



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

**LEANDRO JADER PITOMBEIRA XAVIER**

**ANÉIS QUÂNTICOS EM MONO- E BICAMADAS DE GRAFENO**

**FORTALEZA**

**2016**

LEANDRO JADER PITOMBEIRA XAVIER

ANÉIS QUÂNTICOS EM MONO- E BICAMADAS DE GRAFENO

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. João Milton Pereira Junior

FORTALEZA

2016

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca Universitária

Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

X21a      Xavier, Leandro Jader Pitombeira.  
            Anéis Quânticos em Mono- e Bicamadas de Grafeno / Leandro Jader Pitombeira Xavier.  
            – 2016.  
            92 f. : il. color.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de  
Pós-Graduação em Física , Fortaleza, 2016.

Orientação: Prof. Dr. João Milton Pereira Junior.

1. grafeno. 2. anél quântico. 3. bicamada. 4. confinamento topológico. 5. massa. I. Título.

CDD 530

---

**LEANDRO JADER PITOMBEIRA XAVIER**

**ANÉIS QUÂNTICOS EM MONO- E BICAMADAS DE GRAFENO**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovado em 29 / 08 / 2016 .

**BANCA EXAMINADORA**

---

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

---

Dr. Andrey Chaves  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

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

---

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

---

Dr<sup>a</sup> Silvia Helena Roberto de Sena  
Universidade da Integração Internacional da  
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

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

# Agradecimentos

- Primeiramente aos meus pais *Leudo Xavier* e *Socorro Pitombeira*, pelos ensinamentos que me foram transmitidos, pela ininterrupta e altruística ajuda durante toda a minha vida e por terem puxado minha orelha.
- A minha amiga, companheira e namorada *Beatriz Cajazeiras* por todo o apoio, carinho e atenção.
- Aos meus irmãos *Leudo Jr.*, *Antônio Leydson*, *Maria Leydiane* e *Leyziane Nara* pela amizade, companheirismo, compreensão e apoio igualmente importantes.
- Ao meu orientador Prof. João Milton Pereira Júnior sem o qual este trabalho não seria possível, pelos conhecimentos transmitidos e por ser um modelo de professor, orientador e pesquisador.
- Ao meu amigo e colaborador Dr. Diego Rabelo da Costa o qual me apoiou, auxiliou e coorientou durante o último ano de doutorado, desempenhando um papel impar na obtenção do meu título.
- Aos membros da banca: Prof Andrey Chaves, Prof Eduardo Costa Girão e a Prof.<sup>a</sup> Silvia Helena Roberto Sena, não apenas pela leitura e crítica deste trabalho mas também pelo apoio e confiança depositada em mim.
- Aos demais professores do grupo de pesquisa Prof. Wandemberg Paiva Ferreira e Prof. Jeanlex Soares de Sousa, pelos vários auxílios prestados.
- A todos os professores com quem tive aula na graduação e na pós-graduação, aos quais devo boa parte do conhecimento que detenho.
- A todos os meus amigos, em especial aos que tive mais contato durante a minha formação acadêmica, dos quais devo citar: *Daniel Gomes*, *Davi Dantas*, *Diego Lucena*, *Hygor Piaget*, *Joari Santiago*, *João Paulo Pitombeira*, *Kauã Monteiro*, *Levi Leite*, *Rafael Alencar*, *Saulo Dantas*, *Vagner Bessa*, . Pelas valorosas discussões e pelos indispensáveis momentos de descontração.
- Ao Prof. Alejandro Pedro Ayala e a toda equipe da Pós-graduação do Departamento de Física da UFC, em especial a Rejane Ramos Coelho pelo esforço incansável para o desenvolvimento do nosso departamento.
- A coordenação do IFCE – Campus Crateús, em especial aos professores João Henrique e Diego Ximenes Mecêdo por todo o apoio fornecido.

- Aos colegas do grupo por discussões importantes e pelo companheirismo: *Danilo Borges, Diego Araujo, Jorge Luiz e Jorge Coelho.*
- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo suporte financeiro.

*“...observe quem vai subindo a ladeira,  
seja princesa ou seja lavadeira,  
pra ir mais alto vai ter que suar.”  
(Flávio José)*



# Resumo

Um importante campo da pesquisa em física do estado sólido é a investigação de sistemas de baixa dimensionalidade, nos quais o movimento dos portadores de carga está confinado em uma, duas ou três dimensões. Uma importante classe desses sistemas são os anéis quânticos, eles formam um sistema natural para a investigação de fenômenos de interferência quântica e de transportes, como as oscilações de Aharonov-Bohm e correntes persistentes. Por outro lado, o grafeno, uma folha plana de átomos de carbono disposto em uma rede hexagonal, exibe propriedades peculiares como o comportamento pseudo-relativístico dos portadores de cargas próximos do nível de Fermi e espera-se sua aplicação no desenvolvimento de novos dispositivos eletrônicos. Nesse trabalho, estudamos estados localizados de anéis quânticos em monocamada e bicamada de grafeno.

Sabe-se que, devido a uma interação com um substrato, uma monocamada de grafeno pode desenvolver um termo de massa na equação de Dirac-Weyl que descreve o comportamento dos portadores de carga na proximidade do nível de Fermi. Além disso, uma inversão na massa, obtida através de defeitos no substrato, pode confinar os portadores de carga na interface da mudança do sinal. Estudamos um sistema em que essa inversão se dá ao longo de uma linha circular, portanto formando um confinamento anelar. A dispersão eletrônica foi calculada como função do raio da linha circular e da intensidade do termo de massa induzido tanto analiticamente, utilizando o modelo contínuo, quanto numericamente, utilizando o modelo tight-binding. Nossos resultados mostraram uma boa concordância entre os dois modelos. Além disso os níveis de energia mostraram um comportamento fracamente dependente da intensidade do termo de massa induzidos. Os estados confinados nesse sistema são robustos em relação a desordens no sentido que, nenhuma desordem não magnética pode quebrar a degenerescência de vale e os estados não podem ser retroespalhados, semelhantes a estados topológicos. A influência de um campo magnético nesse sistema também foi estudada e, além das oscilações de Aharonov-Bohm, foi observado que controlando o campo magnético pode-se controlar o vale que os estados pertencem.

Submetendo uma bicamada de grafeno a uma diferença de potencial (ddp) heterogênea pode-se confinar o movimento dos portadores de carga, porém, além de um confinamento convencional, há a possibilidade de um confinamento *topológico*, no qual a ddp aplicada sobre a bicamada inverte de sinal na região do confinamento. Analogamente ao anel na monocamada, propomos um sistema em que essa inversão se dá ao longo de uma linha circular, portanto formando um confinamento anelar em bicamada de grafeno. A dispersão eletrônica foi calculada analiticamente como função do raio da linha circular, da amplitude da ddp e da intensidade de um campo magnético externo utilizando o modelo contínuo. Os estados nesse sistema, semelhantes

ao sistema na monocamada, também apresentaram robustez a desordens não magnéticas e a retroespalhamentos.

**Palavras-chaves:** massa. bicamada. grafeno. confinamento topológico. campo magnético. anel quântico.

# Abstract

One important field of solid-state physics is the investigation of low-dimensional devices, in which the charge carriers motion is confined in one, two or three dimensions. One important class of such systems are quantum rings, they are a natural systems to investigate quantum interference phenomenon in transport properties, Aharonov-Bohm oscillations and persistent currents. On the other hand, graphene, a planar monolayer of carbon atoms arranged on two-dimensional hexagonal lattice, exhibits peculiar properties like a pseudo-relativistic charge carriers behavior nest to the Fermi level and is expected to lead to the development of new devices. In this work, we studied located states in quantum rings in monolayer and bilayer graphene.

One known that, due a interaction with substrate, monolayer graphene can develop a mass term in the Dirac-Weyl equation that describes the charge carriers nest to Fermi level. Furthermore, a mass inversion, obtained through defects on the substrate, can confine charge carriers in the interface of sign change. We studied a system where the sign inversion happens along a circle, therefore, forming a ring-like confinement. The electronic dispersion was calculated as a function of the radius of the circular line defect and the intensity of the mass term induced ether analytically, by continuous model, or numerically, through tight-binding model. Our analytical results show very good agreement with the tight-binding ones. Furthermore, the energies levels are weakly dependent on the intensity of mass term. The states are robust in the presence of disorder, in the sense that non-magnetic can not break the valley degeneracy and are immune to backscattering, like topological states. Also was studied the influence of a external magnetic field and, besides the Aharonov-Bohm oscillations, we found that tuning the magnetic field, on can control the ground state valley.

Under a heterogeneously potential bias, one can confine the charge carriers motion in a bilayer graphene, but, besides the conventional confinement, it is possible to define a topological confinement, in which the potential bias reverse the sign on the confinement zone. Analogously to the monolayer ring, we propose a system where that inversion happens in a circular line, therefore, forming a ring-like confinement in bilayer graphene. The electronic dispersion was calculated analytically as a function of the radius of the circular line, the intensity of potential bias and the intensity of a external magnetic field using the continuous model. The states in such system, similar to the monolayer one, are robust to a non-magnetic disorder and a backscattering.

**Key-words:** mass. bilayer. graphene. topological confinement. magnetic field. quantum ring.

# Lista de ilustrações

Figura 1	– Formas alotrópicas do carbono. No canto superior esquerdo, uma folha de grafeno; no sentido horário tem-se grafite (múltiplas folhas de grafeno), fulereno e nanotubo de carbono. . . . .	19
Figura 2	– A esquerda, dispersão do grafeno. A direita, dispersão aproximadamente linear próximo do ponto de Dirac. . . . .	21
Figura 3	– Condutividade Hall $\sigma_{xy}$ (vermelho) e resistividade longitudinal $\rho_{xx}$ (verde) no grafeno a temperatura de 4 K e campo magnético de 14 T como função da concentração dos portadores de carga. (Inserção) $\sigma_{xy}$ para uma bicamada de grafeno, onde a usual quantização ocorre em valores inteiros de $4e^2/h$ . Figura adaptada da Ref. [1]. . . . .	22
Figura 4	– a) Dispersão linear sem <i>gap</i> do grafeno para energias próximas do nível de Fermi. b) Dispersão aproximadamente parabólica sem <i>gap</i> para uma bicamada para energias próximas do nível de Fermi. c) Surgimento de um <i>gap</i> $\Delta$ na dispersão da BG ao se aplicar um campo eletrostático perpendicular as camadas. . . . .	24
Figura 5	– Foto de filmes de grafite (azul) com várias espessuras, $d$ , depositados em um substrato de SiO <sub>2</sub> (violeta). Os valores indicados das espessuras foram medidos através de microscopia de força atômica. Observe que a área em que $d \approx 2nm$ no canto superior esquerdo a mudança na coloração é extremamente tênue. Figura adaptada de Ref. [2]. . . . .	25
Figura 6	– Imagem de microscopia de força atômica de dois anéis quânticos concêntricos. Figura adaptada de Ref. [3]. . . . .	26
Figura 7	– Dispersão do grafeno obtida através dos modelos <i>tight-binding</i> e <i>ab initio</i> . a) A dispersão obtida através de calculos <i>ab initio</i> é mostrada em linhas cheias, e a obtida pelo <i>tight-binding</i> é mostrado em linhas pontilhadas. A dispersão do <i>tight-binding</i> é calculada para os melhores valores dos parâmetros do <i>tight-binding</i> que interpolam a dispersão do <i>ab initio</i> . b) Diferença entre as dispersões. Figura adaptada da Ref. [4]. . . . .	28
Figura 8	– Rede hexagonal do grafeno. Esquerda: a rede do grafeno representada como duas redes triangulares cujos os vetores primitivos são $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ . Os vetores $\delta_1$ , $\delta_2$ e $\delta_3$ localizam os primeiros vizinhos para os átomos que pertencem à sub-rede B. Para os átomos que pertencem à sub-rede A os primeiros vizinhos estão nas posições $-\delta_1$ , $-\delta_2$ e $-\delta_3$ . Direita: zona de Brillouin. Figura adaptada da Ref. [5]. . . . .	29

Figura 9 – Estrutura de banda do grafeno obtido pelo modelo contínuo para (a) potencial externo nulo, (b) um potencial externo uniforme $U_0$ e (c) um termo de massa $U_0$ . . . . .	39
Figura 10 – Níveis de Landau no grafeno obtido pelo modelo contínuo para (a) potencial externo nulo, (b) um potencial externo uniforme $u_0$ , e (c) um termo de massa uniforme $\delta_0$ . . . . .	41
Figura 11 – Bicamada de grafeno com empilhamento AB vista de cima. Os carbonos em vermelho formam a sub-rede triangular B da camada inferior. Os carbonos em azul formam a sub-rede A' da camada superior. Os carbonos em preto são as sub-redes B' e A que coincidem pois a coordenada z é ignorada pela perspectiva. . . . .	41
Figura 12 – (a) Rede cristalina de uma BG. Os átomos em verde formam, na folha inferior, a sub-rede A e na folha superior a sub-rede B'. Os parâmetros de <i>hopping</i> entre os respectivos pontos são mostrados. No presente modelo consideramos $\gamma_3 = \gamma_4 = 0$ . (b) Primeira zona de Brillouin. Figura adaptada da Ref. [5]. . . . .	42
Figura 13 – Dispersão eletrônica da BG. As energias foram traçadas como função de $ak_y$ para $ak_x = 2\pi/3$ . Os pontos $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ são destacados no gráfico. . . . .	44
Figura 14 – Esquema de uma bicamada de grafeno submetida a um campo elétrico uniforme induzido através de um capacitor. As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e o capacitor em cinza. . . . .	46
Figura 15 – Dispersão eletrônica da BG usando o modelo contínuo. As energias foram traçadas como função de $ak$ , onde $k$ é a distancia ao ponto $\mathbf{K}$ ou $\mathbf{K}'$ para (a) potencial externo nulo e (b) para $V = t/12$ . . . . .	47
Figura 16 – (a) Níveis de Landau próximos do ponto $\mathbf{K}$ como função do campo magnético aplicado perpendicular a bicamada de grafeno (a) na ausência de um potencial externo e (b) na presença de um potencial externo uniforme ( $V = 50$ meV) destacado por uma linha tracejada. . . . .	49
Figura 17 – (a) Intensidade fotoeletrônica como função da energia e do momento entorno do ponto $\mathbf{K}$ . As linhas sólidas marcam o máximo de intensidade. (b) Esboço da <i>buffer layer</i> que induz potenciais não equivalentes sobre as sub-redes A (azul) e B (vermelho). Figura adaptada da Ref. [6]. . . . .	50
Figura 18 – Valores de <i>gap</i> calculados pela DFT para três configurações do grafeno sobre o substrato de h-BN a, b, e c como função da distância entre as camadas, onde os círculos pretos, azuis e vermelhos são, respectivamente, átomos de Carbono, Boro e Nitrogênio. A separação de equilíbrio é indicada pelas setas. Figura adaptada da Ref. [7]. . . . .	51

Figura 19 – (a) Perfil do potencial $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{r})$ no grafeno induzido pelo substrato de h-BN. (b) Esboço da folha de grafeno sobre um substrato de h-BN com uma linha de defeito na posição $x = 0$ responsável pelo confinamento no grafeno. Figura adaptada da Ref. [8]. . . . .	52
Figura 20 – (a) Dispersão eletrônica do grafeno sobre um substrato de h-BN com uma linha de defeito. <i>inset</i> : velocidade para os estados no vale $\mathbf{K}$ (pontilhado azul) e no vale $\mathbf{K}'$ (pontilhado vermelho) e para o caso sem defeito (linha sólida preta). (b) e (c) autofunções nos vales $\mathbf{K}$ e $\mathbf{K}'$ , respectivamente. Figura adaptada da Ref. [8]. . . . .	53
Figura 21 – (a) Esboço do substrato de h-BN com uma linha de defeito circular de raio $R$ responsável pelo confinamento anelar no grafeno. (b) Perfil do potencial no grafeno induzido pelo substrato de h-BN. . . . .	53
Figura 22 – Níveis de energia como função do raio $R$ da linha de defeito circular como mostrada na Figura 21. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é $\Delta_0 = 200$ meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale $\mathbf{K}$ . A região cinza corresponde um contínuo de energias. Os pontos são os resultados numéricos obtidos através do modelo <i>tight-binding</i> . . . . .	58
Figura 23 – Níveis de energia como função da intensidade do termo de massa induzido $\Delta_0$ para o raio da linha de defeito circular $R = 20$ nm. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale $\mathbf{K}$ . A região cinza corresponde um contínuo de energias. Os pontos são os resultados numéricos obtidos através do modelo <i>tight-binding</i> . . . . .	59
Figura 24 – Níveis de energia como função do raio $R$ da linha de defeito circular sobre a influência de campo magnético perpendicular $B_z = 1$ T. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é $\Delta_0 = 200$ meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale $\mathbf{K}$ . A região cinza não mais corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau. . . . .	62
Figura 25 – Níveis de energia como função da intensidade do termo de massa induzido $\Delta_0$ para o raio da linha de defeito circular de raio $R = 20$ nm e sobre a influência de campo magnético perpendicular $B_z = 1$ T. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale $\mathbf{K}$ . A região cinza não mais corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau. . . . .	63

Figura 26 – Níveis de energia para os vales $K$ (linha sólidas) e $K'$ (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo $B_z$ para raio $R = 20$ nm. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é $\Delta_0 = 200$ meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo). A linha sólida verde corresponde ao estado fundamental para elétrons. A região cinza não corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau semelhantes aos mostrados na Figura 9. . . . .	64
Figura 27 – Densidade de corrente angular para os vales $\mathbf{K}$ (linha sólidas) e $\mathbf{K}'$ (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo $B_z$ para raio $R = 20$ nm. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é $\Delta_0 = 200$ meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo). A linha sólida verde corresponde a densidade de corrente angular do estado fundamental para elétrons. . . . .	65
Figura 28 – Níveis de energia obtidos pelo modelo <i>tight-binding</i> para um anel elíptico como função a excentricidade, $\xi$ , variando a excentricidade de zero (círculo de raio $R = 20$ nm) até 0.99 mantendo o perímetro da elipse constante. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é $\Delta_0 = 200$ meV. <i>inset</i> Forma da elipse para $\xi = 0$ e $\xi = 0.9$ . . . . .	66
Figura 29 – Níveis de energia obtidos pelo modelo <i>tight-binding</i> para uma elipse com excentricidade, $\xi = 0.9$ , deformada do círculo de raio $R = 20$ nm mantendo o perímetro constante. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é $\Delta_0 = 200$ meV. <i>inset</i> Densidade de probabilidade para o nível de energia indicada pela seta. . . . .	67
Figura 30 – Esquema de um potencial <i>kink</i> induzido em uma BG através de dois capacitores. As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e os capacitores em cinza. Em linha pontilhada mostra um esboço dos estados confinado na direção perpendicular a direção em que há a troca de sinal. Figura adaptada da Ref. [9]. . . . .	69
Figura 31 – Espectro de energia como função do momento na direção $y$ . O estado é confinado espacialmente na direção $x$ . (a) Espectro obtido para um potencial <i>kink</i> abrupto (linha pontilhada) e obtido com um potencial <i>kink</i> suave proporcional a $V \tanh(x/l)$ para $l = 0,5$ (linha sólida). (b) Espectro para um potencial <i>kink</i> abrupto e um <i>antikink</i> (oposto do potencial <i>kink</i> ). (c) Mesmo que em (a) para $l = 4$ , o qual torna a troca de sinal mais lenta. (d) Espectro de um confinamento convencional (não topológico). Figura adaptada da Ref. [9]. . . . .	69

Figura 32 – Espectro de energia de um <i>kink</i> linear como função do campo magnético para (a) $k'_y = 0$ e (b) $k'_y = 0.15$ , onde $k'_y = k_y \hbar v_F / t_{\perp}$ . Os níveis em azul correspondem aos níveis confinado no “kink”, enquanto que os vermelho aos níveis de Landau. Figura adaptada da Ref. [10]. . . . .	70
Figura 33 – Esquema de um anel quântico eletrostático em um BG. Na região do disco, devido a um capacitor, atravessa um campo elétrico uniforme e perpendicular as camadas, o qual induz um potencial de $+V$ (azul) no disco da camada superior e $-V$ (vermelho) no disco da camada inferior. Na região fora do disco, devido a um segundo capacitor, um campo elétrico oposto ao primeiro induz um potencial de $-V$ (vermelho) na região complementar do disco da camada superior e $+V$ (azul) na respectiva região da camada inferior. . . . .	71
Figura 34 – Gráfico do potencial $U_1$ (em preto) e $U_2$ (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico em uma bicamada de grafeno. . . . .	72
Figura 35 – Ilustração dos intervalos, onde os autovalores de $\hat{p}$ são complexos. A Região I corresponde a área pintada de preto abaixo do eixo $\epsilon = 0$ ; as Regiões II, III e IV às áreas pitadas, respectivamente, de azul, verde e vermelho e Região IV à área pintada de preto acima do eixo $\epsilon = 0$ . . . . .	80
Figura 36 – Níveis de energia com relação ao raio do anel nas proximidades do ponto $K$ para $B_z = 1$ T e $V = 200$ meV. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo) e estão na Região III. A região em cinza (Região I e V) corresponde aos níveis de Landau que, nesse caso, por serem muito densos foi preferido não mostrá-los. . . . .	81
Figura 37 – Níveis de energia com relação a intensidade da ddp aplicada, $V$ , nas proximidades do ponto $K$ para $B_z = 1$ T e $R = 20$ nm. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo). As regiões que apresentam um alta densidade de energia correspondem aos níveis de Landau nas Regiões I e V. Onde os níveis de energia são menos densos corresponde a Região III. . . . .	82
Figura 38 – Níveis de energia com relação a intensidade do campo magnético, $B_z$ , nas proximidades do ponto $K$ para $R = 20$ nm e $V = 200$ meV. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, $m$ , negativo (positivo, nulo). As regiões que apresentam um alta densidade de energia correspondem aos níveis de Landau nas Regiões I e V. Onde os níveis de energia são menos densos corresponde a Região III. . . . .	83



<p>Figura 39 – O mesmo da Figura 38, porém incluindo os níveis no vale <math>K'</math> para energias na Região III traçados como pontos coloridos. A linha sólida verde corresponde ao estado fundamental para elétrons. . . . .</p>	83
<p>Figura 40 – Densidade de corrente angular para os vales <math>K</math> (linha sólidas) e <math>K'</math> (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo <math>B_z</math> para <math>R = 20</math> nm e <math>V = 200</math> meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular, <math>m</math>, negativo (positivo, nulo). A linha sólida verde corresponde a densidade de corrente angular do estado fundamental para elétrons. . . . .</p>	84

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>19</b>
<b>1.1</b>	<b>Grafeno</b>	<b>20</b>
<b>1.2</b>	<b>Bicamada de Grafeno</b>	<b>23</b>
<b>1.3</b>	<b>Fabricação de folhas de grafeno</b>	<b>24</b>
<b>1.4</b>	<b>Anéis quânticos</b>	<b>25</b>
<b>1.5</b>	<b>Estrutura da tese</b>	<b>26</b>
<b>2</b>	<b>MODELO TEÓRICO</b>	<b>28</b>
<b>2.1</b>	<b>Modelo Tight-Binding no Grafeno</b>	<b>28</b>
<b>2.2</b>	<b>Modelo Contínuo no Grafeno</b>	<b>31</b>
2.2.1	Modificação do Hamiltoniano Tight-Binding	31
2.2.2	Dispersão Eletrônica do Grafeno	32
2.2.3	Hamiltoniano do Modelo Contínuo	32
2.2.4	Propriedades do Operador $\pi$	33
2.2.5	Autofunções do operador $\hat{p}^2$	34
2.2.5.1	Ausência de Campo Magnético	34
2.2.5.2	Presença de Campo Magnético Perpendicular Uniforme	36
2.2.6	Equação de Dirac	38
2.2.7	Termo de Massa	38
2.2.8	Níveis de Landau	39
<b>2.3</b>	<b>Modelo Tight-Binding para a Bicamada de Grafeno</b>	<b>40</b>
<b>2.4</b>	<b>Modelo Contínuo para a Bicamada de Grafeno</b>	<b>42</b>
2.4.1	Modificação do Hamiltoniano Tight-Binding	42
2.4.2	Dispersão Eletrônica da Bicamada de Grafeno	44
2.4.3	Hamiltoniano do Modelo Contínuo	44
2.4.4	Diferença de Potencial Uniforme	45
2.4.5	Níveis de Landau	47
<b>3</b>	<b>ANÉIS QUÂNTICOS EM GRAFENO INDUZIDOS PELO SUBSTRATO</b>	<b>50</b>
<b>3.1</b>	<b>Massa Induzida pelo Substrato</b>	<b>50</b>
<b>3.2</b>	<b>Confinamento Topológico em uma Linha de Defeito</b>	<b>51</b>
<b>3.3</b>	<b>Linha de Defeito Circular</b>	<b>53</b>
3.3.1	Solução Geral da Equação Separada	54
3.3.1.1	Componente $\phi_A$	54
3.3.1.2	Componente $\phi_B$	55
3.3.2	Solução do Anel Quântico	55

3.3.3	Resultados e Discussões . . . . .	57
<b>3.4</b>	<b>Campo Magnético Perpendicular a Linha de Defeito Circular . . . . .</b>	<b>59</b>
3.4.1	Solução Geral da Equação Separada . . . . .	59
3.4.1.1	Componente $\phi_A$ . . . . .	60
3.4.1.2	Componente $\phi_B$ . . . . .	60
3.4.2	Solução do Anel Quântico . . . . .	61
3.4.3	Resultados e Discussão . . . . .	62
<b>3.5</b>	<b>Anéis Elípticos . . . . .</b>	<b>64</b>
<b>4</b>	<b>CONFINAMENTO TOPOLÓGICO EM BICAMADA DE GRAFENO . . . . .</b>	<b>68</b>
<b>4.1</b>	<b>Confinamento Topológico em Bicamada de Grafeno . . . . .</b>	<b>68</b>
<b>4.2</b>	<b>Anel Quântico Topológico sobre um Campo Magnético . . . . .</b>	<b>71</b>
4.2.1	Solução Geral da Equação Separada . . . . .	73
4.2.1.1	Componente $\phi_A$ . . . . .	73
4.2.1.2	Componente $\phi_B$ . . . . .	73
4.2.1.3	Componente $\phi_{B'}$ . . . . .	74
4.2.1.4	Componente $\phi_{A'}$ . . . . .	74
4.2.1.5	Soluções Reais . . . . .	75
<b>4.3</b>	<b>Soluções do Anel Quântico Topológico . . . . .</b>	<b>78</b>
<b>4.4</b>	<b>Resultados e Discussões . . . . .</b>	<b>79</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO . . . . .</b>	<b>85</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>87</b>

# 1 Introdução

É um fato bem conhecido que o carbono é uma das matérias-primas para a vida e é base para toda a química orgânica – o seu pequeno raio atômico permite-lhe formar grandes cadeias com a complexidade necessária para gerar a vida como a conhecemos. Porém, nas últimas décadas, uma nova promessa surgiu a partir da descoberta de novas formas alotrópicas do carbono. Além da grafite e do diamante observou-se inúmeras estruturas baseadas em carbono que exibem propriedades físicas singulares possibilitando um vasto número de aplicações tecnológicas. Essas propriedades físicas são, em grande parte, devido à dimensionalidade efetiva dessas estruturas as quais podem ser caracterizadas como estruturas desde dimensionalidade zero (0D), até dimensionalidade três (3D). Tal diversidade, por sua vez, decorre da flexibilidade das ligações químicas em sistemas baseados em carbono <sup>5</sup>.

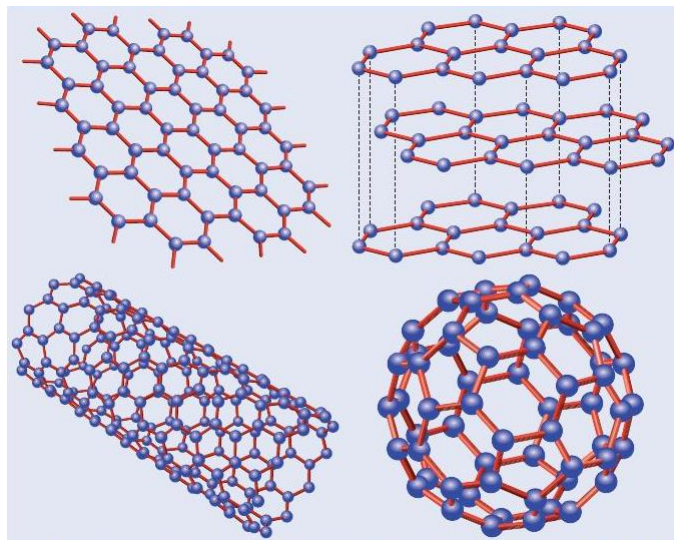


Figura 1 – Formas alotrópicas do carbono. No canto superior esquerdo, uma folha de grafeno; no sentido horário tem-se grafite (múltiplas folhas de grafeno), fulereno e nanotubo de carbono.

O interesse no estudo das formas alotrópicas do carbono recebeu um grande impulso a partir da década de 1980, quando os fulerenos foram descobertos e fabricados <sup>11</sup>. O componente mais famoso dessa família é o  $C_{60}$ , uma molécula formada por 60 átomos de carbono em uma estrutura semelhante à de uma bola de futebol (ver Figura 1). Do ponto de vista físico, os fulerenos podem ser descritos como estruturas efetivamente 0D e portanto possuem estados com níveis de energia discretos. A química dos fulerenos continua uma área bastante ativa, por exemplo, possíveis aplicações em nanotecnologia e nanotribologia\* têm sido consideradas <sup>12</sup>. Em 1996 H. W. Kroto, R. E. Curl e R. E. Smalley foram agraciados com Prêmio Nobel de

\* Ramo da tribologia que estuda fenômenos de fricção em escala nanométrica.

Química pela descoberta dos fulerenos. Na década 1990, observou-se a existência de estruturas tubulares constituídas apenas de carbono, chamadas de nanotubos de carbono <sup>13</sup>. Nanotubos de carbonos, estruturas efetivamente com dimensionalidade um (1D), são dotados de propriedades excepcionais, por exemplo, dependendo da disposição dos átomos de carbono, podem ser metais ou semicondutores. Suas propriedades eletrônicas, mecânicas e de condução térmica têm atraído a atenção dos pesquisadores para possíveis aplicações em microeletrônica e em engenharia <sup>14</sup>. Finalmente em 2004 isolou-se a que talvez seja a mais promissora das estruturas aqui citadas: o grafeno <sup>15</sup>. O grafeno é constituído por átomos de carbono dispostos em uma rede planar - portanto uma estrutura efetivamente com dimensionalidade dois (2D), do tipo favo-de-mel formada por hexágonos justapostos, onde cada átomo ocupa um vértice do hexágono. Andre Geim e Konstantin Novoselov em colaboração com pesquisadores da Universidade de Manchester e do Institute for Microelectronics Technology em Chernogolovka, Rússia, foram os primeiros a isolar o grafeno em laboratório e foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física de 2010 por “experiências inovadoras quanto ao material bidimensional grafeno”.

## 1.1 Grafeno

Através do grafeno podemos entender as propriedades eletrônicas de outras formas alotrópicas do carbono, por isso, o grafeno já vêm sido estudado teoricamente desde 1946. A grafite - uma estrutura 3D - nada mais é do que várias folhas de grafeno ligadas entre si por fracas ligações de Van-der-Waals. O nanotubo de carbono é tratado teoricamente como uma folha de grafeno enrolada e os fulerenos podem ser obtidos adicionando-se pentágonos à estrutura do grafeno gerando uma curvatura positiva na estrutura. Foi P. R. Wallace quem primeiro escreveu a estrutura de banda do grafeno como um ponto de partida para um estudo da grafite <sup>16</sup>, um importante material para reatores nucleares na era pós Segunda Guerra Mundial.

Embora o grafeno seja estudado teoricamente há mais de 60 anos, apenas em 2004 é que ele foi isolado em laboratório! Isso ocorreu, em primeiro lugar, porque os físicos, em geral, não acreditavam ser possível obter um cristal bidimensional estável. Em segundo lugar, não existiam ferramentas experimentais para se procurar um cristal da espessura de um átomo dentre os detritos de grafite cobrindo áreas macroscópicas. O grafeno apenas pôde ser observado através do fenômeno de interferência da luz visível (ver seção 1.3).

O carbono possui seis elétrons e, quando livre, apenas dois elétrons estão desemparelhados tornando-o um átomo bivalente ( $1s^2 2s^2 2p^2$ ). Porém, no grafeno (assim como em muitos outros compostos de carbono), um dos seus 2s elétrons troca para um orbital 2p não ocupado pelos outros dois elétrons, tornando-o, portanto, quadrivalente. Tal movimento é energeticamente desfavorável, pois, os orbitais 2p são mais energéticos que o orbital 2s, porém, é justificado pelo aumento na estabilidade das ligações químicas efetuadas <sup>17</sup>. Os quatro elétrons de valência são responsáveis pelas ligações inter-átomos. No grafeno, três desses elétrons ocupam orbitais

híbridos  $sp^2$  e participam de ligações  $\sigma$  no plano do grafeno com outros três carbonos (os primeiros vizinhos) os quais se ligam formando um ângulo de  $120^\circ$  entre si (por isso a rede hexagonal). Essas ligações são relativamente fortes, o que garante a estabilidade do grafeno mantendo os elétrons confinados na região da ligação. O quarto elétron ocupa o orbital  $2p_z$  que possui como plano nodal o plano das ligações  $\sigma$ , logo, pode ser tratado como independente dos demais elétrons de valência<sup>5</sup>. Esses elétrons quase livres (um por átomo) dão origem a ligações  $\pi$  fracas, portanto são chamados de elétrons  $\pi$  e são os principais responsáveis pelas propriedades de transporte no grafeno<sup>18</sup>.

Boa parte das propriedades peculiares do grafeno pode ser explicada através de sua estrutura de banda. A estrutura de banda do grafeno obtido através do Hamiltoniano *tight-binding* considerando apenas transições entre primeiros vizinhos, é dado por<sup>16</sup>:

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

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

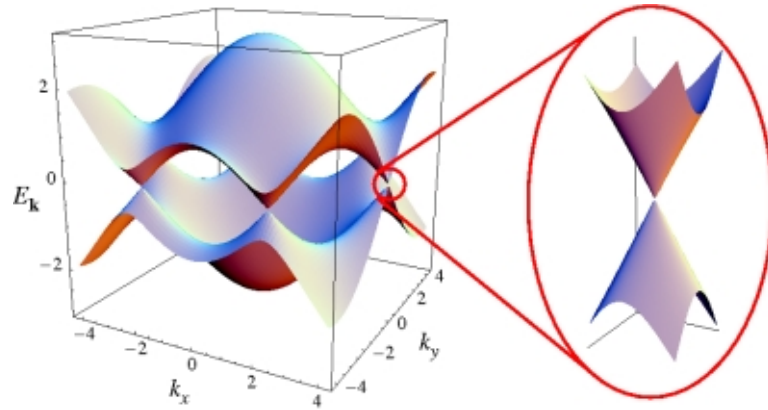


Figura 2 – A esquerda, dispersão do grafeno. A direita, dispersão aproximadamente linear próximo do ponto de Dirac.

Dos pontos em que  $E = 0$  (ver Figura 2) apenas dois não são equivalentes<sup>†</sup>, chamados de pontos de Dirac. Suas posições no espaço recíproco são

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

Para valores de energia próximo de zero, isto é, para valores de  $\mathbf{k}$  próximos de  $\mathbf{K}$  ou  $\mathbf{K}'$ , a dispersão é aproximadamente linear semelhante à dispersão obtida para um férmion de massa zero a partir da equação de Dirac. De fato, os portadores de carga próximo dos pontos de Dirac comportam-se como férmions de Dirac sem massa, exceto pelo fato que eles se movem com velocidade  $v_F$  trezentas vezes menor que a da luz<sup>5</sup>. No grafeno neutro o nível de Fermi

<sup>†</sup> Isto é, pertencem a primeira zona de Brillouin.

cruza exatamente os pontos de Dirac, o que significa que para energias próximas ao nível de Fermi os portadores exibem tal comportamento pseudo-relativístico. A priori isso possibilita que experimentos relativístico sejam feitos em uma escala de energia bem menor, porém a aplicabilidade do grafeno vai muito além disso. Fermions de Dirac comportam-se completamente diferente quando comparados a elétrons ordinários conduzindo assim a novos fenômenos físicos.

Quando sujeitos a campos magnéticos, férmions de Dirac exibem um efeito Hall quântico (EHQ) anômalo, sendo este qualitativamente diferente do EHQ observado em dispositivos a base de semicondutores. O EHQ descreve a quantização da condutividade Hall  $\sigma_{xy}$ , condutividade medida perpendicular à corrente, em platôs de valores inteiros de  $4e^2/h$ . No entanto, no grafeno, os platôs são deslocados de  $1/2$  do valor esperado, já que  $\sigma_{xy} = \pm 4e^2/h(N + 1/2)$  onde  $N$  é o nível de Landau <sup>1</sup>. Esse comportamento é explicado pela presença de um nível de Landau em  $N = 0$  no espectro de energia  $E = \pm\sqrt{2e\hbar BN}$  do grafeno em um campo magnético  $B$ , onde  $E$  é positivo para elétrons e negativo para buracos. A Figura 3 mostra a condutividade Hall  $\sigma_{xy}$  e a resistividade longitudinal  $\rho_{xx}$  como função da concentração dos portadores de carga para uma folha de grafeno sujeita a um campo magnético  $B = 14$  T e temperatura de 4 K. Por causa da grande energia de ciclotron exibidas por elétrons “relativísticos”, o EHQ no grafeno pode ser observado em temperatura ambiente, mesmo que sendo necessário campos magnéticos elevados.

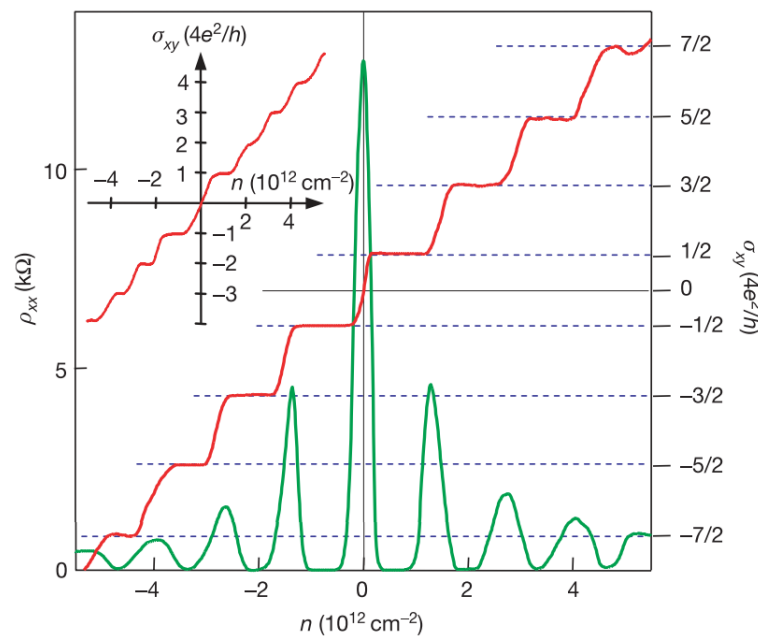


Figura 3 – Condutividade Hall  $\sigma_{xy}$  (vermelho) e resistividade longitudinal  $\rho_{xx}$  (verde) no grafeno a temperatura de 4 K e campo magnético de 14 T como função da concentração dos portadores de carga. (Inserção)  $\sigma_{xy}$  para uma bicamada de grafeno, onde a usual quantização ocorre em valores inteiros de  $4e^2/h$ . Figura adaptada da Ref. [1].

Outra característica dos férmions de Dirac é sua insensibilidade a potenciais eletrostáticos externos. Isso é devido ao chamado paradoxo de Klein<sup>19, 20</sup>: férmions de Dirac podem ser trans-

mitidos com probabilidade unitária através de uma região classicamente proibida. No grafeno potenciais eletrostáticos podem ser facilmente gerados devido a desordens como ondulações na superfície, presença de impurezas ionizadas no substrato ou mesmo adátomos ou moléculas adsorvidos. Isso significa que os portadores de carga no grafeno são praticamente insensíveis a desordem e são, sob certas circunstâncias, imunes a efeitos de localização observados em elétrons ordinários<sup>5</sup>. Medidas nesse material revelam uma alta mobilidade mesmo em temperatura ambiente. Materiais de largo emprego na indústria de semicondutores, como silício (Si) e o arseneto de gálio (GaAs), têm mobilidade à temperatura ambiente aproximadamente 130 e 25 vezes menores, respectivamente, que a do grafeno. Isso torna o grafeno um material muito promissor para a construção de dispositivos eletrônicos.

O leque das propriedades e das aplicações do grafeno é extenso e aqui apenas citamos superficialmente algumas (para mais detalhes ver Ref. [5]). Devido a isso existe hoje um grande ânimo no estudo desse material.

## 1.2 Bicamada de Grafeno

Não só a monocamada de grafeno apresenta extraordinárias características, multicamadas de grafeno, que consistem de poucas camadas de grafenos acopladas por ligações de Van-der-Waals, apresentam novas e interessantes propriedades não observadas em monocamadas. Em particular, a bicamada de grafeno (BG) exibe um espectro aproximadamente parabólico, ainda que sem *gap* (banda proibida), nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ . Isso é uma consequência da interação inter-camadas e das simetrias do sistema (ver Figura 4).

Estudos recentes mostraram que o espectro da BG é fortemente modificado por dopagem química ou pela aplicação de um campo elétrico externo de forma que o espectro adquire um *gap* devido à quebra de simetria de inversão das camadas. Tal *gap* pode ser controlado através do nível de dopagem ou da intensidade do campo elétrico aplicado<sup>21</sup>. Em uma monocamada também se observa o aparecimento de um *gap*, porém este surge devido a efeitos das bordas em nanofitas de carbono (grafeno com uma das dimensões do plano de átomos muito menor do que a outra). Porém tal *gap* depende fortemente do tipo da borda da nanofita, podendo ser *armchair* ou *zigzag*. A dificuldade no controle das desordens nas bordas de nanofitas torna difícil o controle de tal *gap*, fato que não é observado em uma BG submetida a um campo elétrico. Uma outra forma de surgir um *gap* no grafeno é através de uma interação apropriada com um substrato<sup>8, 22, 23</sup>, porém, também não pode ser facilmente controlado. Além disso, também foi mostrado que é possível obter confinamento eletrostático dos portadores de cargas na BG em dispositivos quânticos como pontos<sup>24, 25, 26, 27, 28, 29, 30</sup> e anéis<sup>31, 32</sup>. Recentemente foi mostrado que, além desses confinamentos convencionais há a possibilidade de um confinamento topológico, no qual o potencial de confinamento muda de sinal na região de confinamento<sup>9, 33, 34, 35</sup>. Os estados provenientes do confinamento topológico possuem similaridades com



estados de borda de isolantes topológicos<sup>36,37</sup>. Tais resultados mostram a possibilidade da fabricação de nanoestruturas eletrostáticas controláveis a base de bicamadas de grafeno.

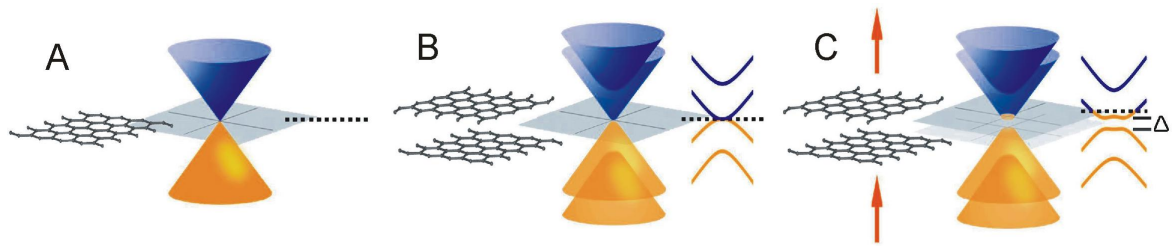


Figura 4 – a) Dispersão linear sem *gap* do grafeno para energias próximas do nível de Fermi. b) Dispersão aproximadamente parabólica sem *gap* para uma bicamada para energias próximas do nível de Fermi. c) Surgimento de um *gap*  $\Delta$  na dispersão da BG ao se aplicar um campo eletrostático perpendicular as camadas.

### 1.3 Fabricação de folhas de grafeno

Grande parte da pesquisa experimental acadêmica feita sobre grafeno utiliza amostras obtidas por meio de clivagem micromecânica do cristal de grafite, a mesma técnica utilizada para isolar a primeira folha de grafeno observada em laboratório<sup>15</sup>. Utiliza-se um cristal de grafite de alta qualidade, da qual se extrai planos de grafeno com uma fita adesiva. Posteriormente, fricciona-se a amostra de grafeno no substrato de óxido de silício. No substrato de silício os filmes de grafite ficam depositado em diferentes números de camadas de grafeno (ou seja, em diferentes espessuras) em uma macroregião. Filmes de grafite com espessura menor que 50 nm são transparentes à luz visível, porém sobre a superfície de silício eles são facilmente observados devido a um fenômeno de interferência. O substrato de  $\text{SiO}_2$  com uma espessura de 300 nm possui uma coloração violeta quando observado pelo microscópio óptico. Com o acréscimo da espessura proveniente dos filmes de grafite observa-se uma mudança na coloração para azul na região onde esses filmes se localizam. Quanto mais finos são os filmes mais tênue é a mudança na coloração, até que filmes com espessuras menores que 1,5 nm não são mais observados por esse método. Através da microscopia eletrônica de varredura de alta resolução, esses filmes podem ser claramente identificados. Então, nas regiões em que os filmes de grafite possuem espessura menor que 1,5 nm aplica-se microscopia eletrônica de varredura para localizar uma camada de grafeno isolada (ver Figura 5)<sup>2</sup>.

Apesar de simples e de ser largamente utilizado, o processo de fabricação de grafeno através da clivagem micromecânica é ineficiente e portanto inadequado para a produção em larga escala. Por essa razão, surgiu um grande interesse em novas formas de fabricação. Outra maneira de produzir grafeno é utilizando carbeto de silício ( $\text{SiC}$ ), esquentando-o a altas temperaturas. Nesse processo, átomos de silício são removidos do cristal e, na superfície deste último, são

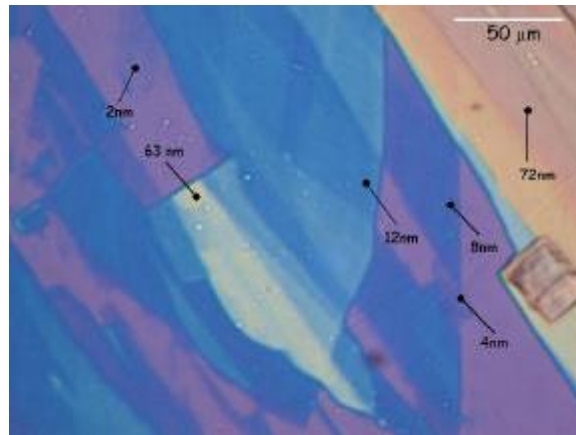


Figura 5 – Foto de filmes de grafite (azul) com várias espessuras,  $d$ , depositados em um substrato de  $\text{SiO}_2$  (violeta). Os valores indicados das espessuras foram medidos através de microscopia de força atômica. Observe que a área em que  $d \approx 2\text{nm}$  no canto superior esquerdo a mudança na coloração é extremamente tênue. Figura adaptada de Ref. [2].

criadas camadas de grafeno<sup>38</sup>. Esse procedimento abre a perspectiva de produção do grafeno em maior escala, fundamental para avanços tecnológicos e aplicações.

## 1.4 Anéis quânticos

Um importante campo da pesquisa em física do estado sólido é a investigação de sistemas de baixa dimensionalidade, nos quais o movimento do elétron está confinado de forma que o comprimento de onda é da ordem das dimensões da estrutura de confinamento. Novas propriedades surgem, diferentes daquelas observadas em elétrons que podem se mover livremente (*bulk*). Sistemas de baixa dimensionalidade capazes de confinar o elétron em uma, duas ou três dimensões vem sendo fabricados e extensivamente estudados nas últimas décadas. Tais estudos são estimulados pela vasta demanda por dispositivos eletrônicos mais eficientes, rápidos e miniaturizados.

Entre os sistemas de baixa dimensionalidade, estruturas duplamente ligadas em forma anelar (ver Figura 6) são chamados de anéis quânticos (AQs). Anéis quânticos são capazes de confinar nas três dimensões, porém, as autofunções do Hamiltoniano possuem um comportamento transitório entre um fio quântico (confinamento em duas dimensões) e um ponto quântico (confinamento em três dimensões). Sobre a influência de campo magnético AQ exibem correntes persistentes, que são correntes circulares que não exigem uma fonte de força externa<sup>39, 40, 41, 42</sup>. Além disso, devido a uma fase geométrica, pode-se estudar efeitos de interferência quântica como o efeito Aharonov-Bohm que se manifesta como uma oscilação no momento angular do estado fundamental<sup>43</sup>. Anéis quânticos foram estudados extensivamente tanto experimentalmente<sup>44, 45</sup> quanto teoricamente<sup>22, 46, 47, 48, 49, 50</sup> em grafeno.

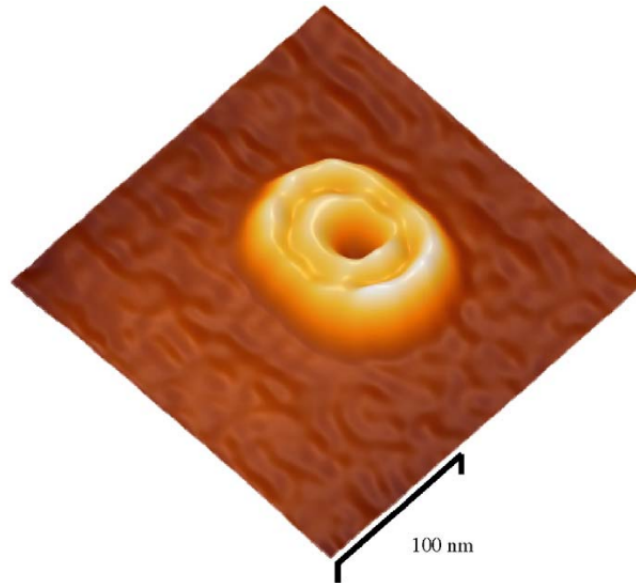


Figura 6 – Imagem de microscopia de força atômica de dois anéis quânticos concêntricos. Figura adaptada de Ref. [3].

Devidos as suas propriedades, espera-se a aplicação de anéis quânticos em um amplo número de sistemas, por exemplo, teoricamente, utilizando AQ, pode-se controlar entre reter ou liberar fótons individuais ajustando o campo elétrico e magnético sobre o anel. Emissão individual de fótons foi demonstrado ser possível em anéis de InAs/GaAs incorporados a uma rede cristalina fotônica. Aplicações de tais AQs como capacitores de luz são prospectivas no campo da computação fotônica. Além disso, possíveis aplicações de AQs como *spin qubits* para a computação quântica vem sendo cogitadas, pois, devido a alta estabilidade que o *spin* apresenta em tais estruturas, processos de relaxação e incoerência ocorrem em tempos relativamente altos possibilitando leitura e manipulação<sup>39</sup>.

## 1.5 Estrutura da tese

No próximo capítulo desenvolveremos os modelos utilizado para descrever os sistemas estudados nesta tese e os aplicaremos a sistemas triviais, mas, que permitem melhor compreensão dos sistemas baseados em mono- e bicamadas de grafeno. Partindo do Hamiltoniano *tight-binding* deduziremos o Hamiltoniano do modelo contínuo tanto para a monocamada quanto para a bicamada de grafeno. Em seguida mostraremos o espectro de energias próximos ao nível de fermi obtida pelo modelo contínuo na presença de campos elétricos e/ou magnéticos.

Nos Capítulos 3 e 4 estudaremos, respectivamente, anéis quânticos em monocamada de grafeno induzidos pelo substrato e anéis quânticos devido a um *kink* na diferença de potencial induzida sobre uma bicamada de grafeno. Em ambos os capítulos seguiremos a mesma estrutura, começaremos o capítulo expondo resultados da literatura que embasam tanto teoricamente

quanto experimental o sistema proposto, em seguida resolveremos a equação de autovalor do Hamiltoniano e por último mostraremos e discutiremos os resultados obtidos.

No Capítulo 5 concluímos a tese, recordando os sistemas estudados e seus principais resultados, assim como sugerimos possíveis aplicações.

## 2 Modelo Teórico

Neste capítulo será apresentado o modelo utilizado para calcular a estrutura de bandas ou as sub-bandas em monocamada ou bicamada de grafeno para energias próximas do nível de Fermi. Nesse intuito, será feito o uso do método *tight-binding* que consiste em calcular o espectro de energias considerando a função de onda como uma combinação linear dos orbitais atômicos de cada átomo da rede cristalina<sup>51</sup>.

O modelo *tight-binding*, geralmente, possui uma precisão inferior a modelos que utilizam primeiros princípios como o da teoria do funcional de densidade (DFT - abreviação em inglês)<sup>51</sup>. Porém para o grafeno o modelo *tight-binding* exibe uma boa descrição da estrutura de banda próximo ao nível de Fermi<sup>4</sup>. Observe na Figura 7, onde o modelo *tight-binding* e um modelo *ab initio* são comparados. Próximo ao ponto de Dirac **K** os modelos exibem uma excelente concordância.

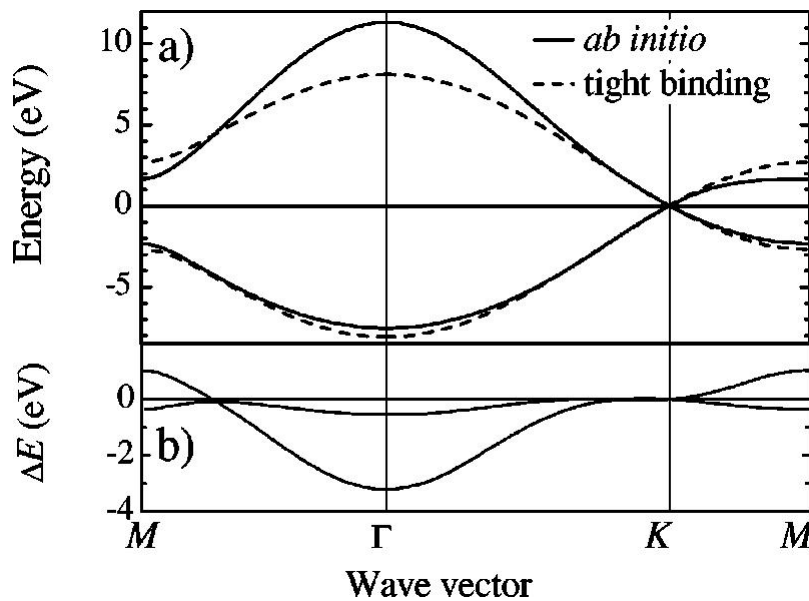


Figura 7 – Dispersão do grafeno obtida através dos modelos *tight-binding* e *ab initio*. a) A dispersão obtida através de cálculos *ab initio* é mostrada em linhas cheias, e a obtida pelo *tight-binding* é mostrada em linhas pontilhadas. A dispersão do *tight-binding* é calculada para os melhores valores dos parâmetros do *tight-binding* que interpolam a dispersão do *ab initio*. b) Diferença entre as dispersões. Figura adaptada da Ref. [4].

### 2.1 Modelo Tight-Binding no Grafeno

A rede cristalina do grafeno é uma rede planar hexagonal com os átomos de carbonos ocupando os vértices dos hexágonos. Essa não é uma rede de Bravais, porém, podemos obter

uma rede de Bravais triangular tomando como base dois átomos de carbono e cujos vetores primitivos são dados por,

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

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

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

Os átomos que ocupam os pontos da rede triangular formam a sub-rede triangular A, enquanto que os demais átomos constituem a sub-rede triangular B que é deslocada da primeira pelo vetor  $(a, 0)$ . Os primeiros vizinhos de um átomo na sub-rede B, são átomos na sub-rede A localizados relativamente nas posições  $\delta_1 = a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ ,  $\delta_2 = a(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$  e  $\delta_3 = a(-1, 0)$ , como pode-se ver na Figura 8.

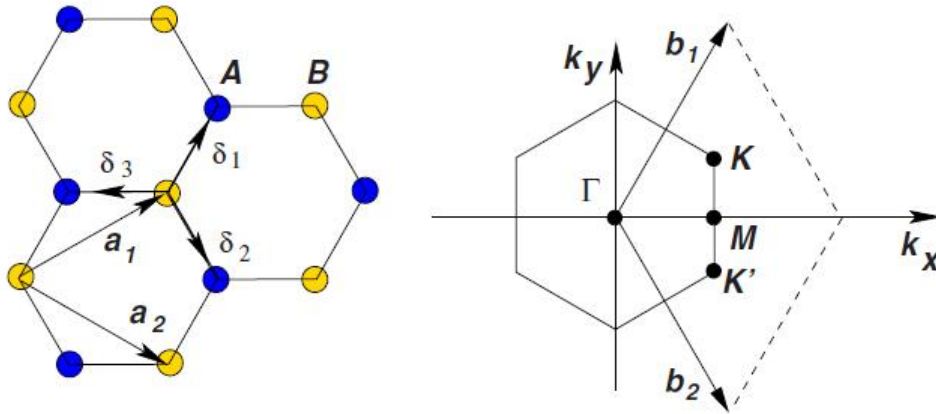


Figura 8 – Rede hexagonal do grafeno. Esquerda: a rede do grafeno representada como duas redes triangulares cujos os vetores primitivos são  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$ . Os vetores  $\delta_1$ ,  $\delta_2$  e  $\delta_3$  localizam os primeiros vizinhos para os átomos que pertencem à sub-rede B. Para os átomos que pertencem à sub-rede A os primeiros vizinhos estão nas posições  $-\delta_1$ ,  $-\delta_2$  e  $-\delta_3$ . Direita: zona de Brillouin. Figura adaptada da Ref. [5].

Consideraremos que apenas os elétrons  $\pi$  são responsáveis pelas propriedades eletrônicas do grafeno. Não levaremos em conta, explicitamente, interações elétron-elétron ou spin-órbita e assumimos  $N$  sítios da rede de Bravais. O Hamiltoniano *tight-binding* para um elétron  $\pi$  no grafeno escrito no formalismo de segunda quantização, incluindo apenas o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos, é escrito como <sup>52, 53, 54</sup>:

$$H = - \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} t (a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} + b_{\mathbf{R}_B}^\dagger a_{\mathbf{R}_A}) + \sum_{\mathbf{R}_A} U_{\mathbf{R}_A} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} + \sum_{\mathbf{R}_B} U_{\mathbf{R}_B} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger b_{\mathbf{R}_B}, \quad (2.3)$$

onde  $\mathbf{R}_A$  percorre todos os sítios da sub-rede A e  $\mathbf{R}_B$ , no primeiro somatório, apenas os primeiros vizinhos do sítio  $\mathbf{R}_A$  na sub-rede B, enquanto que no terceiro somatório, todos os sítios da sub-rede B;  $t$  ( $\approx 2,8$  eV) é o parâmetro de *hopping* entre os primeiros vizinhos; o operador  $a_{\mathbf{R}}$  ( $a_{\mathbf{R}}^\dagger$ ) destrói (cria) um elétron no estado  $2p_z$  (estado dos elétrons  $\pi$ ) no sítio  $\mathbf{R}$  da sub-rede A e uma análoga definição para os operadores  $b_{\mathbf{R}}$  e  $b_{\mathbf{R}}^\dagger$  é usada para a sub-rede B;  $U_{\mathbf{R}}$  é a energia potencial induzida sobre o sítio  $\mathbf{R}$ . Observe que o potencial induzido, em geral, não possui a periodicidade da rede, portanto, as autofunções do Hamiltoniano, em geral, não obedecem ao teorema de Bloch.

No modelo *tight-binding*, supomos que os autoestados da energia são combinações lineares dos estados orbitais  $2p_z$ ,

$$\Psi = \Psi_A + \Psi_B = \sum_{\mathbf{R}_A} c_{\mathbf{R}_A} |\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle + \sum_{\mathbf{R}_B} c_{\mathbf{R}_B} |\chi_{\mathbf{R}_B}\rangle, \quad (2.4)$$

onde  $|\chi_{\mathbf{R}}\rangle$  é o ket associado ao estado  $2p_z$  do carbono com o centro deslocado de  $\mathbf{R}$ , isto é,  $\langle \mathbf{r} | \chi_{\mathbf{R}} \rangle = \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ , sendo  $\chi(\mathbf{r})$  a função de onda do orbital. Os  $2N$  coeficientes  $c_{\mathbf{R}_A}, c_{\mathbf{R}_B}$  podem ser determinados obtendo  $2N$  equações substituindo  $\Psi$  na equação de autovalor do Hamiltoniano e então fazendo o produto interno com os  $2N$  estados atômicos,

$$[H] [\Psi] = E [S] [\Psi], \quad (2.5)$$

onde  $[H]_{i,j} = \langle \chi_{\mathbf{R}_i} | H | \chi_{\mathbf{R}_j} \rangle$ ,  $[S]_{i,j} = \langle \chi_{\mathbf{R}_i} | \chi_{\mathbf{R}_j} \rangle$ ,  $[\Psi]_i = C_{\mathbf{R}_i}$  e  $\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j$  percorrem todos os sítios das sub-redes.

Os elementos  $[S]_{i,j}$  são as integrais de superposição dos orbitais atômicos que sobre a aproximação *tight-binding* diremos que,

$$[S]_{i,j} = \int \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d^3x = \begin{cases} 1 & \text{se } i=j, \\ 0 & \text{qualquer outro caso,} \end{cases} \quad (2.6)$$

onde  $\mathbf{R}_i$  e  $\mathbf{R}_j$  são quaisquer vetores das sub-redes. A condição (2.6) estabelece que a superposição entre dois estados  $2p_z$  entre dois carbonos diferentes quaisquer do cristal sempre é nula. Essa condição restringe o modelo, porém, verifica-se que o método ainda é aplicável com satisfatoriedade pois as funções de onda do estado  $2p_z$  decrescem rapidamente quando distanciamos do núcleo. Através da equação (2.6) acha-se que  $[S] = I_{2N \times 2N}$  é a matriz identidade. Os elementos  $[H]_{i,j}$  são os *hopping* entre os sítios e portanto serão dados por,

$$[H]_{i,j} = \int \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) H \chi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d^3x = \begin{cases} U_i & \text{na diagonal principal,} \\ -t & \text{para primeiros vizinhos,} \\ 0 & \text{qualquer outro caso.} \end{cases} \quad (2.7)$$

No modelo *tight-binding* os autovalores são obtidos diagonalizando a matriz  $[H]$ . O efeito de um campo magnético externo pode ser introduzido no modelo *tight-binding* incluindo-se uma fase nos termos de *hopping* de acordo com a substituição de Peierls  $-t \rightarrow -t \exp\left(-i \frac{e}{\hbar} \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}\right)$ ,

onde  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor e a integral é feita no caminho que conecta os sítios  $i$  e  $j$ <sup>53, 54</sup>. Para um campo magnético uniforme  $\mathbf{B}$ , escolhamos o *gauge* simétrico definido por  $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{2}$ , portanto a fase de Peierls torna-se  $\exp\left(\frac{ieB_z a}{2\hbar}\left(\frac{y}{2} - \frac{x\sqrt{3}}{2}\right)\right)$  para *hopping* ao longo do vetor  $\delta_1$ ,  $\exp\left(\frac{ieB_z a}{2\hbar}\left(\frac{y}{2} + \frac{x\sqrt{3}}{2}\right)\right)$  para *hopping* ao longo do vetor  $\delta_2$  e  $\exp\left(-\frac{ieB_z ay}{2\hbar}\right)$  para *hopping* ao longo do vetor  $\delta_3$ .

## 2.2 Modelo Contínuo no Grafeno

### 2.2.1 Modificação do Hamiltoniano Tight-Binding

Observe que o sistema de equações (2.5) pode ser obtido, sob a condição (2.6), se reescrevermos a equação de autovalor do Hamiltoniano da forma,

$$\begin{bmatrix} \sum_{\mathbf{R}_A} U_{\mathbf{R}_A} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} & -t \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} \\ -t \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} & \sum_{\mathbf{R}_B} U_{\mathbf{R}_B} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix}, \quad (2.8)$$

onde  $\Psi_A = \sum_{\mathbf{R}_A} c_{\mathbf{R}_A} |\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle$  e  $\Psi_B = \sum_{\mathbf{R}_B} c_{\mathbf{R}_B} |\chi_{\mathbf{R}_B}\rangle$ . Observe que o operador  $a_{\mathbf{R}_A}^\dagger a_{\mathbf{R}_A}$  é o operador de projeção sobre o estado  $|\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle$ , isto é,  $a_{\mathbf{R}_A}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} = |\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle \langle \chi_{\mathbf{R}_A}|$ . Decorre de um resultado fundamental da mecânica quântica<sup>17</sup> que

$$\sum_{\mathbf{R}_A} U_{\mathbf{R}_A} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} = \sum_{\mathbf{R}_A} U_{\mathbf{R}_A} |\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle \langle \chi_{\mathbf{R}_A}| = U_A(\hat{\mathbf{r}}), \quad (2.9)$$

onde  $\hat{\mathbf{r}}$  é o operador posição e  $U_A(\mathbf{r})$  é a energia potencial sobre os átomos da sub-rede A. Observe que a última afirmação apenas é verdadeira se desprezarmos os termos fora da diagonal principal na matriz que representa  $U_A(\hat{\mathbf{r}})$  na base  $\{|\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle\}$ , porém, isso está implicitamente assumido na expressão do Hamiltoniano (2.3). De forma análoga, podemos mostrar que,

$$\sum_{\mathbf{R}_B} U_{\mathbf{R}_B} a_{\mathbf{R}_B}^\dagger a_{\mathbf{R}_B} = U_B(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.10)$$

onde  $U_B(\mathbf{r})$  é a energia potencial sobre os átomos da sub-rede B.

Supondo a rede cristalina do grafeno infinita, podemos reescrever o operador  $\sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B}$  como um operador de translação, se observarmos que

$$\left( \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} \right) |\chi_{\mathbf{R}_B}\rangle = |\chi_{\mathbf{R}_B + \delta_1}\rangle + |\chi_{\mathbf{R}_B + \delta_2}\rangle + |\chi_{\mathbf{R}_B + \delta_3}\rangle, \quad (2.11)$$

onde  $\delta_i$  são as posições dos primeiros vizinhos relativo ao carbono na posição  $\mathbf{R}_B$ . Utilizando o operador de translação espacial, podemos escrever que

$$\left( \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} \right) |\chi_{\mathbf{R}_B}\rangle = \left( e^{-\frac{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \delta_1}{\hbar}} + e^{-\frac{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \delta_2}{\hbar}} + e^{-\frac{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \delta_3}{\hbar}} \right) |\chi_{\mathbf{R}_B}\rangle, \quad (2.12)$$



onde  $\hat{\mathbf{p}}$  é o operador momento linear. Simplificando a expressão anterior, podemos escrever que

$$\left( \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} \right) |\chi_{\mathbf{R}_B}\rangle = g(\hat{\mathbf{p}}) |\chi_{\mathbf{R}_B}\rangle, \quad (2.13)$$

onde,

$$g(\hat{\mathbf{p}}) = e^{-\frac{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \delta_1}{\hbar}} + e^{-\frac{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \delta_2}{\hbar}} + e^{-\frac{i\hat{\mathbf{p}} \cdot \delta_3}{\hbar}} = e^{i\hat{p}_x a / \hbar} + 2e^{-i\hat{p}_x a / 2\hbar} \cos(\hat{p}_y \sqrt{3}a / 2\hbar). \quad (2.14)$$

Podemos obter uma fórmula análoga para o operador  $\sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger a_{\mathbf{R}_A}$ ,

$$\left( \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} \right) |\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle = \bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) |\chi_{\mathbf{R}_A}\rangle, \quad (2.15)$$

onde  $\bar{g}(\mathbf{p})$  é o complexo conjugado de  $g(\mathbf{p})$ . Então podemos reescrever a equação de autovalor do Hamiltoniano (2.8), como

$$\begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & -tg(\hat{\mathbf{p}}) \\ -t\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) & U_B(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix}. \quad (2.16)$$

Então supomos que  $\Psi_A$  e  $\Psi_B$  podem assumir qualquer forma e não somente uma combinação dos estados atômicos. Além disso, assumiremos que a dependência na coordenada  $z$ , perpendicular ao plano do grafeno, é a mesma nas funções  $\Psi_A$  e  $\Psi_B$  e portanto pode ser eliminada da equação (2.16).

## 2.2.2 Dispersão Eletrônica do Grafeno

A equação (2.16) pode facilmente ser resolvida para o caso onde  $U_A = U_B = 0$ . Nesse caso, podemos desacoplar o sistema e obtemos a equação,

$$t^2 |g(\hat{\mathbf{p}})|^2 \Psi_A = E^2 \Psi_A \quad (2.17)$$

cuja solução, são ondas livres  $\Psi_A = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ , e os autovalores são

$$E(\mathbf{k}) = \pm t |g(\hbar \mathbf{k})| = \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos(\sqrt{3}k_y a / 2) \cos(3k_x a / 2)}. \quad (2.18)$$

As duas soluções anteriores formam a banda de valência e a banda de condução do grafeno mostradas na Figura 2, onde  $E = 0$  é o nível de fermi. Observe que as bandas se tocam nos pontos  $\mathbf{K} = (2\pi/3a, 2\pi/3\sqrt{3}a)$  e  $\mathbf{K}' = (2\pi/3a, -2\pi/3\sqrt{3}a)$  e ainda que  $g(\hbar \mathbf{K}) = g(\hbar \mathbf{K}') = 0$ . Nas proximidades dos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  as bandas possuem um comportamento aproximadamente linear, formando dois cones chamados de vale  $\mathbf{K}$  e vale  $\mathbf{K}'$ .

## 2.2.3 Hamiltoniano do Modelo Contínuo

De forma geral, a solução da equação (2.16) torna-se complicada devido a complexidade do operador  $g(\hat{\mathbf{p}})$ . No modelo contínuo, se expande a função  $g(\hbar \mathbf{k})$  em torno dos pontos  $\mathbf{K}$

e  $\mathbf{K}'$  e se retém apenas os termos lineares, simplificando consideravelmente a equação (2.16). Expandindo  $g(\hbar\mathbf{k})$  obtém-se que

$$g(\hbar\mathbf{k}) \approx -\frac{3a}{2}(k_x - i\kappa k_y)e^{i\kappa\pi/6}, \quad (2.19)$$

onde  $\kappa = 1$  quando a expansão é feita no entorno do ponto  $\mathbf{K}$  e  $\kappa = -1$  quando a expansão é feita no entorno do ponto  $\mathbf{K}'$ . A equação de autovalor torna-se

$$\begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & \frac{3ta}{2\hbar}(\hat{p}_x - i\kappa\hat{p}_y)e^{i\kappa\pi/6} \\ \frac{3ta}{2\hbar}(\hat{p}_x + i\kappa\hat{p}_y)e^{-i\kappa\pi/6} & U_B(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{bmatrix}, \quad (2.20)$$

seja a velocidade de Fermi,  $v_F$ , dada por  $v_F = 3ta/2\hbar$ . Multiplicando a equação superior por  $e^{-i\kappa\pi/12}$  e a inferior por  $e^{i\kappa\pi/12}$ , obtemos que

$$\begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & v_F(\hat{p}_x - i\kappa\hat{p}_y) \\ v_F(\hat{p}_x + i\kappa\hat{p}_y) & U_B(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_A e^{-i\kappa\pi/12} \\ \Psi_B e^{i\kappa\pi/12} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \Psi_A e^{-i\kappa\pi/12} \\ \Psi_B e^{i\kappa\pi/12} \end{bmatrix}, \quad (2.21)$$

finalmente obtemos o Hamiltoniano segundo o modelo contínuo para o grafeno nas proximidades dos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ ,

$$H = \begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & \pi^\dagger \\ \pi & U_B(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

onde

$$\pi = v_F(\hat{p}_x + i\kappa\hat{p}_y), \quad (2.23)$$

o Hamiltoniano opera sobre um pseudospinor dado por,

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

onde  $\phi_A$  e  $\phi_B$  diferem das funções de onda associadas as sub-redes apenas por uma fase. O efeito de um campo magnético externo pode ser introduzido fazendo a usual substituição  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$ , onde  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  é o potencial vetor e  $q$  a carga da partícula (para o elétron  $q = -e$ ).

## 2.2.4 Propriedades do Operador $\pi$

Observe que em coordenadas retangulares, podemos escrever  $\pi$  e  $\pi^\dagger$  como

$$\pi = -i\hbar v_F(\partial_x + i\kappa\partial_y), \quad (2.25)$$

$$\pi^\dagger = -i\hbar v_F(\partial_x - i\kappa\partial_y), \quad (2.26)$$

já em coordenadas polares,

$$\pi = -i\hbar v_F e^{i\kappa\theta} (\partial_\rho + i\kappa\rho^{-1}\partial_\theta), \quad (2.27)$$

$$\pi^\dagger = -i\hbar v_F e^{-i\kappa\theta} (\partial_\rho - i\kappa\rho^{-1}\partial_\theta). \quad (2.28)$$

Pode-se mostrar que

$$\pi^\dagger \pi = v_F^2 \hat{\mathbf{p}}^2 = -v_F^2 \hbar^2 \nabla^2 \quad \text{e} \quad [\pi, \pi^\dagger] = 0. \quad (2.29)$$

Na presença de um campo magnético, devemos fazer a substituição  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}})$ , faremos isso cometendo um abuso de notação, diremos que

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla^2 - q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (2.30)$$

No caso de coordenadas retangulares, temos que

$$\pi = -i\hbar v_F (\partial_x + i\kappa \partial_y) + v_F (A_x + i\kappa A_y), \quad (2.31)$$

$$\pi^\dagger = -i\hbar v_F (\partial_x - i\kappa \partial_y) + v_F (A_x - i\kappa A_y), \quad (2.32)$$

enquanto que em coordenadas polares temos que

$$\pi = -i\hbar v_F e^{i\kappa\theta} (\partial_\rho + i\kappa \rho^{-1} \partial_\theta) + v_F e^{i\kappa\theta} (A_\rho + i\kappa A_\theta), \quad (2.33)$$

$$\pi^\dagger = -i\hbar v_F e^{-i\kappa\theta} (\partial_\rho - i\kappa \rho^{-1} \partial_\theta) + v_F e^{-i\kappa\theta} (A_\rho - i\kappa A_\theta). \quad (2.34)$$

Pode-se mostrar que

$$\pi \pi^\dagger = v_F^2 \hat{\mathbf{p}}^2 + \kappa v_F^2 \hbar q B_z, \quad (2.35)$$

$$\pi^\dagger \pi = v_F^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - \kappa v_F^2 \hbar q B_z, \quad (2.36)$$

$$[\pi, \pi^\dagger] = 2\kappa v_F^2 \hbar q B_z, \quad (2.37)$$

onde o operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$  pode ser escrito como

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2 + 2iq\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla + iq\hbar (\nabla \cdot \mathbf{A}) + q^2 \mathbf{A}^2. \quad (2.38)$$

## 2.2.5 Autofunções do operador $\hat{\mathbf{p}}^2$

As soluções dos sistemas que estudaremos nos próximos capítulos serão combinações dos autovetores do operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$ . Nessa seção desenvolveremos vários resultados que serão utilizados nos próximos capítulos. Desejamos achar as soluções da equação de autovalor

$$\hat{\mathbf{p}}^2 F = \hbar^2 \alpha F. \quad (2.39)$$

### 2.2.5.1 Ausência de Campo Magnético

Na ausência de campo magnético o operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$  é simplesmente um múltiplo do Laplaciano,  $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$ . Em coordenadas retangulares, os autovetores são as bem conhecidas ondas planas  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  cujos autovalores são  $\hbar^2 k^2$ . Precisaremos também conhecer os autovetores em coordenadas polares, isto é, desejamos resolver a equação (2.39)

$$-\nabla^2 F = \alpha F, \quad (2.40)$$

em coordenadas polares. Substituindo o Laplaciano em coordenadas polares obtemos que

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \theta^2} + \alpha F = 0. \quad (2.41)$$

Separando as variáveis a solução na variável  $\theta$  é  $e^{im\theta}$ , onde, devido a simetria,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Substituindo  $F(\rho, \theta)$  por  $G(\rho)e^{im\theta}$  obtemos que

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dG}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho} G + \alpha G = 0. \quad (2.42)$$

Para solucionar a equação na variável radial, primeiro faremos uma mudança na variável independente  $x = \sqrt{\alpha}\rho$  para obtemos equação de Bessel

$$\frac{d^2 G}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{dG}{dx} + \left( 1 - \frac{m^2}{x^2} \right) G = 0, \quad (2.43)$$

cujas as soluções são as Funções de Bessel do primeiro tipo  $J_m(x)$  e do segundo tipo  $Y_m(x)$ . Portanto as autofunções do operador  $\hat{p}^2$  com autovalor  $\hbar^2\alpha$  são,

$$G_m(\sqrt{\alpha}\rho)e^{im\theta} = J_m(\sqrt{\alpha}\rho)e^{im\theta} \quad (2.44)$$

$$H_m(\sqrt{\alpha}\rho)e^{im\theta} = Y_m(\sqrt{\alpha}\rho)e^{im\theta} \quad (2.45)$$

Se  $\alpha$  for negativo, ainda podemos achar soluções reais se ao invés de usarmos  $J_m(\sqrt{\alpha}\rho)$  e  $Y_m(\sqrt{\alpha}\rho)$  usarmos  $I_m(\sqrt{-\alpha}\rho)$  e  $K_m(\sqrt{-\alpha}\rho)$ , onde  $I_m(x)$  e  $K_m(x)$  são as funções de Bessel modificadas do primeiro e segundo tipo. Devemos conhecer o comportamento assintótico de cada autovetor para adequarmos as soluções. Pode-se mostrar que<sup>55</sup>

- $\rho \rightarrow 0$ :

$$J_m(\sqrt{\alpha}\rho) \rightarrow \frac{(\sqrt{\alpha}\rho)^m}{2^m m!}, \quad (2.46)$$

$$I_m(\sqrt{-\alpha}\rho) \rightarrow \frac{(\sqrt{-\alpha}\rho)^m}{2^m m!}, \quad (2.47)$$

$$Y_0(\sqrt{\alpha}\rho) \rightarrow \frac{1}{\pi} \ln(\sqrt{\alpha}\rho), \quad (2.48)$$

$$K_0(\sqrt{-\alpha}\rho) \rightarrow -\ln(\sqrt{-\alpha}\rho), \quad (2.49)$$

$$Y_m(\sqrt{\alpha}\rho) \rightarrow -\frac{(m-1)!2^m}{\pi(\sqrt{\alpha}\rho)^m}, \quad (m > 0) \quad (2.50)$$

$$K_m(\sqrt{-\alpha}\rho) \rightarrow \frac{(m-1)!2^{m-1}}{(\sqrt{-\alpha}\rho)^m}, \quad (m > 0) \quad (2.51)$$

- $\rho \rightarrow \infty$ :

$$J_m(\sqrt{\alpha}\rho) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi\sqrt{\alpha}\rho}} \cos(\sqrt{\alpha}\rho - m\pi/2 - \pi/4), \quad (2.52)$$

$$I_m(\sqrt{-\alpha}\rho) \rightarrow \frac{e^{\sqrt{-\alpha}\rho}}{\sqrt{2\pi\sqrt{-\alpha}\rho}} \left( 1 - \frac{4m^2 - 1}{8\sqrt{-\alpha}\rho} \right), \quad (2.53)$$

$$Y_m(\sqrt{\alpha}\rho) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi\sqrt{\alpha}\rho}} \operatorname{sen}(\sqrt{\alpha}\rho - m\pi/2 - \pi/4), \quad (2.54)$$

$$K_m(\sqrt{-\alpha}\rho) \rightarrow \frac{\pi}{\sqrt{2\sqrt{-\alpha}\rho}} e^{-\sqrt{-\alpha}\rho} \left(1 + \frac{4m^2 - 1}{8\sqrt{-\alpha}\rho}\right), \quad (2.55)$$

Observe que apesar de  $J_m(\sqrt{\alpha}\rho)$  e  $Y_m(\sqrt{\alpha}\rho)$  evanescerem quando  $\rho \rightarrow \infty$ , elas não são quadrado integráveis no plano, pois  $\rho|J_m(\sqrt{\alpha}\rho)|^2$  e  $\rho|Y_m(\sqrt{\alpha}\rho)|^2$  não evanescem. Já as funções  $I_m(\sqrt{-\alpha}\rho)$  e  $K_m(\sqrt{-\alpha}\rho)$  são quadrado integráveis no plano. Observe ainda que  $Y_m(\sqrt{\alpha}\rho)$  e  $K_m(\sqrt{-\alpha}\rho)$  divergem para  $\rho \rightarrow 0$ .

As funções de Bessel também obedecem as seguintes relações de recorrência

$$\mathcal{B}_{m+1}(x) = \mathcal{B}'_m(x) + mx^{-1}\mathcal{B}_m(x), \quad (2.56)$$

$$-\mathcal{L}_{m-1}(x) = \mathcal{L}'_m(x) - mx^{-1}\mathcal{L}_m(x), \quad (2.57)$$

onde  $\mathcal{B}_m$  denota  $J_m, Y_m, I_m, (-1)^m K_m$  e  $\mathcal{L}_m$  denota  $J_m, Y_m, (-1)^m I_m, K_m$ .

### 2.2.5.2 Presença de Campo Magnético Perpendicular Uniforme

Na presença de um campo magnético perpendicular uniforme,  $\mathbf{B} = B_z \hat{k}$ , podemos determinar  $\hat{\mathbf{p}}^2$  através da equação (2.30),

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}^2 &= (-i\hbar\partial_x + eA_x)^2 + (-i\hbar\partial_y + eA_y)^2 \\ &= -\hbar\nabla^2 - 2ie\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla - ie\hbar(\nabla \cdot \mathbf{A}) + e^2\mathbf{A}^2, \end{aligned} \quad (2.58)$$

no terceiro termo o operador  $\nabla$  opera apenas sobre  $\mathbf{A}$ . Resolveremos a equação de autovalor (2.39) em coordenadas polares, pois o sistema possui simetria axial, além disso, utilizaremos em toda a tese o *gauge* simétrico,

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2}B_z\rho\hat{\mathbf{e}}_\theta, \quad (2.59)$$

onde  $\hat{\mathbf{e}}_\theta$  é o vetor unitário tangencial. A equação de autovalor se torna

$$\nabla^2 F + \frac{ieB_z}{\hbar} \frac{\partial F}{\partial \theta} - \frac{e^2 B_z^2 \rho^2}{4\hbar^2} F + \alpha F = 0. \quad (2.60)$$

Fazendo  $F(\rho, \theta) = G(\rho)e^{im\theta}$  para separar as variáveis e devido a simetria  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ , substituindo na equação anterior, temos que

$$\frac{d^2 G}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{dG}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} G - \beta m G - \frac{\rho^2 \beta^2}{4} G + \alpha G = 0, \quad (2.61)$$

onde,

$$\beta = \frac{eB_z}{\hbar}. \quad (2.62)$$

Para solucionar a equação na variável radial, primeiro faremos uma mudança na variável independente,  $\rho$ ,

$$x = \frac{\rho^2 |\beta|}{2}, \quad (2.63)$$

e obtemos que

$$x \frac{d^2 G}{dx^2} + \frac{dG}{dx} + \left( \frac{\alpha}{2|\beta|} - \frac{m^2}{4x} - \operatorname{sgn}(\beta) \frac{m}{2} - \frac{x}{4} \right) G = 0. \quad (2.64)$$

Em seguida, muda-se a variável dependente  $G$  para

$$G(\rho) = e^{-x/2} x^{|m|/2} M(x), \quad (2.65)$$

e então obtemos a Equação Diferencial Hypergeométrica Confluente

$$x \frac{d^2 M}{dx^2} + (1 + |m| - x) \frac{dM}{dx} - \left( \frac{|m|}{2} + \operatorname{sgn}(\beta) \frac{m}{2} - \frac{\alpha}{2|\beta|} + \frac{1}{2} \right) M = 0, \quad (2.66)$$

cujas as soluções linearmente independentes são as Funções Hypergeométrica Confluente do primeiro tipo

$$M(x) = {}_1F_1(a, b, x), \quad (2.67)$$

e do segundo tipo

$$M(x) = U(a, b, x), \quad (2.68)$$

onde  $b = 1 + |m|$  e

$$a = \frac{|m|}{2} + \operatorname{sgn}(\beta) \frac{m}{2} - \frac{\alpha}{2|\beta|} + \frac{1}{2}. \quad (2.69)$$

Portanto os autovetores do operador  $\hat{p}^2$  com autovalor  $\hbar^2 \alpha$  são

$$G_m(\alpha, \rho) e^{im\theta} = e^{-x/2} x^{|m|/2} {}_1F_1 \left( \frac{|m|}{2} + \operatorname{sgn}(\beta) \frac{m}{2} - \frac{\alpha}{2|\beta|} + \frac{1}{2}, |m| + 1, x \right) e^{im\theta} \quad (2.70)$$

$$H_m(\alpha, \rho) e^{im\theta} = e^{-x/2} x^{|m|/2} U \left( \frac{|m|}{2} + \operatorname{sgn}(\beta) \frac{m}{2} - \frac{\alpha}{2|\beta|} + \frac{1}{2}, |m| + 1, x \right) e^{im\theta} \quad (2.71)$$

Devemos conhecer o comportamento assintótico de cada autovetor para adequarmos as soluções. Pode se mostrar que<sup>55</sup>

- $\rho \rightarrow 0$ :

$$G_m(\alpha, \rho) \rightarrow \frac{a}{b} e^{-x/2} x^{|m|/2+1}, \quad (2.72)$$

$$H_m(\alpha, \rho) \rightarrow \infty, \quad (2.73)$$

- $\rho \rightarrow \infty$ :

$$G_m(\alpha, \rho) \rightarrow \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^{x/2} x^{a-b+|m|/2}, \quad (2.74)$$

$$H_m(\alpha, \rho) \rightarrow e^{-x/2} x^{|m|/2-a}. \quad (2.75)$$

Observe que solução  $G_m(\alpha, \rho^2)$  é definida para  $\rho = 0$  e para  $\rho \rightarrow \infty$  diverge se  $a \neq -n$ ,  $n$  inteiro não negativo, caso contrário converge para zero. A solução  $H_m(\alpha, \rho^2)$  não é definida para  $\rho = 0$  e tende para zero para  $\rho \rightarrow \infty$ .

As funções Hypergeometricas Confluentes obedecem as seguintes relações que serão úteis no próximo capítulo,

$${}_1F_1'(a, b, x) = \frac{a}{b} {}_1F_1(a + 1, b + 1, x), \quad (2.76)$$

$$U'(a, b, x) = -aU(a + 1, b + 1, x). \quad (2.77)$$

## 2.2.6 Equação de Dirac

Quando  $U_A(\mathbf{r}) = U_B(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$ , podemos escrever o Hamiltoniano (2.22) da forma

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} + IU(\hat{\mathbf{r}}), \quad (2.78)$$

onde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  são as matrizes de Pauli e  $I$  a matriz identidade de ordem dois. Observe que esse é exatamente o Hamiltoniano de Dirac para uma partícula relativística sem massa cuja velocidade da luz é igual a velocidade de Fermi,  $v_F$ , se movendo sobre a influência do potencial  $U(\hat{\mathbf{r}})$ .

Para o caso onde o potencial é uniforme, isto é,  $U_A(\mathbf{r}) = U_B(\mathbf{r}) = U_0$ , podemos desacoplar o sistema de equações para  $\phi_A$  e obtemos que

$$\pi^\dagger \pi \phi_A - (E - U_0)^2 \phi_A = 0, \quad (2.79)$$

ou ainda

$$-v_F^2 \hbar^2 \nabla^2 \phi_A - (E - U_0)^2 \phi_A = 0. \quad (2.80)$$

essa equação é a mesma tanto para o vale  $\mathbf{K}$  ( $\kappa = 1$ ) quanto para o vale  $\mathbf{K}'$  ( $\kappa = -1$ ). Substituindo  $\phi_A$  por uma onda plana,  $\phi_A = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ , obtemos que

$$E = \pm v_F \hbar |k| + U_0. \quad (2.81)$$

A Figura 9a mostra a forma de  $E$  como função  $k$  para  $U_0 = 0$ , onde podemos ver que o espectro é um cone sem *gap* entre as bandas de valência e condução, assim como era no caso mais geral dado pela equação (2.18). Observe na Figura 9b que o único efeito do potencial é deslocar o espectro de energias.

## 2.2.7 Termo de Massa

Suponha que  $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$ , nesse caso a equação de Dirac passa a ter um termo de massa

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} + U(\hat{\mathbf{r}}) \sigma_z, \quad (2.82)$$

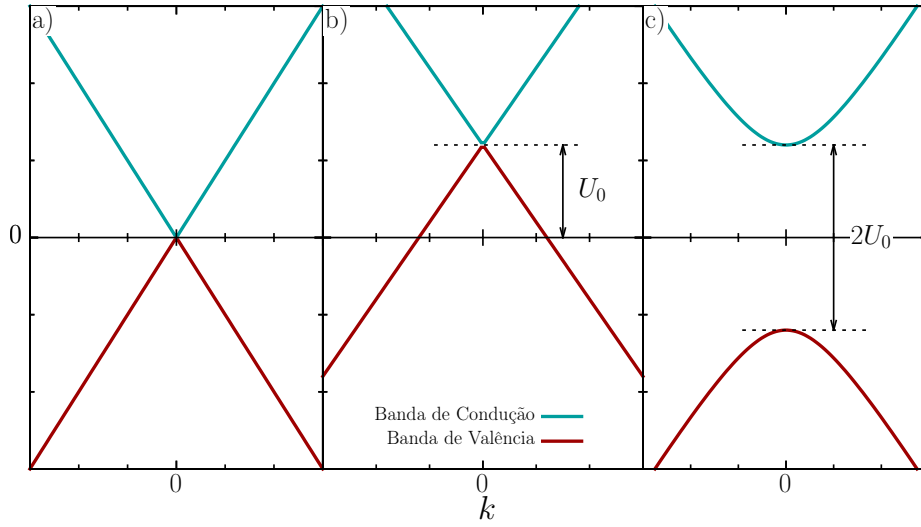


Figura 9 – Estrutura de banda do grafeno obtido pelo modelo contínuo para (a) potencial externo nulo, (b) um potencial externo uniforme  $U_0$  e (c) um termo de massa  $U_0$ .

onde a “massa” do elétron seria dada por  $m = U(\hat{\mathbf{r}})/v_F^2$ . No próximo capítulo discutiremos como um potencial como esse pode ser obtido.

Se o potencial for uniforme, isto é,  $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = U_0$ , irá abrir um *gap* entre as bandas de valência e condução do grafeno. De fato, desacoplando o sistema obtemos que

$$\pi^\dagger \pi \phi_A - (E^2 - U_0^2) \phi_A = 0, \quad (2.83)$$

ou, usando (2.29),

$$-v_F^2 \hbar^2 \nabla^2 \phi_A - (E^2 - U_0^2) \phi_A = 0. \quad (2.84)$$

Essa equação é a mesma tanto para o vale  $\mathbf{K}$  ( $\kappa = 1$ ) quanto para o vale  $\mathbf{K}'$  ( $\kappa = -1$ ). Substituindo  $\phi_A$  por uma onda plana, isto é,  $\phi_A = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ , obtemos que

$$E = \pm \sqrt{v_F^2 \hbar^2 k^2 + U_0^2}. \quad (2.85)$$

A Figura 9c mostra a forma de  $E$  como função  $k$ , onde podemos ver que o espectro possui um *gap* de  $2U_0$  entre as bandas de valência e condução nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ .

## 2.2.8 Níveis de Landau

Agora acharemos os níveis de energia do grafeno na presença de um campo magnético perpendicular uniforme,  $\mathbf{B} = B_z \hat{\mathbf{k}}$ , e um potencial externo ou uma massa uniforme,  $U_A(\mathbf{r}) = U_0 + \Delta_0 U_B(\mathbf{r}) = U_0 - \Delta_0$ . A equação de autovalor do Hamiltoniano nos conduz ao sistema de equações

$$(U_0 + \Delta_0) \phi_A + \pi^\dagger \phi_B = E \phi_A, \quad (2.86)$$

$$\pi \phi_A + (U_0 - \Delta_0) \phi_B = E \phi_B, \quad (2.87)$$



que poder ser desacoplado para  $\phi_A$ , como

$$\pi^\dagger \pi \phi_A - [(E - U_0)^2 - \Delta_0^2] \phi_A = 0. \quad (2.88)$$

Utilizando a equação (2.36) obtemos que

$$v_F^2 \hat{\mathbf{p}}^2 \phi_A + \kappa v_F^2 \hbar^2 \beta \phi_A - [(E - U_0)^2 - \Delta_0^2] \phi_A = 0, \quad (2.89)$$

cujas soluções são os autovalores do operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$  dados na equação (2.70)

$$\phi_A = G_m(\alpha, \rho) e^{im\theta}, \quad (2.90)$$

onde excluimos a função  $H_m(\alpha, \rho)$  pois ela diverge em  $\rho = 0$ . A função  $G_m(\alpha, \rho)$  apenas irá convergir para  $\rho \rightarrow \infty$  se  $a = -n$ , onde  $n$  é um inteiro não negativo e  $a$  é dado pela equação (2.69), portanto,

$$\frac{|m|}{2} + \text{sgn}(\beta) \frac{m}{2} - \frac{\alpha}{2|\beta|} + \frac{1}{2} = -n, \quad (2.91)$$

de modo que

$$\alpha = |\beta|(2n + |m| + \text{sgn}(\beta) m + 1), \quad (2.92)$$

ou

$$\alpha = |\beta|(2N + 1), \quad (2.93)$$

onde  $N = n + |m|(1 + \text{sgn}(m\beta))/2 = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Podemos achar a relação entre a energia  $E$  e o  $\alpha$ , substituindo  $\phi_A$  na equação desacoplada

$$v_F^2 \hbar^2 \alpha + \kappa v_F^2 \hbar^2 \beta - (E - U_0)^2 + \Delta_0^2 = 0, \quad (2.94)$$

ou ainda

$$\epsilon = u_0 \pm \sqrt{\alpha + \delta_0^2 + \kappa\beta} \quad (2.95)$$

onde  $\epsilon = E/\hbar v_F$ ,  $u_0 = U_0/\hbar v_F$  e  $\delta_0 = \Delta_0/\hbar v_F$ . Substituindo  $\alpha$ , obtemos os níveis de Landau,

$$\epsilon = u_0 \pm \sqrt{|\beta|(2N + 1) + \delta_0^2 + \kappa\beta}. \quad (2.96)$$

Da última equação podemos concluir que os níveis de energia nos vales  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  possuem a simetria  $\epsilon_{\mathbf{K}}(\beta) = \epsilon_{\mathbf{K}'}(-\beta)$ . A Figura 10 mostra os níveis de Landau com e sem um potencial externo aplicado e no caso de um termo de massa no vale  $\mathbf{K}$ .

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

Uma bicamada de grafeno (BG) é formada por duas folhas de grafeno sobrepostas e acopladas por ligações de Van Der Waals entre os carbonos da folha inferior com os carbonos da folha superior. Dividimos a rede cristalina da BG em quatro sub-redes triangulares, duas da folha inferior, sub-redes A e B, e as outras duas para a folha superior, sub-redes A' e B'. Se os

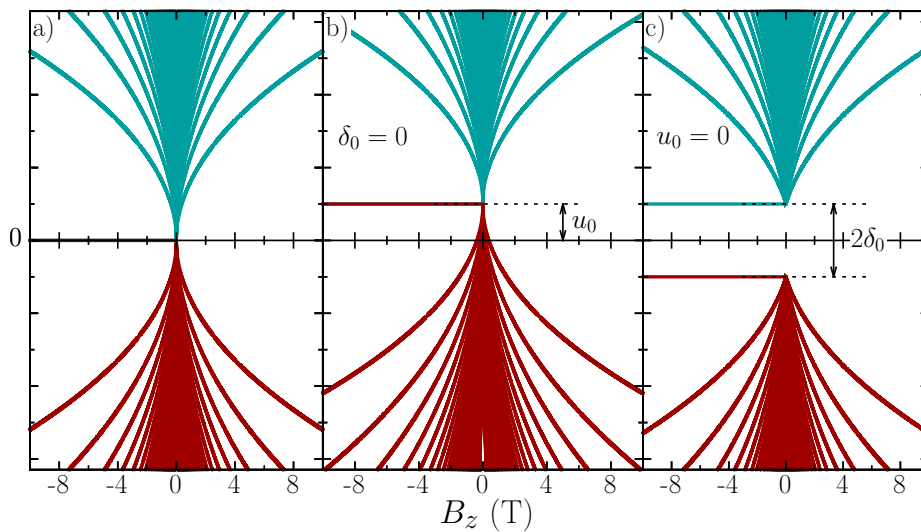


Figura 10 – Níveis de Landau no grafeno obtido pelo modelo contínuo para (a) potencial externo nulo, (b) um potencial externo uniforme  $u_0$ , e (c) um termo de massa uniforme  $\delta_0$ .

carbonos da folha superior estiverem exatamente acima dos carbonos da folha inferior, então eles se ligam e formam o empilhamento conhecido como AA. Por outro lado, um outro tipo de empilhamento ocorre quando apenas os carbonos da sub-rede B' da folha superior se encontram exatamente sobre os carbonos da sub-rede A da folha inferior e as ligações ocorrem apenas entre essas sub-redes. Esse é o empilhamento conhecido como AB (Figura 11), também chamado de empilhamento de Bernal. Obtem-se uma boa concordância ao se comparar dados experimentais em bicamadas de grafeno produzidas por clivagem micromecânica com os dados teóricos do empilhamento AB<sup>56</sup>, portanto trataremos com o empilhamento de Bernal.

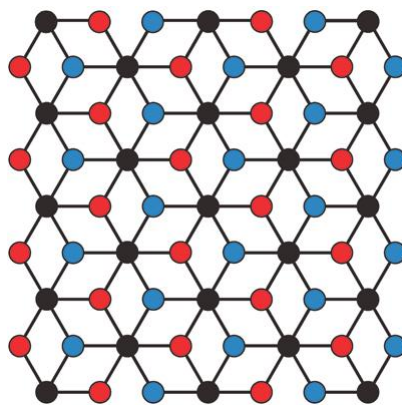


Figura 11 – Bicamada de grafeno com empilhamento AB vista de cima. Os carbonos em vermelho formam a sub-rede triangular B da camada inferior. Os carbonos em azul formam a sub-rede A' da camada superior. Os carbonos em preto são as sub-redes B' e A que coincidem pois a coordenada  $z$  é ignorada pela perspectiva.

O Hamiltoniano *tight-binding* para um elétron  $\pi$  na BG escrito no formalismo de segunda

quantização, incluindo apenas o termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos, é escrito como 5.53:

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} t (a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} + b_{\mathbf{R}_B}^\dagger a_{\mathbf{R}_A}) - \sum_{\langle \mathbf{R}_{A'}, \mathbf{R}_{B'} \rangle} t (a_{\mathbf{R}_{A'}}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}} + b_{\mathbf{R}_{B'}}^\dagger a_{\mathbf{R}_{A'}}) \\
 & - \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_{B'} \rangle} t_\perp (a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}} + b_{\mathbf{R}_{B'}}^\dagger a_{\mathbf{R}_A}) + \sum_{\mathbf{R}_A} U_{\mathbf{R}_A} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} + \sum_{\mathbf{R}_B} U_{\mathbf{R}_B} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} \\
 & + \sum_{\mathbf{R}_{A'}} U_{\mathbf{R}_{A'}} a_{\mathbf{R}_{A'}}^\dagger a_{\mathbf{R}_{A'}} + \sum_{\mathbf{R}_{B'}} U_{\mathbf{R}_{B'}} b_{\mathbf{R}_{B'}}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}} , \quad (2.97)
 \end{aligned}$$

onde  $t_\perp$  ( $\approx 0,4 \text{ eV}^5$ ) é o valor do *hopping* entre os carbonos da sub-rede A e B', e os demais símbolos tem significado semelhante aos da equação (2.3). O primeiro somatório são os termos de *hopping* entre os primeiros vizinhos na folha inferior; o segundo somatório é análogo ao primeiro para a folha superior; o terceiro somatório são os termos de *hopping* entre os carbonos da sub-rede A da folha inferior e os da sub-rede B' da folha superior; os demais termos são os potenciais induzidos em cada sítio das sub-redes. A Figura 12 mostra na configuração espacial dos átomos de carbono da BG os termos de *hopping*. Semelhante ao grafeno, os autovalores e autovetores são obtidos diagonalizando a matriz do Hamiltoniano (2.97).

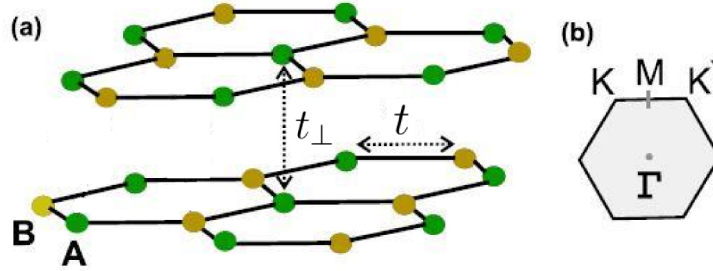


Figura 12 – (a) Rede cristalina de uma BG. Os átomos em verde formam, na folha inferior, a sub-rede A e na folha superior a sub-rede B'. Os parâmetros de *hopping* entre os respectivos pontos são mostrados. No presente modelo consideramos  $\gamma_3 = \gamma_4 = 0$ . (b) Primeira zona de Brillouin. Figura adaptada da Ref. [5].

## 2.4 Modelo Contínuo para a Bicamada de Grafeno

### 2.4.1 Modificação do Hamiltoniano Tight-Binding

Pode-se aplicar os conceitos do modelo contínuo e deduzir um Hamiltoniano semelhante ao (2.22) para a BG, para isso, observe que podemos reescrever o Hamiltoniano (2.97) como

$$H = \begin{bmatrix} \sum_{\mathbf{R}_A} U_{\mathbf{R}_A} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} & -t \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} & -t_\perp \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_{B'} \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}} & 0 \\ -t \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_B \rangle} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} & \sum_{\mathbf{R}_B} U_{\mathbf{R}_B} b_{\mathbf{R}_B}^\dagger b_{\mathbf{R}_B} & 0 & 0 \\ -t_\perp \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_{B'} \rangle} b_{\mathbf{R}_{B'}}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} & 0 & \sum_{\mathbf{R}_{B'}} U_{\mathbf{R}_{B'}} b_{\mathbf{R}_{B'}}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}} & -t \sum_{\langle \mathbf{R}_{A'}, \mathbf{R}_{B'} \rangle} b_{\mathbf{R}_{B'}}^\dagger a_{\mathbf{R}_{A'}} \\ 0 & 0 & -t \sum_{\langle \mathbf{R}_{A'}, \mathbf{R}_{B'} \rangle} a_{\mathbf{R}_{A'}}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}} & \sum_{\mathbf{R}_{A'}} U_{\mathbf{R}_{A'}} a_{\mathbf{R}_{A'}}^\dagger a_{\mathbf{R}_{A'}} \end{bmatrix}, \quad (2.98)$$

onde ele opera sobre um *pseudospinor* dado por

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \\ \Psi_{B'} \\ \Psi_{A'} \end{bmatrix} \quad (2.99)$$

onde  $\Psi_i$  é uma combinação dos estados orbitais dos sítios da sub-rede  $i$ . Observe que o operador  $-t_\perp \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_{B'} \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}}$  quando agindo sobre os estados orbitais  $|\chi_{\mathbf{R}_{B'}}\rangle$  comporta-se como um operador de translação, isto é,

$$\left( \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_{B'} \rangle} a_{\mathbf{R}_A}^\dagger b_{\mathbf{R}_{B'}} \right) |\chi_{\mathbf{R}_{B'}}\rangle = |\chi_{\mathbf{R}_{B'} - a_\perp \hat{k}}\rangle = e^{i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} |\chi_{\mathbf{R}_{B'}}\rangle, \quad (2.100)$$

onde  $\hat{k}$  é o vetor unitário na direção  $z$  e  $a_\perp$  é a distância entre as folhas. De forma equivalente, podemos escrever que

$$\left( \sum_{\langle \mathbf{R}_A, \mathbf{R}_{B'} \rangle} b_{\mathbf{R}_{B'}}^\dagger a_{\mathbf{R}_A} \right) |\chi_{\mathbf{R}_{A'}}\rangle = |\chi_{\mathbf{R}_{A'} + a_\perp \hat{k}}\rangle = e^{-i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} |\chi_{\mathbf{R}_{A'}}\rangle. \quad (2.101)$$

Combinando esses resultados com as equações (2.9) e (2.13), obtemos que

$$H = \begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & -tg(\hat{\mathbf{p}}) & -t_\perp e^{i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} & 0 \\ -t\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) & U_B(\hat{\mathbf{r}}) & 0 & 0 \\ -t_\perp e^{-i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} & 0 & U_{B'}(\hat{\mathbf{r}}) & -t\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) \\ 0 & 0 & -tg(\hat{\mathbf{p}}) & U_{A'}(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix}. \quad (2.102)$$

Então supomos que  $\Psi_A, \Psi_B, \Psi_{B'}$  e  $\Psi_{A'}$  podem assumir qualquer forma e não somente uma combinação dos estados atômicos. Além disso, assumiremos que a dependência na coordenada  $z$ , perpendicular ao plano da BG, é a mesma nas funções  $\Psi_A, \Psi_B$  e apenas deslocada de  $a_\perp \hat{k}$  para as funções  $\Psi_{B'}$  e  $\Psi_{A'}$ . Observe então que podemos eliminar a dependência em  $z$  na equação de autovalor. De fato, podemos escrever a equação de autovalor na seguinte forma

$$\begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & -tg(\hat{\mathbf{p}}) & -t_\perp e^{i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} & 0 \\ -t\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) & U_B(\hat{\mathbf{r}}) & 0 & 0 \\ -t_\perp e^{-i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} & 0 & U_{B'}(\hat{\mathbf{r}}) & -t\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) \\ 0 & 0 & -tg(\hat{\mathbf{p}}) & U_{A'}(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_A(x, y)Z(z) \\ \psi_B(x, y)Z(z) \\ \psi_{B'}(x, y)Z(z - a_\perp) \\ \psi_{A'}(x, y)Z(z - a_\perp) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_A(x, y)Z(z) \\ \psi_B(x, y)Z(z) \\ \psi_{B'}(x, y)Z(z - a_\perp) \\ \psi_{A'}(x, y)Z(z - a_\perp) \end{bmatrix}, \quad (2.103)$$

observe que  $e^{i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} Z(z - a_\perp) = Z(z)$  e que  $e^{-i\hat{p}_z a_\perp / \hbar} Z(z) = Z(z - a_\perp)$  e portanto conseguimos eliminar a dependência em  $z$  em todas as quatro equações, isto é,

$$\begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & -tg(\hat{\mathbf{p}}) & -t_\perp & 0 \\ -t\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) & U_B(\hat{\mathbf{r}}) & 0 & 0 \\ -t_\perp & 0 & U_{B'}(\hat{\mathbf{r}}) & -t\bar{g}(\hat{\mathbf{p}}) \\ 0 & 0 & -tg(\hat{\mathbf{p}}) & U_{A'}(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \\ \psi_{B'}(x, y) \\ \psi_{A'}(x, y) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \\ \psi_{B'}(x, y) \\ \psi_{A'}(x, y) \end{bmatrix}. \quad (2.104)$$

### 2.4.2 Dispersão Eletrônica da Bicamada de Grafeno

A equação (2.104) pode ser facilmente resolvida para o caso onde  $U_A = U_B = U_{B'} = U_{A'} = 0$ . Nesse caso, podemos desacoplar o sistema e obtemos a equação

$$-t^4 |g(\hat{\mathbf{p}})|^4 \psi_A + 2E^2 t^2 |g(\hat{\mathbf{p}})|^2 \psi_A + (t_\perp^2 E^2 - E^4) \psi_A = 0, \quad (2.105)$$

cuja solução são ondas livres  $\Psi_A = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  e os autovalores são

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{|g(\hbar\mathbf{k})|^2 t^2 + \frac{t_\perp^2}{2} \pm \frac{t_\perp}{2} \sqrt{4|g(\hbar\mathbf{k})|^2 t^2 + t_\perp^2}}, \quad (2.106)$$

onde  $|g(\hbar\mathbf{k})|$  é dado na equação (2.18). As quatro soluções dão origem a quatro bandas de energia que formam a dispersão eletrônica da BG próximo ao nível de Fermi,  $E = 0$ . Observe que para  $t_\perp = 0$  as soluções recaem nas soluções da monocamada de grafeno, equação (2.18). A Figura 13 mostra  $E/t$  como função de  $ak_y$  para  $ak_x = 2\pi/3$ , portanto, passando pelos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ . Observe que as soluções com o sinal de menos dentro da raiz zeram nos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  e formam a banda de valência e condução que, semelhante a monocamada de grafeno, não apresentam *gap*. Entretanto, a dispersão nos vales  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  é aproximadamente parabólico e não mais linear como para a monocamada de grafeno.

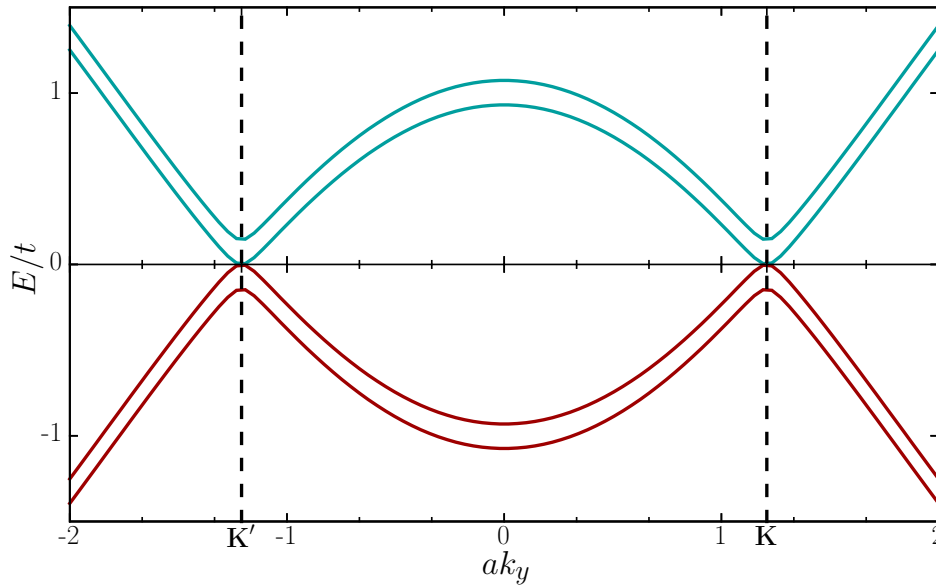


Figura 13 – Dispersão eletrônica da BG. As energias foram traçadas como função de  $ak_y$  para  $ak_x = 2\pi/3$ . Os pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  são destacados no gráfico.

### 2.4.3 Hamiltoniano do Modelo Contínuo

Semelhante a monocamada de grafeno, para obtermos o Hamiltoniano do modelo contínuo para a BG, devemos expandir a função  $g(\hbar\mathbf{k})$  em torno dos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  e reter apenas os

termos lineares. Utilizando a equação (2.19) obtemos que

$$\begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & \frac{3ta}{2\hbar}(\hat{p}_x - i\kappa\hat{p}_y)e^{i\kappa\pi/6} & -t_\perp & 0 \\ \frac{3ta}{2\hbar}(\hat{p}_x + i\kappa\hat{p}_y)e^{-i\kappa\pi/6} & U_B(\hat{\mathbf{r}}) & 0 & 0 \\ -t_\perp & 0 & U_{B'}(\hat{\mathbf{r}}) & \frac{3ta}{2\hbar}(\hat{p}_x + i\kappa\hat{p}_y)e^{-i\kappa\pi/6} \\ 0 & 0 & \frac{3ta}{2\hbar}(\hat{p}_x - i\kappa\hat{p}_y)e^{i\kappa\pi/6} & U_{A'}(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_{B'} \\ \psi_{A'} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_A \\ \psi_B \\ \psi_{B'} \\ \psi_{A'} \end{bmatrix}. \quad (2.107)$$

Fazendo  $v_F = 3ta/2\hbar$  e multiplicando a primeira equação por  $e^{-i\kappa\pi/12}$ , a segunda equação por  $e^{i\kappa\pi/12}$ , a terceira equação por  $-e^{-i\kappa\pi/12}$  e a quarta equação por  $-e^{-i3\kappa\pi/12}$ , obtemos que

$$\begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & v_F(\hat{p}_x - i\kappa\hat{p}_y) & t_\perp & 0 \\ v_F(\hat{p}_x + i\kappa\hat{p}_y) & U_B(\hat{\mathbf{r}}) & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & U_{B'}(\hat{\mathbf{r}}) & v_F(\hat{p}_x + i\kappa\hat{p}_y) \\ 0 & 0 & v_F(\hat{p}_x - i\kappa\hat{p}_y) & U_{A'}(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_A e^{-i\kappa\pi/12} \\ \psi_B e^{i\kappa\pi/12} \\ -\psi_{B'} e^{-i\kappa\pi/12} \\ -\psi_{A'} e^{-i3\kappa\pi/12} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_A e^{-i\kappa\pi/12} \\ \psi_B e^{i\kappa\pi/12} \\ -\psi_{B'} e^{-i\kappa\pi/12} \\ -\psi_{A'} e^{-i3\kappa\pi/12} \end{bmatrix}, \quad (2.108)$$

do qual, finalmente, o Hamiltoniano segundo o modelo contínuo para a BG nas proximidades dos pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  é obtido,

$$H = \begin{bmatrix} U_A(\hat{\mathbf{r}}) & \pi & t_\perp & 0 \\ \pi^\dagger & U_B(\hat{\mathbf{r}}) & 0 & 0 \\ t_\perp & 0 & U_{B'}(\hat{\mathbf{r}}) & \pi^\dagger \\ 0 & 0 & \pi & U_{A'}(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix}. \quad (2.109)$$

O Hamiltoniano opera sobre um pseudospinor dado por

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi_A \\ \phi_B \\ \phi_{B'} \\ \phi_{A'} \end{bmatrix}, \quad (2.110)$$

onde  $\phi_A$ ,  $\phi_B$ ,  $\phi_{B'}$  e  $\phi_{A'}$  diferem das funções de onda associadas as sub-redes apenas por uma fase.

#### 2.4.4 Diferença de Potencial Uniforme

Suponha que a BG é colocada entre um capacitor de placas paralelas submetidos à uma diferença de potencial (ddp) (ver Figura 14). Um campo elétrico uniforme atravessa perpendicularmente as folhas e portanto as sub-redes pertencentes a mesma folha possuem o mesmo potencial, isto é,  $U_A(\mathbf{r}) = U_B(\mathbf{r}) = U_1(\mathbf{r})$  e  $U_{A'}(\mathbf{r}) = U_{B'}(\mathbf{r}) = U_2(\mathbf{r})$ .

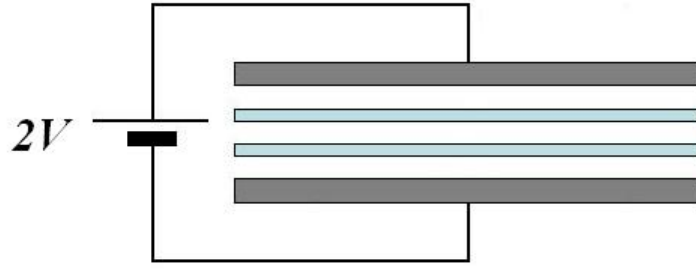


Figura 14 – Esquema de uma bicamada de grafeno submetida a um campo elétrico uniforme induzido através de um capacitor. As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e o capacitor em cinza.

A equação de autovalor do Hamiltoniano nos conduz ao seguinte sistema de equações diferenciais

$$\pi\phi_B + (U_1 - E)\psi_A + t_\perp\phi_{B'} = 0, \quad (2.111)$$

$$\pi^\dagger\phi_A + (U_1 - E)\phi_B = 0, \quad (2.112)$$

$$\pi^\dagger\phi_{A'} + (U_2 - E)\phi_{B'} + t_\perp\phi_A = 0, \quad (2.113)$$

$$\pi\phi_{B'} + (U_2 - E)\phi_{A'} = 0. \quad (2.114)$$

Desacoplando tal sistema para  $U_1(\mathbf{r})$  e  $U_2(\mathbf{r})$  constantes, obtemos a seguinte equação diferencial para  $\phi_A$

$$\begin{aligned} \pi^\dagger\pi\pi\pi^\dagger\phi_A - (U_1 - E)^2\pi^\dagger\pi\phi_A - (U_2 - E)^2\pi\pi^\dagger\phi_A + \\ + (U_1 - E)^2(U_2 - E)^2\phi_A - t_\perp^2(U_1 - E)(U_2 - E)\phi_A = 0. \end{aligned} \quad (2.115)$$

Substituindo  $\pi$ , obtemos que,

$$\begin{aligned} v_F^4(\hat{\mathbf{p}}^2)^2\psi_A - v_F^2 \left[ (U_1 - E)^2 + (U_2 - E)^2 \right] \hat{\mathbf{p}}^2\psi_A + \\ + \left[ (U_1 - E)^2(U_2 - E)^2 - t_\perp^2(U_1 - E)(U_2 - E) \right] \psi_A = 0, \end{aligned} \quad (2.116)$$

e finalmente, fazendo  $U_1(\mathbf{r}) = -U_2(\mathbf{r}) = V$  e  $\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2\nabla^2$ , obtemos a equação

$$v_F^4\hbar^4(\nabla^2)^2\phi_A + 2v_F^2\hbar^2(V^2 + E^2)\nabla^2\phi_A + (V^2 - E^2)(V^2 - E^2 + t_\perp^2)\phi_A = 0, \quad (2.117)$$

cujas soluções são ondas planas,  $\phi_A = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ . Substituindo  $\phi_A$  na equação diferencial obtemos que os autovalores do Hamiltoniano são

$$\epsilon = \pm \sqrt{v^2 + \mathbf{k}^2 + \frac{\tau^2}{2} \pm \sqrt{(4v^2 + \tau^2)\mathbf{k}^2 + \frac{\tau^4}{4}}}, \quad (2.118)$$

onde  $\epsilon = E/v_F\hbar$ ,  $v = V/v_F\hbar$  e  $\tau = t_\perp/v_F\hbar$ . As quatro soluções compõem as quatro bandas da BG. Na Figura 15a traçamos a dispersão obtida para  $v$  nulo, onde os níveis de energia são

semelhantes aos obtidos na Figura 13 próximos ao ponto  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ . Na Figura 15b traçamos a dispersão obtida para  $V = t/12$  onde observa-se o surgimento de um *gap*. O *gap* é exatamente igual duas vezes o valor mínimo da energia da banda superior, isto é,

$$\text{gap} = 2 \frac{|V|t_{\perp}}{\sqrt{(4V^2 + t_{\perp}^2)}}, \quad (2.119)$$

onde vemos que o *gap* pode ser controlado, alterando a ddp aplicada sobre a bicamada.

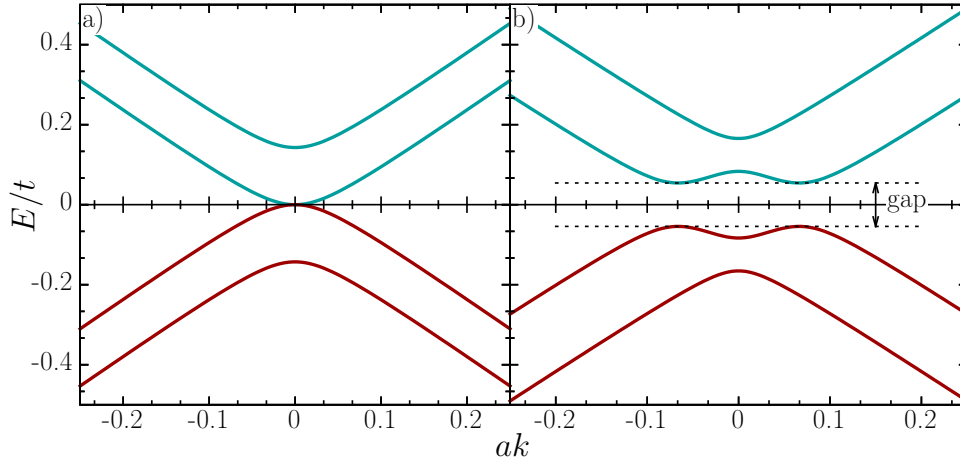


Figura 15 – Dispersão eletrônica da BG usando o modelo contínuo. As energias foram traçadas como função de  $ak$ , onde  $k$  é a distancia ao ponto  $\mathbf{K}$  ou  $\mathbf{K}'$  para (a) potencial externo nulo e (b) para  $V = t/12$ .

## 2.4.5 Níveis de Landau

Suponha que além do capacitor, exista um campo magnético uniforme perpendicular as folhas de grafeno. Substituindo  $\pi$  na equação separada (2.115) obtemos que

$$\begin{aligned} v_F^4 (\hat{\mathbf{p}}^2)^2 \psi_A - v_F^2 [(U_1 - E)^2 + (U_2 - E)^2] \hat{\mathbf{p}}^2 \psi_A + [(U_1 - E)^2 (U_2 - E)^2 - \\ - t^2 (U_1 - E)(U_2 - E) - v_F^4 \hbar^2 e^2 B_z^2 - v_F^2 \hbar e B_z (U_1 - E)^2 + v_F^2 \hbar e B_z (U_2 - E)^2] \psi_A = 0, \end{aligned} \quad (2.120)$$

e finalmente fazendo  $U_1(\mathbf{r}) = -U_2(\mathbf{r}) = V$ , temos que

$$\begin{aligned} v_F^4 (\hat{\mathbf{p}}^2)^2 \psi_A - 2v_F^2 (V^2 + E^2) \hat{\mathbf{p}}^2 \psi_A + \\ + [(V^2 - E^2)^2 + t^2 (V^2 - E^2) - v_F^4 \hbar^2 e^2 B_z^2 + 4v_F^2 \hbar e B_z V E] \psi_A = 0. \end{aligned} \quad (2.121)$$

Observe que a última equação é uma equação quadrática com coeficientes constantes para o operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$ , portanto buscaremos soluções que são autofunções desse. As autofunções



do operador  $\hat{p}^2$  serão solução da equação (2.121) contanto que o seu respectivo autovalor  $\alpha$  satisfaça a equação característica,

$$\gamma^4 \alpha^2 - 2\gamma^2(V^2 + E^2)\alpha + [(V^2 - E^2)^2 + t^2(V^2 - E^2) - \gamma^4 \beta^2 + 4\gamma^2 \beta V E] = 0, \quad (2.122)$$

onde  $\gamma = v_F \hbar$ . Fazendo  $\epsilon = E/\gamma$ ,  $v = V/\gamma$  e  $\tau = t_\perp/\gamma$  a equação característica torna-se

$$\alpha^2 - 2(v^2 + \epsilon^2)\alpha + [(v^2 - \epsilon^2)^2 + \tau^2(v^2 - \epsilon^2) - \beta^2 + 4\beta v \epsilon] = 0. \quad (2.123)$$

No caso de  $v$  nulo a solução apenas contará com as soluções  $G_m(\alpha, \rho)$  já que as soluções  $H_m(\alpha, \rho)$  divergem para  $\rho \rightarrow 0$ . Além disso, as funções  $G_m(\alpha, \rho)$  devem convergir quando  $\rho \rightarrow \infty$ , portanto deve-se fazer  $a = -n$ ,  $n$  inteiro não negativo. Então isolando  $\alpha$  na equação (2.69), obtemos que

$$\alpha = 2|\beta| \left( n + \frac{|m|}{2} + \text{sgn}(\beta) \frac{m}{2} + \frac{1}{2} \right) = |\beta| (2N + 1), \text{ com } N = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.124)$$

A equação (2.123) torna-se,

$$\epsilon^4 - (2\alpha + \tau^2)\epsilon^2 + \alpha^2 - \beta^2 = 0. \quad (2.125)$$

Resolvendo para  $\epsilon$ , obtêm-se que

$$\epsilon = \pm \sqrt{\alpha + \frac{\tau^2}{2} \pm \sqrt{\beta^2 + \alpha\tau^2 + \frac{\tau^4}{4}}} \quad (2.126)$$

Observe que a energia é uma função par de  $\beta$  (um múltiplo não inteiro de  $B_z$ ). A Figura 16a mostra os quatro conjuntos de níveis de energia na proximidade do ponto  $\mathbf{K}$  em função de  $B_z$  para  $N = 0, \dots, 100$ .

Para o caso  $v \neq 0$ , para que as soluções  $G_m(\alpha, \rho)$  convirjam quando  $\rho \rightarrow \infty$  deve-se fazer  $a = -n$ ,  $n$  inteiro não negativo. Portanto a equação (2.124) também é válida nesse caso. Para determinarmos os valores da energia devemos resolver a equação de quarto grau (2.123)

$$\epsilon^4 - (2v^2 + 2\alpha + \tau^2)\epsilon^2 + 4\beta v \epsilon + \alpha^2 - \beta^2 + v^2(\tau^2 + v^2 - 2\alpha) = 0. \quad (2.127)$$

Apesar de poder ser resolvida analiticamente foi feito a solução numérica e mostrada na Figura 16b para  $N = 0, \dots, 100$ . Primeiramente, nota-se o aparecimento de um *gap* entre as bandas mais próximas da reta  $E = 0$ , esse resultado já é bem conhecido da literatura<sup>5</sup>. Outra diferença, destacado no *inset* da figura, é o fato que os níveis de energia não são mais funções pares do campo magnético.

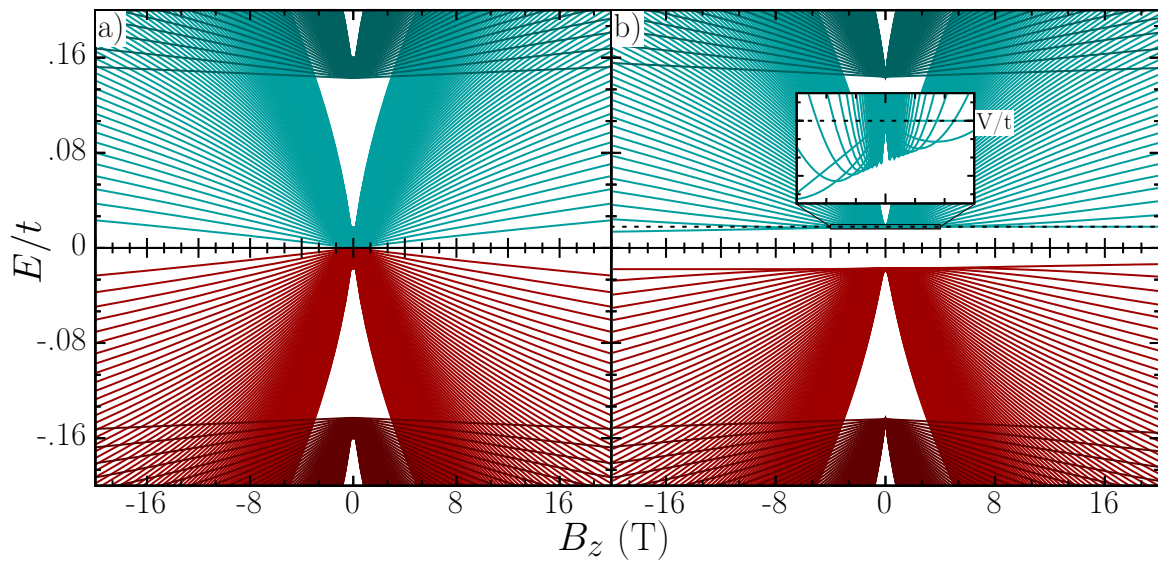


Figura 16 – (a) Níveis de Landau próximos do ponto  $\mathbf{K}$  como função do campo magnético aplicado perpendicular a bicamada de grafeno (a) na ausência de um potencial externo e (b) na presença de um potencial externo uniforme ( $V = 50$  meV) destacado por uma linha tracejada.

## 3 Anéis Quânticos em Grafeno Induzidos pelo Substrato

### 3.1 Massa Induzida pelo Substrato

Na seção (2.2.7) vimos que quebrando a simetria entre as sub-redes A e B com um termo de massa  $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$  surge um *gap* entre a banda de condução e valência no grafeno. Para isso, o potencial induzido sobre o grafeno deve possuir a periodicidade de uma rede hexagonal como a do grafeno. Pode-se obter tal potencial através de uma interação com um substrato apropriado <sup>8, 22, 23</sup>. Por exemplo, é conhecido que grafeno crescido epitaxialmente em um substrato de SiC exibe um *gap* devido à interação do grafeno com uma camada de átomos de carbonos no substrato de SiC conhecida como *buffer layer* (Figura 17) que também é uma rede hexagonal com um parâmetro de rede similar ao do grafeno <sup>6, 57, 58</sup>.

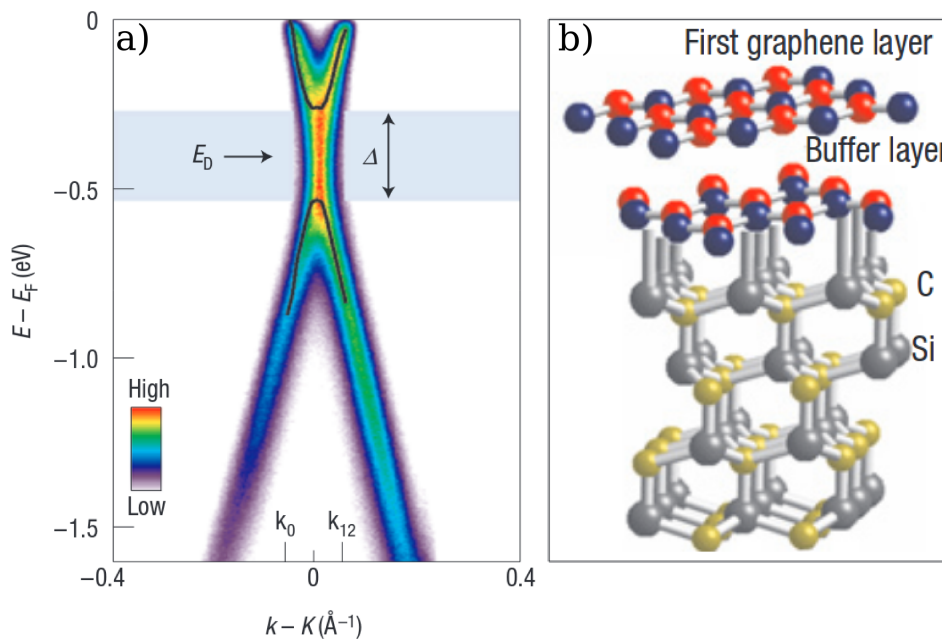


Figura 17 – (a) Intensidade fotoeletrônica como função da energia e do momento entorno do ponto **K**. As linhas sólidas marcam o máximo de intensidade. (b) Esboço da *buffer layer* que induz potenciais não equivalentes sobre as sub-redes A (azul) e B (vermelho). Figura adaptada da Ref. [6].

Além disso, foi demonstrado teoricamente através da DFT que a estrutura eletrônica do grafeno sobre um substrato de Nitreto de Boro hexagonal (h-BN) também exibe tal *gap* <sup>7</sup>. O cristal de h-BN pode ser obtido com uma estrutura similar ao do grafeno, exceto pelo fato que os componentes químicos das sub-redes A e B são diferentes e a diferença entre os parâmetros de

rede do grafeno e do h-BN é menor do que 2%<sup>7, 59</sup>. Os resultados mostraram que o *gap* induzido depende da distância e orientação entre o grafeno e a camada de h-BN (Figura 18). Experimentos recentes relataram um crescimento precisamente alinhado de grafeno sobre um cristal de h-BN<sup>60</sup>.

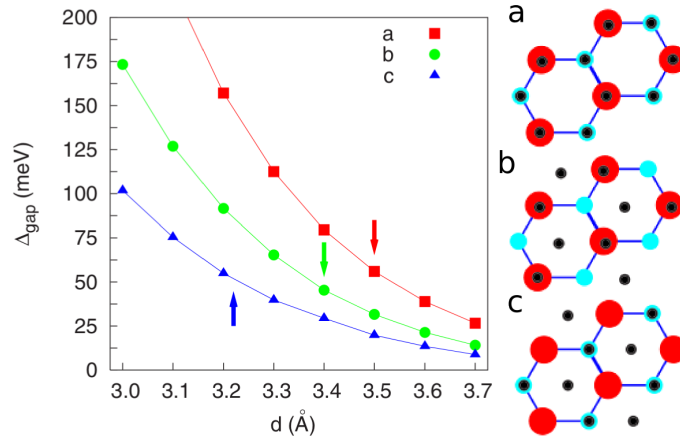


Figura 18 – Valores de *gap* calculados pela DFT para três configurações do grafeno sobre o substrato de h-BN a, b, e c como função da distância entre as camadas, onde os círculos pretos, azuis e vermelhos são, respectivamente, átomos de Carbono, Boro e Nitrogênio. A separação de equilíbrio é indicada pelas setas. Figura adaptada da Ref. [7].

O comportamento semicondutor com *gap* finito do grafeno abre uma perspectiva de se estudar confinamento em grafeno devido a um termo de massa dependendo da posição. Uma massa dependendo da posição pode ser obtida modificando espacialmente o substrato, por exemplo, através de defeitos na rede cristalina.

## 3.2 Confinamento Topológico em uma Linha de Defeito

Um trabalho recente<sup>8</sup> estudou confinamento em grafeno sobre h-BN com uma linha de defeito onde ao atravessarmos a linha a rede cristalina do h-BN inverte os átomos de Nitrogênio e Boro como mostra a Figura 19. Nesse caso o potencial induzido sobre os átomos de carbono também se invertem, tal que,  $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{r})$ , onde

$$\Delta(\mathbf{r}) = \begin{cases} -\Delta_0 & \text{para } x < 0, \\ \Delta_0 & \text{para } x > 0, \end{cases} \quad (3.1)$$

sendo  $\Delta_0$  a intensidade do potencial induzido sobre os carbonos devido ao substrato.

**Nota.** De forma geral, os potenciais induzidos em cada sub-rede não são opostos,  $U_A(\mathbf{r}) \neq -U_B(\mathbf{r})$ , porém, nesse caso, podemos deslocar o nível de referência da energia  $E$  de forma que o ponto médio entre  $U_A$  e  $U_B$  se torne o novo nível  $E' = 0$ . Nesse caso, podemos escrever que  $\Delta'_0 = (U_A - U_B)/2$ . Obtidos os níveis  $E'$ , pode-se obter os níveis de energia  $E$  fazendo

$E = E' + (U_A + U_B)/2$ , portanto, apenas retornando os níveis de energia à posição inicial. No restante desse capítulo suporemos que os potenciais induzido em cada sub-rede são opostos, isto é,  $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{r})$ .

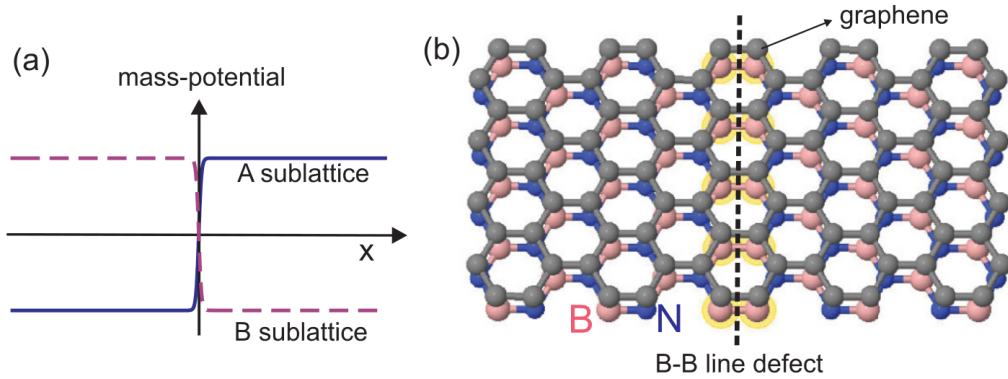


Figura 19 – (a) Perfil do potencial  $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{r})$  no grafeno induzido pelo substrato de h-BN. (b) Esboço da folha de grafeno sobre um substrato de h-BN com uma linha de defeito na posição  $x = 0$  responsável pelo confinamento no grafeno. Figura adaptada da Ref. [8].

Os resultados mostram o aparecimento de níveis de energia  $E = \kappa\hbar v_F |k_y|$  na região do *gap* entre as bandas mostrados na Figura 20. A Figura 20b e c mostra as autofunções nos vales  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ , respectivamente, onde se observa o confinamento ao longo do eixo  $x$ , perpendicular a linha de defeito. O *inset* da Figura 20a mostra a velocidade para os estados no vale  $\mathbf{K}$  (pontilhado azul) e no vale  $\mathbf{K}'$  (pontilhado vermelho). Observe que os estados no vale  $\mathbf{K}$  se propagam no sentido positivo do eixo  $y$  enquanto que os estados do vale  $\mathbf{K}'$  se propagam no sentido negativo, isto é, são contrapropagantes.

Esses estados possuem semelhança com os estados topológicos em isolantes topológicos, por exemplo, se assemelha aos estados topológicos do Quantum Hall Effect (QHE) onde os estados contrapropagantes estão deslocados fisicamente para as bordas; ou estados do Quantum Spin Hall Effect onde os estados contrapropagantes diferem no valor do spin. Se desconsiderarmos a interação intra-vale, os estados não podem ser retroespalhados por não possuir, em cada vale, um estado associado ao movimento na direção oposta, isso significa que os estados, assim como os estados em isolantes topológicos, podem contornar desordens sem haver espalhamento.

Além disso, observe que os estados são duplamente degenerados, para uma dada energia existe um estado no vale  $\mathbf{K}$  e um no vale  $\mathbf{K}'$ , isso ocorre devido ao teorema Kramer, já que como as autofunções são autofunções de um (pseudo-)fermion e o Hamiltoniano possui a simetria de inversão de tempo, então todo autoestado deve ser degenerado, isso significa que nenhuma desordem não-magnética pode quebrar a degenerescência entre os vales.

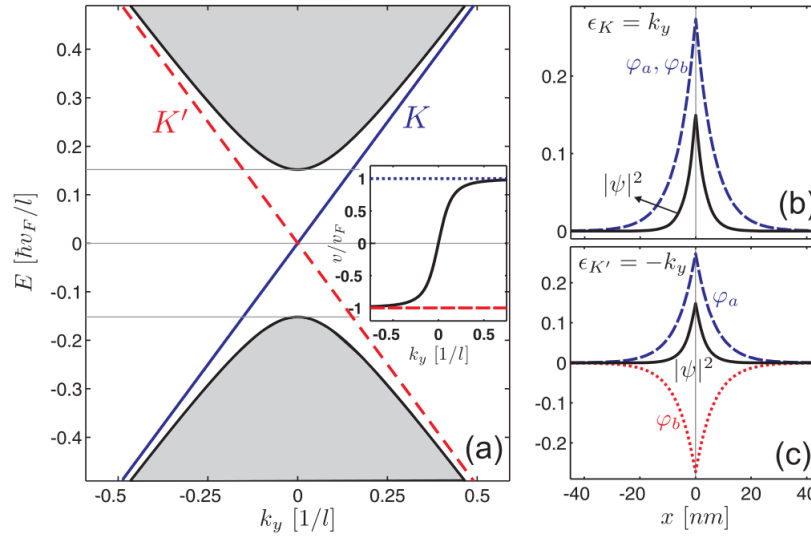


Figura 20 – (a) Dispersão eletrônica do grafeno sobre um substrato de h-BN com uma linha de defeito. *inset*: velocidade para os estados no vale  $\mathbf{K}$  (pontilhado azul) e no vale  $\mathbf{K}'$  (pontilhado vermelho) e para o caso sem defeito (linha sólida preta). (b) e (c) autofunções nos vales  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ , respectivamente. Figura adaptada da Ref. [8].

### 3.3 Linha de Defeito Circular

Nossa proposta foi estudar anéis quânticos no grafeno formados por uma linha de defeito circular no substrato de h-BN, isto é, ao sairmos da região circular de raio  $R$ , os átomos das sub-redes A e B do substrato são trocados como mostra a Figura 21. Um defeito perfeitamente circular modela em primeira aproximação qualquer região limitada por uma linha de defeito. Estudos recentes mostram avanços no controle de defeitos em h-BN<sup>61</sup>. Devemos enfatizar que o elétron ficará confinado ao longo da linha circular de defeito e não na região do disco, portanto, formando um confinamento em forma de anel e não de ponto quântico como é aparente.

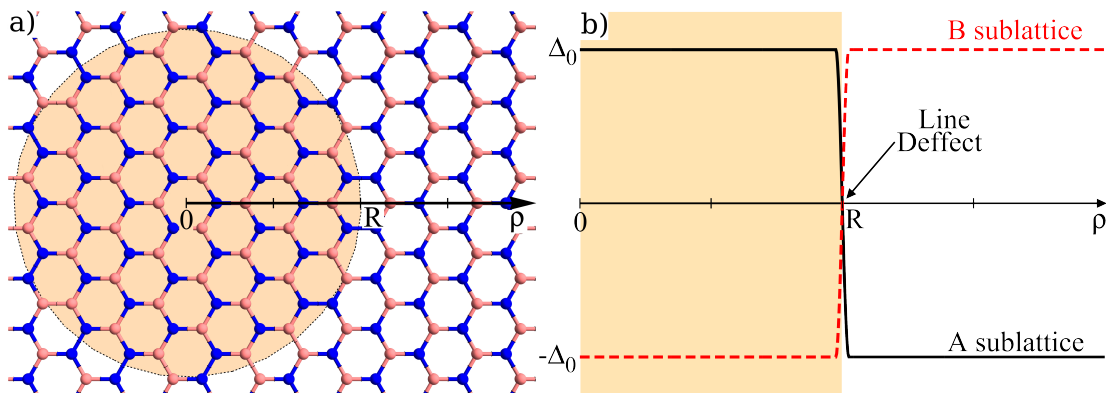


Figura 21 – (a) Esboço do substrato de h-BN com uma linha de defeito circular de raio  $R$  responsável pelo confinamento anelar no grafeno. (b) Perfil do potencial no grafeno induzido pelo substrato de h-BN.

O potencial induzido sobre os átomos de carbono se escreve como  $U_A(\mathbf{r}) = -U_B(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{r})$ , tal que

$$\Delta(\mathbf{r}) = \begin{cases} \Delta_0 & \text{para } \rho < R, \\ -\Delta_0 & \text{para } \rho > R, \end{cases} \quad (3.2)$$

onde  $R$  é o raio da região circular e  $\Delta_0$  é a intensidade do potencial induzido pelos átomos do substrato sobre os carbonos. Observe que a equação de autovalor do Hamiltoniano,  $H\Phi = E\Phi$ , que se escreve como

$$\begin{bmatrix} \Delta(\hat{\mathbf{r}}) & \pi^\dagger \\ \pi & -\Delta(\hat{\mathbf{r}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{bmatrix}, \quad (3.3)$$

pode ser separada se dividirmos a solução em duas regiões,  $\rho < R$  e  $\rho > R$ , isto é,

$$\Phi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \Phi^<(\mathbf{r}) & \text{para } \rho < R, \\ \Phi^>(\mathbf{r}) & \text{para } \rho > R. \end{cases} \quad (3.4)$$

Dentro de cada região o potencial é uniforme e o sistema de equações diferenciais da equação de autovalor do Hamiltoniano pode ser facilmente separado. Para  $\rho < R$  as equações são

$$\Delta_0\phi_A^< + \pi^\dagger\phi_B^< = E\phi_A^<, \quad (3.5)$$

$$\pi\phi_A^< - \Delta_0\phi_B^< = E\phi_B^<. \quad (3.6)$$

separando para  $\phi_A^<$  obtemos que

$$\pi^\dagger\pi\phi_A^< - (E^2 - \Delta_0^2)\phi_A^< = 0. \quad (3.7)$$

Primeiramente resolveremos o caso sem campo magnético, portanto,  $\pi^\dagger\pi = -v_F\hbar\nabla^2$  e a equação (3.7) torna-se,

$$\nabla^2\phi_A^< + (\epsilon^2 - \delta_0^2)\phi_A^< = 0. \quad (3.8)$$

onde  $\epsilon = E/\hbar v_F$  e  $\delta_0 = \Delta_0/\hbar v_F$ . Para obter o sistema de equações para  $\rho > R$  basta substituir  $\delta_0$  por  $-\delta_0$ , porém observe que a equação separada não se modifica.

### 3.3.1 Solução Geral da Equação Separada

Primeiramente acharemos a solução geral do problema de autovalor com massa constante e então aplicaremos as soluções obtidas cada região separadamente.

#### 3.3.1.1 Componente $\phi_A$

Observe que a equação (3.8) é uma equação de autovalor do Laplaciano, portanto a solução pode ser escritas em termos dos autovalores do operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$  estudados na seção (2.2.5.1),

$$\phi_A = \left( C_1 I_m(\sqrt{-\alpha}\rho) + C_2 K_m(\sqrt{-\alpha}\rho) \right) e^{im\theta} \quad (3.9)$$

onde  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  e escrevemos a solução em termos das funções de Bessel modificadas  $I_m$  e  $K_m$ , pois desejamos achar estados confinados que apenas é possível se  $\alpha < 0$ .  $\phi_A$  escrito como uma combinação dos autovetores de  $\hat{p}^2$  será solução apenas para  $\alpha$  satisfazendo o polinômio característico obtido substituindo  $\phi_A$  na equação (3.8)

$$-\alpha + \epsilon^2 - \delta_0^2 = 0, \quad (3.10)$$

isto é,

$$\alpha = \epsilon^2 - \delta_0^2. \quad (3.11)$$

Portanto, com  $\alpha < 0$  (estados confinados) devemos ter  $|\epsilon| < |\delta_0|$ . Observe que  $|\epsilon| < |\delta_0|$  corresponde exatamente a banda proibida devido ao termo de massa mostrada na Figura 9. Para simplificar a notação, seja  $\eta = \sqrt{-\alpha} = \sqrt{\delta_0^2 - \epsilon^2}$ , então  $\phi_A$  se torna

$$\phi_A = \left( C_1 I_m(\eta\rho) + C_2 K_m(\eta\rho) \right) e^{im\theta}. \quad (3.12)$$

### 3.3.1.2 Componente $\phi_B$

Podemos obter a componente  $\phi_B$  isolando-a no sistema de equações diferenciais como função de  $\phi_A$ , isto é,

$$\begin{aligned} \phi_B &= \frac{1}{E + U_0} \pi \phi_A \\ &= \frac{-i\hbar v_F}{E + U_0} e^{i\kappa\theta} \left( \partial_\rho + i\kappa\rho^{-1}\partial_\theta \right) \phi_A \\ &= -i \frac{1}{\epsilon + \delta_0} e^{i(m+\kappa)\theta} \left( \partial_\rho - \kappa m \rho^{-1} \right) \left( C_1 I_m(\eta\rho) + C_2 K_m(\eta\rho) \right) \\ &= -i \frac{\eta}{\epsilon + \delta_0} \left( C_1 I_{m+\kappa}(\eta\rho) - C_2 K_{m+\kappa}(\eta\rho) \right) e^{i(m+\kappa)\theta}, \end{aligned} \quad (3.13)$$

onde usamos as equações (2.27), (2.56) e (2.57).

### 3.3.2 Solução do Anel Quântico

A solução no interior da linha de defeito pode ser escrita partindo da solução geral como,

$$\phi_A^< = C_1^< I_m(\eta\rho) e^{im\theta}, \quad (3.14)$$

$$\phi_B^< = -i \frac{\eta}{\epsilon + \delta_0} C_1^< I_{m+\kappa}(\eta\rho) e^{i(m+\kappa)\theta}, \quad (3.15)$$

onde descartamos a solução  $K_m$  fazendo  $C_2^< = 0$  já que ela diverge para  $\rho = 0$ . A solução externa a linha de defeito pode ser obtida da solução geral obtida na seção anterior substituindo  $\delta_0$  por  $-\delta_0$

$$\phi_A^> = C_2^> K_m(\eta\rho) e^{im\theta}, \quad (3.16)$$

$$\phi_B^> = i \frac{\eta}{\epsilon - \delta_0} C_2^> K_{m+\kappa}(\eta\rho) e^{i(m+\kappa)\theta}, \quad (3.17)$$



onde descartamos a solução  $I_m$  fazendo  $C_1^> = 0$  já que ela diverge para  $\rho \rightarrow \infty$ . As soluções aceitáveis são aquelas que são contínuas na interface  $\rho = R$ , isto é,  $\Phi^<(R, \theta) = \Phi^>(R, \theta)$ . Impondo essa condição obtemos o seguinte sistema homogêneo

$$\begin{bmatrix} I_m(\eta R) & -K_m(\eta R) \\ \frac{1}{\epsilon + \delta_0} I_{m+\kappa}(\eta R) & \frac{1}{\epsilon - \delta_0} K_{m+\kappa}(\eta R) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^< \\ C_2^> \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

Para o sistema ter solução o determinante da matriz dos coeficientes deve zerar, isto é,

$$\frac{I_m(\eta R)K_{m+\kappa}(\eta R)}{\epsilon - \delta_0} + \frac{I_{m+\kappa}(\eta R)K_m(\eta R)}{\epsilon + \delta_0} = 0. \quad (3.19)$$

Observe que apenas para certos valores a condição anterior é satisfeita, conduzindo a quantização da energia. As soluções dessa equação transcendental foram obtidas por métodos numéricos e os níveis de energia obtidos serão mostrados e discutidos na próxima seção.

Resolvemos o mesmo problema diagonalizando a matriz do Hamiltoniano *tight-binding* dado pela equação (2.7). Utilizamos uma folha de grafeno hexagonal grande relativo ao raio do anel e com bordas *armchair* para evitar efeitos devido a finitude da folha. Utilizamos 100 anéis de carbonos na lateral do hexágono que corresponde a um estrutura de lado igual a 42,316 nm. Para modelar o termo de massa fizemos  $U_{\mathbf{R}_A} = \Delta_0$  ( $U_{\mathbf{R}_B} = -\Delta_0$ ) para átomos na posição  $\mathbf{R}_A$  ( $\mathbf{R}_B$ ) da sub-rede A (B) tal que  $|\mathbf{R}_A| < R$  ( $|\mathbf{R}_B| < R$ ) – tomando como origem o centro do hexágono – e  $U_{\mathbf{R}_A} = -\Delta_0$  ( $U_{\mathbf{R}_B} = \Delta_0$ ) para átomos na posição  $\mathbf{R}_A$  ( $\mathbf{R}_B$ ) tal que  $|\mathbf{R}_A| > R$  ( $|\mathbf{R}_B| > R$ ). Os níveis de energia também são discutidos na próxima seção em comparação com os resultados do modelo contínuo.

Terminaremos essa seção mostrando a solução analítica para o caso particular em que  $\eta R \rightarrow \infty$ , isto é,  $|\epsilon| \ll |\delta_0|$  ou  $|R| \rightarrow \infty$ . Primeiramente usando a equação do Wronskiano para  $I_m$  e  $K_m$ ,

$$\mathcal{W}\{I_m, K_m\}(x) = I_m(x)K_{m+1}(x) + I_{m+1}(x)K_m(x) = \frac{1}{x}, \quad (3.20)$$

podemos reescrever a equação transcendental como

$$2\eta R I_m(\eta R) K_{m+\kappa}(\eta R) = \frac{\delta_0 - \epsilon}{\delta_0}. \quad (3.21)$$

Supondo  $\eta R \rightarrow \infty$ , podemos usar as expansões assintóticas (2.53) e (2.55)

$$2\eta R \frac{e^{\eta R}}{\sqrt{2\pi\eta R}} \left(1 - \frac{4m^2 - 1}{8\eta R}\right) \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{2\eta R}} e^{-\eta R} \left(1 + \frac{4(m + \kappa)^2 - 1}{8\eta R}\right) = \frac{\delta_0 - \epsilon}{\delta_0}, \quad (3.22)$$

simplificando,

$$1 - \frac{4m^2 - 1}{8\eta R} + \frac{4(m + \kappa)^2 - 1}{8\eta R} = 1 - \frac{\epsilon}{\delta_0}, \quad (3.23)$$

ou ainda

$$\frac{\eta\epsilon}{\delta_0} = -\frac{2m\kappa + 1}{2R}, \quad (3.24)$$

onde descartamos termos proporcionais a  $(\eta R)^{-2}$ . Resolvendo a última equação obtemos que,

$$e^2 = \frac{\delta_0^2}{2} - \frac{\delta_0^2}{2} \sqrt{1 - \frac{4m^2 + 4m\kappa + 1}{\delta_0^2 R^2}} \quad (3.25)$$

Assumindo que  $(4m^2 + 4m\kappa + 1)/\delta_0^2 R^2 \ll 1$  e usando a série binomial  $(1 - x^2)^{\frac{1}{2}} \approx 1 - x^2/2$ , simplificamos a equação anterior, agora dada por

$$e = -\text{sgn}(\delta_0) \frac{2\kappa m + 1}{2R}. \quad (3.26)$$

A equação (3.26) será discutida na próxima seção.

### 3.3.3 Resultados e Discussões

A Figura 22 mostra os níveis de energia como função do raio  $R$  do defeito circular para um termo de massa  $\Delta_0 = 200$  meV nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$ . As linhas sólidas são os níveis de energia obtidos pelo modelo contínuo, enquanto que os pontos são os níveis obtidos pelo modelo *tight-binding*. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). Os números são os valores de  $m$  para cada nível de energia. A região cinza é um contínuo de energia de estados livres que no modelo *tight-binding* é traduzido como uma região com uma alta densidade de energias. Observa-se uma boa concordância entre os resultados do modelo contínuo e os do modelo *tight-binding* onde apenas apresentam uma leve discordância para altos valores de  $m$ . Isso ocorre pois o modelo contínuo é obtido do modelo *tight-binding* truncando uma expansão no momento, então quanto maior for o valor do índice do momento angular  $m$  significa mais distante do ponto  $\mathbf{K}$  ou  $\mathbf{K}'$  na rede recíproca, aumentando o erro do truncamento. Os níveis de energia exibem o usual comportamento hiperbólico  $1/R$  de estados confinados em anéis quânticos. Observe que para o caso particular  $\eta R \rightarrow \infty$ , equação (3.26), pode-se observar explicitamente esse comportamento. No limite  $R \rightarrow 0$ , a região de confinamento da função de onda se torna excessivamente pequena exigindo que os estados confinados tenham uma maior curvatura, portanto, níveis de energia maiores, conseqüentemente, os níveis de energia “imersam” no contínuo.

Os níveis de energia são simétricos em relação ao nível de fermi  $E_F = 0$ , de fato, pode-se mostrar facilmente da equação (3.26) que  $E^K(-m) = E^K(m + 1)$  onde o índice sobrescrito  $K$  indica que a relação é válida nas proximidades do vale  $\mathbf{K}$  ( $\kappa = 1$ ). A equação (3.26) também mostra a relação entre as energias em cada vale, de fato, todo nível de energia é duplamente degenerado possuindo um estado em cada vale com o índice de momento angular oposto ao outro, isto é,  $E^K(-m) = E^{K'}(m)$ , onde o índice sobrescrito  $K'$  indica que a relação é válida nas proximidades do vale  $\mathbf{K}'$  ( $\kappa = -1$ ). Isso ocorre devido ao teorema da degenerescência de Kramer, já que o Hamiltoniano possui simetria de inversão temporal e o elétron tem momento semi-inteiro. Portanto, pode-se dizer que esses estados são robustos no sentido que nenhuma impureza não-magnética pode quebrar a degenerescência de vales. Isso também pode ser observado nos resultados *tight-binding* em que todo nível de energia aparece em pares extremamente próximos,

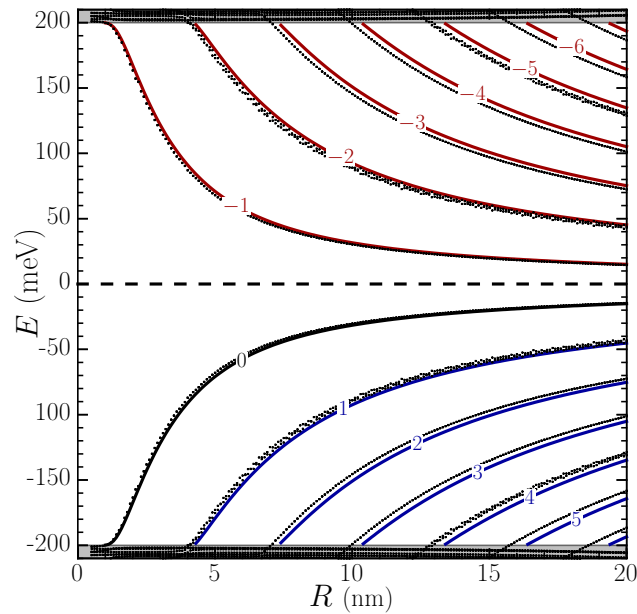


Figura 22 – Níveis de energia como função do raio  $R$  da linha de defeito circular como mostrada na Figura 21. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale  $\mathbf{K}$ . A região cinza corresponde um contínuo de energias. Os pontos são os resultados numéricos obtidos através do modelo *tight-binding*.

a pequena diferença pode ser devido uma interação intra-valet que é descartada no modelo contínuo, ou a erros numéricos.

A Figura 23 mostra o espectro de energia no vale  $\mathbf{K}$  como função da intensidade do termo de massa induzido pelo substrato de h-BN,  $\Delta_0$ , para raio  $R = 20$  nm. As cores e os índices tem o mesmo significado utilizado na Figura 22. Observe que os níveis de energia dentro do *gap*,  $|E| < |\Delta_0|$ , dependem fracamente com a intensidade  $\Delta_0$ , porém quanto maior ele se torna, mais níveis surgem do contínuo. Como foi visto na Seção (3.1), a intensidade do termo de massa induzida depende da distância e do empilhamento do grafeno sobre a camada de h-BN. Isso significa que os níveis de energia que surgem nesse sistema são praticamente independentes dessa distância ou empilhamento e que influenciam apenas na quantidade dos níveis de energia. Observe que esse resultado pode ser demonstrado analiticamente no caso  $\eta R \rightarrow \infty$ , onde na equação (3.26) apenas existe uma dependência no sinal da intensidade  $\Delta_0$ , mas não na intensidade propriamente dita.

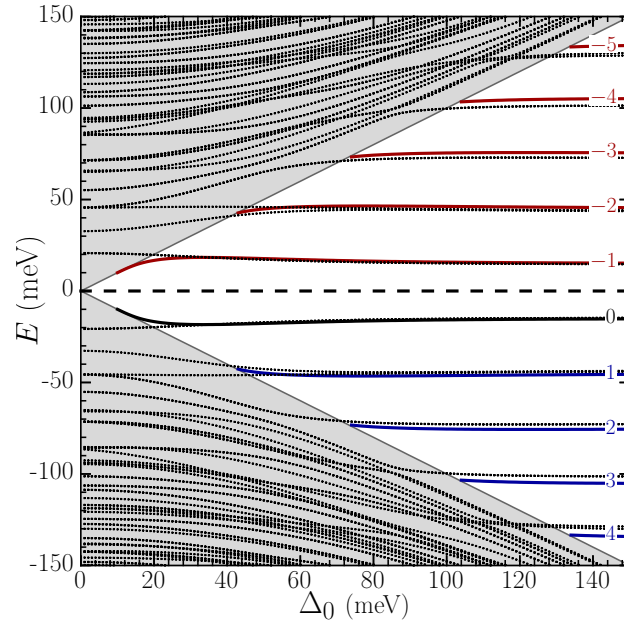


Figura 23 – Níveis de energia como função da intensidade do termo de massa induzido  $\Delta_0$  para o raio da linha de defeito circular  $R = 20$  nm. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale  $\mathbf{K}$ . A região cinza corresponde um contínuo de energias. Os pontos são os resultados numéricos obtidos através do modelo *tight-binding*.

### 3.4 Campo Magnético Perpendicular a Linha de Defeito Circular

Agora consideraremos o sistema estudado na seção anterior incluindo um campo magnético  $\mathbf{B} = B_z \hat{k}$  perpendicular as camadas do substrato e grafeno. Utilizaremos o *gauge* simétrico  $\mathbf{A} = \mathbf{r} \times \mathbf{B}/2$ , portanto

$$\mathbf{A} = \frac{B_z \rho}{2} \hat{\theta}. \quad (3.27)$$

Seguiremos a mesma metodologia dividindo a solução para as regiões interior e exterior à linha circular de defeito. A equação separada (3.7) ainda é válida, porém, devemos substituir  $\pi^\dagger \pi$  usando a equação (2.36)

$$v_F^2 \hat{\mathbf{p}}^2 \phi_A^< + \kappa v_F^2 \hbar e B_z \phi_A^< - (E^2 - \Delta_0^2) \phi_A^< = 0. \quad (3.28)$$

#### 3.4.1 Solução Geral da Equação Separada

Primeiramente acharemos a solução geral do problema de autovalor com massa constante e então aplicaremos as soluções obtidas a cada região separadamente.

### 3.4.1.1 Componente $\phi_A$

A equação (3.28) é uma equação de autovalor do operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$ , portanto, a solução será combinação dos autovalores estudados na Seção (2.2.5.2),

$$\phi_A = (C_1 G_m(\alpha, \rho) + C_2 H_m(\alpha, \rho)) e^{im\theta}, \quad (3.29)$$

onde  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ;  $G_m$  e  $H_m$  são dados nas equações (2.70) e (2.71), respectivamente.  $\phi_A$  escrito como uma combinação dos autovetores de  $\hat{\mathbf{p}}^2$  será solução apenas para  $\alpha$  satisfazendo o polinômio característico obtido substituindo  $\phi_A$  na equação (3.28), isto é, para

$$\alpha = \epsilon^2 - \delta_0^2 - \kappa\beta, \quad (3.30)$$

onde  $\epsilon = E/\hbar v_F$ ,  $\delta_0 = \Delta_0/\hbar v_F$  e  $\beta = eB_z/\hbar$ .

### 3.4.1.2 Componente $\phi_B$

Podemos obter a componente  $\phi_B$  isolando-a no sistema de equações diferenciais como função de  $\phi_A$ ,

$$\begin{aligned} \phi_B &= \frac{1}{E + U_0} \pi \phi_A \\ &= \frac{-i\hbar v_F}{E + U_0} e^{i\kappa\theta} \left( \partial_\rho + i\frac{\kappa}{\rho} \partial_\theta - \kappa \frac{eB_z \rho}{2\hbar} \right) \phi_A \\ &= -i \frac{1}{\epsilon + \delta_0} e^{i(m+\kappa)\theta} \left( \partial_\rho - \frac{\kappa m}{\rho} - \frac{\kappa\beta\rho}{2} \right) (C_1 G_m(\alpha, \rho) + C_2 H_m(\alpha, \rho)) \\ &= -i \frac{1}{\epsilon + \delta_0} (C_1 \Omega G_m(\alpha, \rho) + C_2 \Omega H_m(\alpha, \rho)) e^{i(m+\kappa)\theta}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde usamos as equações (2.33) e (3.27). O operador  $\Omega$  é definido como

$$\Omega = \partial_\rho - \frac{\kappa m}{\rho} - \frac{\kappa\beta\rho}{2}, \quad (3.32)$$

e as funções  $\Omega G_m(\alpha, \rho)$  e  $\Omega H_m(\alpha, \rho)$  podem ser facilmente calculadas

$$\Omega G_m(\alpha, \rho) = -\frac{\rho}{2} (\kappa\beta + |\beta|) G_m(\alpha, \rho) + \frac{|m| - \kappa m}{\rho} G_m(\alpha, \rho) + \quad (3.33)$$

$$+ \frac{a}{|m| + 1} \rho |\beta| e^{-\chi/2} \chi^{|m|/2} {}_1F_1(a + 1, |m| + 2, \chi), \quad (3.34)$$

$$\Omega H_m(\alpha, \rho) = -\frac{\rho}{2} (\kappa\beta + |\beta|) H_m(\alpha, \rho) + \frac{|m| - \kappa m}{\rho} H_m(\alpha, \rho) + \quad (3.35)$$

$$- a \rho |\beta| e^{-\chi/2} \chi^{|m|/2} U(a + 1, |m| + 2, \chi), \quad (3.36)$$

onde  $\chi = |\beta|\rho^2/2$ ,  $a = (|m| + \text{sgn}(\beta)m - \alpha/|\beta| + 1)/2$  e utilizamos as equações (2.76) e (2.77).

### 3.4.2 Solução do Anel Quântico

A solução no interior da linha de defeito pode ser escrita partindo da solução geral como

$$\phi_A^< = C_1^< G_m(\alpha, \rho) e^{im\theta}, \quad (3.37)$$

$$\phi_B^< = -i \frac{1}{\epsilon + \delta_0} C_1^< \Omega G_m(\alpha, \rho) e^{i(m+\kappa)\theta}, \quad (3.38)$$

onde descartamos a solução  $H_m$  fazendo  $C_2^< = 0$  já que ela diverge para  $\rho = 0$ . A solução externa à linha de defeito pode ser obtida da solução geral obtida na seção anterior substituindo  $\delta_0$  por  $-\delta_0$ , levando as seguintes soluções

$$\phi_A^< = C_2^> H_m(\alpha, \rho) e^{im\theta}, \quad (3.39)$$

$$\phi_B^< = -i \frac{1}{\epsilon - \delta_0} C_2^> \Omega H_m(\alpha, \rho) e^{i(m+\kappa)\theta}, \quad (3.40)$$

onde descartamos a solução  $G_m$  fazendo  $C_1^> = 0$  já que ela diverge para  $\rho \rightarrow \infty$ . As soluções aceitáveis são aquelas que são contínuas na interface  $\rho = R$ , isto é,  $\Phi^<(R, \theta) = \Phi^>(R, \theta)$ . Impondo essa condição obtemos o seguinte sistema homogêneo

$$\begin{bmatrix} G_m(\alpha, R) & -H_m(\alpha, R) \\ \frac{1}{\epsilon + \delta_0} \Omega G_m(\alpha, R) & -\frac{1}{\epsilon - \delta_0} \Omega H_m(\alpha, R) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^< \\ C_2^> \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.41)$$

Para o sistema ter solução não trivial o determinante da matriz dos coeficientes deve zerar, isto é,

$$\frac{G_m(\alpha, R) \Omega H_m(\alpha, R)}{\epsilon - \delta_0} - \frac{H_m(\alpha, R) \Omega G_m(\alpha, R)}{\epsilon + \delta_0} = 0. \quad (3.42)$$

Observe que apenas para certos valores que a condição anterior é satisfeita, conduzindo a quantização da energia. As soluções dessa equação transcendental foram obtidas por métodos numéricos e os níveis de energia obtidos serão mostrados e discutidos na próxima seção.

Assim como no caso sem campo magnético podemos achar uma aproximação para os níveis de energia para o limite  $|\epsilon| \ll |\delta_0|$  ou  $|\delta_0| \rightarrow \infty$ , porém, através de considerações numéricas. Como será mostrado na Figura 26, os níveis de energia nesse limite são linear com o campo magnético, isto é, podem ser escritos como  $E = a_1 B_z + a_0$ . O coeficiente constante,  $a_0$ , é o nível de energia quando o campo for nulo, portanto, deve ser igual a equação (3.26). O coeficiente angular  $a_1$  pode ser determinado através da Figura 24, onde se observa que para  $R \rightarrow \infty$  os níveis também são lineares com o raio  $R$ , isto é,  $a_1 = \mu R$ , portanto, ajustando  $\mu$  as curvas obtidas tem-se que

$$E = \text{sgn}(\Delta_0) \left[ \kappa (-0.4530 \text{ meV/nm T}) R B_z - \frac{\hbar v_F (2\kappa m + 1)}{2R} \right]. \quad (3.43)$$

A equação (3.43) será discutida na próxima seção.

### 3.4.3 Resultados e Discussão

A Figura 24 mostra os níveis de energia como função do raio  $R$  do defeito circular para um termo de massa  $\Delta_0 = 200$  meV sobre a influência de campo magnético  $B_z = 1$  T nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$  obtidos pelo modelo contínuo. A região cinza não mais corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau. Os níveis de energia ainda exibem um comportamento assintótico  $1/R$ , porém não tendem mais para zero, mas para  $\text{sgn}(\Delta_0) \kappa (-0.4530 \text{ meV/nm T}) RB_z$  como pode-se observar na equação (3.43).

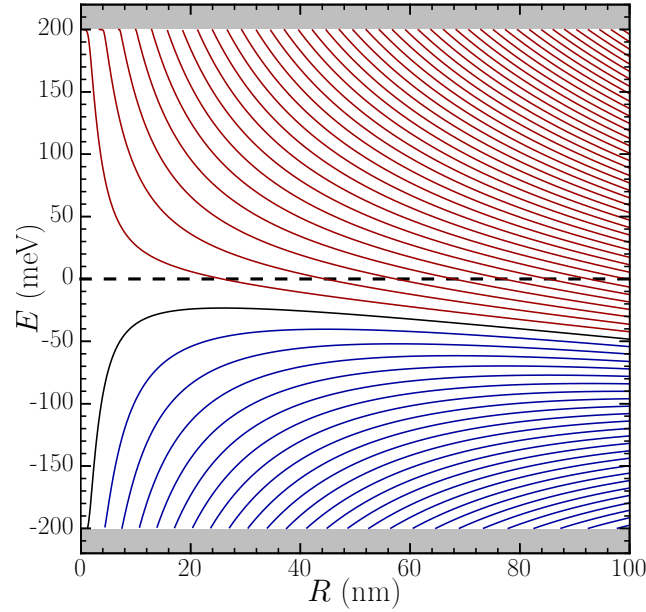


Figura 24 – Níveis de energia como função do raio  $R$  da linha de defeito circular sobre a influência de campo magnético perpendicular  $B_z = 1$  T. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale  $\mathbf{K}$ . A região cinza não mais corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau.

A Figura 25 mostra o espectro de energia no vale  $\mathbf{K}$  como função da intensidade do termo de massa induzido pelo substrato de h-BN,  $\Delta_0$ , para raio  $R = 20$  nm e sobre a influência de campo magnético  $B_z = 1$  T. Observe que os níveis de energia dentro do *gap*,  $|E| < |\Delta_0|$ , ainda dependem fracamente com a intensidade  $\Delta_0$ . Observe que no limite  $|\epsilon| \ll |\delta_0|$  ou  $|\delta_0| \rightarrow \infty$ , a equação (3.43) apenas existe uma dependência no sinal da intensidade  $\Delta_0$ , mas não na intensidade propriamente dita.

A Figura 26 mostra o espectro de energia para ambos os vales  $K$  (linha sólidas) e  $K'$  (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo  $B_z$  para raio  $R = 20$  nm e intensidade do termo de massa induzida pelo substrato  $\Delta_0 = 200$  meV. A região cinza não corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau semelhantes aos mostrados na Figura 9. Observe que no limite  $|E| \ll |\Delta_0|$ , os níveis de energia exibem uma dependência

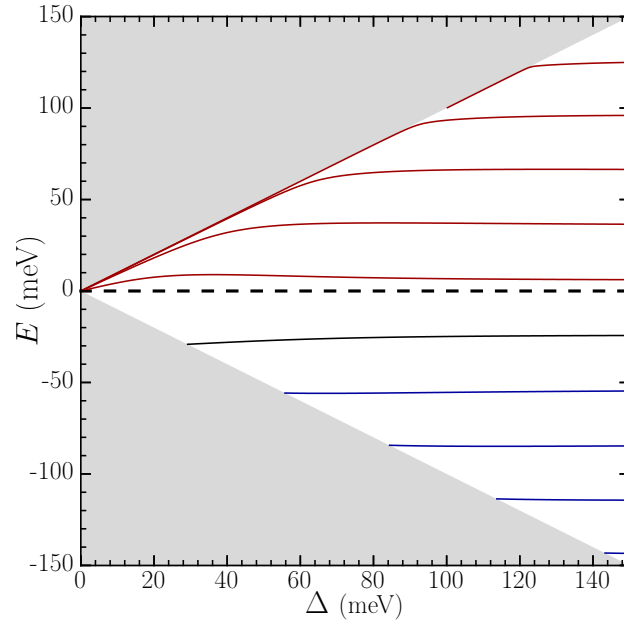


Figura 25 – Níveis de energia como função da intensidade do termo de massa induzido  $\Delta_0$  para o raio da linha de defeito circular de raio  $R = 20$  nm e sobre a influência de campo magnético perpendicular  $B_z = 1$  T. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo) para elétrons no vale  $\mathbf{K}$ . A região cinza não mais corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau.

aproximadamente linear com o campo magnético  $B_z$  com os níveis igualmente espaçados o que nos possibilitou deduzir a equação (3.43). Através desta equação pode-se mostrar que os níveis de energia possuem a simetria  $E^K(m) = -E^{K'}(m+1)$ . A influência do campo magnético quebra a degenerescência entre os vales, porém, reestabelece para eventuais valores do campo e índices de momento angular maiores. A linha sólida verde corresponde ao estado fundamental para elétrons que troca periodicamente de vale e momento angular semelhante as oscilações de Aharonov-Bohm. Pode-se calcular o período de oscilação no limite  $|\epsilon| \ll |\delta_0|$  ou  $|\delta_0| \rightarrow \infty$  através da equação (3.43), obtendo que

$$\Delta Bz = \frac{\hbar v_F}{(0.4530 \text{ meV/nm T}) 2R^2}. \quad (3.44)$$

Esses estados são semelhantes aos estados na linha de defeito vista na Seção (3.2), se propagam unidirecionalmente ao longo da linha circular, com a direção dependendo do vale. Para demonstra isso, calculamos a componente angular da densidade de corrente,

$$j_\theta = -v_F \Phi^\dagger \sigma_\theta \Phi = -iv_F \begin{bmatrix} \overline{\phi_A} & \overline{\phi_B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -e^{i\theta} \\ -e^{i\theta} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{bmatrix} \quad (3.45)$$

onde a barra sobre a função expressa o complexo conjugado. Supondo  $\phi_A = \varphi_A(\rho)e^{im\theta}$ ,  $\phi_B = i\varphi_B(\rho)e^{i(m+1)\theta}$ ,  $\varphi_A(\rho)$  e  $\varphi_B(\rho)$  reais, obtemos que,

$$j_\theta = -2v_F \varphi_A \varphi_B. \quad (3.46)$$



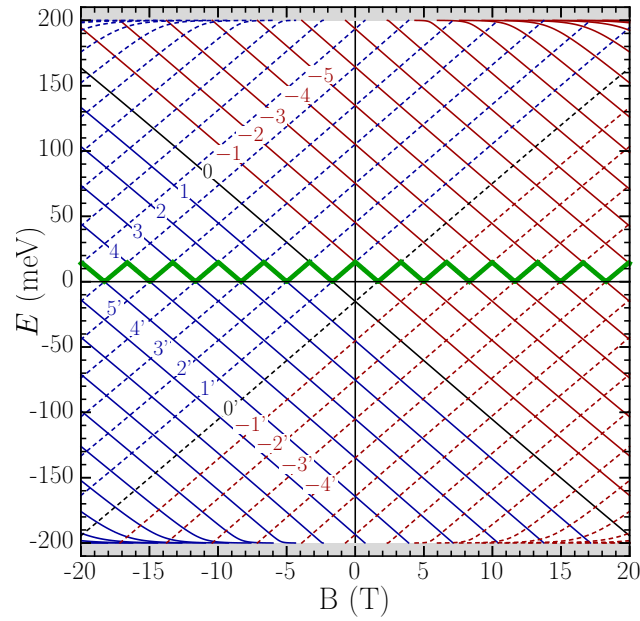


Figura 26 – Níveis de energia para os vales  $K$  (linha sólidas) e  $K'$  (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo  $B_z$  para raio  $R = 20$  nm. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). A linha sólida verde corresponde ao estado fundamental para elétrons. A região cinza não corresponde a um contínuo de energias, mas sim, aos níveis de Landau semelhantes aos mostrados na Figura 9.

A Figura 27 mostra  $\langle j_\theta/v_F \rangle$  para os vales  $K$  (linhas sólidas) e  $K'$  (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo  $B_z$  para raio  $R = 20$  nm. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). Observe que a densidade de corrente dos estados no vale  $K$  é negativa (rotação horária), enquanto que dos estados no vale  $K'$  é positiva (rotação anti-horária). A linha sólida verde corresponde à densidade de corrente do estado fundamental para elétrons onde se observa que a direção de propagação pode ser controlada ajustando o campo magnético externo.

### 3.5 Anéis Elípticos

Vimos na seção anterior que os estados confinados no anel quântico formado pela linha de defeito circular são unidirecionais, portanto, assim como em estados topológicos, podem contornar desordens sem ser espalhados. Para provar essa hipótese, propomos uma linha de defeito de forma elíptica. Anéis elípticos já foram estudados em semicondutores e observa-se que os elétrons tendem a se confinar nas regiões de maior curvatura. Com isso o confinamento deixa de ser anelar, alterando efeitos de interferência como as oscilações de Aharonov-Bohm. Os

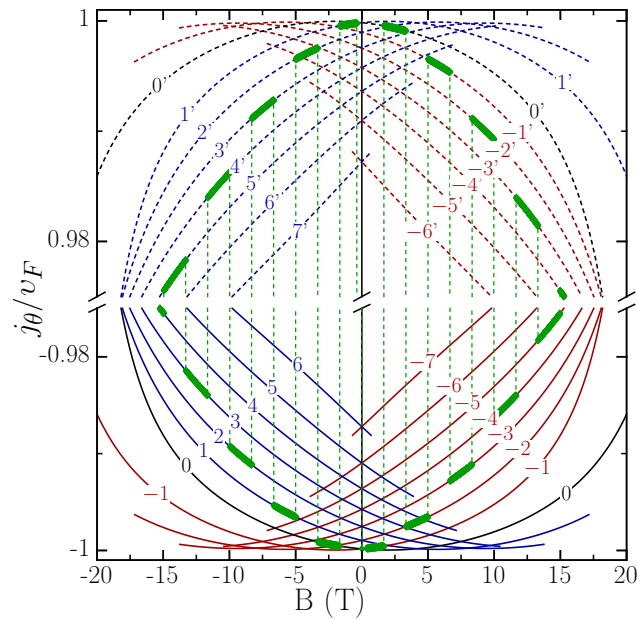


Figura 27 – Densidade de corrente angular para os vales  $K$  (linha sólidas) e  $K'$  (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo  $B_z$  para raio  $R = 20$  nm. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). A linha sólida verde corresponde a densidade de corrente angular do estado fundamental para elétrons.

níveis de energia para um anel elíptico no grafeno formado por uma linha de defeito no substrato foram obtidas numericamente pelo método *tight-binding* em uma folha de grafeno idêntica a descrita na Seção 3.3.2.

A Figura 28 mostra os níveis de energia para um anel elíptico como função da excentricidade,  $\xi$ , variando-a de zero (círculo de raio  $R = 20$  nm) até 0.99\* mantendo o perímetro da elipse constante. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. Observe que os níveis de energia praticamente não se alteram com a mudança da excentricidade, exceto para  $\xi > 0,9$ . Para  $\xi > 0,9$  a parte inferior da elipse se aproxima da parte superior e o sistema se aproxima de duas semi-linhas paralelas onde a função de onda se propagando em direções opostas em cada linha. Devido a proximidade, o confinamento exige estados com maior curvatura, portanto, maior energia, então os níveis “imergem” no contínuo.

A Figura 29 mostra os níveis de energia obtidos pelo modelo *tight-binding* para uma elipse com excentricidade,  $\xi = 0.8$ , deformada do círculo de raio  $R = 20$  nm mantendo o perímetro constante. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. Observe que os níveis de energia são praticamente inalterados em relação aos da Figura 26, em particular, as oscilações Aharonov-Bohm são mantidas mesmo existindo regiões de alta curvatura no confinamento. Por não existir estados se propagando na direção oposta ao longo da

\* Para  $\xi = 1$  a elipse se torna duas linhas.

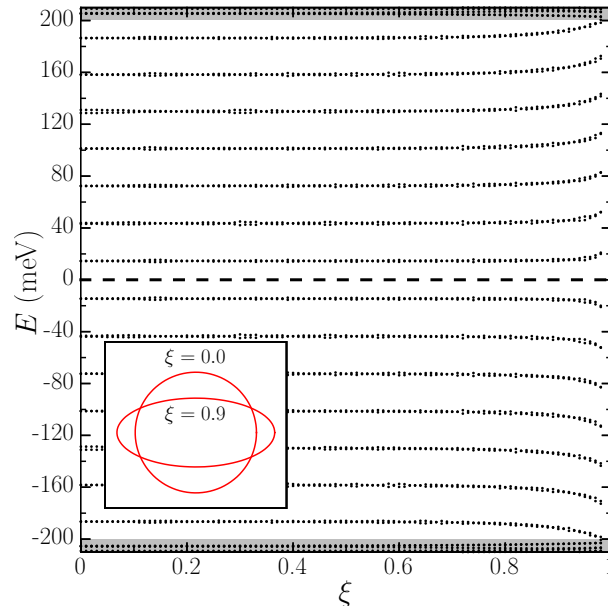


Figura 28 – Níveis de energia obtidos pelo modelo *tight-binding* para um anel elíptico como função a excentricidade,  $\xi$ , variando a excentricidade de zero (círculo de raio  $R = 20$  nm) até 0.99 mantendo o perímetro da elipse constante. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. *inset* Forma da elipse para  $\xi = 0$  e  $\xi = 0.9$ .

linha de defeito, os estados não são confinados nas regiões de alta curvatura o que pode ser visto no *inset* da Figura 29 que mostra a densidade de probabilidade distribuída ao longo da elipse para o nível de energia indicado na figura ( $B_z = 3$  T).

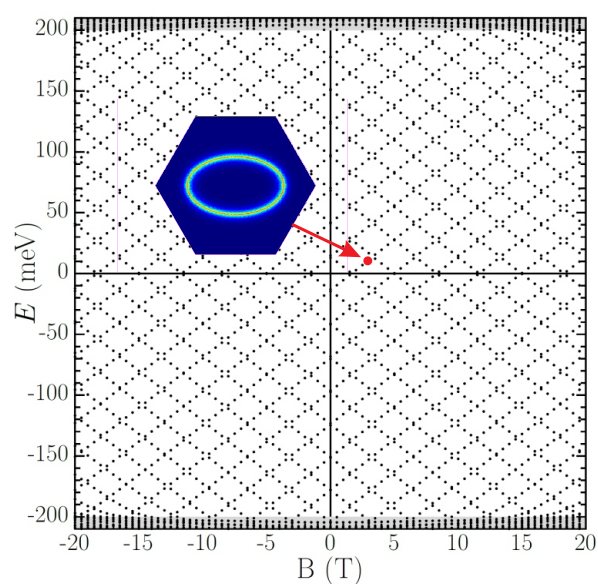


Figura 29 – Níveis de energia obtidos pelo modelo *tight-binding* para uma elipse com excentricidade,  $\xi = 0.9$ , deformada do círculo de raio  $R = 20$  nm mantendo o perímetro constante. A intensidade do termo de massa induzida pelo substrato é  $\Delta_0 = 200$  meV. *inset* Densidade de probabilidade para o nível de energia indicada pela seta.

# 4 Confinamento topológico em bicamada de grafeno

## 4.1 Confinamento Topológico em Bicamada de Grafeno

Como foi visto na Seção (2.4.4) um potencial uniforme pode abrir um gap na dispersão eletrônica da bicamada de grafeno. Isso abre uma perspectiva de se estudar confinamento em BG devido a um potencial dependendo da posição. Sabe-se que aplicando uma diferença de potencial inhomogênea em uma BG, pode-se confinar espacialmente os portadores de carga para energias próximas do nível de Fermi <sup>25, 31, 32</sup>. No entanto, além de um confinamento convencional, há a possibilidade de um confinamento *topológico* na interface entre regiões em que o Hamiltoniano é topologicamente distinto <sup>9, 33, 34, 35</sup>.

Introduziremos a seguinte nomenclatura: se o espectro de energias de um Hamiltoniano possuir uma *gap* diremos que ele é um **Hamiltoniano aberto**, caso contrário será um **Hamiltoniano fechado**. Partindo desse conceito, dois Hamiltonianos aberto são topologicamente iguais quando pode-se deformar continuamente um no outro sem que haja um Hamiltoniano fechado no processo, caso contrário são topologicamente distintos, isto é, um não pode ser deformado continuamente no outro a menos que ocorra uma transição de fase e o Hamiltoniano se torne fechado <sup>62, 63</sup>.

Um exemplo de Hamiltonianos abertos topologicamente distintos são os Hamiltonianos de uma BG submetido à diferença de potenciais uniformes e inversas. Isso se verifica pois i) a deformação no Hamiltoniano ocorre apenas deformando a energia potencial, já que o termo de energia cinética é inalterado e ii) para deformar continuamente uma ddp  $U(\mathbf{r}) = U_0$  para  $U(\mathbf{r}) = -U_0$ , haverá estágios em que  $\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} U(\mathbf{r}) = 0$  para algum valor da coordenada angular  $\theta$ ; nesses casos, haverá estados livres, com espectro contínuo e energia nula, portanto gerando um espectro sem *gap*.

Na interface entre regiões onde o Hamiltoniano é topologicamente distinto (**parede de domínio** ou **kink**) surgem estados de bordas metálicos, isto é, sem *gap* que são chamados de estados topológicos.

Um exemplo de tal potencial *kink* foi estudado por I. Martin *et al*, no qual uma ddp é induzida em um semiplano da BG por um campo elétrico uniforme e perpendicular e no semiplano complementar a ddp (e o campo) é oposto ao primeiro (ver Figura 30). Martin utilizou o modelo contínuo estudando vários potenciais gerados pela configuração, tanto analiticamente com um potencial que mudava abruptamente de sinal (potencial *kink* abrupto), quanto numericamente com potenciais em que a mudança de sinal acontecia suavemente (potencial *kink* suave). Em

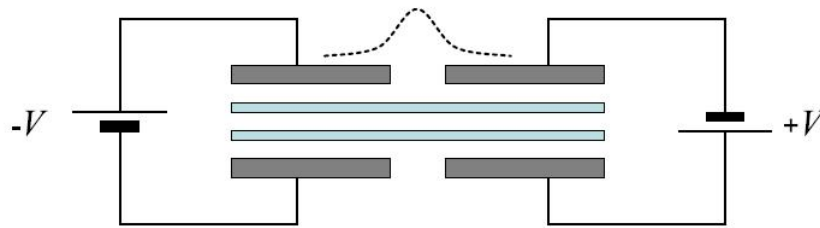


Figura 30 – Esquema de um potencial *kink* induzido em uma BG através de dois capacitores. As camadas foram esboçadas em linhas coloridas e os capacitores em cinza. Em linha pontilhada mostra um esboço dos estados confinado na direção perpendicular a direção em que há a troca de sinal. Figura adaptada da Ref. [9].

seus resultados, os autores estudaram estados quirais unidimensionais com energia nula (1D *chiral zero modes*). O espectro próximo do ponto **K** obtido é mostrado na Figura 31.

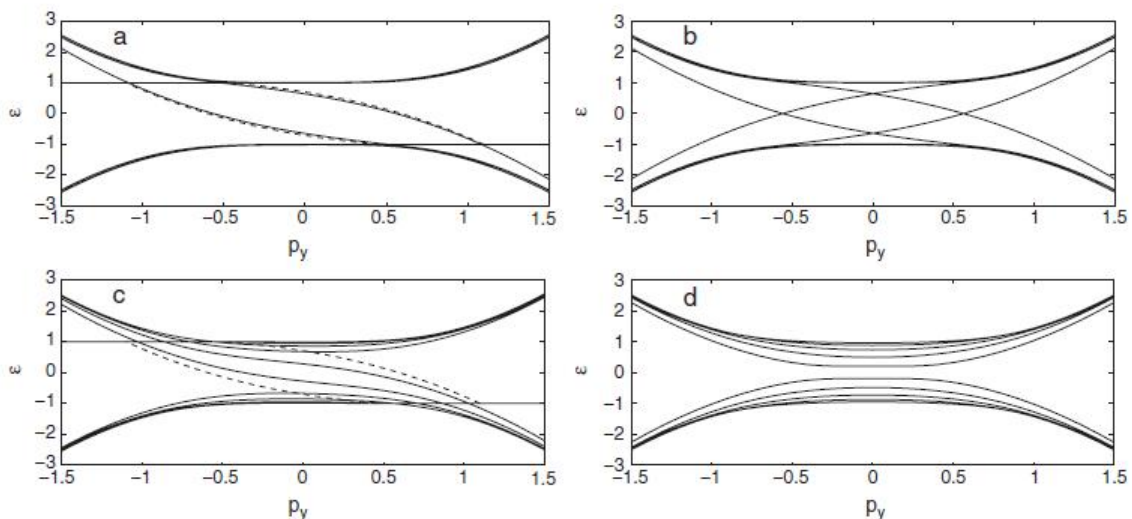


Figura 31 – Espectro de energia como função do momento na direção  $y$ . O estado é confinado espacialmente na direção  $x$ . (a) Espectro obtido para um potencial *kink* abrupto (linha pontilhada) e obtido com um potencial *kink* suave proporcional a  $V \tanh(x/l)$  para  $l = 0,5$  (linha sólida). (b) Espectro para um potencial *kink* abrupto e um *antikink* (oposto do potencial *kink*). (c) Mesmo que em (a) para  $l = 4$ , o qual torna a troca de sinal mais lenta. (d) Espectro de um confinamento convencional (não topológico). Figura adaptada da Ref. [9].

Os gráficos (a) e (c) da Figura 31 mostram o espectro para um potencial *kink* abrupto (linha pontilhada) e um potencial *kink* suave (linha sólida). No gráfico (c) a mudança do sinal do *kink* suave se dá de forma mais lenta do que no gráfico (a), por isso em (a) as curvas do *kink* abrupto e suave se assemelham mais do que as curvas em (c). Em (c) observa-se ainda o surgimento de novas subbandas no espectro do *kink* suave. O gráfico (b) mostra o espectro para

um potencial *kink* e seu oposto, um *antikink*. Observe que, para os confinamentos topológicos, gráficos (a),(b) e (c), o espectro é ímpar, isto é,  $E(p_y) = -E(-p_y)$  e possuem dois 1D *chiral zero modes*, ambos com velocidade de propagação negativa. Tais estados surgem devido a natureza topológica do confinamento. Em (d) é mostrado o espectro de um confinamento convencional (não topológico) onde não se observa tais estados e o *gap* é mantido. Para se obter o espectro próximo do ponto  $\mathbf{K}'$  basta substituir  $p_y$  por  $-p_y$ . Nos gráficos da Figura 31 tal substituição é equivalente a refletir as curvas em relação ao eixo das ordenadas, portanto, do gráfico (b), vemos que o espectro nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}'$  é igual ao espectro do potencial *antikink* nas proximidades do ponto  $\mathbf{K}$ . Isso mostra que tal sistema possui dois 1D *chiral zero modes* por vale (pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ ) que se propagando na mesma direção e sentido, porém, estados de vales diferentes se propagam em sentidos contrários. Esses estados podem, a priori, ser aplicados na *valleytronics*\* <sup>64, 65</sup>, como esses estados possuem direção de propagação determinadas pelo vale que se encontram, então um “filtro de vale” pode ser feito aplicando uma diferença de potencial ao longo do *kink*, apenas elétrons de um dos vales vão se propagar, os elétrons do outro vale serão “filtrados”.

O mesmo sistema foi estudado sobre a influência de um campo magnético constante por Zarenia *et al.* Os resultados mostraram que devido ao forte confinamento e a propagação unidirecional, o níveis de energias confinados no *kink* eram praticamente insensíveis ao campo magnético<sup>10</sup> como mostra a Figura 32, onde os estados quirais são mostrados em azul para dois valores do momento no eixo y, (a)  $k'_y = 0$  e (b)  $k'_y = 0.15$ , sendo  $k'_y = k_y \hbar v_F / t_{\perp}$ .

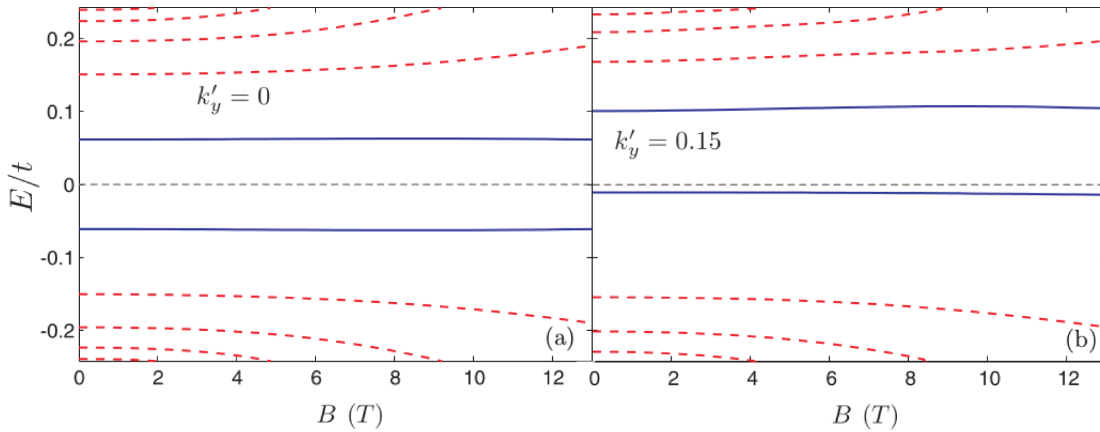


Figura 32 – Espectro de energia de um *kink* linear como função do campo magnético para (a)  $k'_y = 0$  e (b)  $k'_y = 0.15$ , onde  $k'_y = k_y \hbar v_F / t_{\perp}$ . Os níveis em azul correspondem aos níveis confinado no “kink”, enquanto que os vermelho aos níveis de Landau. Figura adaptada da Ref. [10].

\* Proposta de utilização dos graus de liberdade dos vales para funcionalidades eletrônicas

## 4.2 Anel Quântico Topológico sobre um Campo Magnético

Em trabalhos anteriores propomos um sistema em que a mudança de sinal (*kink*) na ddp ocorria na direção radial<sup>33</sup>. Tal sistema dá origem a estados quirais confinados ao longo do *kink*, portanto, semelhantes a estados confinados em anéis quânticos. Os níveis de energia apresentavam oscilações semelhantes às oscilações de Aharonov-Bohm mesmo na ausência de um campo magnético. Nessa seção daremos continuidade ao estudo desse sistema estudando a influência de um campo magnético  $\mathbf{B} = B_z \hat{k}$  perpendicular a BG. Utilizaremos o *gauge* simétrico  $\mathbf{A} = \mathbf{r} \times \mathbf{B}/2$ , portanto

$$\mathbf{A} = \frac{B_z \rho}{2} \hat{\theta}. \quad (4.1)$$

Suponha que a BG – a qual trataremos como infinita – é colocada entre placas paralelas circulares com raio  $R$  de um capacitor<sup>†</sup> submetido á uma ddp igual a  $2V$ . Suponha que existe outro capacitor de placas paralelas vazadas, submetido à uma ddp inversa ao do primeiro capacitor, de forma que a região da BG que não está entre as placas do primeiro capacitor, estará entre as placas vazadas do segundo capacitor<sup>‡</sup> (ver Figura 33). Então os potenciais induzido sobre as camadas são dados por (ver Figura 34),

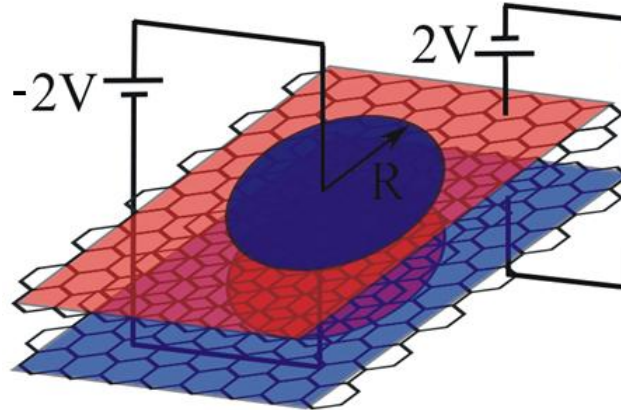


Figura 33 – Esquema de um anel quântico eletrostático em um BG. Na região do disco, devido a um capacitor, atravessa um campo elétrico uniforme e perpendicular as camadas, o qual induz um potencial de  $+V$  (azul) no disco da camada superior e  $-V$  (vermelho) no disco da camada inferior. Na região fora do disco, devido a um segundo capacitor, um campo elétrico oposto ao primeiro induz um potencial de  $-V$  (vermelho) na região complementar do disco da camada superior e  $+V$  (azul) na respectiva região da camada inferior.

$$U_1(\rho) = \begin{cases} V, & \text{se } 0 \leq \rho < R, \\ -V, & \text{se } R < \rho, \end{cases} \quad (4.2)$$

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

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



e

$$U_2(\rho) = \begin{cases} -V, & \text{se } 0 \leq \rho < R, \\ V, & \text{se } R < \rho. \end{cases} \quad (4.3)$$

onde  $U_1(\rho)$  ( $U_2(\rho)$ ) é o potencial induzido sobre a camada superior (inferior). Chamamos tal sistema de anel quântico, pois a região de confinamento (a região onde os potenciais mudam de sinal) possui uma forma anelar.

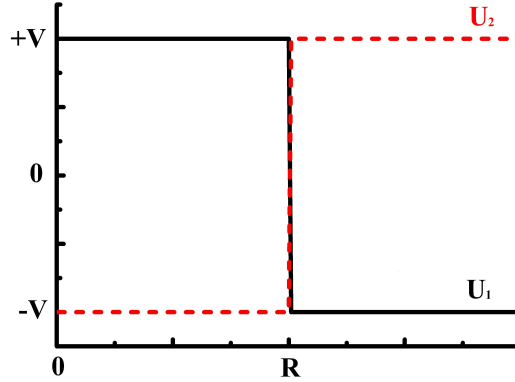


Figura 34 – Gráfico do potencial  $U_1$  (em preto) e  $U_2$  (em vermelho) como função da coordenada radial, para um anel quântico em uma bicamada de grafeno.

Podemos, sem perda de generalidade, supor que as componentes do *pseudospinor*,  $\phi_i$ , são da forma

$$\phi_i(\rho, \theta) = \begin{cases} \phi_i^<(\rho, \theta), & \text{se } 0 \leq \rho \leq R, \\ \phi_i^>(\rho, \theta), & \text{se } R \leq \rho, \end{cases} \quad (4.4)$$

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

$$\pi\phi_B^< + (U_1 - E)\phi_A^< + t_\perp\phi_{B'}^< = 0, \quad (4.5)$$

$$\pi^\dagger\phi_A^< + (U_1 - E)\phi_B^< = 0, \quad (4.6)$$

$$\pi^\dagger\phi_{A'}^< + (U_2 - E)\phi_{B'}^< + t_\perp\phi_A^< = 0, \quad (4.7)$$

$$\pi\phi_{B'}^< + (U_2 - E)\phi_{A'}^< = 0. \quad (4.8)$$

Fazendo  $U_1 = -U_2$  uniformes e separando o sistema, obtemos que

$$\begin{aligned} \pi^\dagger\pi\pi^\dagger\phi_A^< - (U_1 - E)^2\pi^\dagger\pi\phi_A^< - (U_2 - E)^2\pi\pi^\dagger\phi_A^< + \\ + (U_1 - E)^2(U_2 - E)^2\phi_A^< - t_\perp^2(U_1 - E)(U_2 - E)\phi_A^< = 0. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Substituindo  $\pi\pi^\dagger$  e  $\pi^\dagger\pi$  pelas equações (2.35) e (2.36), temos que

$$\begin{aligned} v_F^4(\hat{\mathbf{p}}^2)^2\phi_A^< - v_F^2 \left[ (U_1 - E)^2 + (U_2 - E)^2 \right] \hat{\mathbf{p}}^2\phi_A^< + \left[ (U_1 - E)^2(U_2 - E)^2 - \right. \\ \left. - t^2(U_1 - E)(U_2 - E) - v_F^4\hbar^2e^2B_z^2 - v_F^2\hbar e\kappa B_z(U_1 - E)^2 + \kappa v_F^2\hbar e\kappa B_z(U_2 - E)^2 \right] \phi_A^< = 0, \end{aligned} \quad (4.10)$$

fazendo  $U_1 = -U_2 = V$ , obtemos

$$v_F^4 (\hat{\mathbf{p}}^2)^2 \phi_A^< - 2v_F^2 (V^2 + E^2) \hat{\mathbf{p}}^2 \phi_A^< + \left[ (V^2 - E^2)^2 + t^2 (V^2 - E^2) - v_F^4 \hbar^2 e^2 B_z^2 + 4v_F^2 \hbar e \kappa B_z V E \right] \phi_A^< = 0. \quad (4.11)$$

Primeiramente acharemos a solução geral da equação (4.11) e a adequaremos a região interna  $\rho < R$ . Para obter o sistema de equações e a equação separada para a região externa  $\rho > R$  basta substituir  $V$  por  $-V$ , portanto a solução geral achada na próxima seção também será válida para a região  $\rho > R$  se trocarmos  $v$  por  $-v$ .

## 4.2.1 Solução Geral da Equação Separada

### 4.2.1.1 Componente $\phi_A$

Observe que a equação (4.11) é um polinômio no operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$  com coeficientes constantes, portanto a solução pode ser escrita como uma combinação dos autovalores de  $\hat{\mathbf{p}}^2$ , desde que, os respectivos autovalores satisfaçam o polinômio característico

$$\gamma^4 \alpha^2 - 2\gamma^2 (V^2 + E^2) \alpha + \left[ (V^2 - E^2)^2 + t^2 (V^2 - E^2) - \gamma^4 \beta^2 + 4\gamma^2 \kappa \beta V E \right] = 0, \quad (4.12)$$

onde  $\gamma = v_F \hbar$ . Fazendo  $\epsilon = E/\gamma$ ,  $v = V/\gamma$  e  $\tau = t_\perp/\gamma$  a equação característica torna-se

$$\alpha^2 - 2(v^2 + \epsilon^2) \alpha + \left[ (v^2 - \epsilon^2)^2 + \tau^2 (v^2 - \epsilon^2) - \beta^2 + 4\kappa \beta v \epsilon \right] = 0. \quad (4.13)$$

Resolvendo a equação para  $\alpha$ , obtêm-se duas soluções

$$\alpha_{P,M} = v^2 + \epsilon^2 \pm \sqrt{4v^2 \epsilon^2 - \tau^2 (v^2 - \epsilon^2) + \beta^2 - 4\kappa \beta v \epsilon}. \quad (4.14)$$

Dada uma energia  $E$ , a componente  $\phi_A$  será dada pela combinação linear dos autovetores do operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$  estudados na Seção (2.2.5.2)

$$\phi_A(\mathbf{r}) = [C_1 G_m(\alpha_M, \rho) + C_2 G_m(\alpha_P, \rho) + C_3 H_m(\alpha_M, \rho) + C_4 H_m(\alpha_P, \rho)] e^{im\theta}. \quad (4.15)$$

Observe que como temos dois autovalores  $\alpha_{P,M}$  duplamente degenerados, uma solução  $G_m(\alpha, \rho)$  e a outra  $H_m(\alpha, \rho)$ , então temos quatro soluções linearmente independentes, como é de se esperar já que a equação (4.11) é de quarta ordem.

### 4.2.1.2 Componente $\phi_B$

Supondo obtido a componente  $\phi_A$  do pseudospinor, pode-se obter a componente  $\phi_B$  através da equação (4.6)

$$\phi_B = -\frac{\pi^\dagger \phi_A}{U_1 - E}. \quad (4.16)$$

Em coordenadas polares, o operador  $\pi^\dagger$  é da forma

$$\pi^\dagger = -i\hbar v_F e^{-i\kappa\theta} \left( \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{i\kappa}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\rho\kappa\beta}{2} \right). \quad (4.17)$$

Se  $\pi^\dagger$  operar sobre uma função da forma  $F(\rho, \theta) = G(\rho)e^{im\theta}$ , têm-se que

$$\pi^\dagger G(\rho)e^{im\theta} = -i\gamma e^{i(m-\kappa)\theta} \left( \frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa m}{\rho} + \frac{\kappa\rho\beta}{2} \right) G(\rho) \quad (4.18)$$

$$= -i\gamma e^{i(m-\kappa)\theta} \Omega_2 G(\rho). \quad (4.19)$$

O operador  $\Omega_2$  é definido como

$$\Omega_2 = \frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa m}{\rho} + \frac{\kappa\beta\rho}{2}, \quad (4.20)$$

portanto no caso do potencial uniforme temos que

$$\phi_B = \frac{i}{v - \epsilon} [C_1 \Omega_2 G_m(\alpha_M, \rho) + C_2 \Omega_2 G_m(\alpha_P, \rho) + C_3 \Omega_2 H_m(\alpha_M, \rho) + C_4 \Omega_2 H_m(\alpha_P, \rho)] e^{i(m-\kappa)\theta}, \quad (4.21)$$

e as funções  $\Omega_2 G_m(\alpha, \rho)$  e  $\Omega_2 H_m(\alpha, \rho)$  podem ser facilmente calculadas como

$$\begin{aligned} \Omega_2 G_m(\alpha, \rho) &= \frac{\rho}{2} (\kappa\beta - |\beta|) G_m(\alpha, \rho) + \frac{|m| + \kappa m}{\rho} G_m(\alpha, \rho) + \\ &\quad + \frac{a}{|m| + 1} \rho |\beta| e^{-\chi/2} \chi^{|m|/2} {}_1F_1(a + 1, |m| + 2, \chi), \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} \Omega_2 H_m(\alpha, \rho) &= \frac{\rho}{2} (\kappa\beta - |\beta|) H_m(\alpha, \rho) + \frac{|m| + \kappa m}{\rho} H_m(\alpha, \rho) + \\ &\quad - a\rho |\beta| e^{-\chi/2} \chi^{|m|/2} U(a + 1, |m| + 2, \chi), \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde  $\chi = |\beta|\rho^2/2$ ,  $a = (|m| + \text{sgn}(\beta)m - \alpha/|\beta| + 1)/2$  e utilizamos as equações (2.76) e (2.77).

#### 4.2.1.3 Componente $\phi_{B'}$

A componente  $\phi_{B'}$  é obtida a partir das equações (4.5) e (4.6), as quais fornecem

$$\phi_{B'} = \frac{1}{t(U_1 - E)} [\pi\pi^\dagger - (U_1 - E)^2] \phi_A. \quad (4.24)$$

Observe que  $\pi\pi^\dagger = v_F^2 \hat{\mathbf{p}}^2 - \kappa\gamma^2\beta$ . No caso de um potencial uniforme,  $\phi_A$  é uma combinação linear de autofunções do operador  $\hat{\mathbf{p}}^2$ , portanto  $\phi_{B'}$  é dado por

$$\phi_{B'} = \frac{\eta}{\tau(v - \epsilon)} [C_1 G_m(\alpha_M, \rho) + C_2 G_m(\alpha_P, \rho) + C_3 H_m(\alpha_M, \rho) + C_4 H_m(\alpha_P, \rho)] e^{im\theta}, \quad (4.25)$$

onde  $\eta = \alpha^2 - (v - \epsilon)^2 - \kappa\beta$ .

#### 4.2.1.4 Componente $\phi_{A'}$

Por último, pode-se obter  $\phi_{A'}$  partindo das equações (4.5), (4.6) e (4.8):

$$\phi_{A'} = -\frac{\pi\phi_{B'}}{(U_2 - E)}. \quad (4.26)$$

Em coordenadas polares, o operador  $\pi$  é da forma

$$\pi = -i\hbar v_F e^{i\kappa\theta} \left( \frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{i\kappa}{\rho} \frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\rho\kappa\beta}{2} \right). \quad (4.27)$$

Se  $\pi$  operar sobre uma função da forma  $F(\rho, \theta) = G(\rho)e^{im\theta}$ , têm-se que

$$\pi G(\rho)e^{im\theta} = -i\gamma e^{i(m+\kappa)\theta} \left( \frac{d}{d\rho} - \frac{\kappa m}{\rho} - \frac{\rho\kappa\beta}{2} \right) G(\rho) \quad (4.28)$$

$$= -i\gamma e^{i(m+\kappa)\theta} \Omega_1 G(\rho). \quad (4.29)$$

O operador  $\Omega_1$  é definido como

$$\Omega_1 = \frac{d}{d\rho} - \frac{\kappa m}{\rho} - \frac{\kappa\beta\rho}{2}, \quad (4.30)$$

portanto no caso do potencial uniforme temos que

$$\begin{aligned} \phi_{A'} = -i \frac{\eta}{\tau(v^2 - \epsilon^2)} [C_1 \Omega_1 G_m(\alpha_M, \rho) + C_2 \Omega_1 G_m(\alpha_P, \rho) + \\ + C_3 \Omega_1 H_m(\alpha_M, \rho) + C_4 \Omega_1 H_m(\alpha_P, \rho)] e^{i(m+\kappa)\theta}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

e as funções  $\Omega_1 G_m(\alpha, \rho)$  e  $\Omega_1 H_m(\alpha, \rho)$  podem ser facilmente calculadas como

$$\begin{aligned} \Omega_1 G_m(\alpha, \rho) = -\frac{\rho}{2}(\kappa\beta + |\beta|)G_m(\alpha, \rho) + \frac{|m| - \kappa m}{\rho}G_m(\alpha, \rho) + \\ + \frac{a}{|m| + 1}\rho|\beta|e^{-\chi/2}\chi^{|m|/2} {}_1F_1(a + 1, |m| + 2, \chi), \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} \Omega_1 H_m(\alpha, \rho) = -\frac{\rho}{2}(\kappa\beta + |\beta|)H_m(\alpha, \rho) + \frac{|m| - \kappa m}{\rho}H_m(\alpha, \rho) + \\ - a\rho|\beta|e^{-\chi/2}\chi^{|m|/2}U(a + 1, |m| + 2, \chi), \end{aligned} \quad (4.33)$$

onde  $\chi = |\beta|\rho^2/2$ ,  $a = (|m| + \text{sgn}(\beta)m - \alpha/|\beta| + 1)/2$  e utilizamos as equações (2.76) e (2.77).

#### 4.2.1.5 Soluções Reais

Para certos valores de energia  $\alpha_{P,M}$  é complexo, portanto a equação transcendental será uma função a valores complexos. Do ponto de vista computacional, achar as raízes de uma função a valores complexos é equivalente a achar a solução de sistema de duas equações não lineares. Ademais, nos métodos numéricos para achar a solução de sistema de equações não lineares, em geral, não é possível isolar a solução e, portanto, impossibilitando o controle do erro. Por esse motivo, nessa seção acharemos as soluções reais que podem substituir as complexas, facilitando achar a solução da equação transcendental.

Pela equação (4.14),  $\alpha_{P,M}$  será complexo quando

$$4v^2e^2 - \tau^2(v^2 - e^2) + \beta^2 - 4\kappa\beta v\epsilon < 0, \quad (4.34)$$

isto é,

$$\epsilon_1 < \epsilon < \epsilon_2, \quad (4.35)$$

onde,

$$\epsilon_{1,2} = \frac{2\kappa\beta v \pm \sqrt{v^2\tau^2(4v^2 + \tau^2) - \beta^2\tau^2}}{4v^2 + \tau^2}. \quad (4.36)$$

Portanto, se a energia estiver no intervalo  $(\epsilon_1, \epsilon_2)$ , então as autofunções (e os autovalores) de  $\hat{\mathbf{p}}^2$  são complexos. Nesse caso, para trabalharmos com funções reais, escolhe-se como solução geral da equação (4.11) a parte real e imaginária das soluções complexas,

$$\phi_A(\mathbf{r}) = [C_1\Re[G_m(\alpha_M, \rho)] + C_2\Im[G_m(\alpha_M, \rho)] + C_3\Re[H_m(\alpha_M, \rho)] + C_4\Im[H_m(\alpha_M, \rho)]] e^{im\theta}, \quad (4.37)$$

onde  $\Re$  e  $\Im$  denotam, respectivamente, as partes real e imaginária da função e apenas usamos o autovalor  $\alpha_M$  em todas as funções. Para demonstrar a validade da solução (4.37) definiremos o operador  $\Omega_3$ , tal que,

$$\hat{\mathbf{p}}^2 G(\rho) e^{im\theta} = -\hbar^2 e^{im\theta} \Omega_3 G(\rho), \quad (4.38)$$

onde  $\Omega_3 G(\rho)$  é dado por

$$\Omega_3 = \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} - \beta m - \frac{\beta^2 \rho^2}{4}, \quad (4.39)$$

é fácil mostrar que  $\Omega_3$  é linear. Substituindo a equação (4.38) na equação (4.11), obtém-se que

$$\begin{aligned} SG(\rho) = \Omega_3^2 G(\rho) - 2(v^2 + \epsilon^2) \Omega_3 G(\rho) + \\ + [(v^2 - \epsilon^2)^2 + \tau^2(v^2 - \epsilon^2) - \beta^2 + 4\kappa\beta v\epsilon] G(\rho) = 0, \end{aligned} \quad (4.40)$$

tal que, o operador acima definido por  $\mathcal{S}$ , também é linear. Dessa maneira, temos que

$$\mathcal{S}\{G_m\}(\rho) = 0, \quad (4.41)$$

$$\mathcal{S}\{\Re[G_m] + i\Im[G_m]\}(\rho) = 0, \quad (4.42)$$

$$\mathcal{S}\{\Re[G_m]\} + i\mathcal{S}\{\Im[G_m]\}(\rho) = 0, \quad (4.43)$$

$$\mathcal{S}\{\Re[G_m]\} = 0 \quad \text{e} \quad \mathcal{S}\{\Im[G_m]\} = 0. \quad (4.44)$$

o que mostra que dado uma solução  $G_m(\rho)e^{im\theta}$  da equação (4.11), então,  $\Re[G_m(\rho)]e^{im\theta}$  e  $\Im[G_m(\rho)]e^{im\theta}$  também o são.

Pode-se obter as demais componentes usando as seguintes propriedades,

$$\Omega_1 \mathcal{P}[G(\rho)] = \mathcal{P}[\Omega_1 G(\rho)], \quad (4.45)$$

$$\Omega_2 \mathcal{P}[G(\rho)] = \mathcal{P}[\Omega_2 G(\rho)], \quad (4.46)$$

$$\Omega_3 \mathcal{P}[G(\rho)] = \mathcal{P}[\Omega_3 G(\rho)], \quad (4.47)$$

onde  $\mathcal{P}$  denota  $\Re$  ou  $\Im$ . Dado  $\phi_A$  da forma (4.37), então as demais componentes são dadas por

$$\phi_B = \frac{i}{v - \epsilon} [C_1 \Re[\Omega_2 G_m(\alpha_M, \rho)] + C_2 \Im[\Omega_2 G_m(\alpha_M, \rho)] + C_3 \Re[\Omega_2 H_m(\alpha_M, \rho)] + C_4 \Im[\Omega_2 H_m(\alpha_M, \rho)]] e^{i(m-\kappa)\theta}, \quad (4.48)$$

$$\phi_{B'} = \frac{1}{\tau(v - \epsilon)} [C_1 \Re[\eta(\alpha_M) G_m(\alpha_M, \rho)] + C_2 \Im[\eta(\alpha_M) G_m(\alpha_M, \rho)] + C_3 \Re[\eta(\alpha_M) H_m(\alpha_M, \rho)] + C_4 \Im[\eta(\alpha_M) H_m(\alpha_M, \rho)]] e^{im\theta}, \quad (4.49)$$

$$\phi_{A'} = -\frac{i}{\tau(v^2 - \epsilon^2)} [C_1 \Re[\eta(\alpha_M) \Omega_1 G_m(\rho)] + C_2 \Im[\eta(\alpha_M) \Omega_1 G_m(\rho)] + C_3 \Re[\eta(\alpha_M) \Omega_1 H_m(\rho)] + C_4 \Im[\eta(\alpha_M) \Omega_1 H_m(\rho)]] e^{i(m+\kappa)\theta}, \quad (4.50)$$

onde  $\eta(\alpha) = \alpha - (v - \epsilon)^2 - \kappa\beta$ .

Podemos combinar as soluções para  $\alpha_{P,M}$  complexo ou real adotando as notações  $[ ]^{RM}$  e  $[ ]^{IP}$  abaixo definidas,

$$\phi_A(\mathbf{r}) = [C_1 [G_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_2 [G_m(\alpha, \rho)]^{IP} + C_3 [H_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_4 [H_m(\alpha, \rho)]^{IP}] e^{im\theta}, \quad (4.51)$$

onde o primeiro índice superior indica a parte da função que será adotada caso  $\alpha$  complexo,  $R$  para parte real e  $I$  para parte imaginária. O segundo índice indica qual o sinal de  $\alpha$  na equação (4.14) devemos adotar, caso  $\alpha$  real. Observe que no caso de  $\alpha$  complexo, deve-se utilizar para todas as funções o autovalor  $\alpha_M$ . As demais componentes são dadas por,

$$\phi_B = \frac{i}{v - \epsilon} [C_1 [\Omega_2 G_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_2 [\Omega_2 G_m(\alpha, \rho)]^{IP} + C_3 [\Omega_2 H_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_4 [\Omega_2 H_m(\alpha, \rho)]^{IP}] e^{i(m-\kappa)\theta}, \quad (4.52)$$

$$\phi_{B'} = \frac{1}{\tau(v - \epsilon)} [C_1 [\eta G_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_2 [\eta G_m(\alpha, \rho)]^{IP} + C_3 [\eta H_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_4 [\eta H_m(\rho)]^{IP}] e^{im\theta}, \quad (4.53)$$

$$\phi_{A'} = -\frac{i}{\tau(v^2 - \epsilon^2)} [C_1 [\eta \Omega_1 G_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_2 [\eta \Omega_1 G_m(\alpha, \rho)]^{IP} + C_3 [\eta \Omega_1 H_m(\alpha, \rho)]^{RM} + C_4 [\eta \Omega_1 H_m(\alpha, \rho)]^{IP}] e^{i(m+\kappa)\theta}. \quad (4.54)$$

### 4.3 Soluções do Anel Quântico Topológico

A solução interior à linha do *kink*, isto é, para  $0 \leq \rho < R$ , pode ser escrita partindo da solução geral como

$$\phi_A^< = [C_1^< [G_m(\alpha, \rho)]^{RM<} + C_2^< [G_m(\alpha, \rho)]^{IP<}] e^{im\theta}, \quad (4.55)$$

$$(4.56)$$

$$\phi_B^< = \frac{i}{v - \epsilon} [C_1^< [\Omega_2 G_m(\alpha, \rho)]^{RM<} + C_2^< [\Omega_2 G_m(\alpha, \rho)]^{IP<}] e^{i(m-\kappa)\theta}, \quad (4.57)$$

$$(4.58)$$

$$\phi_{B'}^< = \frac{1}{\tau(v - \epsilon)} [C_1^< [\eta G_m(\alpha, \rho)]^{RM<} + C_2^< [\eta G_m(\alpha, \rho)]^{IP<}] e^{im\theta}, \quad (4.59)$$

$$(4.60)$$

$$\phi_{A'}^< = -\frac{i}{\tau(v^2 - \epsilon^2)} [C_1^< [\eta \Omega_1 G_m(\alpha, \rho)]^{RM<} + C_2^< [\eta \Omega_1 G_m(\alpha, \rho)]^{IP<}] e^{i(m+\kappa)\theta}, \quad (4.61)$$

onde descartamos as soluções  $H_m(\alpha, \rho)$  fazendo  $C_3^< = 0$  e  $C_4^< = 0$  já que elas divergem para  $\rho = 0$ . A solução externa à linha do *kink*, isto é, para  $\rho > R$ , pode ser escrita partindo da solução geral obtida na seção anterior substituindo  $v$  por  $-v$ , dada por

$$\phi_A^> = [C_3^> [H_m(\alpha, \rho)]^{RM>} + C_4^> [H_m(\alpha, \rho)]^{IP>}] e^{im\theta}, \quad (4.62)$$

$$(4.63)$$

$$\phi_B^> = -\frac{i}{v + \epsilon} [C_3^> [\Omega_2 H_m(\alpha, \rho)]^{RM>} + C_4^> [\Omega_2 H_m(\alpha, \rho)]^{IP>}] e^{i(m-\kappa)\theta}, \quad (4.64)$$

$$(4.65)$$

$$\phi_{B'}^> = -\frac{1}{\tau(v + \epsilon)} [C_3^> [\eta H_m(\alpha, \rho)]^{RM>} + C_4^> [\eta H_m(\alpha, \rho)]^{IP>}] e^{im\theta}, \quad (4.66)$$

$$(4.67)$$

$$\phi_{A'}^> = -\frac{i}{\tau(v^2 - \epsilon^2)} [C_3^> [\eta \Omega_1 H_m(\alpha, \rho)]^{RM>} + C_4^> [\eta \Omega_1 H_m(\alpha, \rho)]^{IP>}] e^{i(m+\kappa)\theta}, \quad (4.68)$$

onde descartamos as soluções  $G_m(\alpha, \rho)$  fazendo  $C_1^> = 0$  e  $C_2^> = 0$  já que elas divergem para  $\rho \rightarrow \infty$ . Foi introduzido um terceiro índice superior  $>$  e  $<$  para indicar o sinal  $v$ . No caso do índice  $>$ , toda dependência em  $v$  deve ser substituído por  $-v$ , já no caso do índice  $<$ , toda dependência em  $v$  deve ser mantida inalterada. As soluções aceitáveis são aquelas que são contínuas na interface  $\rho = R$ , isto é,  $\Phi^<(R, \theta) = \Phi^>(R, \theta)$ . Impondo essa condição somos conduzidos a um sistema homogêneo nas constantes  $C_1^<$ ,  $C_2^<$ ,  $C_3^>$  e  $C_4^>$ . Para que esse sistema admita solução não trivial o determinante da matriz formadas pelos coeficientes deve ser nulo, isto é

$$\begin{vmatrix} [G_m(\alpha, R)]^{RM<} & [G_m(\alpha, R)]^{IP<} & -[H_m(\alpha, R)]^{RM>} & -[H_m(\alpha, R)]^{IP>} \\ \frac{1}{v-\epsilon} [\Omega_2 G_m(\alpha, R)]^{RM<} & \frac{1}{v-\epsilon} [\Omega_2 G_m(\alpha, R)]^{IP<} & \frac{1}{v+\epsilon} [\Omega_2 H_m(\alpha, R)]^{RM>} & \frac{1}{v+\epsilon} [\Omega_2 H_m(\alpha, R)]^{IP>} \\ \frac{1}{v-\epsilon} [\eta G_m(\alpha, R)]^{RM<} & \frac{1}{v-\epsilon} [\eta G_m(\alpha, R)]^{IP<} & \frac{1}{v+\epsilon} [\eta H_m(\alpha, R)]^{RM>} & \frac{1}{v+\epsilon} [\eta H_m(\alpha, R)]^{IP>} \\ [\eta \Omega_1 G_m(\alpha, R)]^{RM<} & [\eta \Omega_1 G_m(\alpha, R)]^{IP<} & -[\eta \Omega_1 H_m(\alpha, R)]^{RM>} & -[\eta \Omega_1 H_m(\alpha, R)]^{IP>} \end{vmatrix} = 0, \quad (4.69)$$

ou seja, para se achar os níveis de energia deve-se achar os zeros da equação transcendental anterior. Tal condição nos conduz a níveis de energias discretos, pois apenas para certos valores de energia ela é satisfeita.

Foi analisado o comportamento dos níveis de energia em relação ao raio do anel,  $R$ , a intensidade do potencial eletrostático,  $V$ , e a intensidade do campo magnético  $B_z$ .

## 4.4 Resultados e Discussões

Na seção anterior vimos que para certos intervalos de energia os autovalores de  $\hat{p}^2$  são complexos, porém, os intervalos em que isso acontece são diferente para as soluções quando  $\rho < R$  e  $\rho > R$ . De fato, para  $\rho < R$  o intervalo em que  $\alpha_{P,M}^<$  é complexo é o intervalo compreendido entre as energias,

$$\epsilon_{1,2} = \frac{2\kappa\beta v \pm \sqrt{v^2\tau^2(4v^2 + \tau^2) - \beta^2\tau^2}}{4v^2 + \tau^2}. \quad (4.70)$$

Já para  $\rho > R$  o intervalo em que  $\alpha_{P,M}^>$  é complexo é o compreendido entre,

$$\epsilon_{3,4} = \frac{-2\kappa\beta v \pm \sqrt{v^2\tau^2(4v^2 + \tau^2) - \beta^2\tau^2}}{4v^2 + \tau^2}. \quad (4.71)$$

Os níveis de energia foram calculados dividindo o espectro nos intervalos delimitados pelas energias  $\epsilon_{1,2,3,4}$  já que as soluções em  $\rho < R$  e  $\rho > R$  diferem para cada intervalo. Chamaremos esses intervalos de Regiões I,...,V em ordem crescente de energia. A Figura 35 mostra como as energias  $\epsilon_{1,2,3,4}$  dependem com o campo magnético para  $V = 50$  meV e as regiões que elas separam. A Região I corresponde a área pintada de preto abaixo do eixo  $\epsilon = 0$ ; as Regiões II, III e IV às áreas pitadas, respectivamente, de azul, verde e vermelho e Região V à área pintada de preto acima do eixo  $\epsilon = 0$ . Observe que as energias fecham duas elipses e que para elevados valores absolutos do campo magnético apenas existe as Regiões I e V, porém isso ocorre para campos não atingíveis do ponto de vista prático. A Região III corresponde ao “gap” no caso em que a ddp é uniforme, portanto onde surgem os estados topológicos.

A Figura 36 mostra dependência dos níveis de energia com relação ao raio do anel nas proximidades do ponto  $K$  para  $B_z = 1$  T e  $V = 200$  meV. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas, porém, as regiões II e IV são estreitas para  $B_z = 1$  T (conferir Figura 35) e portanto não são visíveis na escala de energia do gráfico. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo) e estão na Região III. A região em cinza (Região I e V) corresponde aos níveis de Landau que, nesse caso, por serem muito densos foi preferido não mostrar-los. Os níveis de energia possuem um comportamento similar ao caso na ausência do campo magnético, possuem um comportamento assintótico que tendem para o nível de energia  $k_y = 0$  no caso do *kink* linear<sup>66</sup>, além disso, quando o raio do *kink* se torna pequeno, os estados tendem a ter maior curvatura e



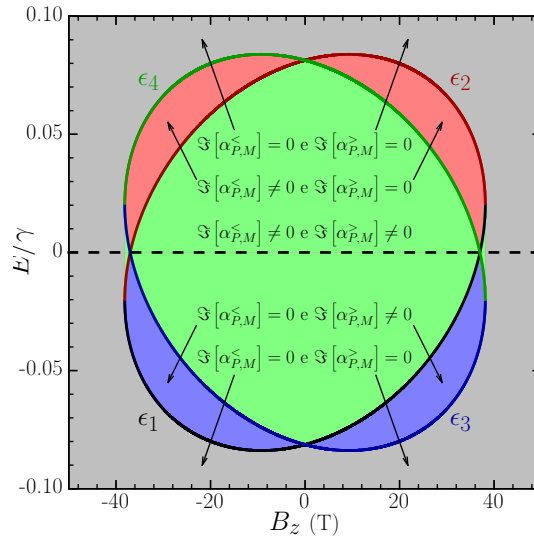


Figura 35 – Ilustração dos intervalos, onde os autovalores de  $\hat{p}$  são complexos. A Região I corresponde a área pintada de preto abaixo do eixo  $\epsilon = 0$ ; as Regiões II, III e IV às áreas pintadas, respectivamente, de azul, verde e vermelho e Região IV à área pintada de preto acima do eixo  $\epsilon = 0$ .

portanto maior energia, logo os níveis “imergem” na região dos níveis de Landau. A principal diferença que a presença do campo magnético cria é a quebra da simetria  $E(m) = -E(-m)$  que existe na ausência do campo magnético<sup>33</sup>. Em particular, o campo magnético quebra a degenerescência no estado de energia zero.

A Figura 37 mostra dependência dos níveis de energia com relação a intensidade da ddp aplicada,  $V$ , nas proximidades do ponto  $K$  para  $B_z = 1$  T e  $R = 20$  nm. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas, porém as regiões II e IV não são visíveis na escala de energia do gráfico. As cores das curvas tem o mesmo significado da Figura 36. As regiões que apresentam uma alta densidade de energia correspondem aos níveis de Landau nas Regiões I e V. Onde os níveis de energia são menos densos corresponde a Região III onde se observa que os níveis de energia possuem um comportamento similar ao caso na ausência do campo magnético, diferindo apenas na quebra de simetria que foi destacada no paragrafo anterior.

A Figura 38 mostra dependência dos níveis de energia com relação a intensidade do campo magnético,  $B_z$ , nas proximidades do ponto  $K$  para  $R = 20$  nm e  $V = 200$  meV. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). As regiões que apresentam um alta densidade de energia correspondem aos níveis de Landau nas Regiões I e V. Observe que os níveis de Landau são semelhantes aos níveis da Figura 16, porém exibem oscilações formando “anticrossing”. Isso pode ser entendido como uma combinação dos espectros dos sistemas com potenciais uniformes e opostos (Figura 16), quando combinados, os espectros nos pontos que possuem a mesma energia há um “anticrossing”. Onde os níveis de energia são menos densos corresponde a Região III e observa-se que, diferente do caso *kink*

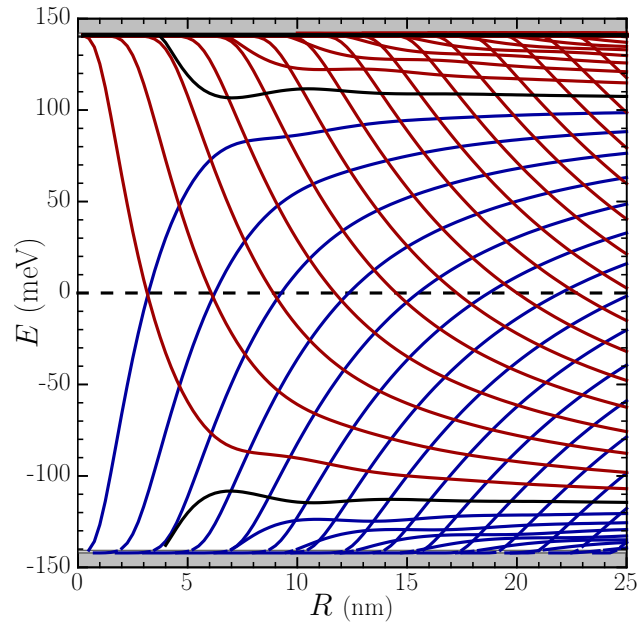


Figura 36 – Níveis de energia com relação ao raio do anel nas proximidades do ponto  $K$  para  $B_z = 1$  T e  $V = 200$  meV. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo) e estão na Região III. A região em cinza (Região I e V) corresponde aos níveis de Landau que, nesse caso, por serem muito densos foi preferido não mostrá-los.

linear (Figura 32), os níveis topológicos sofrem uma grande variação com o campo magnético. De um ponto de vista semi-clássico, no caso *kink* linear, uma carga estaria confinada a se mover em uma linha e unidirecionalmente, não permitindo que haja formação de orbitas de ciclotron. Já no caso de um anel, tais orbitas são possíveis devido a geometria do sistema e portanto sendo influenciadas pelo campo magnético. A Figura 39 é o mesmo da Figura 38, porém incluindo os níveis no vale  $K'$  para energias na Região III traçados como pontos coloridos. A linha sólida verde corresponde ao estado fundamental para elétrons que troca periodicamente de vale e momento angular semelhante as oscilações de Aharonov-Bohm.

Esses estados são semelhantes aos estados no “kink” linear visto na seção (4.1), se propagam unidirecionalmente ao longo da linha circular, com a direção dependendo do vale. Para demonstra isso, calculamos a componente angular da densidade de corrente mostrada na Figura 40. Observe que a densidade de corrente dos estados no vale  $K$  (linhas sólidas) é negativa (rotação horária), enquanto que dos estados no vale  $K'$  (linhas tracejadas) é positiva (rotação anti-horária). A linha sólida verde corresponde a densidade de corrente do estado fundamental para elétrons onde se observa que a direção de propagação pode ser controlada controlando o campo magnético externo.

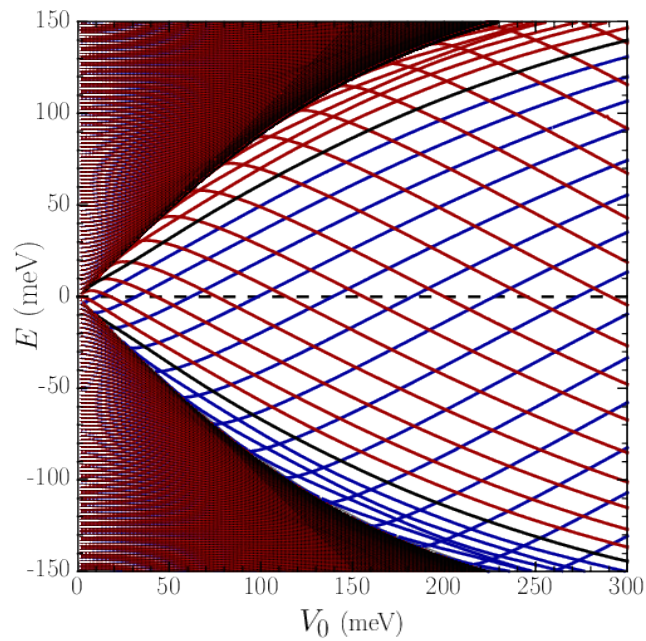


Figura 37 – Níveis de energia com relação a intensidade da ddp aplicada,  $V$ , nas proximidades do ponto  $K$  para  $B_z = 1$  T e  $R = 20$  nm. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). As regiões que apresentam um alta densidade de energia correspondem aos níveis de Landau nas Regiões I e V. Onde os níveis de energia são menos densos corresponde a Região III.

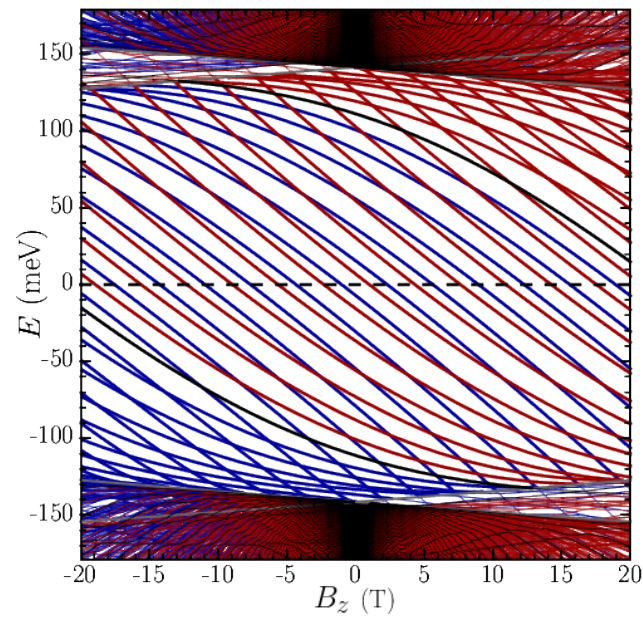


Figura 38 – Níveis de energia com relação a intensidade do campo magnético,  $B_z$ , nas proximidades do ponto  $K$  para  $R = 20$  nm e  $V = 200$  meV. As Regiões I,...,V, foram separadas por linhas sólidas cinzas. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). As regiões que apresentam um alta densidade de energia correspondem aos níveis de Landau nas Regiões I e V. Onde os níveis de energia são menos densos corresponde a Região III.

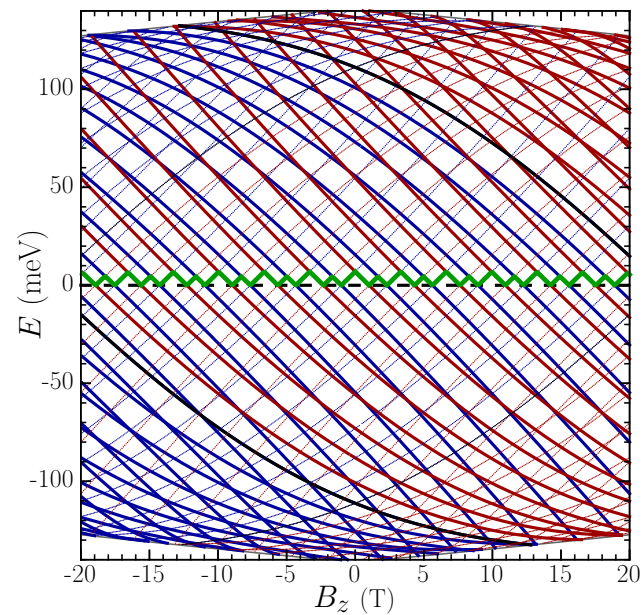


Figura 39 – O mesmo da Figura 38, porém incluindo os níveis no vale  $K'$  para energias na Região III traçados como pontos coloridos. A linha sólida verde corresponde ao estado fundamental para elétrons.

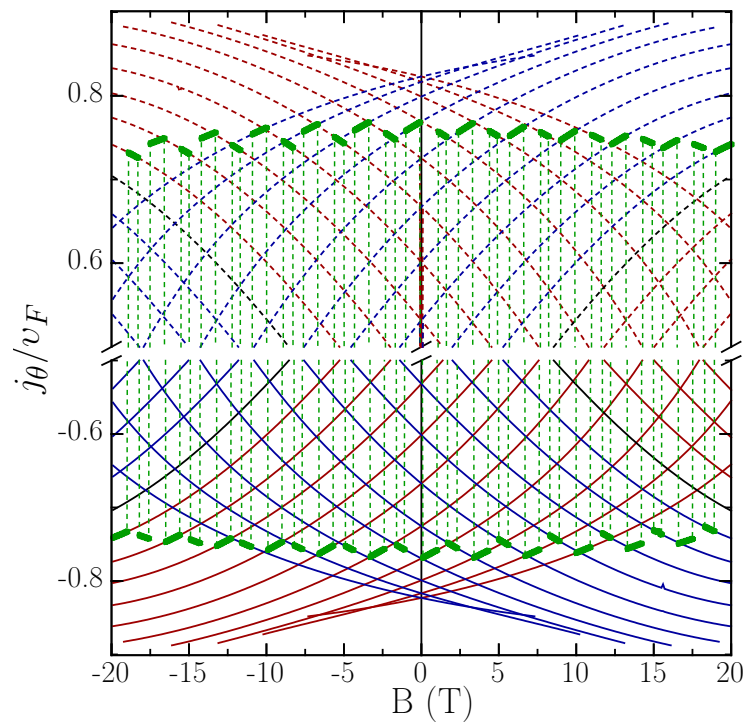


Figura 40 – Densidade de corrente angular para os vales  $K$  (linha sólidas) e  $K'$  (linhas tracejadas) como função do campo magnético externo  $B_z$  para  $R = 20$  nm e  $V = 200$  meV. As curvas em vermelho (azul, preto) correspondem aos estados com o índice de momento angular,  $m$ , negativo (positivo, nulo). A linha sólida verde corresponde a densidade de corrente angular do estado fundamental para elétrons.

## 5 Conclusão

Em síntese, estudamos estados confinados em estrutura anelares em monocamada e bicamada de grafeno tanto numericamente, utilizando o modelo tight-binding, quanto analiticamente através do modelo contínuo. Nossos resultados analíticos mostraram uma boa concordância com os resultados do modelo tight-binding e forneceram um melhor entendimento do sistema.

Na monocamada um *gap* é aberto devido a uma interação com o substrato apropriado (rede hexagonal) e o confinamento anelar pode ser obtido através de uma linha de defeito circular no substrato. Uma linha de defeito no substrato pode ser modelada por um *kink* no termo de massa da equação de Dirac-Weyl que descreve o comportamento dos portadores de carga na proximidade do nível de Fermi. Nossos resultados mostram a presença de estados confinados na região do *kink* semelhantes a estados topológicos possuindo uma dupla degenerescência de vales e mostraram-se robustos a desordens não magnéticas, no sentido que elas não podem quebrar tal degenerescência. Os níveis de energia se mostraram praticamente insensíveis a intensidade da massa induzida que influencia apenas na quantidade de estados confinados. Os estados possuem uma corrente angular diferente de zero, mesmo na ausência do campo magnético, porém, circulando em sentidos contrários em cada vale. Isso contribui com a robustez dos estados, a propagação unidirecional coíbe o retroespalhamento prevenindo, por exemplo, a localização dos estados devido a desordens. Devido a degenerescência entre vales a corrente líquida no caso sem campo magnético é nula, porém, sobre a influência de um campo magnético perpendicular observa-se correntes persistentes devido a quebra dessa degenerescência. Além disso oscilações de Aharonov-Bohm no momento angular foram observadas no espectro de energia como função do campo magnético, mais do que isso, é observada uma oscilação entre os vales de forma que o vale do estado fundamental pode ser controlado ajustando o campo magnético. Tais oscilações persistem mesmo variando a excentricidade da linha de defeito que é um reflexo da impossibilidade do retroespalhamento, provando a robustez desses estados. Esses resultados são drasticamente diferentes dos resultados apresentados em anéis quânticos em semi-condutores, onde uma excentricidade finita pode confinar os estados nas regiões de alta curvatura.

Na bicamada de grafeno um *gap* é aberto devido a uma diferença de potencial aplicada perpendicular as camadas. Pode-se fazer um confinamento topológico em bicamada de grafeno, invertendo o sinal da diferença de potencial aplicada sobre a bicamada. Na parede de domínio surgem estados de bordas metálicos, isto é, sem *gap*, estados topológicos. Em trabalhos anteriores propomos um sistema em que a mudança de sinal (*kink*) na ddp ocorria na direção radial<sup>33</sup>. Tal sistema dá origem a estados quirais confinados ao longo do *kink*, portanto, semelhantes a estados confinados em anéis quânticos. Os níveis de energia apresentavam oscilações semelhantes as oscilações de Aharonov-Bohm mesmo na ausência de um campo magnético. Damos continui-

dade à análise desse sistema estudando a influência de um campo magnético perpendicular a bicamada. Os estados também são robustos a desordens não magnéticas e ao retroespalhamento, no mesmo sentido aplicado anteriormente. A influência do campo magnético novamente quebra a degenerescência de vales gerando correntes persistentes e as oscilações de Aharonov-Bohm. Semelhante a monocamada, pode-se controlar o vale do estado fundamental controlando o campo magnético externo.

Nossos resultados contribui com a literatura em anéis quânticos apresentando novos resultados que não acontecem em anéis quânticos de semi-condutores, como os estados propagantes unidirecional inibindo o retroespalhamento. Devidos as suas propriedades, espera-se a aplicação de anéis quânticos de semicondutores em um amplo número de sistemas, por exemplo, como fonte e detector na fotônica; qubits para computação quântica e dispositivos da spintrônica<sup>67</sup>. Nos sistemas estudados além dessas aplicações, poderiam ser utilizados na *valetrônica* utilizando o grau de liberdade do vale nos fenômenos de transporte eletrônico<sup>64</sup>.

# Referências

- 1 NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, v. 438, p. 197 – 200, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 22.
- 2 NOVOSELOV, K. S. et al. *Supporting Online Material, Materials and Methods*. 2013. Science. Disponível em: <<http://www.sciencemag.org/cgi/content/full/306/5696/666/DC1>>. Acesso em: 23 mar. 2013. Citado 3 vezes nas páginas 11, 24 e 25.
- 3 KURODA, T. et al. Excitonic transitions in semiconductor concentric quantum double rings. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 32, p. 46, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 26.
- 4 REICH, S.; MAULTZSCH, J.; THOMSEN, C. Tight-binding description of graphene. *Physical Review B*, v. 66, p. 035412, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 28.
- 5 NETO, A. H. C. et al. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*, v. 81, p. 109, 2009. Citado 8 vezes nas páginas 11, 12, 19, 21, 23, 29, 42 e 48.
- 6 ZHOU, S. Y. et al. Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene. *Nature Material*, v. 6, p. 770, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 50.
- 7 GIOVANNETTI, G. et al. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: *Ab initio* density functional calculations. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 073103, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 12, 50 e 51.
- 8 ZARENIA, M. et al. Substrate-induced chiral states in graphene. *Phys. Rev. B*, v. 86, p. 085451, 2012. Citado 6 vezes nas páginas 13, 23, 50, 51, 52 e 53.
- 9 MARTIN, I.; BLANTER, Y. M.; MORPURGO, A. F. Topological confinement in graphene bilayer. *Physical Review Letters*, v. 100, p. 036804, 2008. Citado 4 vezes nas páginas 14, 23, 68 e 69.
- 10 ZARENIA, M. et al. Chiral states in bilayer graphene: Magnetic field dependence and gap opening. *Physical Review B*, v. 84, p. 125451, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 70.
- 11 KROTO, H. W. et al. Buckminsterfullerene. *Nature*, v. 318, p. 162–164, 1985. Citado na página 19.
- 12 DRESSELHAUS, M. S.; DRESSELHAUS, G.; C., E. P. *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes: Their Properties and Applications*. San Diego, Califórnia, USA: Academic Press, 1996. Citado na página 19.
- 13 IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, v. 354, p. 56–58, 1991. Citado na página 20.
- 14 REICH, S.; THOMSEN, C.; J., M. *Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties*. Weinheim: Wiley-VCH, 2004. Citado na página 20.
- 15 NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, v. 306, p. 666–669, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 24.



- 16 WALLANCE, P. R. The band theory of graphite. *Physical Review*, v. 71, p. 622–634, 1947. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- 17 COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. *Quantum Mechanics v.1*. New York, USA: John Wiley, 1977. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 31.
- 18 SAITO, R.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. London, UK: Imperial College Press, 1998. Citado na página 21.
- 19 KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics*, v. 2, p. 620–625, 2004. Citado na página 22.
- 20 JR, J. M. P. et al. Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene. *Semiconductor Science and Technology*, v. 25, p. 033002, 2010. Citado na página 22.
- 21 MCCANN, E.; FAL'KO, V. I. Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer. *Physical Review Letters*, v. 96, p. 086805, 2006. Citado na página 23.
- 22 COSTA, D. R. da et al. Geometry and edge effects on the energy levels of graphene quantum rings: A comparison between tight-binding and simplified Dirac models. *Phys. Rev. B*, v. 89, p. 075418, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 23, 25 e 50.
- 23 RECHER, P. et al. Aharonov-Bohm effect and broken valley degeneracy in graphene rings. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 235404, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 50.
- 24 PEREIRA JR., J. M. J. M.; VASILOPOULOS, P.; PEERTERS, F. M. Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer. *Nano Letters*, v. 7, p. 946, 2007. Citado na página 23.
- 25 PEREIRA JR., J. M. et al. Landau levels in graphene bilayer quantum dots. *Physical Review B*, v. 79, p. 195403, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 68.
- 26 COSTA, D. R. da et al. Energy levels of bilayer graphene quantum dots. *Phys. Rev. B*, v. 92, p. 115437, 2015. Citado na página 23.
- 27 MIRZAKHANI, M. et al. Energy levels of hybrid monolayer-bilayer graphene quantum dots. *Phys. Rev. B*, v. 93, p. 165410, 2016. Citado na página 23.
- 28 COSTA, D. R. da et al. Magnetic field dependence of energy levels in biased bilayer graphene quantum dots. *Phys. Rev. B*, v. 93, p. 085401, 2016. Citado na página 23.
- 29 COSTA, D. R. da et al. Hexagonal-shaped monolayer-bilayer quantum disks in graphene: A tight-binding approach. *Phys. Rev. B*, v. 94, p. 035415, 2016. Citado na página 23.
- 30 ZEBROWSKI, D. P.; WACH, E.; SZAFRAN, B. Confined states in quantum dots defined within finite flakes of bilayer graphene: Coupling to the edge, ionization threshold, and valley degeneracy. *Phys. Rev. B*, v. 88, p. 165405, 2013. Citado na página 23.
- 31 ZARENIA, M. et al. Electrostatically confined quantum rings in bilayer graphene. *Nano Letters*, v. 9, p. 4088, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 68.
- 32 ZARENIA, M. et al. Simplified model for the energy levels of quantum rings in single layer and bilayer graphene. *Physical Review B*, v. 81, p. 045431, 2010. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 68.

- 33 XAVIER, L. J. P. et al. Topological confinement in graphene bilayer. *Applied Physics Letters*, v. 96, p. 212108, 2010. Citado 5 vezes nas páginas 23, 68, 71, 80 e 85.
- 34 MARTINEZ, J. C.; JALIL, M. B. A.; TAN, S. G. Robust localized modes in bilayer graphene induced by an antisymmetric kink potential. *Applied Physics Letters*, v. 95, p. 213106, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 68.
- 35 SAN-JOSE, P. et al. Pseudospin valve in bilayer graphene: Towards graphene-based pseudospintronics. *Physical Review Letters*, v. 102, p. 247204, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 23 e 68.
- 36 MOORE, J. E.; BALENTS, L. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Physical Review B*, v. 75, p. 121306(R), 2007. Citado na página 24.
- 37 FU, L.; KANE, C. L.; MELE, E. J. Topological insulators in three dimensions. *Physical Review Letters*, v. 98, p. 106803, 2007. Citado na página 24.
- 38 BERGER, C. et al. Ultrathin epitaxial graphite: 2d electron gas properties and a route toward graphene-based nanoelectronics. *The Journal of Physical Chemistry B*, v. 108, p. 19912–19916, 2004. Citado na página 25.
- 39 FOMIN, V. M. Quantum ring: A unique playground for the quantum-mechanical paradigm. In: \_\_\_\_\_. *Physics of Quantum Rings*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014. p. 1–24. ISBN 978-3-642-39197-2. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-39197-2\\_1](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-39197-2_1)>. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.
- 40 LÉVY, L. et al. Magnetization of mesoscopic copper rings: Evidence for persistent currents. *Physical Review Letters*, v. 64, p. 2074, 1990. Citado na página 25.
- 41 CHANDRASEKHAR, V. et al. Magnetic response of a single, isolated gold loop. *Physical Review Letters*, v. 67, p. 3578, 1991. Citado na página 25.
- 42 MAILLY, D.; CHAPELIER, C.; BENOIT, A. Experimental observation of persistent currents in a gaas-algaas single loop. *Physical Review Letters*, v. 70, p. 2020, 1993. Citado na página 25.
- 43 SZAFRAN, B. B.; PEETERS, F. M.; BEDNAREK, S. Electron spin and charge switching in a coupled quantum-dot–quantum ring system. *Physical Review B*, v. 70, p. 125310, 2004. Citado na página 25.
- 44 RUSSO, S. et al. Observation of aharonov-bohm conductance oscillations in a graphene ring. *Phys. Rev. B*, v. 77, p. 085413, 2008. Citado na página 25.
- 45 HUEFNER, M. et al. The aharonov–bohm effect in a side-gated graphene ring. *New Journal of Physics*, v. 12, p. 043054, 2010. Citado na página 25.
- 46 SCHELTER, J.; BOHR, D.; TRAUZETTEL, B. Interplay of the aharonov-bohm effect and klein tunneling in graphene. *Phys. Rev. B*, v. 81, p. 195441, 2010. Citado na página 25.
- 47 YAN, C.-H.; WEI, L.-F. Size effects in aharonov–bohm graphene rings. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 22, p. 295503, 2010. Citado na página 25.
- 48 BAHAMON, D. A.; PEREIRA, A. L. C.; SCHULZ, P. A. Inner and outer edge states in graphene rings: A numerical investigation. *Phys. Rev. B*, v. 79, p. 125414, 2009. Citado na página 25.

- 49 WURM, J. et al. Graphene rings in magnetic fields: Aharonov–bohm effect and valley splitting. *Semiconductor Science and Technology*, v. 25, p. 034003, 2010. Citado na página 25.
- 50 ABERGEL, D. S. L.; APALKOV, V. M.; CHAKRABORTY, T. Interplay between valley polarization and electron-electron interaction in a graphene ring. *Phys. Rev. B*, v. 78, p. 193405, 2008. Citado na página 25.
- 51 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. Philadelphia, USA: Brooks Cole, 1976. Citado na página 28.
- 52 SENA, S. H. R. *Transporte e Estados Confinados de Portadores de Carga em Nanoestruturas de Grafeno*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, fev. 2010. Citado na página 29.
- 53 DACOSTA, D. R. *Transportes e confinamento em monocamada e bicamada de nanoestruturas de grafeno com diferentes bordas, interfaces e potenciais*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, nov. 2014. Citado 3 vezes nas páginas 29, 31 e 42.
- 54 CHAVES, A. *Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, des. 2010. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 31.
- 55 ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. New York, USA: Dover, 1972. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 37.
- 56 PEREIRA JR., J. M. J. M.; PEERTERS, F. M.; VASILOPOULOS, P. Landau levels and oscillator strength in a biased bilayer of graphene. *Physical Review B*, v. 76, p. 115419, 2007. Citado na página 41.
- 57 NEVIUS, M. S. et al. Semiconducting graphene from highly ordered substrate interactions. *Physical Review Letters*, v. 115, p. 136802, 2015. Citado na página 50.
- 58 WANG, W.-X. et al. Atomic resolution imaging of the two-component dirac-landau levels in a gapped graphene monolayer. *Physical Review B*, v. 92, p. 165420, 2015. Citado na página 50.
- 59 DEAN, C. R. et al. Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics. *Nature Nanotechnology*, v. 5, p. 722, 2010. Citado na página 51.
- 60 TANG, S. S. et al. Precisely aligned graphene grown on hexagonal boron nitride by catalyst free chemical vapor deposition. *SCIENTIFIC REPORTS*, v. 3, p. 2666, 2013. Citado na página 51.
- 61 TAY, R. Y. et al. Synthesis of aligned symmetrical multifaceted monolayer hexagonal boron nitride single crystals on resolidified copper. *Nanoscale*, v. 8, p. 2434, 2016. Citado na página 53.
- 62 HASAN, M. Z.; KANE, C. L. Colloquium: Topological insulators. *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, v. 82, p. 3045, 2010. Citado na página 68.
- 63 QI, X.-L.; ZHANG, S.-C. Topological insulators and superconductors. *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, v. 83, p. 1057, 2011. Citado na página 68.

- 64 RYCERZ, A.; TWORZYDLO, J.; BEENAKKER, C. W. J. Valley filter and valley valve in graphene. *Nature*, v. 3, p. 172, 2007. Citado 2 vezes nas páginas 70 e 86.
- 65 COSTA, D. R. da et al. Valley filtering using electrostatic potentials in bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, v. 92, p. 045417, 2015. Citado na página 70.
- 66 XAVIER, L. J. P. *Confinamento eletrônico em bicamadas de grafeno*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, jan. 2010. Citado na página 79.
- 67 FOMIN, V. M. et al. Self-organized quantum rings: Physical characterization and theoretical modeling. In: \_\_\_\_\_. *Physics of Quantum Rings*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014. p. 83–105. ISBN 978-3-642-39197-2. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-39197-2\\_4](http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-39197-2_4)>. Citado na página 86.