obtemos

$$H_{TB} = -\frac{\tau}{N} \sum_i \sum_{k,k'} \left[e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_i} a_k^\dagger b_{k'} \left(e^{-ik'_x a} + e^{ik'_x \frac{a}{2}} e^{ik'_y \frac{\sqrt{3}a}{2}} + e^{ik'_x \frac{a}{2}} e^{-ik'_y \frac{\sqrt{3}a}{2}} \right) + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k}) \cdot \vec{r}_i} b_{k'}^\dagger a_k \left(e^{ik'_x a} + e^{-ik'_x \frac{a}{2}} e^{-ik'_y \frac{\sqrt{3}a}{2}} + e^{-ik'_x \frac{a}{2}} e^{ik'_y \frac{\sqrt{3}a}{2}} \right) \right]. \quad (2.9)$$

Portanto, a transformada de Fourier do Hamiltoniano H_{TB} para uma rede infinita é

$$H_{TB} = -\tau \sum_k \left[g(\vec{k}) a_k^\dagger b_k + g^*(\vec{k}) b_k^\dagger a_k \right], \quad (2.10)$$

onde o fator de estrutura $g(\vec{k})$ é dado por

$$g(\vec{k}) = e^{-ik_x a} + 2e^{ik_x \frac{a}{2}} \cos \left(k_y \frac{\sqrt{3}a}{2} \right). \quad (2.11)$$

O Hamiltoniano acima pode ser descrito de forma matricial, para isso, fazemos

$$H_{TB} = \sum_k \langle \Psi_k | H_k | \Psi_k \rangle, \quad (2.12)$$

com os vetores $\Psi_k = (a_k \ b_k)^T$. Desse modo, escrevemos H_{TB} como

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} 0 & \tau g(\vec{k}) \\ \tau g^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.13)$$

Diagonalizando a matriz, encontramos o espectro das bandas de energia do grafeno dado por

$$E(\vec{k}) = \pm \tau \sqrt{3 + 2 \cos(k_y a \sqrt{3}) + 4 \cos \left(k_x \frac{3a}{2} \right) \cos \left(k_y \frac{a\sqrt{3}}{2} \right)}, \quad (2.14)$$

no qual obtemos 6 cones que compoem a banda de valência ($E_v \leq 0$) e a banda de condução ($E_c \geq 0$) de acordo com a Fig. 10. Apenas dois dos seis pontos onde esses cones se cruzam, ou seja, onde as bandas de condução e valência se tocam, são não-equivalentes - esses são os pontos de Dirac, K e K', dados no espaço recíproco pela Eq. (2.4).

Através do *zoom* na Fig. (10), podemos perceber que as curvas que formam os cones tendem a uma linearidade quando próximas da região de energia zero (no intervalo energético de ± 300 meV). Isso indica um comportamento para os elétrons de quasi-partícula sem massa, que obedece à equação de Dirac, cuja dispersão também é linear.

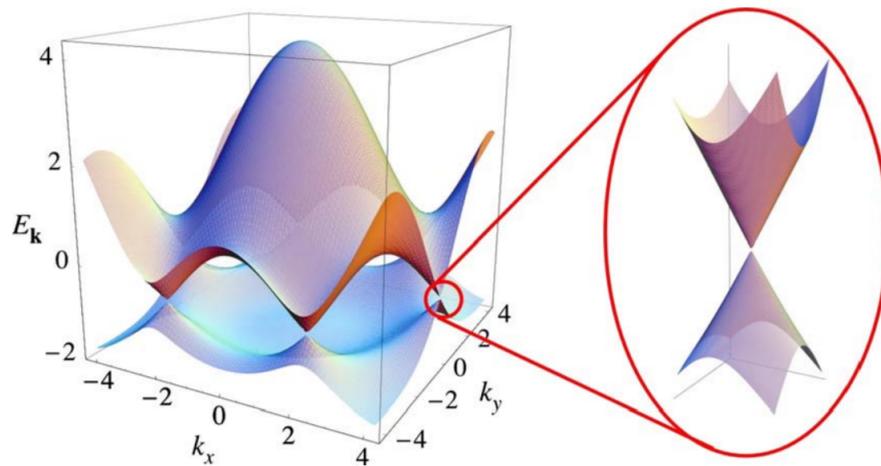


Figura 10: Dispersão eletrônica da estrutura de grafeno. A esquerda: Estrutura da bandas. A direita: Aproximação de um ponto de Dirac. [33]

Para demonstrarmos essa constatação, expandiremos os termos não nulos do Hamiltoniano da Eq. (2.13) em série de Taylor ao redor dos pontos de Dirac. Assim, definindo as coordenadas do espaço recíproco de acordo com o ponto K como

$$k'_x = k_x - \frac{2\pi}{3a}, \quad k'_y = k_y + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}, \quad (2.15)$$

expandimos o fator de estrutura considerando apenas os termos de primeira ordem em k_x e k_y

$$g(\vec{k}) = \frac{3a}{2}(k'_x - ik'_y) \left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{3a}{2}(k'_x - ik'_y)e^{-i\frac{5\pi}{6}}. \quad (2.16)$$

Agora, o mesmo processo para K'

$$g(\vec{k}) = \frac{3a}{2}(-k'_x - ik'_y) \left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{3a}{2}(-k'_x - ik'_y)e^{-i\frac{5\pi}{6}}. \quad (2.17)$$

As exponenciais complexas resultantes das expansões podem ser incluídas como fases nos autoestados. Finalmente, substituindo os fatores de estrutura no Hamiltoniano obtemos a aproximação para o sistema a baixas energias

$$H_D^\pm = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \pm k_x - ik_y \\ \pm k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

onde o sinal de $+(-)$ se refere ao cone K(K'). Esse Hamiltoniano é quase idêntico ao de Dirac para duas dimensões, o qual descreve partículas relativísticas com massa zero, trocando apenas a velocidade da luz c pela velocidade de Fermi $v_f \approx 10^6$ m/s .

Podemos, ainda, reescrever o Hamiltoniano de forma simplificada

$$H_D = v_f \vec{\sigma} \cdot \vec{p}, \quad (2.19)$$

onde $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli e \vec{p} é o momento. Diferentemente da equação de Dirac original na qual essas matrizes representam o grau de liberdade *spin*, nessa aproximação, σ é apenas consequência da estrutura cristalográfica do grafeno, por isso é chamado de *pseudo-spin* e os autoestados $\Psi = [\Psi_A, \Psi_B]^T$ de *pseudo-spinores*, com $\Psi_{A(B)}$ sendo a probabilidade de se encontrar o elétron na subrede A (B).

Portanto, demonstramos que elétrons a baixas energias no grafeno com a influência de infinitos sítios de confinamento devidos a átomos vizinhos podem ser descritos como férmions livres e sem massa que obedecem a equação de Dirac. Através desse modelo contínuo, observamos características eletrônicas do grafeno muito interessantes como: o efeito *Hall* quântico anômalo [34], o tunelamento de Klein [33] e o fenômeno de *zitterbewegung*[35].

2.2 Grafeno em um campo magnético homogêneo

Dando continuidade ao estudo de elétrons a baixas energias em uma monocamada de grafeno, através do modelo de férmions livres, analisaremos os efeitos gerados por um campo magnético homogêneo nos níveis de energia do sistema. Para isso, reescreveremos o Hamiltoniano de Dirac presente na Eq. (2.19) com a seguinte transformação $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}$ onde e é o valor absoluto da carga e \vec{A} é o vetor potencial

$$H = v_f \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}). \quad (2.20)$$

Considerando o campo magnético uniforme $\vec{B} = B\hat{z}$ cuja escolha do gauge de Landau é $\vec{A} = Bx\hat{y}$, resolvemos

$$-i\hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i \left(\partial_y + i \frac{eB}{\hbar} x \right) \\ \partial_x + i \left(\partial_y + i \frac{eB}{\hbar} x \right) & 0 \end{pmatrix} \Psi = E\Psi. \quad (2.21)$$

Devido ao gauge escolhido, o Hamiltoniano comuta com p_y , ou seja, $[H, p_y] = 0$. Assim, a função de onda com duas componentes é dada por

$$\psi(x, y) = e^{ik_y y} [\psi_a(x), \psi_b(x)]^T, \quad (2.22)$$

onde k_y é o vetor de onda na direção y . Se nós usarmos o comprimento magnético

$$l_b = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (2.23)$$

como unidade de distância, obteremos a partir da Eq.(2.21)

$$\left(\frac{d}{dx} + l_b k_y + x\right) \psi_b = i \frac{E l_b}{\hbar v_f} \psi_a, \quad (2.24)$$

$$\left(\frac{d}{dx} - l_b k_y - x\right) \psi_a = i \frac{E l_b}{\hbar v_f} \psi_b. \quad (2.25)$$

Em seguida, ao desacoplarmos as equações para o componente ψ_b , temos

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - (x + l_b k_y)^2 + \frac{l_b^2 E^2}{\hbar^2 v_f^2} + 1\right) \psi_b = 0. \quad (2.26)$$

As soluções analíticas dessa equação, já conhecida na literatura, são os polinômios de Hermite, assim

$$\frac{l_b^2 E^2}{\hbar^2 v_f^2} + 1 = 2n + 1. \quad (2.27)$$

Portanto, obtemos um espectro discreto que é dado pelos níveis de Landau

(LL)

$$E_n = \pm \frac{\hbar v_f}{l_b} \sqrt{2n}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.28)$$

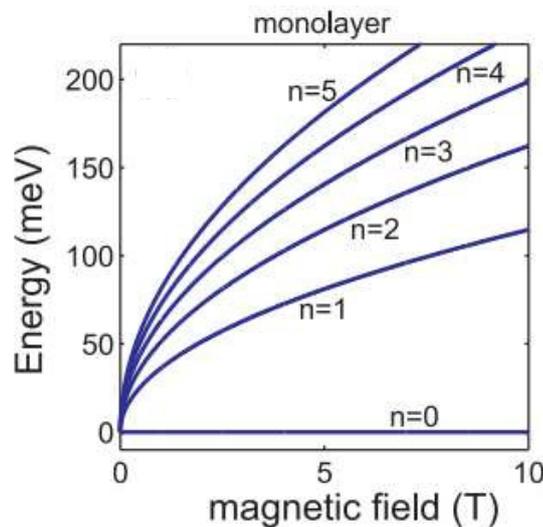


Figura 11: Níveis de Landau como função do campo magnético em uma monocamada de grafeno [1]

Dois pontos importantes a respeito desse resultado merecem ser destacados. Primeiro, ao contrário de outros materiais em que os níveis eletrônicos dependem linearmente do campo, no grafeno, os níveis de Landau tem uma dependência na forma de \sqrt{B} , assim, o espectro não é equidistante como podemos ver na Fig. 11. Além disso, nesse espectro de energia existe um nível de $E = 0$, o qual é uma consequência direta da inexistência de gap dos férmions de Dirac no grafeno [36, 37, 38]. O estado nesse nível possui quatro degenerescências: duas devido à simetria elétron-buraco e outras duas devido à

simetria de vales. Tais características possuem consequências muito relevantes para as propriedades do grafeno que serão discutidas nessa dissertação.

2.3 Nanofitas de grafeno

Existem dois tipos básicos de bordas em uma nanofita de grafeno: *armchair* e *zigzag*. As diferentes bordas em conjunto com a variação no tamanho das fitas afetam a estrutura eletrônica do grafeno de forma muito significativa. Para entendermos, primeiramente, as diferenças na geometria de nanofitas, devemos observar a Fig. 12. Nela, estão representadas nanofitas (a) *armchair* e (b) *zigzag*. Definiremos a largura de uma fita através de N , que é o número de linhas formadas por dois átomos em um célula unitária.

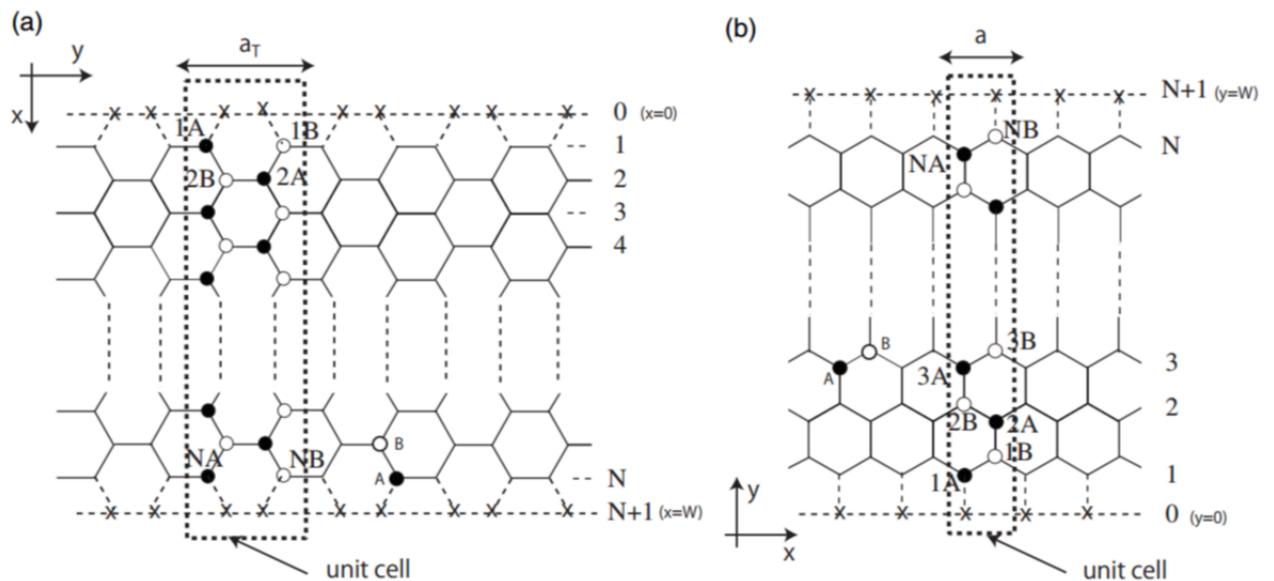


Figura 12: Estrutura de nanofitas de grafeno com (a) bordas *armchair* e (b) bordas *zigzag*. Os retângulos pontilhados definem as células unitárias. N define a largura da fita e os marcadores x indicam os átomos de carbono que faltam nas bordas. [39]

Em seguida, na Fig. 13, temos a estrutura de bandas de energia e a densidade de estados para uma nanofita *armchair* de grafeno com diferentes larguras. Analisando-a, pode-se concluir que a largura da fita determinará o seu comportamento: metálico ou semicondutor. Desse modo, os sistemas serão metálicos quando $N = 3M - 1$, onde M é um número inteiro. Entretanto, para os sistemas semicondutores, o gap entre as bandas de energia diminui ao passo que a largura é aumentada até o momento em que o gap será zero para grandes valores de N [40].

Por outro lado, a estrutura de bandas e a densidade de estados para uma nanofita *zigzag* demonstram características bem diferentes das comentadas anteriormente. De acordo com a Fig. 14, o estado no topo da banda de valência e o mais baixo na banda de condução sempre estão degenerados em $k = \pi$ não importando qual a largura da fita. Já os

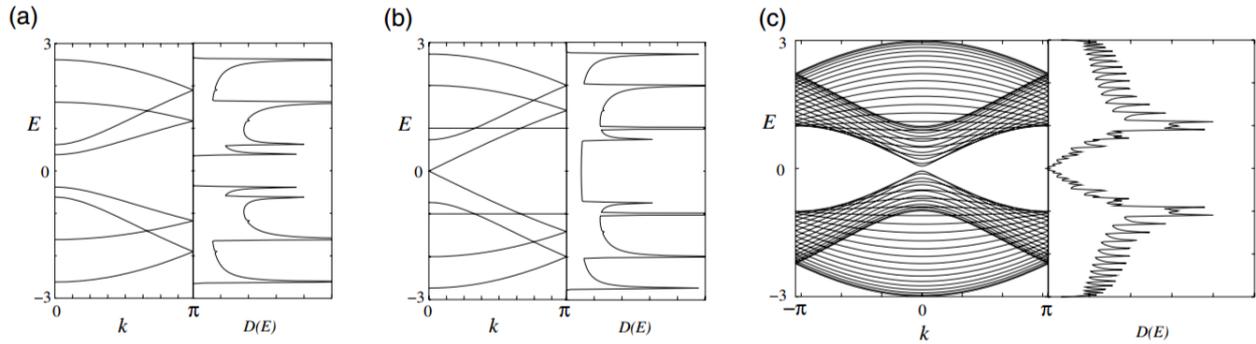


Figura 13: Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e a densidade de estados $D(E)$ para nanofitas armchair com larguras: (a) $N = 4$, (b) $N = 5$ e (c) $N = 30$. [39]

estados mais centrais das bandas se aproximam uns dos outros ao se aumentar os valores de N . Assim, começamos a perceber um encontro de bandas na região de $2\pi/3 \leq |k| \leq \pi$, onde estas estão localizadas nas proximidades do nível de Fermi. Portanto, através da distribuição da densidade de cargas, concluímos que estes últimos estados citados estão localizados nas bordas zigzag da nanofita de grafeno [41].

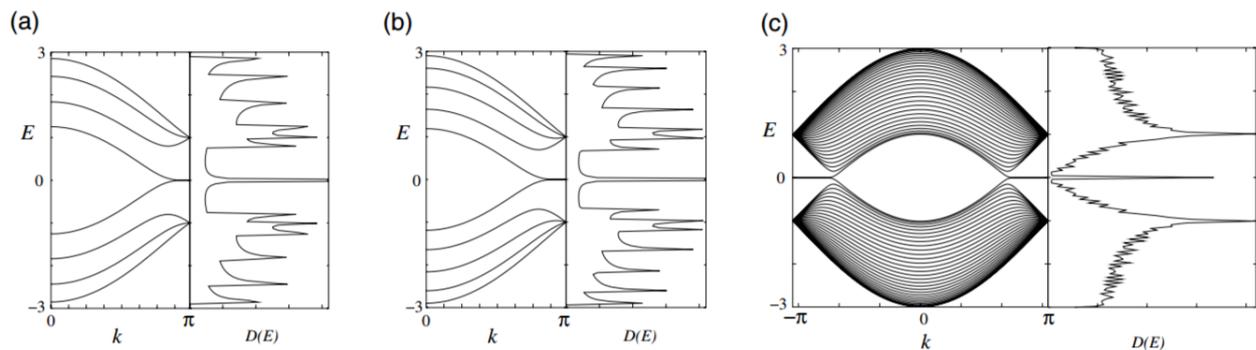


Figura 14: Estrutura de bandas de energia $E(k)$ e a densidade de estados $D(E)$ para nanofitas zigzag com larguras: (a) $N = 4$, (b) $N = 5$ e (c) $N = 30$. [39]

Do mesmo modo, as funções de onda dos estados de borda também estarão localizados, em sua maioria, nas bordas do sistema zigzag. Esse efeito afetaria fortemente o transporte eletrônico e, conseqüentemente, os resultados dessa dissertação. Neste trabalho, investigaremos somente o caso armchair, no qual é esperado evitar estados de borda. Logo, modelar a propagação eletrônica no sistema como um pacote de onda que não toca as bordas do sistema será justificável. Como discutiremos mais adiante, a nanofita armchair é, muito convenientemente, a ideal para a filtragem de vales com a tensão mecânica específica que iremos propor aqui.

3 EVOLUÇÃO TEMPORAL: MÉTODO SPLIT-OPERATOR

Neste capítulo, introduziremos o método *split-operator* para solucionar as equações de *Schrödinger* dependentes do tempo no modelo *tight-binding*. Ao analisarmos a equação de *Schrödinger*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H \Psi(\vec{r}, t), \quad (3.1)$$

que tem como solução

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} H \Delta t \right] \Psi(\vec{r}, t), \quad (3.2)$$

podemos identificar a exponencial da Eq. (3.2) como um operador de evolução temporal. Assim, o próprio Hamiltoniano do sistema será o agente de translação temporal [42].

Com o intuito de aplicarmos o operador temporal na função de onda de forma mais simplificada, fazemos uma aproximação da exponencial na Eq. (3.2) de acordo com a “forma de Cayley”:

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} H \Delta t \right] \Psi(\vec{r}, t) \simeq \frac{1 + \frac{i}{2\hbar} H \Delta t}{1 - \frac{i}{2\hbar} H \Delta t} \Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t + \Delta t), \quad (3.3)$$

que resultará em

$$\left(1 - \frac{i}{2\hbar} H \Delta t \right) \Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \left(1 + \frac{i}{2\hbar} H \Delta t \right) \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.4)$$

Através dessa aproximação podemos determinar a função de onda no sistema em qualquer intervalo de tempo. Para isso, basta entendermos que a derivada devida ao operador de momento no Hamiltoniano pode ser calculada em diferenças finitas, o que discretizaria o espaço e as funções que descrevem os potenciais. Essa discretização nos permite escrever a função de onda na forma de uma matriz coluna. Assim, a Eq. (3.4) se tornará uma equação matricial.

Entretanto, quanto maior a dimensionalidade do sistema descrito pelo Hamiltoniano maior será a diagonalidade da matriz a ser resolvida. Ou seja, se o sistema for unidimensional a matriz será tridiagonal, se o sistema for bidimensional teremos uma matriz pentadiagonal, e assim por diante. Dessa forma, ao trabalharmos em sistemas com maior dimensionalidade, os cálculos computacionais serão muito longos e demorados.

Com esse problema em mente, surge a necessidade de utilizarmos o método de *split-operator* [43, 44, 45, 46]. Através desse método solucionaremos um problema bidimensional como uma sequência de problemas unidimensionais. Esse método consiste em

separar convenientemente a exponencial de um operador $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, de forma aproximada, como $\exp[\hat{C}] = \exp[\frac{\hat{A}}{2}] \exp[\hat{B}] \exp[\frac{\hat{A}}{2}]$. Note que a separação não leva a um resultado exato somente se $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, o que como veremos adiante, é o nosso caso.

No modelo de *tight-binding*, consideramos os sítios atômicos de um sistema como poços de potencial nos quais é possível confinar elétrons. Cada uma dessas possíveis posições do elétron são consideradas autoestado do sistema. Entretanto, como os poços possuem valor finito de potencial, existe uma probabilidade de tunelamento para os sítios vizinhos. Logo, o Hamiltoniano para um sistema de poços de potencial finito é

$$H|\Psi_i\rangle \simeq \tau_{i-1}|\Psi_{i-1}\rangle + E_0|\Psi_i\rangle + \tau_{i+1}|\Psi_{i+1}\rangle, \quad (3.5)$$

onde τ_j é a energia de *hopping* do elétron entre os poços i e j . O conjunto dos estados desse sistema forma uma base ortogonal, através da qual podemos escrever o Hamiltoniano e diagonalizá-lo. Então, o Hamiltoniano de um sistema unidimensional na forma de matriz será

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & E_0 & \tau_{i-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau_{i-1} & E_0 & \tau_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_i & E_0 & \tau_{i+1} & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \tau_{i+1} & E_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Como o sistema de estudo dessa dissertação é o grafeno, torna-se necessário que desenvolvamos essa matriz para o caso bidimensional. Logo, devemos considerar linhas e colunas com índices n e m respectivamente. Além disso, lembremos que, no modelo *tight-binding* para o grafeno, cada átomo interage apenas com outros 3, assim devemos ajustar o parâmetro de *hopping*, pois agora que teremos duas dimensões, um dos quatro parâmetros (que seriam esperados se a rede fosse quadrada) deverá ser nulo. Assim, o Hamiltoniano bidimensional poderá ser escrito na seguinte forma

$$H_{TB}|\Psi_{nm}\rangle = H_n|\Psi_{nm}\rangle + H_m|\Psi_{nm}\rangle, \quad (3.7)$$

no qual os operadores de linha (H_n) e coluna (H_m) são

$$H_n|\Psi_{nm}\rangle = \tau_{n(m+1)}|\Psi_{n(m+1)}\rangle + \tau_{n(m-1)}|\Psi_{n(m-1)}\rangle + \frac{E_0}{2}|\Psi_{nm}\rangle, \quad (3.8)$$

$$H_m|\Psi_{nm}\rangle = \tau_{(n+1)m}|\Psi_{(n+1)m}\rangle + \tau_{(n-1)m}|\Psi_{n(m-1)}\rangle + \frac{E_0}{2}|\Psi_{nm}\rangle. \quad (3.9)$$

Portanto, ao desenvolvermos o Hamiltoniano em duas partes, linha e coluna, simplificamos o problema de uma matriz pentadiagonal para o caso de duas matrizes tridiagonais.

Finalmente, podemos aplicar esse método à Eq. (3.2), mais precisamente, ao operador de evolução temporal

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right] \approx \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H_n\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t\right]. \quad (3.10)$$

Nessa aproximação, ainda existe um erro da ordem de Δt^3 devido à não-comutatividade entre os operadores de linha e coluna [47], que será desprezado porque faremos variações muito pequenas de tempo ($\Delta t = 0.1$ fs).

A função de onda propagada

$$\Psi_{nm}^{t+\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}H_n\Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t} \Psi_{nm}^t \quad (3.11)$$

será obtida através dos três passos dados a seguir:

$$\eta_{nm} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t} \Psi_{nm}^t, \quad (3.12)$$

$$\xi_{nm} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_n\Delta t} \eta_{nm}, \quad (3.13)$$

$$\Psi_{nm}^{t+\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t} \xi_{nm}. \quad (3.14)$$

Cada uma dessas equações será reescrita usando a forma de Cayley para exponenciais, por exemplo

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m\right) \eta_{nm} \approx \left(1 - \frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m\right) \Psi_{nm}^t, \quad (3.15)$$

e a equação matricial tridiagonal resultante poderá ser, então, solucionada numericamente por rotinas computacionais conhecidas[48].

4 EFEITOS DE DISTORÇÃO EM NANOFITAS

Distorções em nanoestruturas de grafeno são capazes de alterar características não só geométricas mas, também, eletrônicas [49]. Desse modo, através da capacidade de manipularmos eficientemente distorções em camadas de grafeno crescidas epitaxialmente com boa adesão em um substrato flexível, podemos ajustar propriedades eletrônicas desejadas para a criação de novos dispositivos.

Deformações devido a torções elásticas mudam as posições atômicas e, conseqüentemente, alteram a amplitude de *hopping* dos átomos de carbono, gerando um novo termo no hamiltoniano original da Eq. (2.5):

$$H'_{TB} = - \sum_{i,j} \tau_{ij} a_i^\dagger b_j + h.c., \quad (4.1)$$

onde τ_{ij} é o parâmetro de *hopping* entre os átomos adjacentes em i e j (primeiros vizinhos) para o caso torcido e é dado por

$$\tau_{i,j} = \tau e^{-\beta(\delta a_{i,j}/a_0-1)}, \quad (4.2)$$

no qual, $\beta \approx 3,37$ e $\delta a_{i,j}$ é o comprimento do vetor das posições atômicas na região torcida.

Expandindo novamente esse hamiltoniano em torno dos pontos de Dirac, obtemos

$$H'_{TB} = \int d^2r \{A(\vec{r}) a_1^\dagger(\vec{r}) b_1(\vec{r}) + h.c.\}, \quad (4.3)$$

com uma expressão similar para o cone 2, mas substituindo A por A^* , onde

$$A(\vec{r}) = \sum_{\vec{\delta} a_{ij}} \tau_{ij}(\vec{r}) \exp^{-i\vec{\delta} a_{ij} \cdot \vec{K}}. \quad (4.4)$$

Como já foi dito, a estrutura hexagonal do grafeno não é uma rede de Bravais, portanto, não possui simetria inversa para o *hopping* de primeiros vizinhos. Assim, a função A deve ser complexa

$$A(\vec{r}) = A_x(\vec{r}) + iA_y(\vec{r}). \quad (4.5)$$

Reescrevendo o hamiltoniano em termos de spinors de Dirac, temos

$$H'_D = \int d^2r [\hat{\Psi}_1^\dagger(\vec{r}) \vec{\sigma} \cdot \vec{A}(\vec{r}) \hat{\Psi}_1(\vec{r})], \quad (4.6)$$

onde $\vec{A} = (A_x, A_y)$. Esse resultado nos mostra que variações na amplitude de *hopping* induzem um potencial vetor efetivo, que desloca os cones de Dirac de acordo com a Fig. 15. Esse efeito é semelhante ao gerado por um campo magnético aplicado perpendicularmente a uma nanofita se compararmos tal resultado com o hamiltoniano de Dirac da Eq. (2.20). A presença de um potencial vetor indica a indução de um campo magnético efetivo que pode ser dado por $B_{ps} = \nabla \times A$. Entretanto, para que não haja quebra global de simetria de reversão temporal, os cones de Dirac possuem sinais opostos para os campos induzidos, gerando uma compensação entre eles [50, 51]. Assim, com uma distribuição de tensão é possível induzir grandes campos pseudo-magnéticos que possuem sinais opostos nos dois vales desse sistema.

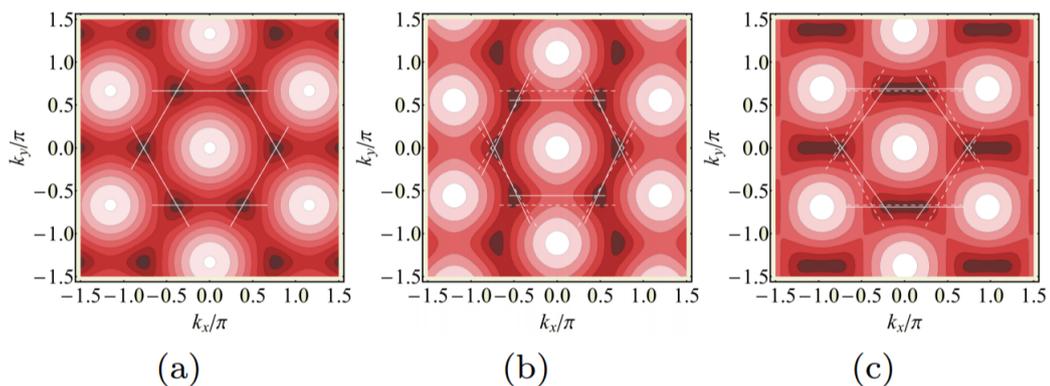


Figura 15: Gráfico de densidade da dispersão de energia para: (a) região sem torção, (b) torção aplicada ao longo da direção *armchair* e (c) da direção *zigzag* [52].

Previu-se que torções aplicadas com simetria triangular, como demonstrado na Fig. 16 resultariam em campos magnéticos praticamente uniformes que seriam perpendiculares ao plano do grafeno [24], desse modo, o transporte eletrônico na monocamada de grafeno seria afetado pelas órbitas de Lorentz no plano. Mais recentemente, demonstrou-se que deformações circulares, de acordo com a Fig. 17, utilizadas nesse trabalho, também induziriam campos com essas mesmas propriedades [32].

No caso de uma folha de grafeno retangular com comprimento W_x e largura W_y , o formato da distorção requerida é de um arco de círculo, que tem as posições dos átomos definidos por

$$u_x(x, y) = (R + x) \cos \left[\frac{2y}{W_y} \arcsin \left(\frac{W_y}{2R} \right) \right] - y, \quad (4.7)$$

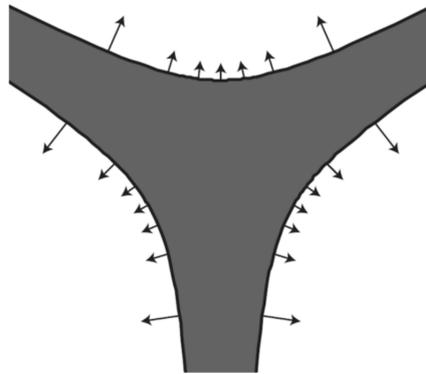


Figura 16: Geometria com simetria triangular de distorção com tensão normal à superfície.[24]

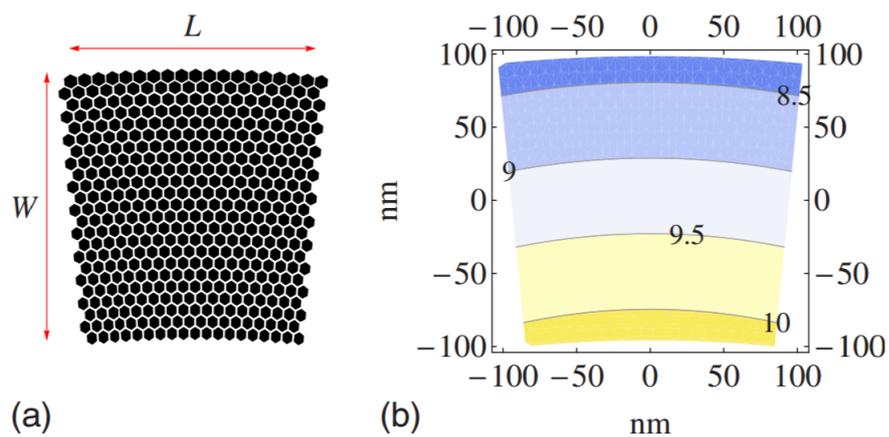


Figura 17: (a) Exemplo de grafeno retangular deformado em arco. Os raios das bordas inferiores e superiores são R e $R+W$, respectivamente ($R = 5 \times L$). (b) Campo magnético efetivo, em Teslas, para a mesma nanofita deformada. As dimensões são $W = 200$ nm, $L = 192$ nm, e $R = 5 \times L = 960$ nm. A distorção máxima é de 10%. [32]

e

$$u_y(x, y) = (R + x) \sin \left[\frac{2y}{W_y} \arcsin \left(\frac{W_y}{2R} \right) \right] - R - x. \quad (4.8)$$

Como mencionado anteriormente, já que o campo pseudo magnético aponta em direções opostas nos pontos K e K', abrem-se as possibilidades para criação de dispositivos em que é possível filtrar pacotes de onda com vales distintos. Recentemente, demonstrou-se que, no sistema da Fig. 18 o qual se baseia na distorção proposta pelas Eqs. (4.7) e (4.8), somando-se os efeitos de campo magnético externo e induzido por tensão cria-se uma supressão quase perfeita do campo magnético em um dos pontos de Dirac, enquanto o campo efetivo no outro é aumentado. Um pacote de onda em um dos pontos de Dirac que se propaga no sistema é rapidamente refletido, enquanto o outro exibe uma trajetória praticamente reta [43]. Desse modo, o sistema funciona como um filtro de vales. Tais resultados são mostrados na Fig. 19. Outros filtros de vale baseados em strain em monocamadas de grafeno sugeridos na literatura dependem também de potenciais e/ou campos magnéticos externos [25, 26, 27, 28, 29].

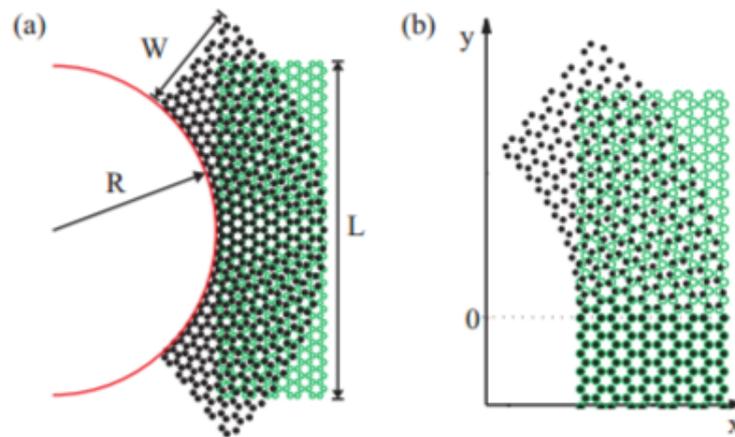


Figura 18: (a) Esboço de uma folha de grafeno tensionada: considerou-se uma amostra retangular de largura W e altura L , flexionada como um arco de círculo de raio R . A folha de grafeno não tensionada é mostrada como círculos abertos, para comparação. (b) Barreira magnética induzida por tensão, obtida flexionando-se a rede do grafeno apenas na região $y \geq 0$. [43]

Entretanto, demonstraremos que utilizando-se de uma geometria diferente não haverá necessidade de se aplicar um campo magnético externo para polarizar os vales. Para entendermos melhor a escolha da geometria desse trabalho, faremos uma analogia com um sistema no qual é aplicado um campo magnético externo não homogêneo.

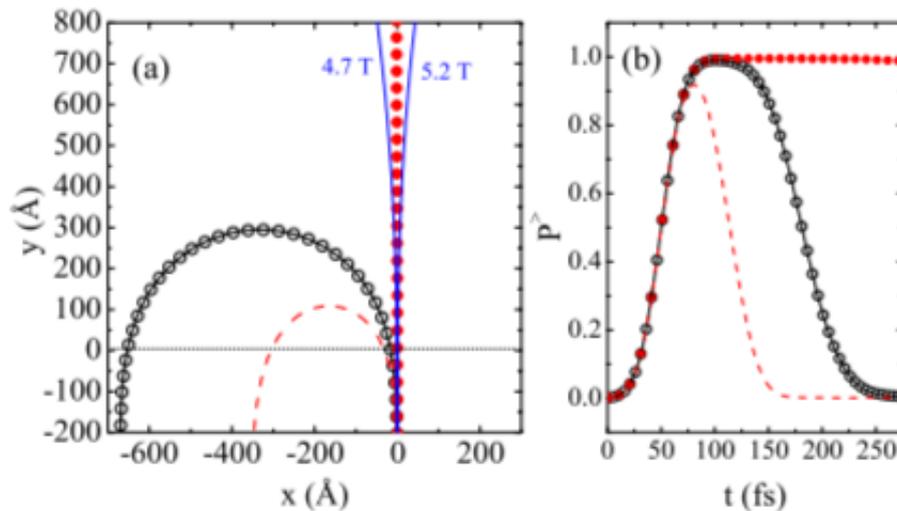


Figura 19: (a) Trajetórias no plano xy para pacotes de onda com momento inicial $k_y^0 = 0.02 \text{ \AA}^{-1}$ em torno de K (símbolos) e K' (curvas), para um elétron e um buraco respectivamente, considerando-se uma folha de grafeno flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1 \mu\text{m}$ e um campo magnético externo $B = 0 \text{ T}$ (aberto, sólida) e 4.9 T (fechado, tracejada). As curvas azuis finas mostram os resultados para duas outras intensidades de campo magnético externo para o pacote em K . (b) Probabilidade de se encontrar a partícula em $y \geq 0$ como função do tempo, para pacotes de onda com as mesmas configurações que em (a).[43]

4.1 Snake states

Estudos recentes [53, 54] demonstraram as propriedades eletrônicas do grafeno em um campo magnético perpendicular não homogêneo:

$$B(x) = \left\{ \begin{array}{l} B, \quad x < -d \\ B', \quad |x| \leq d \\ \sigma B, \quad x > d \end{array} \right\}, \quad (4.9)$$

onde $\sigma = \pm 1$ é o sinal do campo magnético na terceira região do sistema. O perfil do campo na camada de grafeno é dado pela Fig. 20.

Devido à dependência do campo magnético em relação ao eixo x , através da qual o campo muda de sentido, observaremos uma variação no comportamento dos estados do pacote de onda durante sua propagação. Esses novos estados são chamados de *snake states*. No caso $\sigma = 1$, onde $B' \leq 0$, existe a possibilidade de propagação de pares de *snake states* em sentidos contrários. Já no caso de $\sigma = -1$ e $B' = 0$, a propagação dos *snake states* é unidirecional. Assim, a trajetória clássica de um típico *snake state* no último caso está esquematizado na Fig. 21.

Fazendo uma analogia entre o grafeno com campo magnético externo e com uma distorção, é esperado que encontremos, também, *snake states* em nanofita de grafeno torcida. Essa conclusão vem do fato de que sabemos que a distorção circular deforma a

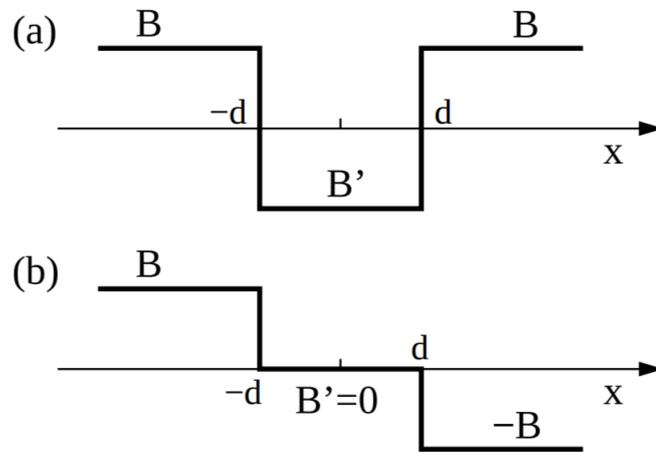


Figura 20: Perfil do campo magnético (a) Caso $\sigma = 1$. Para $B' \leq 0$, a propagação de pares de *snake states* em sentidos contrários é possível. (b) Caso $\sigma = -1$, com propagação unidirecional de *snake states*. [54]

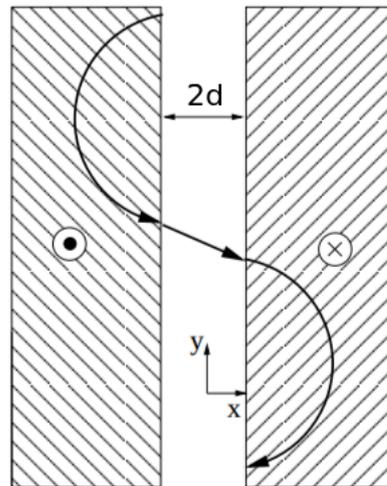


Figura 21: Trajetória clássica de um *snake state* em uma região de campo magnético perpendicular à camada de grafeno, onde nos dois lados da figura temos campos magnéticos de sinais contrários. [53]

zona de Brillouin do grafeno, deslocando os cones de Dirac, da mesma forma de quando se aplica um campo magnético uniforme perpendicularmente ao plano do grafeno. Portanto, para obtermos *snake states* em uma nanofita de grafeno sem o uso de campo magnético externo devemos distorcê-la em diferentes direções promovendo uma barreira de campo pseudo magnético, com regiões de campo que mudam de sinal ao longo do eixo perpendicular ao de propagação.

Assim, o sistema utilizado nesse trabalho consiste de uma nanofita de grafeno com largura W_y e comprimento W_x ($W_y = 6387.16 \text{ \AA}$ e $W_x = 2213.56 \text{ \AA}$, correspondendo a 1801×3000 átomos) que é mecanicamente torcida em uma configuração específica, como esquematizado na Fig. 22(a): ao longo de uma certa região de comprimento β , a fita é torcida em dois arcos circulares de raio R , em direções opostas. Essa curvatura é obtida definindo o deslocamento das posições atômicas de acordo com as Eq.(4.7) e (4.8). Uma transição brusca entre as regiões torcida e não torcida da fita seria claramente impossível, já que levaria a um distaciamento interatômico muito grande e irreal nas proximidades da região de transição, especialmente para R pequenos. Portanto, consideramos uma variação suave (gaussiana) na curvatura $K_R = 1/R = (1/R_0)e^{(-j^2/\beta^2)}$, onde j é índice da coluna na qual a posição atômica dada pertence à rede [55], o comprimento é descrito pelo parâmetro adimensional β , enquanto R_0 fornece o raio máximo da curva (isto é, na coluna central dos átomos, onde $x_{i,j} = 0$ na falta de torção).

A distorção circular deforma a zona de Brillouin, deslocando os cones de Dirac um em relação ao outro, da mesma forma quando um campo magnético uniforme é aplicado perpendicularmente ao plano do grafeno, fazendo com que $K \rightarrow K + 2/\Phi_0$, onde $\Phi_0 = e/h$ é o quantum de fluxo. Tal formato de deformação muda as energias de *hopping* e, assim, induz um potencial vetor efetivo

$$A_x + iA_y = \frac{1}{ev_f} \sum_{\delta a_{i,j}} \delta\tau_{i,j} e^{-iK \cdot \delta a_{i,j}}, \quad (4.10)$$

onde $\delta a_{i,j}$ é o vetor distância entre os átomos adjacentes i e j na região distorcida, v_f é a velocidade de Fermi, $\delta\tau_{i,j}$ é a diferença entre as energias de *hopping* da região torcida e não torcida, e o campo pseudo-magnético é dado por $B_{ps} = \nabla \times A$.

Além disso, a distorção em diferentes direções para $y > 0$ e $y < 0$ gera uma barreira de campo pseudo-magnético, com regiões de campo que mudam de sinal em $y=0$. Um exemplo esquematizado da configuração de distribuição de campo pseudo-magnético induzido por torção está presente na Fig. 22(b) para um conjunto de parâmetros representativos (β, R_0) . Nós ressaltamos que o exemplo considerado na Fig. 22(b) é muito menor que o investigado nesse trabalho, já que calcular e plotar uma distribuição de vetor

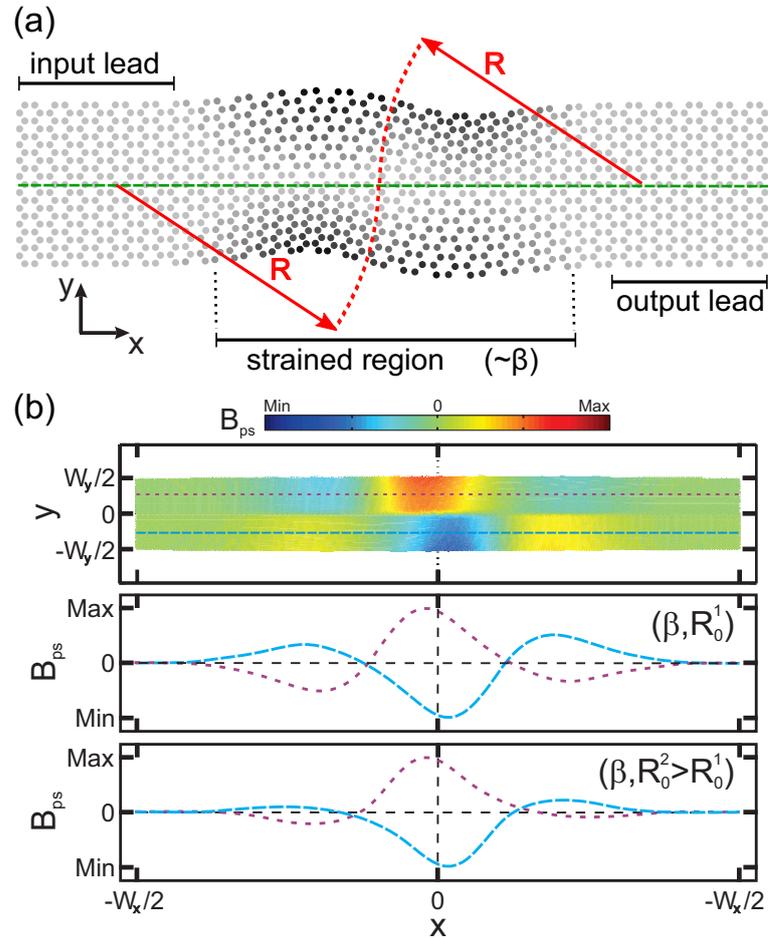


Figura 22: (a) Esquema de uma fita de grafeno torcida. O estresse é definido por círculos de raio R (pontilhado vermelho), que decai suavemente à zero para os locais de entrada e saída, de modo que a largura da região tensionada é definida por β . O mapa de cor indica os deslocamentos locais menores (regiões claras) e maiores (regiões escuras). A linha de átomos centrais (linha verde pontilhada) nunca é tensionada nessa configuração. (b) (cima) Esquematização do perfil do campo pseudo-magnético induzido para uma configuração de tensão representativa (β, R_0) . (baixo) Visão transversal do campo pseudo-magnético ao longo das linhas localizadas nas regiões $y > 0$ (linha pontilhada roxa) e $y < 0$ (linha traçada azul) do sistema do painel de cima, considerando dois raios máximos diferentes, com $R_0^2 > R_0^1$.

potencial ao longo de 1801×3000 posições atômicas no nosso real exemplo demandaria cálculos computacionais muito grandes. Então, o campo pseudo-magnético na Fig. 22(b) é discutido aqui apenas qualitativamente. O campo induzido é zero no início e no fim da região estudada, onde a distorção é nula, e assume valores no intervalo que vão de $B_{ps} = Min$ até $B_{ps} = Max$ ao longo do comprimento da nanofita próximo a $x=0$, onde a torção é máxima. Duas barreiras adicionais são observadas consistentemente no lado esquerdo e no lado direito da barreira principal no centro. Entretanto, estas são muito menores que a central e, assim, não têm um papel importante no processo de filtragem de vales, como demonstraremos mais a frente. De fato, observamos que ao aumentarmos R_0 , essas barreiras adicionais tornam-se cada vez menores em comparação com a principal de modo que a importância destas nas propriedades de transporte do sistema estudado neste trabalho (com R_0 maior) é desprezível. Isto pode ser verificado na comparação dos painéis inferiores da Fig. 22(b) para dois diferentes raios máximos $R_0^2 > R_0^1$ assumindo um comprimento fixo para a região tensionada β .

4.1.1 Solução analítica

Mantendo em mente a analogia mencionada, calcularemos primeiramente a dispersão de energia ao longo da fita na presença de uma barreira magnética seguindo os mesmos passos da seção 2.2. Entretanto, agora, assumiremos um campo magnético não homogêneo $\vec{B} = B\hat{z}$ que depende unicamente da coordenada transversal:

$$B(y) = \begin{cases} B, & y < 0 \\ -B, & y > 0 \end{cases}. \quad (4.11)$$

Como já foi mencionado, elétrons a baixas energias no grafeno exibem uma dispersão de energia quase linear, de modo que se comportam como férmions sem massa de Dirac obedecendo, portanto, à equação de Dirac:

$$\sigma \cdot \left(-i\nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \Psi = \bar{E} \Psi, \quad (4.12)$$

com energia $E = \hbar v_F \bar{E}$.

Definindo o potencial vetor no *gauge* de Landau, $\mathbf{A} = \bar{A}(y)\hat{e}_x$, com $\bar{A}(y) = -B(y)y$, a solução geral para a função de onda com invariância translacional na direção do eixo x é $\Psi(x, y) = \psi(y)e^{ikx}$. Assim, nós obtemos da Eq. (4.12):

$$\begin{pmatrix} 0 & k - \partial_y + A(y) \\ k + \partial_y + A(y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(y) \\ \psi_2(y) \end{pmatrix}$$

$$= \bar{E} \begin{pmatrix} \psi_1(y) \\ \psi_2(y) \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

onde $A = \frac{e}{\hbar}\bar{A}$. Isso nos levará às equações desacopladas para cada componente: por exemplo, para a componente para cima do spinor,

$$\left\{ \partial_y^2 + \frac{e}{\hbar}B(y) - \left[k - \frac{e}{\hbar}B(y)y \right]^2 + \bar{E}^2 \right\} \psi_1(y) = 0. \quad (4.14)$$

Se utilizarmos o comprimento magnético

$$l_b = \sqrt{\frac{\hbar}{e|B|}} \quad (4.15)$$

como unidade de distância, nós obteremos

$$\left\{ \partial_y^2 + \text{sgn}(B(y)) - [kl_b - \text{sgn}(B(y))y]^2 + \epsilon^2 \right\} \psi_1(y) = 0. \quad (4.16)$$

onde $\epsilon = \bar{E}l_b = El_b/\hbar v_F$.

Encontraremos a dispersão de energia ao longo da direção y através de soluções analíticas dessa equação em termos das funções parabólicas cilíndricas [54]. Note que o campo magnético $B(y)$, como definido pela Eq. (4.11), é constante, conseqüentemente, podemos separar as soluções para cada região como

$$\psi_{B>0}(y) = \sum_{\pm} a_{\pm} \begin{pmatrix} D_p(\pm q) \\ \mp \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon} D_{p+1}(\pm q) \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

$$\psi_{B<0}(y) = \sum_{\pm} a_{\pm} \begin{pmatrix} D_{p+1}(\pm q) \\ \pm \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon} (p+1) D_p(\pm q) \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

onde

$$q = \sqrt{2} [\text{sgn}(B)kl_b], \quad (4.19)$$

$$p = \frac{(\epsilon)^2}{2} - 1. \quad (4.20)$$

A continuidade da função de onda e as suas derivadas nas duas regiões do sistema fornecem as condições de contorno que permitem calcular os níveis de energias quantizados do sistema.

As Eqs. (4.17) e (4.18) representam soluções para a primeira região do sistema, mas também podem expressar soluções para a segunda região apenas trocando os coeficientes $a_{\pm} \rightarrow c_{\pm}$.

Com o intuito de evitarmos divergência nas soluções para que possamos nor-

malizar as funções de onda, fazemos $a_+ = c_- = 0$. Em seguida, a partir da condição de contorno em $y = 0$ montamos a equações que geram as condições de quantização de energia. Assim, obtemos:

$$\left(\frac{i\epsilon}{\sqrt{2}}v^2 - \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon}(p+1)u^2 \right) = 0, \quad (4.21)$$

cujas funções são dadas por

$$u = D_p(-\sqrt{2}kl_b), \quad (4.22)$$

$$v = \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon}D_{p+1}(-\sqrt{2}kl_b). \quad (4.23)$$

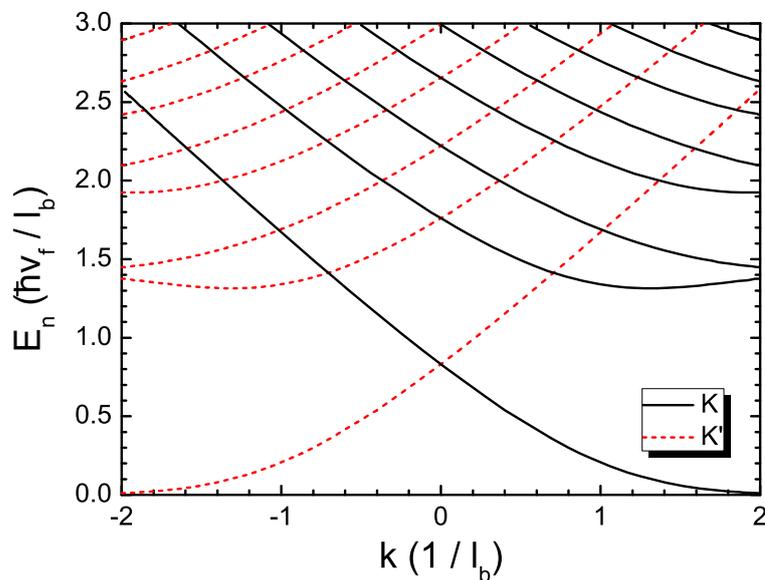


Figura 23: Estados energéticos para uma partícula de Dirac na presença de (pseudo) campo magnético. Resultados para K e K' são os mesmos para um campo magnético externo, enquanto que para um pseudo campo magnético, o espectro de K' (círculos vermelhos) difere daquele para o vale K.

Os resultados analíticos para esse sistema são ilustrados na Fig. 23, na qual observamos uma assimetria nas bandas de energia ao longo da barreira em relação ao eixo $k_x = 0$. Ou seja, os estados energéticos (predominantemente) decrescem monotonicamente com k_x , isto significa que elétrons ocupando esses estados têm uma velocidade negativa $v = (1/\hbar)dE/dk$, que eventualmente convergirá a zero quando $k_x \rightarrow +\infty$. É fácil verificar que ao inverter o sinal do campo magnético, a configuração é refletida com relação ao eixo $k_x = 0$, e as velocidades de propagação são, agora, predominantemente positivas. A interpretação física desse resultado tem base na existência dos *snake states* que se propagam ao longo da região de campo magnético, que pode ser entendido até mesmo por uma análise clássica simplista desse problema, envolvendo força de Lorentz, órbitas

ciclotrônicas e a regra de mão direita.

Entretanto, esse resultado é de especial importância no contexto de campo pseudo-magnético discutido aqui: já que o campo pseudo-magnético induzido por tensão aponta para direções opostas nos diferentes cones de Dirac K e K' , elétrons em cada cone podem apenas se propagar por *snake states* em direções opostas no sistema proposto nessa dissertação, o que promove um processo muito eficiente de filtragem de vales, como vamos verificar com nossos resultados numéricos a seguir.

4.1.2 Solução numérica

Com o objetivo de estudar a propriedades de transporte em uma grafeno torcido, usaremos o Hamiltoniano com o modelo tight-binding

$$H_{TB} = - \sum_{i,j} \tau_{ij} a_i^\dagger b_j + h.c., \quad (4.24)$$

entretanto, faremos uma aproximação de primeira ordem no parâmetro de *hopping* para o sistema torcido

$$\tau_{ij} \rightarrow \tau_{ij} \left(1 + \frac{2\delta a_{ij}}{a_0} \right). \quad (4.25)$$

Um pacote de onda inicial

$$\Psi(x, y) = \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} + ik_x x + ik_y y \right], \quad (4.26)$$

é propagado utilizando-se o método de *split-operator* que já foi mencionado no capítulo 3.

Durante todo nosso estudo, a largura do pacote de onda foi fixado em $\sigma = 300\text{\AA}$ e o seu vetor de onda \vec{k} tem, por definição, módulo de $k = 0.06\text{\AA}^{-1}$, a menos que seja explicitamente declarado diferente no texto. Usando a aproximação de Dirac para elétrons a baixas energias no grafeno, segundo a qual $E = \hbar v_f k$, a energia do pacote de onda é estimada em $E = 343 \text{ meV}$. Além disso, como nós pretendemos demonstrar a polarização de vales do pacote, nós o posicionamos ao redor de diferente vales no espaço recíproco deslocando o vetor de onda em direção ao pontos de Dirac:

$$k_x \leftarrow |k|, \quad k_y \leftarrow \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}, \quad (4.27)$$

onde o sinal positivo (negativo) se refere ao deslocamento em direção ao ponto K (K') da zona de Brillouin, e $a_0 \approx 1.42 \text{\AA}$ é a distância interatômica.

Com a propagação do pacote de onda Gaussiano, nós calculamos a probabilidade de se encontrar o elétron antes (P_1), dentro (P_2), e depois (P_3) da região tensionada,

através da integral do módulo quadrado da função de onda nos intervalos $-3000\text{Å} \leq x \leq -400\text{Å}$, $-400\text{Å} \leq x \leq 400\text{Å}$, e $400\text{Å} \leq x \leq 3000\text{Å}$, respectivamente. As probabilidades de transmissão são assumidas como sendo o valor de convergência de P_3 quando $t \rightarrow \infty$. Além disso, encontramos, também, as trajetórias do pacote, calculando-se o valor médio da posição, $\langle x \rangle$ e $\langle y \rangle$, em cada passo de tempo.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A existência de *snake states* em uma estrutura de grafeno torcida na forma citada, devido à indução de um campo pseudo magnético, é confirmada pelas trajetórias, demonstradas na Fig. 24, do centro de massa de um pacote de onda com $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$ propagado no tempo através do sistema descrito pela Fig. 22(a), assumindo $\beta \rightarrow \infty$ e $R_0 = 10^4 \text{ \AA}$ como um caso teste.

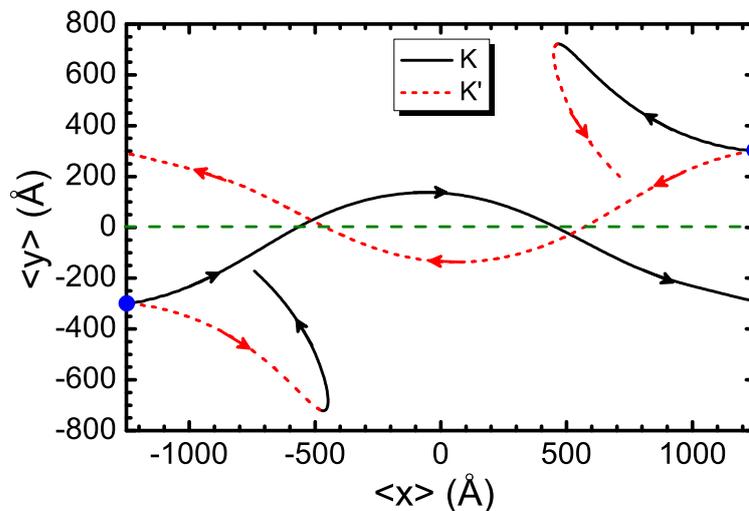


Figura 24: Trajetórias dos pacotes de onda de um electrón que se propaga com momento nos vales K e K', iniciando-se nos pontos (x,y) dados por $(1250 \text{ nm}, 300 \text{ nm})$ (direita) e $(-1250 \text{ nm}, -300 \text{ nm})$ (esquerda). As setas indicam a direção de propagação ao longo das trajetórias.

Se esse pacote de onda tem momento próximo do cone de Dirac K (curvas pretas e sólidas) e se propaga da esquerda para a direita, iniciando-se na metade inferior da nanofita, sua trajetória é defletida por causa da força de Lorentz gerada pelo campo pseudo magnético em direção à metade superior, que em seguida é novamente defletido agora para baixo através do pseudo campo magnético oposto, formando, portanto, uma trajetória no formato de uma cobra. Se esse mesmo pacote tem momento ao redor do cone K' (curvas vermelhas e pontilhadas), ele, então, será defletido para baixo e eventualmente repellido da região tensionada. Entretanto, se esse pacote começar na parte superior da nanofita, ambas as curvas são apenas refletidas com relação ao eixo $\langle y \rangle = 0$ da Fig. 24, e a situação se mantém a mesma.

Agora, inversamente, se o pacote de onda se propagar da direita para a esquerda, será o pacote K' que terá uma trajetória *snake state*, enquanto o pacote K é refletido. É possível se pensar que os pacotes defletidos em direção às fronteiras do sistema, ou seja, longe do centro da fita, poderiam ser refletidos pelas bordas realizando

skipping orbits e que eventualmente atravessariam toda a região tensionada. Entretanto, já que a fita possui bordas *armchair*, os pacotes de onda refletidos são espalhados no espaço recíproco para o outro cone de Dirac, cujo campo pseudo magnético é oposto, fazendo com que, mesmo ao realizar *skipping orbits*, siga na direção oposta da mesma forma [56].

Assim, em resumo, elétrons nos cones K (K') em uma estrutura tensionada na forma citada desse trabalho podem se propagar apenas para a direita (esquerda). De forma análoga, se a configuração da torção é invertida, as trajetórias descritas por K e K' são trocadas.

Tal imagem dos *snake states* sugere fortemente um efeito de filtragem de vales. De fato, se considerarmos agora um sistema com uma região de tensão finita $\beta = 900$ (β é adimensional, no nosso modelo) e $R_0 = 10000 \text{ \AA}$, um pacote de onda com $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$ ao redor do cone K atravessa essa região com uma alta probabilidade $P_3 \rightarrow 0.9$, enquanto que o mesmo pacote em K' possui uma probabilidade de transmissão muito menor, $P_3 \rightarrow 0.3$. Isso é demonstrado na Fig. 25

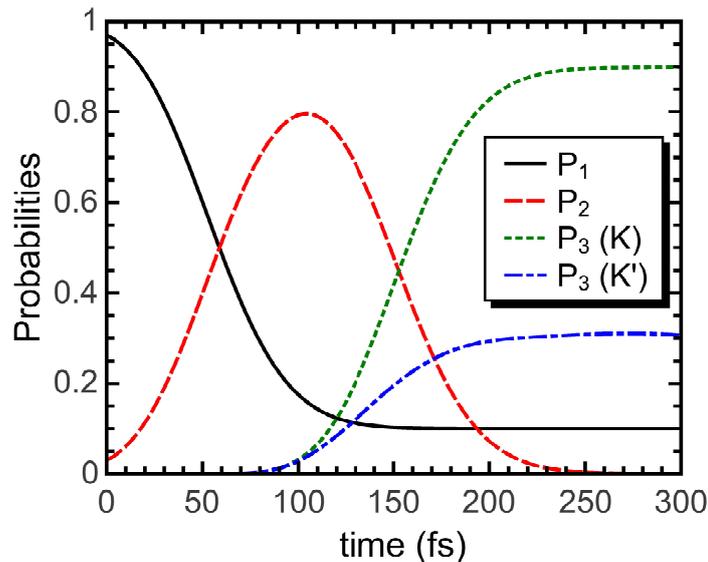


Figura 25: Densidades de probabilidade, como função do tempo, de se encontrar elétron antes (P_1), dentro (P_2), e depois (P_3) da região tensionada com $\beta = 900$ e $R_0 = 10000 \text{ \AA}$, para um pacote de onda com $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$ ao redor do ponto K da zona de Brillouin. Os resultados de P_3 considerando o pacote ao redor de K' são mostrados para comparação.

Em seguida, buscamos otimizar o efeito de polarização de vales. A polarização, definida como $P = 1 - P_3/P'_3$, onde P'_3 é a probabilidade de transmissão de um pacote de onda no cone K', é mostrada na Fig. 26, na qual assumimos diferentes parâmetros β e R_0 . Para um raio de torção fixo R_0 , ao aumentarmos o comprimento da região tensionada β , aumentamos o efeito de polarização, como verificado na Fig. 26(a). Além

disso, os resultados obtidos neste gráfico também sugerem que ao diminuirmos R_0 , sempre melhoraremos a polarização; isso é razoável de se pensar, já que raios menores provocam grandes distorções na estrutura e, conseqüentemente, induzem campos pseudo magnéticos mais fortes. Entretanto, isso não é sempre o caso: a Fig. 26(b) mostra que mesmo para valores de β grandes como 900, ao diminuirmos o raio de torção, o efeito máximo de polarização sempre será encontrado em torno do valor $R_0 \approx 5000 \text{ \AA}$, de modo que para raios menores que este a polarização será sempre reduzida. Isto se deve ao fato de que a conexão suave entre a parte não tensionada da fita e a região distorcida pode acabar gerando uma distribuição complicada de campos pseudo magnéticos, onde haveria diferentes regiões com campos que apontariam para direções opostas, o que afetaria o efeito de polarização que estamos investigando aqui. Este fato também explica a polarização negativa observada para pequenos valores de β na Fig. 26(a).

Na verdade, a validade do campo pseudo magnético efetivo proposto aqui como modelo de baixas energias para nossos cálculos no *tight-binding*, onde as barreiras do campo são aproximadamente constantes, só é garantida nas regiões onde a curvatura circular de torção tem um raio quase uniforme, ou seja, próximo de $\langle x \rangle = 0$. Em contrapartida, as previsões qualitativas deste modelo tão simples são verificadas pelos cálculos do modelo *tight-binding* demonstrados aqui, onde se encontram polarizações da ordem de 0.9.

Até então, todos os resultados foram obtidos para $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$, que corresponde à energia do pacote de onda de $E = 343 \text{ meV}$. Entretanto, é importante que verifiquemos como a polarização depende da energia do pacote. Esta relação é demonstrada na Fig. 27, através da qual observamos que o processo de filtragem de vales proposto neste trabalho tem um intervalo energético ideal de ocorrências. De fato, como o raio das órbitas de Lorentz de um férmion de Dirac sem massa é dado por $R = \frac{E}{ev_f B}$, assumindo $E \approx mv_f^2$, se a energia fosse muito baixa, as orbitas pseudo-magnéticas de Lorentz teriam um raio tão pequeno que apenas porções do pacote de onda que estivessem bem próximas do eixo $y = 0$ conseguiriam ultrapassar o sistema em *snake state*, enquanto que o restante do pacote prontamente voltaria. Por outro lado, se a energia fosse muito alta, os raios das orbitas poderiam se tornar maiores que a região tensionada, de modo que a propagação em *snake state* que proporciona a polarização não aconteceria.

Além disso, o raio da orbita de Lorentz é inversamente proporcional à intensidade do campo pseudo magnético, portanto, aumentando a distorção através da diminuição do raio R_0 , diminuiríamos, também, o raio das orbitas de Lorentz. Essa análise clássica é consistente com os nossos resultados numéricos: na Fig. 27(a), o maior raio de distorção $R_0 = 12000 \text{ \AA}$ fornece o decaimento mais rápido na polarização na medida em que au-

mentamos as energias, já que este raio induz um campo pseudo magnético pequeno, de modo que energias um pouco maiores do que a ideal $E \approx 125$ meV já provocam raios de órbita maiores que a região tensionada.

Reciprocamente, para energias menores que $E \approx 125$ meV, o raio $R = 12000$ Å promove a melhor polarização, já que seu pequeno campo pseudo magnético compensa as baixas energias e previne que os raios das orbitas se tornem muito pequenos. Além disso, a Fig. 27(b) mostra que, para altas energias, onde os raios das orbitas são grandes, a polarização se torna mais eficiente para valores maiores de β , e a energia para polarização máxima aumenta com esse parâmetro.

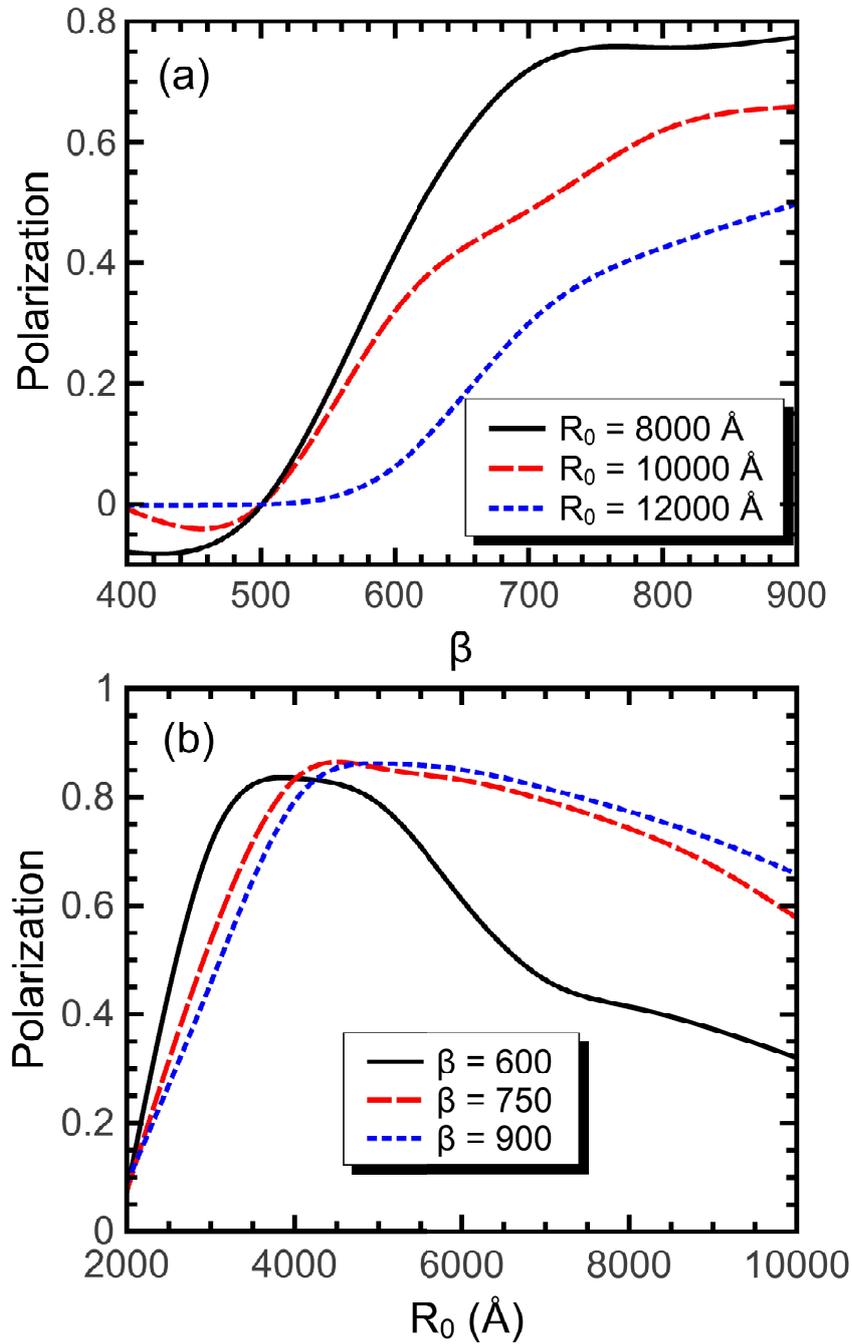


Figura 26: Polarização dos vales do pacote de onda após a região tensionada (a) como função dos raios de torção R_0 , para diferentes valores de β , (b) como função da largura da região tensionada β , para diferentes valores de raio.

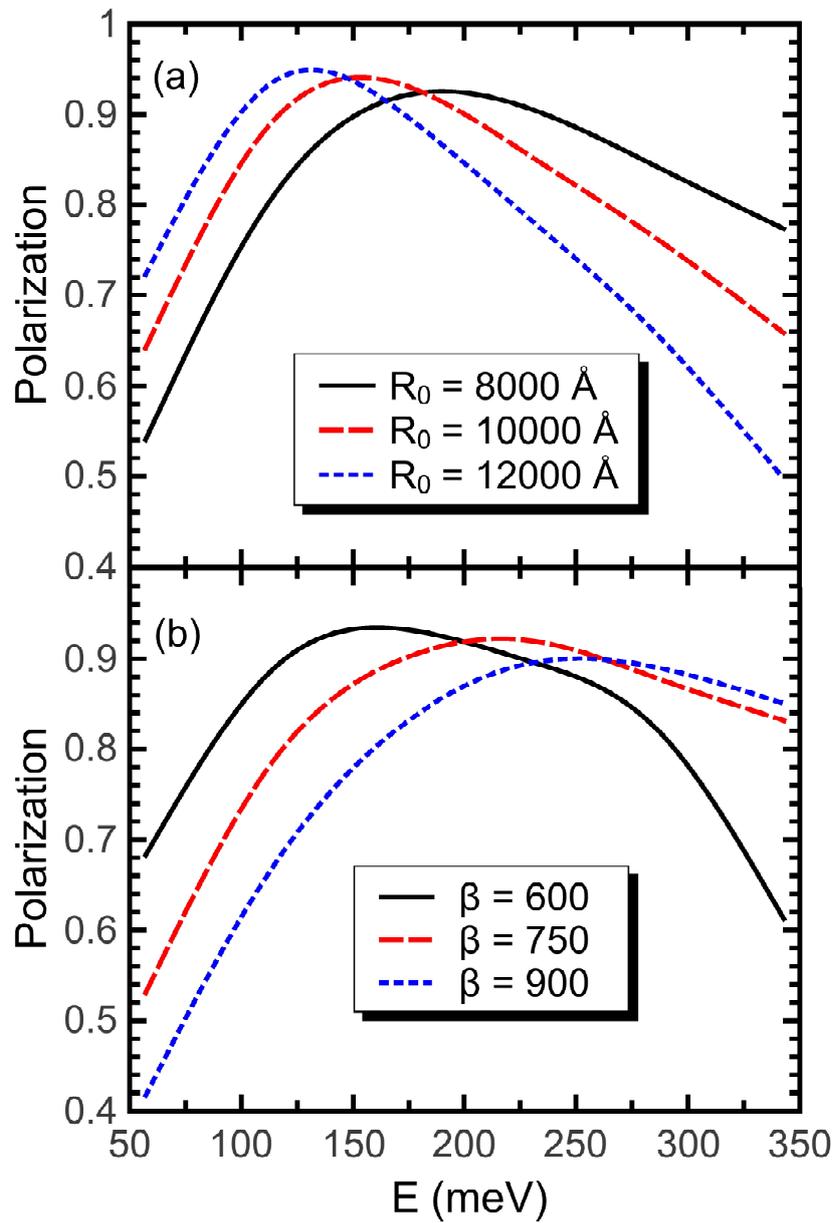


Figura 27: Polarização de vales do pacote de onda que deixa a região torcida como função de sua energia, considerando (a) $\beta = 900$ e diferentes raios, e (b) $R_0 = 6000 \text{ \AA}$ e diferentes valores de β .

6 CONCLUSÃO

Nesta dissertação, investigamos a propagação de um pacote de onda através de uma nanofita de grafeno com uma distribuição específica de tensão, que induz uma barreira pseudo-magnética ao longo da fita. Analisando a trajetória do centro de massa do pacote, calculada com a resolução numérica da equação de *Schrödinger* dependente do tempo para o Hamiltoniano *tight-binding*, observamos a propagação por meio de *snake states*, os quais possuem uma direção de propagação fixa, que é consistente com o modelo de campo pseudo-magnético. Contudo, pode-se verificar analiticamente que, ao se reverter o campo magnético induzido, a direção de propagação dos *snake states* também deve se reverter.

Já que os campos pseudo-magnéticos, devido à deformação, apontam para direções opostas nos diferentes cones de Dirac da estrutura de bandas do grafeno, pacotes de onda em diferentes cones têm obrigatoriamente direções fixas e opostas de propagação, o que sugere um processo muito eficiente de filtragem de vales que não necessita de defeitos de rede, nem de padronização de bordas ou de qualquer outro campo ou potencial externo aplicado.

De fato, nossos resultados demonstraram uma polarização de vales significativa através do sistema, que atinge valores máximos quando (i) o raio do círculo que define a torção diminui para valores intermediários e (ii) o comprimento da região tensionada aumenta.

Além disso, as ferramentas matemáticas e os códigos computacionais desenvolvidos ao longo desse trabalho permitem estudar propriedades de transporte em vários outras configurações de tensão mecânica, até mesmo na presença de vacâncias, defeitos, etc. A filtragem de pacotes de onda através de linhas de defeitos do tipo pentágono-heptágono na rede hexagonal do grafeno, por exemplo, ainda é um problema pouco investigado na literatura, e as técnicas aplicadas aqui para o estudo da otimização de filtragem de vales podem ser diretamente aplicadas ao estudo dessas estruturas.

Como mostrado ao longo dessa dissertação, cada torção circular deve gerar um campo pseudo-magnético quase uniforme. Uma série de torções de forma periódica ao longo de uma nanofita, então, poderia gerar uma super-rede de regiões de confinamento para um elétron. O estudo da densidade de estados e estrutura de bandas nesse sistema também é um dos planos para trabalhos futuros.

APÊNDICE A - ARTIGOS PROVENIENTES DA TESE

All-strain based valley filter in graphene nanoribbons using snake states, L. S. Cavalcante, A. Chaves, D. R. da Costa, G. A. Farias, e F. M. Peeters, submetido a Physical Review B.

All-strain based valley filter in graphene nanoribbons using snake states

L. S. Cavalcante,^{1,*} A. Chaves,^{1,2,†} D. R. da Costa,^{1,3,‡} G. A. Farias,^{1,§} and F. M. Peeters^{3,1,¶}

¹Universidade Federal do Ceará, Departamento de Física Caixa Postal 6030, 60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

²Department of Chemistry, Columbia University, 3000 Broadway, 10027 New York, NY

³Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium

A pseudo-magnetic field kink can be realized along a graphene nanoribbon using strain engineering. Electron transport along this kink is governed by snake states that are characterized by a single propagation direction. Those pseudo-magnetic fields point towards opposite directions in the K and K' valleys, leading to valley polarized snake states. In a graphene nanoribbon with armchair edges this effect results in a valley filter that is based only on strain engineering. We discuss how to maximize this valley filtering by adjusting the parameters that define the stress distribution along the graphene ribbon.

PACS numbers: 81.05.U-, 72.80.Vp, 73.63.-b

I. INTRODUCTION

The advent of graphene^{1,2} not only represented the beginning of a new era of atomically thin materials, with potential technological applications in future electronic and photonic devices, but also brought the possibility of observing several novel phenomena due to its unique band structure, consisting of Dirac cones in points labeled as K and K' in its first Brillouin zone. In fact, the existence of two inequivalent cones is of special importance, since it enables a new degree of freedom to be explored in novel valley-tronic devices.

Several suggestions have been made to harvest valley polarization in graphene: Rycerz et al.³ demonstrated that specific combinations of armchair and zigzag edges in a monolayer graphene ribbon lead to efficient valley filtering. Non-uniform substrate induced masses can also be used to obtain valley polarization, as shown in Refs. [4,5]. As for bilayer graphene, valley filtering can be obtained by specific configurations of external potentials,⁶ or boundaries with monolayer graphene regions.^{7,8} On the other hand, recent studies have demonstrated that pseudo-magnetic fields can be induced in graphene by specific strain configurations and, since these fields point towards opposite directions in different Dirac cones⁹, several suggestions of strain-based valley filters have been proposed in the literature. Most of these proposals involve combinations of the strain induced fields with applied magnetic and electric fields.¹⁰⁻¹⁴ Indeed, strain-based valley filters are specially interesting, because of graphene's ability to withstand large mechanical stress.¹⁵ Very large pseudo-magnetic fields have been experimentally observed in e.g. naturally formed bubbles in a monolayer graphene system on a Pt substrate.¹⁶

In this paper, we propose a very different valley filter device made of a single graphene layer¹⁷ that does not depend on specific edge configurations,³ substrate induced masses,⁴ or external magnetic fields^{10,18}. Yet, it is all based on a particular kind of strain induced in a monolayer graphene nanoribbon, that provides a pseudo-magnetic kink barrier along the ribbon width. Such

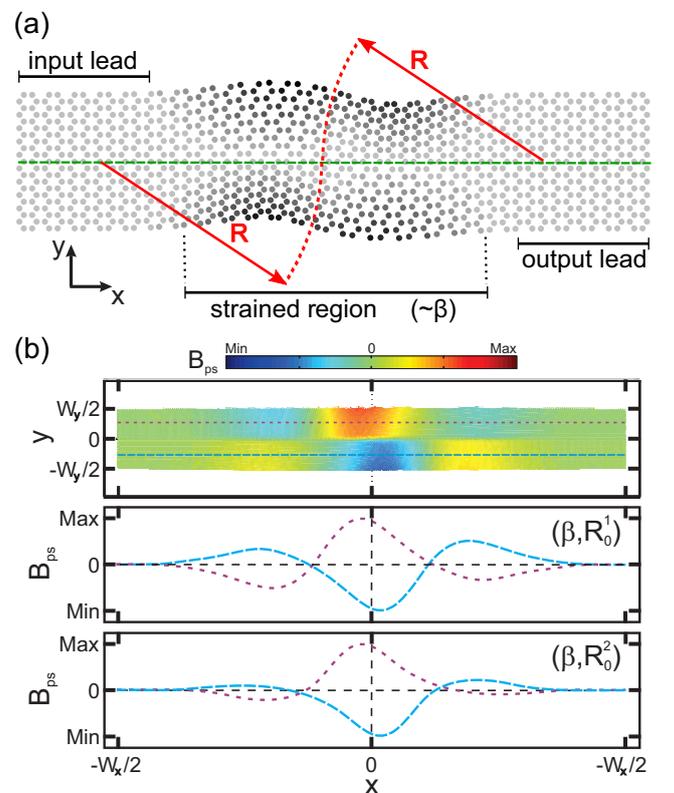


FIG. 1: (Color online) (a) Sketch of the strained graphene ribbon. Strain is defined by two circles of radius R (red dashed), which smoothly decay to zero towards the input and output leads, and the width of the strained region is defined by β . The color map indicates smaller (brighter regions) and larger (darker regions) local displacements. Central atoms (green dashed line along the x -axis) are always unstrained in this configuration. (b) (top) Contour plot of the induced pseudo-magnetic field profile for a representative strain configuration characterized by the parameters (β, R_0) . (bottom) A cross-view of the pseudo-magnetic field along the lines placed in $y > 0$ (purple short-dashed) and $y < 0$ (blue long-dashed) regions of the system in the top panel, for two different maximum radii $R_0^2 > R_0^1$.

strain is expected to be attainable by using flexible substrates in combination with e.g. appropriate piezo's.^{10,15} The valley polarization originates from a combination of (i) the uni-directional motion of snake states along the pseudo-magnetic kink, and (ii) the opposite direction of the pseudo-magnetic field felt in the K and K' valleys. This combination leads to electrons moving in single orbits propagating in opposite directions in the two different valleys. In order to verify the efficiency of such valley filtering device, we calculate the transmission probability of wavepackets through this structure within the tight-binding model. Our results demonstrate that a valley polarization efficiency up to 90% can be reached, provided specific conditions are met by the system, as we will discuss in what follows.

II. THEORETICAL MODEL FOR THE STRAIN

Our system consists of a monolayer graphene nanoribbon with width $W_y \approx 6387 \text{ \AA}$ and length $W_x \approx 2214 \text{ \AA}$ corresponding to 1801×3000 carbon atoms, that is mechanically strained in a specific configuration, as sketched in Fig. 1: along a certain region of length β , the ribbon is distorted into two circular arcs of radius R , in opposite directions. Such circular bending is obtained by defining the displacement of the atomic sites as¹⁵

$$u_x(x, y) = (R + x) \cos \left[\frac{2y}{W_y} \arcsin \left(\frac{W_y}{2R} \right) \right] - y, \quad (1)$$

and

$$u_y(x, y) = (R + x) \sin \left[\frac{2y}{W_y} \arcsin \left(\frac{W_y}{2R} \right) \right] - R - x, \quad (2)$$

where $u_{x,y}$ is the lattice distortion due to strain and the radius has its sign reversed at the $y = 0$ axis, i.e. $R = |R|(2\theta(y) - 1)$, with $\theta(y)$ being the step function. A sharp transition between strained and unstrained regions of the ribbon would be clearly impossible, since it would lead to unrealistically large atomic distances in the vicinity of the transition region, specially for small R . Therefore, we consider a smooth (Gaussian) variation of the curvature $K_R = 1/R = (1/R_0)e^{(-j^2/\beta^2)}$, where j is the index of the column to which a given atomic site belongs in the lattice,¹⁹ the length is described by the dimensionless parameter β , while R_0 provides the maximum radius of the curve (namely, at the central column of atoms, where $x_{i,j} = 0$ in the absence of strain).

The circular distortion deforms the Brillouin zone, shifting the Dirac cones with respect to each other, just like when an uniform magnetic field is applied perpendicular to the graphene plane,^{9,15} leading to $\mathbf{K} \rightarrow \mathbf{K} + 2\pi\mathbf{A}/\Phi_0$, where $\Phi_0 = e/h$ is the flux quantum. Such lattice distortion changes the hopping energies and thus induce an effective vector potential^{20,21}

$$A_x + iA_y = \frac{1}{ev_F} \sum_{\delta\mathbf{a}_{ij}} \delta\tau_{ij} e^{-i\mathbf{K} \cdot \delta\mathbf{a}_{ij}} \quad (3)$$

where $\delta\mathbf{a}_{ij}$ is the vector distance between the adjacent atoms i and j in the strained lattice, v_F is the Fermi velocity, $\delta\tau_{ij}$ is the difference between the strained and unstrained hopping energies, and the pseudo-magnetic field is given by $\mathbf{B}_{\text{ps}} = \nabla \times \mathbf{A}$. Moreover, the distortion in different directions for $y > 0$ and $y < 0$ provides a pseudo-magnetic kink barrier, with pseudo-magnetic field regions that change sign at $y = 0$. A schematic example of the pseudo-magnetic field distribution induced by such strain configuration is presented in Fig. 1(b) for a representative set of parameters (β, R_0). We point out that the sample considered in Fig. 1(b) is much smaller than the one investigated throughout this paper, since calculating and plotting a vector potential distribution along the 1801×3000 atomic sites of our actual sample requires high computational costs. Therefore, the pseudo-magnetic field in Fig. 1(b) is discussed here only in a qualitative way. The pseudo-magnetic field is found to be zero at input and output leads, where the lattice displacements vanish, and assume its minimum and maximum values along the ribbon width around $x = 0$, where the strain is maximum. Two additional kinks are also consistently observed on the left and right sides of this main central kink. They are however much smaller than the central one and, thus, do not play an important role in the valley filtering process, as we will demonstrate further on. In fact, we observe that as we increase R_0 , these additional kinks become even lower as compared to the main kink, so that their importance for the transport properties of the actual sample studied throughout the paper (with larger R_0) is negligible. This can be verified by comparing the bottom panels in Fig. 1(b) for two different maximum radii $R_0^2 > R_0^1$ assuming a fixed width for the strained region β .

III. SNAKE STATES ALONG A MAGNETIC FIELD KINK

Keeping with the analogy between this strain configuration and a magnetic field kink, let us first calculate the energy dispersion along the ribbon in the presence of such a magnetic barrier. We assume an inhomogeneous magnetic field $\mathbf{B} = B\hat{z}$ that depends only on the transversal coordinate, given by $B(y) = B(\theta(y) - \theta(-y))$. Low energy electrons in graphene exhibit a linear energy dispersion, so that they behave as massless Dirac-Weyl fermions, thus, obeying the Dirac equation:

$$\sigma \cdot \left(-i\nabla + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right) \Psi = \bar{E} \Psi, \quad (4)$$

with energy $E = \hbar v_F \bar{E}$.

Defining the vector potential in the Landau gauge, $\mathbf{A} = A(y)\hat{e}_x$, with $A(y) = -B(y)y$, the general solution for the wavefunction with translational invariance in the x -direction is $\Psi(x, y) = \psi(y)e^{ikx}$. Therefore, we obtain

from Eq. (4)

$$\begin{pmatrix} 0 & k - \partial_y + A(y) \\ k + \partial_y + A(y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(y) \\ \psi_2(y) \end{pmatrix} = \bar{E} \begin{pmatrix} \psi_1(y) \\ \psi_2(y) \end{pmatrix}, \quad (5)$$

where $A = \frac{e}{\hbar}\bar{A}$. This leads us to decoupled equations for each component: for instance, for the upper spinor component,

$$\left\{ \partial_y^2 + \frac{e}{\hbar}B(y) - \left[k - \frac{e}{\hbar}B(y)y \right]^2 + \bar{E}^2 \right\} \psi_1(y) = 0. \quad (6)$$

If we use the magnetic length $l_b = \sqrt{\hbar/e|B|}$ as the unit of distance, we obtain

$$\left\{ \partial_y^2 + \text{sgn}(B(y)) - [kl_b - \text{sgn}(B(y))y]^2 + \epsilon^2 \right\} \psi_1(y) = 0. \quad (7)$$

where $\epsilon = \bar{E}l_b = El_b/\hbar v_F$.

The energy dispersion along the y -direction is obtained quasi-analytically by solving this equation in terms of parabolic cylinder functions²², $D_p(q)$. Notice the magnetic field $B(y)$ is piecewise constant, hence, one can separate solutions for each region as

$$\psi_{B>0}(y) = \sum_{\pm} a_{\pm} \begin{pmatrix} D_p(\pm q) \\ \mp \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon} D_{p+1}(\pm q) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\psi_{B<0}(y) = \sum_{\pm} a_{\pm} \begin{pmatrix} D_{p+1}(\pm q) \\ \pm \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon} (p+1) D_p(\pm q) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

where $q = \sqrt{2}[\text{sgn}(B)kl_b]$, and $p = \frac{\epsilon^2}{2} - 1$.

The continuity of the wavefunction and its derivatives at these regions provides boundary conditions that lead to quantization of the energy of the system. Eqs. (8) and (9) represent solutions for the first region of the system, but they also can express solutions for the second region by replacing the coefficients $a_{\pm} \rightarrow c_{\pm}$.

In order that the wavefunctions are normalizable we demand $a_+ = c_- = 0$. Then, the boundary condition at $y = 0$ gives the equation that generates the energy quantization condition. Therefore, we obtain

$$\left(\frac{i\epsilon}{\sqrt{2}}v^2 - \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon}(p+1)u^2 \right) = 0, \quad (10)$$

where the functions are given by $u = D_p(-\sqrt{2}kl_b)$, and $v = \frac{\sqrt{2}}{i\epsilon}D_{p+1}(-\sqrt{2}kl_b)$. Notice that these results for the wavefunction are very closely related to the one for a magnetic kink profile in a normal 2D semiconductor.²³

Numerical results for this system are illustrated in Fig. 2, where we observe an asymmetry in the energy bands along the kink with respect to the $k_x = 0$ axis. Namely, the energy states (predominantly) monotonically decrease with k_x , implying a negative velocity

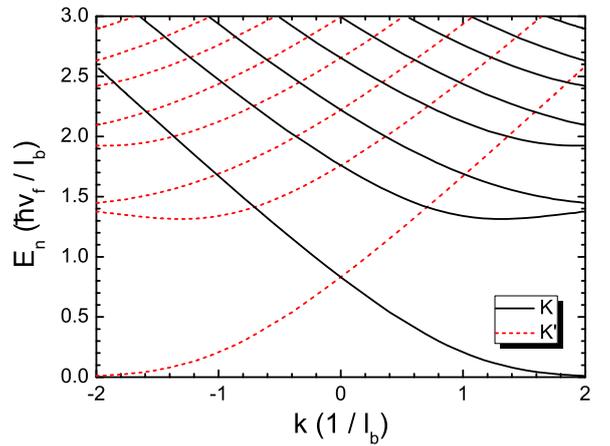


FIG. 2: (Color online) Energy states for a Dirac particle in the presence of a (pseudo-)magnetic kink. Results for K and K' valleys are the same for an external magnetic field, whereas for a pseudo-magnetic field, the K' spectrum (red dashed curves) differs from that from the K valley (black solid curves).

$v = (1/\hbar)dE/dk$, that eventually converges to zero as $k = k_x \rightarrow +\infty$. It is straightforward to verify that by inverting the sign of the magnetic field kink, this figure is reflected with respect to the $k_x = 0$ axis, and the propagation velocities are then predominantly positive. The physical interpretation of this result has its basis on the existence of snake states²⁴ that propagate along the kink, which can also be inferred from a simple classical analysis of this problem, involving Lorentz force, cyclotron orbits and the right-hand rule. Nevertheless, this result is of special importance in the context of pseudo-magnetic kinks discussed here: since the strain-induced pseudo-magnetic field points towards opposite directions in the different Dirac cones K and K' , electrons in each cone will propagate in opposite directions in the pseudo-magnetic kink proposed here, thus yielding an efficient valley filtering process, as we will verify with our numerical results afterwards.

IV. WAVEPACKET PROPAGATION METHOD

In order to investigate the transport properties in our strained graphene, we use a Hamiltonian within the tight-binding model

$$H_{TB} = - \sum_{i,j} \tau_{ij} c_i^\dagger c_j + h.c., \quad (11)$$

where the operator $c_i^\dagger(c_i)$ creates (annihilates) an electron on site i , and τ_{ij} is the hopping energy between adjacent atoms i and j (nearest-neighbors), that depends on the distance δa_{ij} between them according to⁹

$$\tau_{ij} \rightarrow \tau_{ij} \left(1 + \frac{2\delta a_{ij}}{a_0} \right). \quad (12)$$

We consider an initial Gaussian wavepacket

$$\Psi(x, y) = N \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{2\sigma^2} + ik_x x + ik_y y \right], \quad (13)$$

where N is a normalization factor and calculate its time evolution using the split-operator method,^{18,19} in which the time-evolution operator for the Hamiltonian $H = H_i + H_j$ is split as

$$\Psi_{ij}^{t+\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_i\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}H_j\Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar}H_i\Delta t} \Psi_{ij}^t, \quad (14)$$

where $H_{i(j)}$ is the term of the tight-binding Hamiltonian H that corresponds to a horizontal (vertical) hopping between atomic sites

$$H_i|i, j\rangle = \tau'_{ij}|i, j+1\rangle + \tau''_{ij}|i, j-1\rangle \quad (15)$$

$$H_j|i, j\rangle = \tau_{ij}|i+1, j\rangle + \tau_{ij}|i-1, j\rangle. \quad (16)$$

Notice that for the horizontal term H_i , one has to differentiate between hoppings to the right and left neighbouring sites, since in the honeycomb lattice, each site has only horizontal hops to one side. Hence, $\tau'_{ij} = \tau_{ij} \implies \tau''_{ij} = 0$ and $\tau''_{ij} = \tau_{ij} \implies \tau'_{ij} = 0$.

The advantage of such splitting lies in the fact that these operators can be represented by tridiagonal matrices, that are easily handled by standard computational routines. The wavefunction after a single time step $t + \Delta t$ is then obtained in three steps

$$\eta_{ij} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_i\Delta t} \Psi_{ij}^t, \quad (17)$$

$$\xi_{ij} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_j\Delta t} \eta_{ij}, \quad (18)$$

$$\Psi_{ij}^{t+\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_i\Delta t} \xi_{ij}. \quad (19)$$

Each of these equations is re-written using the Cayley form for the exponentials, e.g.

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{4\hbar}H_i\right) \eta_{ij} \approx \left(1 - \frac{i\Delta t}{4\hbar}H_i\right) \Psi_{ij}^t, \quad (20)$$

and the remaining tridiagonal matrix equation is then numerically solved by standard computational routines.²⁵

For our study, we used a wavepacket width of $\sigma = 300$ Å and its wave vector \vec{k} has a modulus of $k = 0.06$ Å⁻¹, unless otherwise explicitly stated in the text. Using the linear spectrum approximation for low-energy electrons in graphene, in which $E = \hbar v_f k$, the wavepacket energy is estimated to be $E = 343$ meV. Besides, as we intend to demonstrate the valley polarization of the wavepacket, we place it in different valleys in reciprocal space by shifting the wave vector towards the two inequivalent Dirac points:

$$k_x \leftarrow |k|, \quad k_y \leftarrow \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, \quad (21)$$

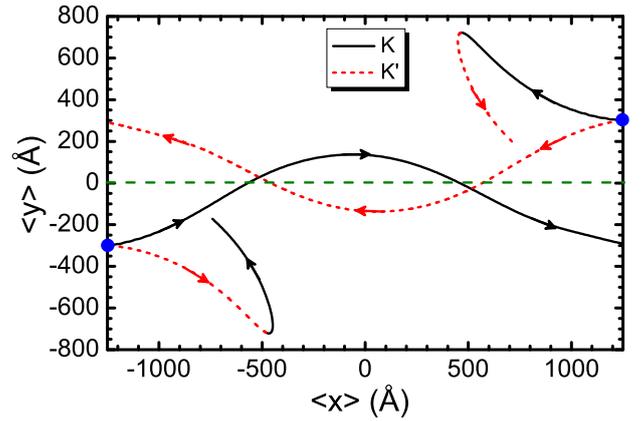


FIG. 3: (Color online) Examples of trajectories of electron wavepackets propagating with momenta around K (black solid curves) and K' (red dashed curves) valleys, starting at (x, y) points (indicated by blue solid dots) given by $(1250$ Å, 300 Å) and $(-1250$ Å, -300 Å), respectively. Arrows indicate the direction of propagation along the trajectories.

where the positive (negative) sign refers to a displacement towards the K (K') point of the Brillouin zone, and $a \approx 1.42$ Å is the inter-atomic distance.

As the Gaussian wavepacket propagates, we calculate the probability of finding the electron before (P_1), within (P_2), and after (P_3) the strained region, as the integral of the square modulus of the wavepacket, taken within the intervals $-3,000$ Å $\leq x \leq -400$ Å, -400 Å $\leq x \leq 400$ Å, and 400 Å $\leq x \leq 3,000$ Å, respectively. Transmission probabilities are assumed to be the converged value of P_3 as $t \rightarrow \infty$. Besides, we keep track of the wavepacket trajectories by calculating the average value of the position, $(\langle x \rangle, \langle y \rangle)$, at each time step.

The armchair edges of the ribbon do not support edge states, therefore, modelling the electron propagating through the system as a wavepacket, whose tails do not reach the ribbon edges, is justified.

V. RESULTS AND DISCUSSION

The existence of snake states in such a strained graphene lattice, as due to the induced pseudo-magnetic fields, is confirmed by the trajectories drawn in Fig. 3 of the center-of-mass of a $k = 0.06$ Å⁻¹ wavepacket propagated in time through the system described by Fig. 1(a), assuming $\beta \rightarrow \infty$ and $R_0 = 10^4$ Å, as a test case. If this wavepacket has momentum around the Dirac cone K (black solid curves) and propagates from left to right, starting at the bottom-half of the ribbon, its trajectory is deflected by the pseudo-magnetic Lorentz force towards the top-half, where it is deflected downwards again by the opposite pseudo-magnetic field, thus performing a snake-like trajectory. If this same packet has momentum around the K' cone (red dashed curves), it is deflected downwards and eventually repelled from the strained re-

gion. If this packet starts from the top-half instead, both curves are just mirror-reflected with respect to the $\langle y \rangle = 0$ axis of Fig. 3, and the situation remains the same. Conversely, if the wavepacket propagates from right to left, it is the K' packet that draws a snake trajectory, whereas the K packet is reflected. One could think that wavepackets deflected towards the edges of the system (i.e., further away from its center) would be reflected by the ribbon edges, perform skipping orbits, and eventually pass through the strained region. However, since the ribbon has armchair edges, reflected wavepackets are scattered to the other Dirac cone, where the pseudo-magnetic field is opposite, thus the skipping orbit follows the opposite direction and the wavepacket comes back anyway.¹⁷ This non-propagating edge state is emphasized in Fig. 3 for a wavepacket that started at the bottom-half (top-half) of the ribbon and around K' (K) Dirac valley. However, the present proposal will not work very efficiently for graphene nanoribbons with zigzag edges. Therefore, in summary, electrons in K (K') cones in such a strained graphene ribbon can only propagate towards the right (left). Analogously, if the strain configuration is inverted, trajectories drawn by K and K' packets are switched.

Such a picture of snakes states strongly suggest a valley filtering effect. In fact, if one now considers a system with finite strain region $\beta = 900$ (in units of the inter-atomic distance $a_0 = 1.42 \text{ \AA}$) and $R_0 = 10,000 \text{ \AA}$, a wavepacket with $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$ around the K cone passes through this region with a high probability $P_3 \approx 0.9$, whereas the same packet in K' would have a much lower transmission probability $P'_3 \approx 0.3$.

Let us now search for an optimization of the valley polarization effect. The polarization, as defined by

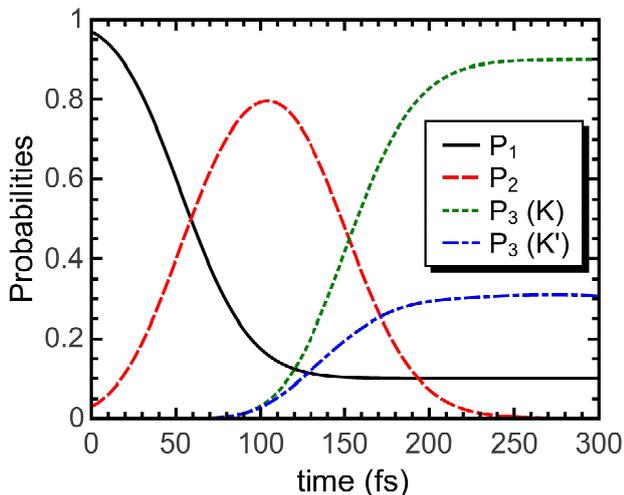


FIG. 4: (Color online) Probability densities, as a function of time, of finding the electron before (P_1), within (P_2), and after (P_3) the $\beta = 900$ and $R_0 = 10,000 \text{ \AA}$ strained region, for a wavepacket with $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$ around the K point of the Brillouin zone. Results for P_3 considering a wavepacket around K' are shown for comparison.

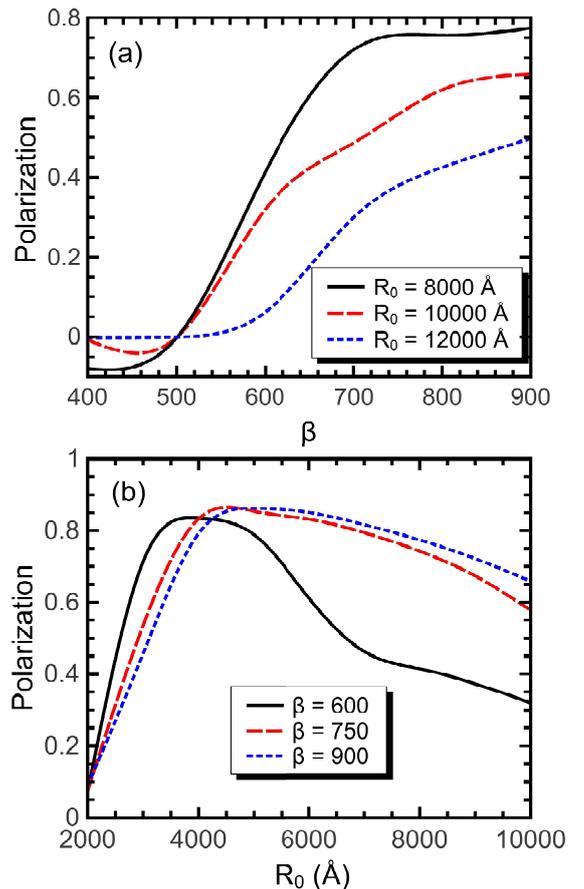


FIG. 5: (Color online) Valley polarization of the outgoing wavepacket, with $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$, as a function (a) of the width of the strained region β , for different radii R_0 , and (b) as function of the strain radius R_0 , for different β values.

$P = 1 - P_3/P'_3$, where P'_3 is the transmission probability for a wavepacket in the K' cone, is shown in Fig. 5 for $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$, assuming different parameters β and R_0 . For a fixed strain radius R_0 , increasing the length of the strain region β increases the polarization, as shown in Fig. 5(a). Besides, results in this panel also suggest that decreasing R_0 would always improve the polarization; this would be reasonable, since smaller radii yield stronger distortions in the lattice and, consequently, larger pseudo-magnetic fields. This is however not always the case: Fig. 5(b) shows that even for β as large as 900 \AA , decreasing the strain radius will always lead to a maximum polarization at an intermediate value $R_0 \approx 5,000 \text{ \AA}$, so that the polarization is reduced as the radius is further decreased. This is due to the fact that the smooth connection between the unstrained ribbon and the strained region might end up creating a complicated pseudo-magnetic field distribution, with regions with fields pointing to opposite directions, which would harm the polarization effect investigated here. This also explains the negative polarization observed for small β in Fig. 5(a).

So far, all results were obtained for $k = 0.06 \text{ \AA}^{-1}$, which corresponds to a wavepacket energy $E = 343 \text{ meV}$. It is however important to check how the polarization depends on the wavepacket energy. This is shown in Fig. 6, where we verify that the valley filtering process proposed here has an optimal range of energies. Indeed, if the energy is too low, the pseudo-magnetic Lorentz orbits would have a very small radius, so that only portions of the wavepacket that are very close to the $y = 0$ line would pass through the system as snake states, whereas the rest of the wavepacket readily turns back. On the other hand, if the energy is too high, orbit radii may end up being larger than the strained region length, so that the snake-like propagation that leads to valley polarization no longer occurs. Moreover, the Lorentz orbit radius is inversely proportional to the pseudo-magnetic field intensity, therefore, increasing the strain by reducing R_0 would also lead to Lorentz orbits with smaller radius. This classical picture is consistent with our numerical findings: in Fig. 6(a), the largest strain radius $R_0 = 12,000 \text{ \AA}$ provides the fastest decay of polarization as the energy increases, since it yields a lower strain-induced pseudo-magnetic field and, therefore, energies slightly higher than the optimal $E \approx 125 \text{ meV}$

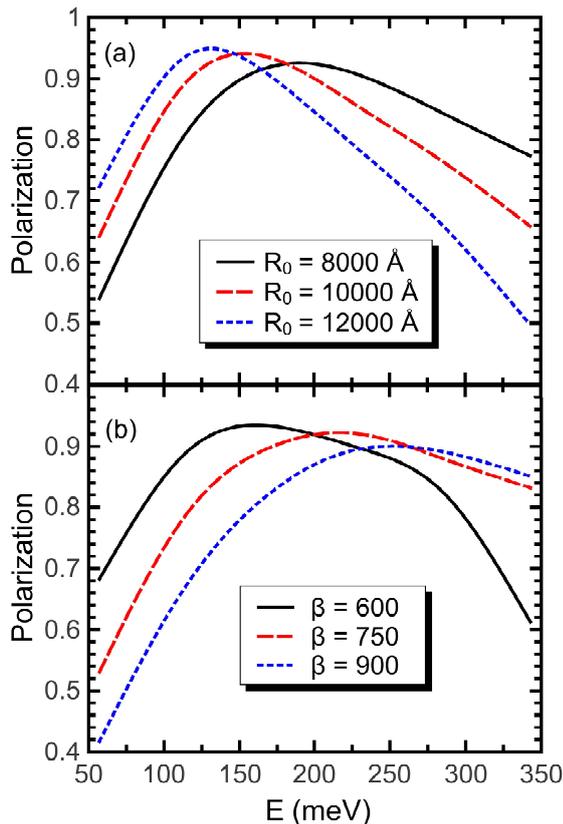


FIG. 6: (Color online) Valley polarization of the outgoing wavepacket as a function of its energy, considering (a) $\beta = 900$ and different radii R_0 , and (b) $R_0 = 6,000 \text{ \AA}$, for different values of β .

already provide orbit radii larger than the strained region length. Conversely, for energies lower than $E \approx 125 \text{ meV}$, $R_0 = 12,000 \text{ \AA}$ provides the best polarization, as its weaker pseudo-magnetic field compensates for the low energy and prevents the orbits radius of becoming too small. Also, Fig. 6(b) shows that, for higher energies, where orbit radii are larger, polarization is more efficient for larger length β , and the energy for optimal polarization increases with this parameter.

VI. CONCLUSIONS

We have investigated the wavepacket propagation through a graphene nanoribbon with armchair edges for a specific strain distribution. The latter provides a pseudo-magnetic barrier kink along the ribbon. By following the trajectory of the center-of-mass of the wavepacket, calculated by solving the time-dependent Schrödinger equation for the tight-binding Hamiltonian, one observes snake states, which have a fixed propagation direction, consistent with the pseudo-magnetic kink picture. However, one can analytically verify that, by reversing the magnetic kink, the propagation direction of snake states must be reversed.

Since the pseudo-magnetic field points towards opposite direction in the different Dirac cones, wavepackets in the different cones can only have fixed opposite directions of propagation. This effect results in an efficient valley filtering process, which does not require either lattice defects, edge engineering, or any externally applied fields or potentials. Our numerical results show significant valley polarization through this system, which can be optimized by the parameters (β , R_0) that depend on the electron energy (i.e. the Fermi energy).

Acknowledgments

Discussions with R. Grassi are gratefully acknowledged. This work was supported by the Brazilian Council for Research (CNPq), under the PRONEX/FUNCAP and Science Without Borders (SWB) programs, CAPES, the Lemann Foundation, and the Flemish Science Foundation (FWO-V1).

-
- * Electronic address: lucaskvalcante@fisica.ufc.br
- † Electronic address: andrey@fisica.ufc.br
- ‡ Electronic address: diego_rabelo@fisica.ufc.br
- § Electronic address: gil@fisica.ufc.br
- ¶ Electronic address: francois.peeters@uantwerpen.be
- ¹ K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
 - ² A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
 - ³ A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, *Nat. Phys.* **3**, 172 (2007).
 - ⁴ M. Zarenia, O. Leenaerts, B. Partoens, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **86**, 085451 (2012).
 - ⁵ M. Ramezani Masir, A. Matulis, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **84**, 245413 (2011).
 - ⁶ D. R. da Costa, Andrey Chaves, S. H. R. Sena, G. A. Farias, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **92**, 045417 (2015).
 - ⁷ Takeshi Nakanishi, Mikito Koshino, and Tsuneya Ando, *Phys. Rev. B* **82**, 125428 (2010).
 - ⁸ L. Pratley and U. Zülicke, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 082401 (2014).
 - ⁹ F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, *Nature Phys.* **6**, 30 (2010).
 - ¹⁰ Tony Low and F. Guinea, *Nano Lett.* **10**, 3551 (2010).
 - ¹¹ T. Fujita, M. B. A. Jalil, and S. G. Tan, *Appl. Phys. Lett.* **97**, 043508 (2010).
 - ¹² F. Zhai, Y. Ma, and Y.-T. Zhang, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 385302 (2011).
 - ¹³ N. Myoung and G. Ihm, *Curr. Appl. Phys.* **14**, 1455 (2014).
 - ¹⁴ F. Zhai, X. Zhao, K. Chang, and H. Q. Xu, *Phys. Rev. B* **82**, 115442 (2010).
 - ¹⁵ F. Guinea, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov, *Phys. Rev. B* **81**, 035408 (2010).
 - ¹⁶ N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and M. F. Crommie, *Science* **30**, 544 (2010).
 - ¹⁷ D. R. da Costa, A. Chaves, G. A. Farias, L. Covaci, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **86**, 115434 (2012).
 - ¹⁸ A. Chaves, L. Covaci, Kh. Yu. Rakhimov, G. A. Farias, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **82**, 205430 (2010).
 - ¹⁹ Kh. Yu. Rakhimov, Andrey Chaves, G. A. Farias, and F. M. Peeters, *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 275801 (2011).
 - ²⁰ M. R. Masir, D. Moldovan, and F. M. Peeters, *Solid State Commun.* **175-176**, 76 (2013).
 - ²¹ D. Moldovan and F. M. Peeters, *Phys. Status Solidi RRL*, 1-7 (2015)
 - ²² T. K. Ghosh, A. De Martino, W. Häusler, L. Dell'Anna, and R. Egger, *Phys. Rev. B* **77**, 081404(R) (2008).
 - ²³ J. Reijniers and F. M. Peeters, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 9771 (2000).
 - ²⁴ Y. Liu, R. P. Tiwari, M. Brada, C. Bruder, F. V. Kusmartsev, and E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **92**, 235438 (2015).
 - ²⁵ W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press New York, New York, 2007), p. 56.

REFERÊNCIAS

- [1] M. Zarenia. Universiteit Antwerpen, Faculteit Wetenschappen, Departement Fysica (2013).
- [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A. A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).
- [3] T. A. Land, T. Michely, R. J. Behm, J. C. Hemminger, and G. Comsa. *Surf. Sci.* **264**, 261 (1992).
- [4] A. Nagashima, K. Nuka, H. Itoh, T. Ichinokawa, C. Oshima and S. Otani. *Surf. Sci.* **291**, 93 (1993).
- [5] A. J. van Bommel, J. E. Crombeen, and A. van Tooren. *Surf. Sci.* **48**, 463 (1975).
- [6] A. Forbeaux, J. M. Th emlin, and J. M. Debever. *Phys. Rev. B* **58**, 16396 (1998).
- [7] C. Berger, Z. Song, T. Li, X. Li, A. Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. Dai, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer. *J. Phys. Chem. B* **108**, 19912 (2004).
- [8] C. Berger, Z. Song, X. Li, X. Wu, N. Brown, C. Naud, D. Mayou, T. Li, J. Hass, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First, and W. A. de Heer. *Science* **312**, 1191 (2006).
- [9] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg. *Science* **313**, 951 (2006).
- [10] K. S. Kim, Y. Zhao, H. Jang, S. Y. Lee, J. M. Kim, K. S. Kim, J. Ahn, P. Kim, J. Choi and B. H. Hong. *Nature* **457**, 706 (2009).
- [11] Y. Hu, M. Ruan, Z. Guo, R. Dong, J. Palmer, J. Hankinson, C. Berger, and W. A. de Heer. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45**, 154010 (2012).
- [12] A. K. Geim. *Science* **324**, 1530 (2009).
- [13] A. K. Geim, and K. S. Novoselov. *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
- [14] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone. *Science* **321**, 385 (2008).
- [15] Y. M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H. Y. Chiu, A. Grill, and Ph. Avouris. *Science* **327**, 5966 (2010).
- [16] M. P. Ramuz, M. Vosgueritchian, P. Wei, C. Wang, Y. Gao, Y. Wu, Y. Chen, and Z. Bao. *ACS Nano* **6** (11), 10384 (2012).
- [17] S. Bae, H. Kim, Y. Lee, X. Xu, J. S. Park, Y. Zheng, J. Balakrishnan, T. Lei, H. R. Kim, Y. I. Song, Y. J. Kim, K. S. Kim, B. Ozyilmaz, J. H. Ahn, B. H. Hong, and S. Iijima. *Nat. Nanotech.* **5**, 574 (2010).
- [18] A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker. *Nat. Phys.* **3**, 172 (2007).
- [19] M. Zarenia, O. Leenaerts, B. Partoens, and F. M. Peeters. *Phys. Rev. B* **86**, 085451 (2012).

- [20] M. R. Masir, A. Matulis, and F. M. Peeters. Phys. Rev. B **84**, 245413 (2011).
- [21] D. R. da Costa, A. Chaves, S. H. R. Sena, G. A. Farias, and F. M. Peeters. Phys. Rev. B **92**, 045417 (2015).
- [22] T. Nakanishi, M. Koshino, and T. Ando. Phys. Rev. B **82**, 125428 (2010).
- [23] L. Pratley and U. Z ulicke. Appl. Phys. Lett. **104**, 082401 (2014).
- [24] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim. Nat. Phys. **6**, 30 (2010).
- [25] T. Low and F. Guinea. Nano Lett. **10** (9), 3551 (2010).
- [26] T. Fujita, M. B. A. Jalil, and S. G. Tan. Appl. Phys. Lett. **97**, 043508 (2010).
- [27] F. Zhai, Y. Ma, and Y. T. Zhang. J. Phys.: Condens. Matter **23**, 385302 (2011).
- [28] N. Myoung and G. Ihm. Curr. Appl. Phys. **14**, 1455 (2014).
- [29] F. Zhai, X. Zhao, K. Chang, and H. Q. Xu. Phys. Rev. B **82**, 115442 (2010).
- [30] T. J. Booth, P. Blake, R. R. Nair, D. Jiang, E. W. Hill, U. Bangert, A. Bleloch, M. Gass, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim. Nano Lett. **8**, 2442 (2008).
- [31] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and M. F. Crommie. Science **329**, 544 (2010).
- [32] F. Guinea, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov. Phys. Rev. B **81**, 035408 (2010).
- [33] A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- [34] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. Phys. Rev. Lett. **95**, 146801 (2005).
- [35] C. Itzykson, and J. B. Zuber. *Quantum Field Theory*, Dover, New York (2006).
- [36] G. Li and E. Y. Andrei. Nat. Phys. **3**, 623 (2007).
- [37] M. L. Sadowski, G. Martinez, M. Potemski, C. Berger, and W. A. de Heer. Phys. Rev. Lett. **97**, 266405 (2006).
- [38] Z. Jiang, E. A. Henriksen, L. C. Tung, Y. J. Wang, M. E. Schwartz, M. Y. Han, P. Kim, and H. L. Stormer. Phys. Rev. Lett. **98**, 197403 (2007).
- [39] K. Wakabayashi, K. Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki. Sci. Technol. Adv. Matter **11** (2010).
- [40] L. Brey and H. A. Fertig. Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).
- [41] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. Phys. Rev. B **54**, 17954 (1996).
- [42] J. J. Sakurai, J. J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, (1993).
- [43] A. Chaves. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, (2010).

- [44] J. P. M. Braga. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, (2011).
- [45] D. R. da Costa. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, (2014).
- [46] A. Chaves, L. Covaci, Kh. Yu. Rakhimov, G. A. Farias, and F. M. Peeters. Phys. Rev. B **82**, 205430 (2010).
- [47] M. Suzuki. Phys. Lett. A **146**, 319 (1990).
- [48] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling. *Numerical Recipes in Fortran 77*, Second Edition, (1992).
- [49] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres. Phys. Rev. B **80**, 045401 (2009).
- [50] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, F. Guinea. Phys. Rep. **496**, 109 (2010).
- [51] M. R. Masir, D. Moldovan, F. M. Peeters. Solid State Commun. **175**, 76 (2013).
- [52] V. M. Pereira and A. H. Castro Neto. Phys. Rev. B **80**, 045401 (2009).
- [53] L. Oroszlány, P. Rakyta, A. Kormányos, C. J. Lambert, and J. Cserti. Phys. Rev. B **77**, 081403 (2008).
- [54] T. K. Ghosh, A. De Martino, W. Häusler, L. Dell'Anna, and R. Egger. Phys. Rev. B **77**, 081404 (2008).
- [55] Kh. Yu. Rakhimov, A. Chaves, G. A. Farias, and F.M. Peeters. J. Phys.: Condens. Matter **23**, 275801 (2011).
- [56] D. R. da Costa, A. Chaves, G. A. Farias, L. Covaci, and F. M. Peeters. Phys. Rev. B **86**, 115434 (2012).