



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

FRANCISCO RONAN VIANA ARAÚJO

Transporte Eletrônico em *Phased Arrays* de Nanofitas de Grafeno

FORTALEZA – CE

2017

FRANCISCO RONAN VIANA ARAÚJO

Transporte Eletrônico em *Phased Arrays* de Nanofitas de Grafeno

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

Orientador: Dr. João Milton Pereira Junior.

FORTALEZA – CE

2017

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)

- A689t Araújo, Francisco Ronan Viana.
Transporte Eletrônico em Phased Arrays de Nanofitas de Grafeno / Francisco Ronan Viana Araújo. –
2017.
70 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação
em Física, Fortaleza, 2017.
Orientação: Prof. Dr. João Milton Pereira Junior.
1. Nanofitas de Grafeno. 2. Phased Arrays. 3. Transporte Eletrônico. I. Título.

CDD 530

FRANCISCO RONAN VIANA ARAÚJO

Transporte Eletrônico em *Phased Arrays* de Nanofitas de Grafeno

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

Aprovada em 11/08/2017.

BANCA EXAMINADORA:

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

Dr. Diego Rabelo da Costa - Examinador Interno
Universidade Federal do Ceará - UFC

Dr. Gildário Dias Lima - Examinador Externo
Universidade Federal do Piauí - UFPI

Aos meus pais, Antônio Gilberto (*in memoriam*) e Rosângela.

AGRADECIMENTOS

À minha mãe, Rosângela, minha namorada, Hercília, e minha irmã, Grazyelle, pelo apoio nos últimos dois anos. Ao professor João Milton Pereira Junior, pelos ensinamentos e pela orientação paciente e segura. Aos amigos Duarte e Luan, pelas discussões valiosíssimas. Aos amigos Etan, Gilvan, Jonathan e Thiago, pelos bons momentos. Aos professores Alex, Itamar e Ricardo, pelo incentivo que recebi dos mesmos. Ao Diego e ao Gildário, pela disponibilidade em participarem da banca de defesa e pelas sugestões dadas. A todos os integrantes do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará (DF/UFC), pelo ótimo trabalho desempenhado. Por fim, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), por fomentar a pesquisa científica e tecnológica e incentivar a formação de pesquisadores brasileiros.

RESUMO

O grafeno, uma camada de átomos de carbono arranjados em uma rede cristalina *honeycomb* (favo de mel), possui propriedades físicas notáveis. Após sua obtenção experimental em 2004 por A. K. Geim e K. S. Novoselov, várias pesquisas foram realizadas objetivando compreender tais propriedades físicas e diversas possibilidades de aplicações foram propostas. No limite de baixas energias, existe uma relação de linearidade entre a energia e o momento para os portadores de carga elétrica nesse material e, com isso, os mesmos comportam-se como partículas relativísticas de massa nula, descritas pela equação de Dirac. Uma das implicações disso é que as autofunções associadas aos elétrons que atravessam uma barreira de potencial podem não sofrer amortecimento em dadas circunstâncias, fenômeno esse conhecido como paradoxo de Klein. Mesmo sem sofrer amortecimento, essas autofunções adquirem fatores de fase que podem depender apenas dos valores de altura e largura da barreira de potencial. Nesse trabalho investigamos as propriedades de transporte em dois dispositivos eletrônicos que utilizam-se desse fenômeno e que podem ser associados a *phased arrays* (sistemas eletrônicos que possuem vários emissores de ondas, mecânicas ou eletromagnéticas, devidamente organizados). Estudamos os mecanismos de transporte eletrônico nesses sistemas físicos e realizamos simulações numéricas da condutância elétrica em função da energia e da condutância elétrica em função do potencial elétrico e observamos que a direção de propagação dos elétrons pode ser controlada através da variação dos valores de altura e largura das barreiras de potencial.

Palavras-chave: Nanofitas de grafeno. *Phased arrays*. Transporte eletrônico.

ABSTRACT

Graphene, a layer of carbon atoms arranged in a honeycomb crystal lattice, has remarkable physical properties. After its experimental obtaining in 2004 by A. K. Geim and K. S. Novoselov, several researches were carried out aiming to understand such physical properties and several possibilities of applications were proposed. At the low energy limit, there is a linearity relationship between energy and momentum for the electric charge carriers in this material and, therefore, they behave as relativistic particles of zero mass, described by the Dirac equation. One of the implications is that the electron-associated eigenfunctions that cross a potential barrier may not undergo damping under certain circumstances, a phenomenon known as Klein's paradox. Even without damping, these eigenfunctions acquire a phase factors that may depend only on the height and width values of the potential barrier. In this study, we investigate the properties transport in two electronic devices that use this phenomenon and that may be associated to phased arrays (electronic systems that have several emitters of waves, mechanically or electromagnetic, properly organized). We studied the electronic transport mechanisms in these physical systems and performed numerical simulations of electrical conductance as a function of energy and electrical conductance as a function of the electric potential and it was observed that the direction of propagation of the electrons can be controlled by varying the values of height and width of potential barriers.

Keywords: Graphene nanoribbons. Phased arrays. Electronic transport.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

1.1	Evolução do número de transistores por chip (linha contínua) em intervalos de dez em dez anos, contados de 1970 a 2010, em comparação com a Lei de Moore (linha tracejada). Fonte: http://producao.virtual.ufpb.br	3
1.2	Grafeno. Possui uma rede cristalina conhecida como <i>honeycomb</i> (favo de mel), com parâmetro de rede a	4
1.3	Formas alotrópicas do carbono obtidas a partir do grafeno. Da esquerda para a direita temos o fulereno, em seguida o nanotubo de carbono e por fim o grafite. Fonte: referência [24].	5
1.4	Forma espacial dos orbitais atômicos s , p_x , p_y e p_z	6
1.5	(a) Autoestados do átomo de carbono. (b) Orbitais híbridos sp^2 e orbital atômico (não hibridizado) p_z . Fonte: referência [9].	6
2.1	Rede cristalina <i>honeycomb</i> (favo de mel). Os sítios em vermelho e azul denotam as sub-redes A e B , respectivamente.	9
2.2	Rede recíproca do grafeno contendo a primeira zona de Brillouin e os pontos de Dirac, \vec{K} e \vec{K}'	10
2.3	Bandas de condução e valência do grafeno, considerando apenas as interações entre átomos de carbono que são primeiros vizinhos. Fonte: adaptada de http://oer.physics.manchester.ac.uk	13
2.4	Bandas de condução e valência do grafeno no limite de baixas energias, considerando apenas as interações entre átomos de carbono que são primeiros vizinhos.	13
2.5	Propagação de um elétron (com baixa energia) em uma barreira de potencial no grafeno.	16
2.6	Incidência de um elétron propagando-se no grafeno sobre uma barreira de potencial com os respectivos ângulos de incidência θ e refração φ	16

2.7	Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência θ . Fonte: referência [17].	18
2.8	Tipos de bordas de nanofitas de grafeno. Os números N_{ac} (a) e N_{zz} (b) estão associados, respectivamente, às larguras das bordas <i>armchair</i> e <i>zigzag</i> . Os retângulos tracejados representam as células unitárias que geram tais nanoestruturas de carbono.	20
2.9	Bandas de energia de uma nanofita de grafeno <i>armchair</i> para quatro valores distintos de sua largura. A mesma apresenta comportamento metálico quando $N_{ac} = 3M - 1$ ($M \in \mathbb{Z}$), como nos casos (b) e (d). Quando essa condição não é verificada, temos um comportamento semicondutor, como nos casos (a) e (c).	22
2.10	Dependência do gap de energia com a largura de uma nanofita de grafeno <i>armchair</i> (em $k = 0$) e <i>zigzag</i> (em $k = \frac{2\pi}{3}$). Adaptada da referência [29].	24
3.1	Representação de dois dos três tipos de regimes de transporte eletrônico. Fonte: adaptada da referência [6].	28
3.2	Condutor balístico de comprimento L e largura W ligado a dois contatos mantidos por potenciais químicos μ_1 e μ_2 . O potencial elétrico estabelecido é $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$. Fonte: adaptada da referência [3].	29
3.3	Condutor com probabilidade de transmissão T ligado a dois contatos através de dois <i>leads</i> . Fonte: adaptada da referência [3].	30
3.4	Condutância elétrica de uma nanofita de grafeno <i>armchair</i> para quatro valores distintos de sua largura.	35
3.5	<i>Phased array</i> simples contendo N emissores de ondas planas, com comprimento de onda λ , separados por uma distância D	36
3.6	Nanofita de grafeno <i>armchair</i> de largura W com três barreiras de potencial de mesmos comprimentos d , mas de alturas V diferentes. Os fatores de fase adquiridos pelas autofunções dependem basicamente das alturas e dos comprimentos das barreiras de potencial.	37
4.1	<i>Phased array</i> com a forma de um retângulo de largura $N_{ac} = 23$	39
4.2	Condutância elétrica em função da energia para um <i>phased array</i> com a forma de um retângulo sem a presença de barreiras de potencial.	40

4.3	Condutância elétrica em função da energia para um <i>phased array</i> com a forma de um retângulo com a presença de barreiras de potencial de alturas $V_1 = 0.5 [t]$ e $V_2 = 1.2 [t]$	40
4.4	<i>Phased array</i> com a forma de um “Y” com braços de largura $N_{ac} = 23$	42
4.5	Condutância elétrica em função da energia para um <i>phased array</i> com a forma de um “Y” sem a presença de barreiras de potencial: (a) intervalo de energias de $-0.29 [t]$ a $0.29 [t]$ e (b) intervalo de energias de $0.00 [t]$ a $1.00 [t]$	43
4.6	Condutância elétrica em função da energia para um <i>phased array</i> com a forma de um “Y” com barreiras de potencial de alturas $V_1 = 1.0 [t]$, $V_2 = 0.5 [t]$ e $V_3 = 1.5 [t]$	44
4.7	Condutância elétrica em função do potencial elétrico para um <i>phased array</i> com a forma de um “Y” com barreiras de potencial de alturas $V_1 = V(x) [t]$, $V_2 = 0.0 [t]$ e $V_3 = V(x) + 1.4 [t]$	45

LISTA DE TABELAS

3.1	Ordens de grandeza de algumas escalas de tamanhos característicos relevantes para a Física de sistemas mesoscópicos. λ_F é o comprimento de onda de Fermi, L_m é o caminho livre médio e L_ϕ é o comprimento de relaxação de fase. Fonte: adaptada da referência [3].	26
-----	--	----

SUMÁRIO

1	Introdução	1
1.1	Perspectiva histórica	1
1.2	Eletrônica baseada no carbono	3
1.3	Orbitais híbridos sp^2	5
1.4	Organização da dissertação	7
2	Propriedades eletrônicas elementares do grafeno	8
2.1	Estrutura cristalina	8
2.2	Método <i>tight-binding</i>	10
2.3	Limite de baixas energias	12
2.4	Paradoxo de Klein	15
2.5	Nanofitas de grafeno	20
2.5.1	Bordas <i>armchair</i>	21
3	Transporte eletrônico e metodologia computacional	25
3.1	Transporte eletrônico	25
3.1.1	Formalismo de Landauer-Büttiker	28
3.1.2	Fórmula de Landauer	30
3.1.3	Fórmula de Büttiker	31
3.2	Introdução ao Kwant	32
3.3	<i>Phased arrays</i>	35
3.3.1	<i>Phased arrays</i> de nanofitas de grafeno	36
4	Resultados e discussão	38
4.1	<i>Phased array</i> com a forma de um retângulo	38
4.1.1	Condutância elétrica em função da energia	39

4.2	<i>Phased array</i> com a forma de um “Y”	41
4.2.1	Condutância elétrica em função da energia	42
4.2.2	Condutância elétrica em função do potencial elétrico	44
5	Considerações finais	46
	Referências	48
A	Bandas de energia e condutância elétrica em função da energia para uma nanofita de grafeno <i>armchair</i> de largura $N_{ac} = 17$	51

Capítulo 1

Introdução

1.1 Perspectiva histórica

As novas e incomuns propriedades biológicas, físicas e químicas apresentadas pelos materiais nanoestruturados são descobertas científicas importantes que começam a apontar para os possíveis avanços que serão alcançados pela ciência e pela tecnologia em um futuro próximo. À área que investiga esses novos materiais foi atribuído o nome de Nanociência ou, mais comumente, Nanotecnologia. Entretanto, a diferença entre Nanociência e Nanotecnologia é igualmente comparável à diferença entre ciência e tecnologia. O domínio da Nanotecnologia encontra-se compreendido entre 0.1 e 100 nanômetros [8]. Nano é um prefixo utilizado em notação científica para representar o 10^{-9} . Nesse sentido, um nanômetro significa 10^{-9} metros. É exatamente nessa escala de tamanho que atualmente estão convergindo os processos de miniaturização da Eletrônica.

Em 1959, o físico norte-americano R. P. Feynman proferiu uma palestra intitulada “*There is plenty of room at the bottom*”, algo como “Há muito mais espaço lá embaixo”. Esse título estranho tratava-se de uma resposta provocativa ao fato de que alguém havia conseguido gravar a oração “Pai Nosso” na cabeça de um alfinete [14]. Durante a palestra, R. P. Feynman levantou o seguinte questionamento: “Por que apenas uma oração e não todo o conteúdo da Enciclopédia Britânica?” Hoje em dia essa palestra é considerada como sendo o marco inicial das áreas Nanociência e Nanotecnologia. Pelo mundo, tanto institutos acadêmicos como de pesquisa aplicada estão criando novos caminhos para pesquisa em Nanotecnologia. Os principais temas investigados atualmente são: Ciência de Materiais, Eletrônica, Optoeletrônica e Ciência Biomédica [13].

Na escala nanométrica há dois aspectos que devem ser considerados: i) a redução da escala de tamanho, que provoca implicações no comportamento dos materiais, e ii) os efeitos quânticos, que surgem em dimensões atômicas e moleculares. De fato, em dimensões atômicas e moleculares, partículas podem atravessar barreiras de potencial, mesmo sem ter energia suficiente para isso. Esse fenômeno é conhecido como tunelamento e é a base para diversos dispositivos eletrônicos atuais.

Em reconhecimento à importância das áreas Nanociência e Nanotecnologia para o próprio Brasil, o Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI)¹ lançou em 2013 a Iniciativa Brasileira de Nanotecnologia (IBN), que é um conjunto de ações que objetivam criar, integrar e fortalecer as atividades governamentais e os agentes ancorados na Nanociência e na Nanotecnologia, para promover o desenvolvimento científico e tecnológico do setor, com foco na inovação. Além disso, a IBN visa aproximar a infraestrutura acadêmica e as empresas, fortalecendo os laços entre pesquisa, conhecimento e setor privado [12].

Em 1965, o norte-americano G. Moore, cofundador da Intel Corporation, fez uma previsão que determinaria o ritmo da revolução digital moderna. A partir da observação cuidadosa de uma nova tendência, G. Moore concluiu que o poder da computação aumentaria tremendamente e que seu custo relativo cairia a um ritmo vertiginoso [1]. Além disso, o mesmo previu que a capacidade de integração na Eletrônica, ou seja, colocar vários componentes eletrônicos em um determinado local, duplicaria a cada ano. Essa percepção, conhecida como Lei de Moore, transformou-se na regra de ouro da Indústria Eletrônica e em um trampolim para a inovação [1]. A Figura 1.1 representa um gráfico da Lei de Moore, de 1970 a 2010.

Atualmente, o elemento químico mais utilizado em Eletrônica é o silício. Trata-se de um material semicondutor, pois suas características elétricas encontram-se entre as dos condutores e as dos isolantes. Apesar de sua grande eficiência e versatilidade, o uso do silício em Eletrônica poderá chegar ao seu limite em menos de uma década [14], por conta de problemas que aparecem quando a escala de tamanho encontra-se na ordem de grandeza do nanômetro.

¹Atual Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações (MCTIC).

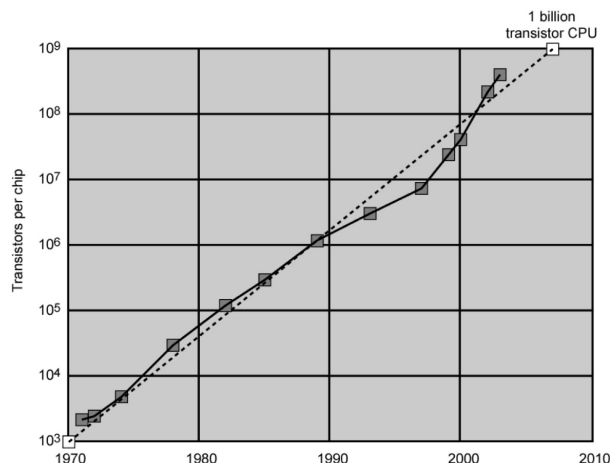


Figura 1.1: Evolução do número de transistores por chip (linha contínua) em intervalos de dez em dez anos, contados de 1970 a 2010, em comparação com a Lei de Moore (linha tracejada). Fonte: <http://producao.virtual.ufpb.br>.

1.2 Eletrônica baseada no carbono

Apesar de G. Moore estar correto em suas previsões, todos sabem, inclusive ele próprio, que esse crescimento não pode durar para sempre. Os transistores de hoje em dia estão na escala de tamanho de 22 nanômetros [10]. Essa é a mesma escala de tamanho de alguns vírus e bactérias. Reduzir mais do que isso torna-se cada vez mais difícil. Pesquisadores e cientistas atualmente estão buscando outras formas de fazer com que os computadores continuem evoluindo em seus desempenhos e reduzindo seus custos. Alguns sugerem a substituição de transistores feitos de silício por transistores feitos de outros materiais, de preferência materiais nanoestruturados. Dentre os vários materiais que podem ser enquadrados na classe dos materiais nanoestruturados, e que é bastante promissor para substituir o silício em um futuro breve, está o grafeno (Figura 1.2), objeto de estudo desse trabalho.

O grafeno é constituído por uma camada de átomos de carbono arranjados em uma rede cristalina *honeycomb* (favo de mel). É considerado um material essencialmente bidimensional, pois possui apenas um átomo de carbono de espessura. Há algumas décadas atrás, L. D. Landau e R. E. Peierls argumentaram que cristais estritamente bidimensionais eram termodinamicamente instáveis e por isso não deveriam existir [24]. Entretanto, em 2004 os físicos russos A. K. Geim, K. S. Novoselov e outros, ambos da Universidade de Manchester (Reino Unido), publicaram um artigo [21] relatando, pela

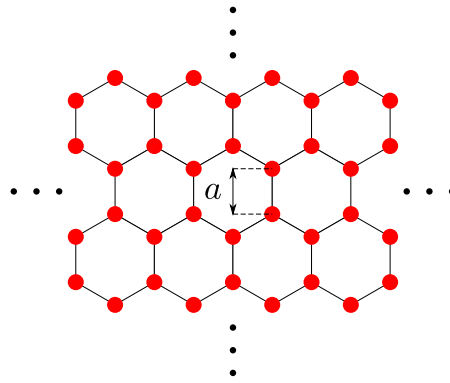


Figura 1.2: Grafeno. Possui uma rede cristalina conhecida como *honeycomb* (favo de mel), com parâmetro de rede a .

primeira vez, a obtenção experimental do grafeno e também uma série de resultados sobre algumas de suas propriedades físicas. Já em 2010, A. K. Geim e K. S. Novoselov foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física por suas “experiências inovadoras sobre o material bidimensional grafeno”. Curiosamente, A. K. Geim também tem em seu currículo um Prêmio Ig Nobel (destinado a conquistas que primeiro fazem as pessoas rirem e depois as fazem pensar), obtido em 2000, por usar campos magnéticos para levitar uma rã.

A técnica utilizada por A. K. Geim e K. S. Novoselov para a obtenção experimental do grafeno é razoavelmente simples. Eles extraíram algumas monocamadas de grafeno a partir do grafite por uma técnica conhecida como *micromechanical cleavage* (clivagem micromecânica) [30]. O grafite é considerado como sendo constituído pelo empilhamento de monocamadas de grafeno. Através dessa técnica, as amostras de grafeno produzidas são tão boas, no sentido de não terem defeitos ou impurezas, que fenômenos como transporte balístico e efeito Hall quântico podem ser facilmente observados [25]. Para fins de aplicação, a técnica mais apropriada na maioria dos casos para a obtenção de amostras grandes é a CVD (*chemical vapour deposition*).

O grafeno é o material base para os fulerenos ($0D$, não há grau de liberdade para o movimento dos portadores de carga elétrica) [19], para os nanotubos de carbono ($1D$, há 1 grau de liberdade) [20] e para o grafite ($3D$, há 3 graus de liberdade), a obtenção dessas formas alotrópicas do carbono a partir do grafeno está representada na Figura 1.3.

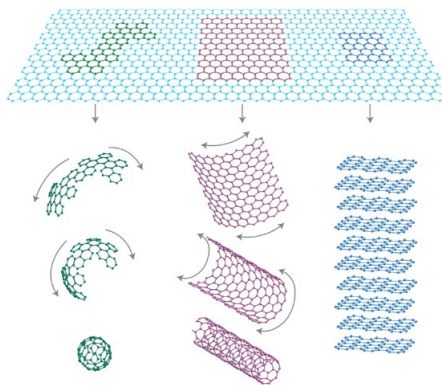


Figura 1.3: Formas alotrópicas do carbono obtidas a partir do grafeno. Da esquerda para a direita temos o fulereno, em seguida o nanotubo de carbono e por fim o grafite. Fonte: referência [24].

1.3 Orbitais híbridos sp^2

O carbono é um elemento químico muito especial. Esse elemento químico está diretamente associado à vida que existe no planeta Terra. Podemos dizer que a importância do carbono consiste na possibilidade de o mesmo possuir diferentes orbitais híbridos: sp , sp^2 e sp^3 . Em alguns materiais os átomos de carbono podem ainda assumir orbitais híbridos sp^d , com $2 < d < 3$ [2]. Por conta disso, o carbono é capaz de realizar ligações químicas de inúmeras maneiras resultando em complexas moléculas. No grafeno, o tipo de orbital híbrido existente é o sp^2 .

De acordo com a teoria do orbital molecular, ligações covalentes resultam da combinação linear de orbitais atômicos para formar orbitais moleculares, que pertencem a toda a molécula em vez de um átomo apenas. O orbital atômico trata-se de uma região em torno do núcleo em que um elétron pode ser encontrado, já o orbital molecular trata-se de uma região em torno da molécula em que um elétron pode ser encontrado.

Geralmente usa-se a notação s, p, d, f correspondendo aos orbitais atômicos com $l = 1, 2, 3, 4$, em que l é o chamado número quântico azimutal. A Figura 1.4 ilustra a forma espacial dos orbitais atômicos mais simples, o s e o p . Podemos observar que o orbital atômico s permite apenas uma forma espacial (o mesmo apresenta simetria esférica), enquanto que o p permite três: p_x, p_y e p_z , pois podem ser alinhadas com os respectivos eixos x, y e z . O átomo de carbono possui seis elétrons, que ocupam os seguintes autoestados: $1s, 2s$ e $2p$ (Figura 1.5(a)).

Para um átomo de carbono realizar as ligações covalentes existentes no grafeno,

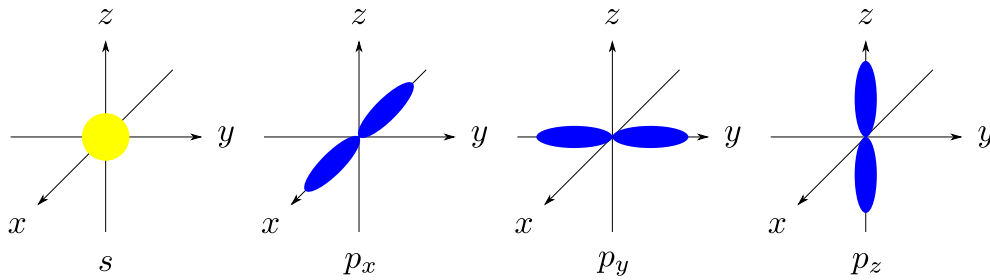


Figura 1.4: Forma espacial dos orbitais atômicos s , p_x , p_y e p_z .

o mesmo precisa ser ligado quimicamente a outros três átomos de carbono e, para isso, cada átomo de carbono hibridiza três orbitais atômicos (um s e dois p). Esses são os chamados orbitais híbridos sp^2 . Para minimizar a repulsão elétrica, os três orbitais híbridos sp^2 procuram ficar o mais distante possível uns dos outros ($F_E \propto r^{-2}$), resultando em um ângulo de 120° entre os eixos dos mesmos. Cada átomo de carbono com três orbitais híbridos sp^2 , então, está ligado quimicamente a outros três átomos de carbono, o que constitui um plano. O orbital atômico p_z não hibridizado é perpendicular a esse plano, como está ilustrado na Figura 1.5(b).

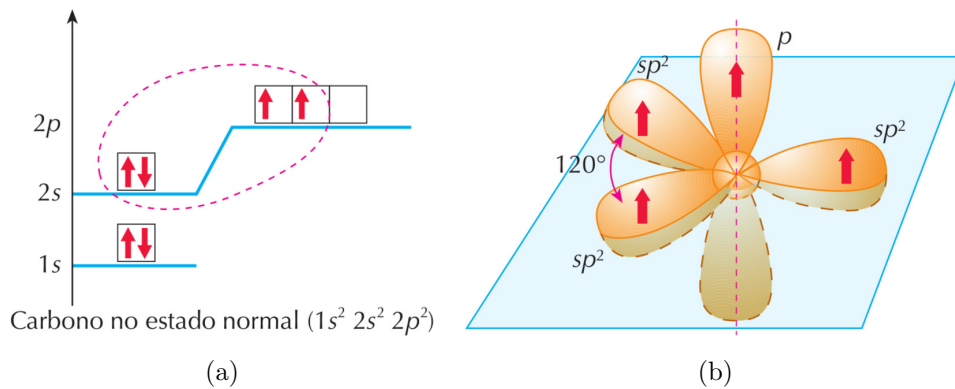


Figura 1.5: (a) Autoestados do átomo de carbono. (b) Orbitais híbridos sp^2 e orbital atômico (não hibridizado) p_z . Fonte: referência [9].

Como veremos, os elétrons com baixas energias no grafeno comportam-se como partículas relativísticas de massa nula, o que resulta em propriedades eletrônicas bem peculiares para esse material. Isso cria uma ponte entre a Física da Matéria Condensada e a Eletrodinâmica Quântica, além de abrir novas perspectivas para a Eletrônica baseada no carbono. Uma das peculiaridades é o fato desses elétrons poderem atravessar uma barreira de potencial sem que suas autofunções sofram amortecimento. Tal fenômeno, conhecido como paradoxo de Klein, nem sempre é visto como algo benéfico para a modelagem de

dispositivos eletrônicos. No entanto, ao atravessar a barreira de potencial, a autofunção adquire um fator de fase que pode depender apenas da altura e da largura da barreira de potencial. Esse fator de fase é muitas vezes passado despercebido nos trabalhos sobre paradoxo de Klein no grafeno, mas pode ser muito útil para a modelagem de dispositivos eletrônicos baseados em fenômenos de interferência. Nesse trabalho, investigamos dois desses tipos de dispositivos eletrônicos, que podem muito bem ser associados a *phased arrays*, que são sistemas eletrônicos que possuem vários emissores de ondas (mecânicas ou eletromagnéticas) devidamente organizados. Essas ondas, após serem emitidas, podem interferir umas com as outras e o resultado disso é a possibilidade de elas serem reforçadas em uma dada orientação e atenuadas nas outras.

1.4 Organização da dissertação

No Capítulo 2 fizemos uma revisão sobre as propriedades eletrônicas elementares do grafeno abordando os seguintes temas: estrutura cristalina, método *tight-binding*, limite de baixas energias, paradoxo de Klein e nanofitas de grafeno. No Capítulo 3 fizemos uma revisão sobre o transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos e sobre a metodologia computacional utilizada no trabalho, dessa forma, abordamos os aspectos de transporte eletrônico com foco no formalismo de Landauer-Büttiker, introduzimos o Kwant e por fim descrevemos brevemente os chamados *phased arrays*. No Capítulo 4 apresentamos os resultados obtidos e os discutimos. No Capítulo 5 apresentamos as considerações finais do trabalho.

Capítulo 2

Propriedades eletrônicas elementares do grafeno

A informação sobre o aspecto das bandas de energia de um material é fundamental para a compreensão das propriedades eletrônicas do mesmo. A partir dessa informação, podemos saber os níveis de energia permitidos para o material. Um procedimento bastante utilizado para determinar as bandas de energia do grafeno é o chamado método *tight-binding* (ligação forte). Faremos uma breve discussão sobre a estrutura cristalina do grafeno na Seção 2.1 e, em seguida, discutiremos suas propriedades eletrônicas elementares.

2.1 Estrutura cristalina

O grafeno é constituído por uma camada de átomos de carbono arranjados em uma rede cristalina *honeycomb* (favo de mel), como mostra a Figura 2.1. Tal rede cristalina não é uma rede de Bravais, no entanto, podemos representá-la por uma rede cristalina triangular com dois átomos de carbono na base, formada pela sobreposição de duas sub-redes cristalinas triangulares, chamadas de sub-redes *A* e *B*. Dizer que uma rede cristalina não é uma rede de Bravais significa que não existem dois vetores primitivos que possam ser combinados linearmente para gerar qualquer outro sítio da rede cristalina.

Sendo $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ [27] a distância carbono-carbono, podemos escrever os vetores primitivos da rede direta do grafeno como:

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

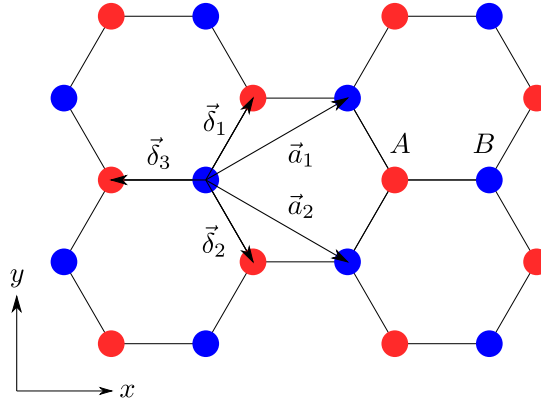


Figura 2.1: Rede cristalina *honeycomb* (favô de mel). Os sítios em vermelho e azul denotam as sub-redes A e B , respectivamente.

Por definição, a rede recíproca associada a uma dada rede cristalina é aquela formada por vetores de onda \vec{k} que obedecem à seguinte condição:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1, \quad (2.2)$$

para todo vetor posição \vec{R} da rede direta. É fácil mostrar que a rede recíproca também é uma rede de Bravais, com vetores primitivos \vec{b}_1 , \vec{b}_2 e \vec{b}_3 , dados por:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad (2.3)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad (2.4)$$

$$\vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (2.5)$$

Com isso, escrevemos os vetores primitivos da rede recíproca do grafeno como:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}) \quad (2.6)$$

Existem dois pontos nessa rede recíproca que, conforme veremos, possuem importância particular para a Física do grafeno, que são os pontos \vec{K} e \vec{K}' :

$$\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \quad \vec{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \quad (2.7)$$

Esses dois pontos são chamados de pontos de Dirac, por motivos que serão esclarecidos em breve, e localizam-se na primeira zona de Brillouin de acordo com a Figura 2.2.

A partir da rede direta do grafeno podemos especificar os vetores que identi-

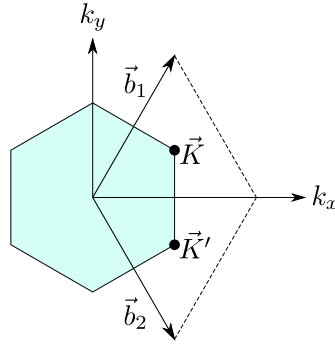


Figura 2.2: Rede recíproca do grafeno contendo a primeira zona de Brillouin e os pontos de Dirac, \vec{K} e \vec{K}' .

cam os três primeiros vizinhos de um certo átomo de carbono, são eles:

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad (2.8)$$

$$\vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad (2.9)$$

$$\vec{\delta}_3 = -a(1, 0) \quad (2.10)$$

Faremos a partir de agora uma descrição das propriedades eletrônicas elementares do grafeno utilizando o método *tight-binding*. Tal método é particularmente útil por possibilitar a obtenção de soluções analíticas aproximadas para os autovalores do operador Hamiltoniano.

2.2 Método *tight-binding*

A aplicação do método *tight-binding* ao grafeno foi feita originalmente por P. R. Wallace, em 1946 [18]. Esse método é útil quando a sobreposição dos orbitais atômicos, relevante para a descrição do problema, é representativa apenas entre átomos que são vizinhos próximos na rede cristalina. Com isso, podemos utilizar os orbitais atômicos como base para a representação do operador Hamiltoniano que descreve o comportamento dos elétrons no material, [11] e [26].

Para o grafeno, considerando a possibilidade de salto de um elétron em um átomo de carbono apenas para seus três primeiros vizinhos (usamos a notação $\langle i, j \rangle$ para representar isso), podemos escrever o operador Hamiltoniano, em termos de operadores de criação e aniquilação, como [27]:

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} (a_{\sigma, i}^\dagger b_{\sigma, j} + h.c.), \quad (2.11)$$

em que $t \approx 2.8$ eV [27] é o parâmetro de *hopping* entre átomos de carbono que são primeiros vizinhos e $a_{\sigma,i}$ ($a_{\sigma,i}^\dagger$) é um operador que aniquila (cria) um elétron de spin $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow no sítio \vec{R}_i da sub-rede A , o equivalente sendo válido para $b_{\sigma,j}$ ($b_{\sigma,j}^\dagger$).

Devemos observar que os primeiros vizinhos de um certo átomo de carbono da sub-rede A são três átomos de carbono da sub-rede B , e vice-versa. Já os segundos vizinhos são seis átomos de carbono da própria sub-rede A (ou B , se for o caso). O parâmetro de *hopping* entre átomos de carbono que são primeiros vizinhos é aproximadamente uma ordem de grandeza maior que entre segundos vizinhos [33]. É nesse sentido que podemos desconsiderar as interações entre átomos de carbono que não são primeiros vizinhos na presente aproximação. Para diagonalizar (2.11) podemos aplicar aos operadores de criação e aniquilação as seguintes transformadas discretas de Fourier:

$$a_{\sigma,i} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}} a_{\sigma,\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i}, \quad (2.12)$$

$$a_{\sigma,i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}} a_{\sigma,\vec{k}}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i}, \quad (2.13)$$

$$b_{\sigma,j} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}'} b_{\sigma,\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{R}_j}, \quad (2.14)$$

$$b_{\sigma,j}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\vec{k}'} b_{\sigma,\vec{k}'}^\dagger e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{R}_j}, \quad (2.15)$$

em que N_c é o número de células unitárias e $\vec{k} = (k_x, k_y)$ é o vetor de onda no espaço dos momentos. Substituindo (2.12), (2.13), (2.14) e (2.15) em (2.11), temos:

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\frac{1}{N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} a_{\sigma,\vec{k}}^\dagger b_{\sigma,\vec{k}'} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{R}_j} + h.c. \right) \\ &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\frac{1}{N_c} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{k}'} a_{\sigma,\vec{k}}^\dagger b_{\sigma,\vec{k}'} e^{i\vec{R}_i \cdot (\vec{k}' - \vec{k})} e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} + h.c. \right), \end{aligned} \quad (2.16)$$

fixando um dado sítio \vec{R}_j , temos que $\vec{R}_i = \vec{R}_j + \vec{\delta}_n$ ($n = 1, 2, 3$). Notamos agora que:

$$\delta(\vec{k}' - \vec{k}) = \frac{1}{N_c} \sum_i e^{i\vec{R}_i \cdot (\vec{k}' - \vec{k})}, \quad (2.17)$$

$$\delta(\vec{k} - \vec{k}') = \frac{1}{N_c} \sum_j e^{i\vec{R}_j \cdot (\vec{k} - \vec{k}')}, \quad (2.18)$$

em que $\delta(\Delta\vec{k})$ é o delta de Kronecker. Com isso, reescrevemos (2.16) como:

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\sum_{\vec{k}} a_{\sigma,\vec{k}}^\dagger b_{\sigma,\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} + h.c. \right) \\ &= \sum_{\vec{k}} (a_{\sigma,\vec{k}}^\dagger b_{\sigma,\vec{k}} f(\vec{k}) + h.c.), \end{aligned} \quad (2.19)$$

em que $f(\vec{k}) = -t \sum_{(i,j),\sigma} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_j - \vec{R}_i)} = -t \sum_{n=1}^3 e^{-i\vec{k} \cdot \delta_n}$ chama-se fator geométrico e aqui representa as interações na rede recíproca entre átomos de carbono que são primeiros vizinhos. A partir dos vetores apresentados em (2.8), (2.9) e (2.10) podemos determinar o fator geométrico para o grafeno:

$$f(\vec{k}) = -t \left[2e^{-ik_x \frac{a}{2}} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_y\right) + e^{ik_x a} \right] \quad (2.20)$$

Sendo:

$$H_N = \begin{bmatrix} 0 & f(\vec{k}) \\ f(\vec{k})^* & 0 \end{bmatrix}, \quad \Psi_{\sigma, \vec{k}} = \begin{bmatrix} a_{\sigma, \vec{k}} \\ b_{\sigma, \vec{k}} \end{bmatrix}, \quad (2.21)$$

reescrevemos (2.19) como:

$$H = \sum_{\vec{k}} \Psi_{\sigma, \vec{k}}^\dagger H_N \Psi_{\sigma, \vec{k}}, \quad (2.22)$$

obtemos as bandas de energia do grafeno diagonalizando H_N :

$$\begin{aligned} E(\vec{k})^2 &= |f(\vec{k})|^2 \Rightarrow \\ E_{\pm}(\vec{k}) &= \pm t \sqrt{3 + 2 \cos(\sqrt{3} k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2} k_x a\right)}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

em que $E_+(\vec{k})$ e $E_-(\vec{k})$ referem-se às bandas de condução e valência do grafeno, respectivamente. Tais bandas de energia são simétricas em relação ao plano de energia nula. A Figura 2.3 apresenta o gráfico de (2.23). Podemos observar que existem seis pontos em que essas bandas de energia se tocam, desses seis pontos apenas dois não são equivalentes, que são os pontos de Dirac, \vec{K} e \vec{K}' .

2.3 Limite de baixas energias

Vamos agora expandir $f(\vec{k})$ em uma série de Taylor de 1ª ordem em torno do ponto $\vec{K} = (\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a})$:

$$f(\vec{k}) \approx f(\vec{K}) + \frac{\partial f(\vec{K})}{\partial k_x} (k_x - k_{x0}) + \frac{\partial f(\vec{K})}{\partial k_y} (k_y - k_{y0}) \quad (2.24)$$

Após realizar algumas manipulações matemáticas, chegamos ao seguinte resultado:

$$f(\vec{k}) \approx \frac{3}{4} at [(\sqrt{3} + i)(k_x - k_{x0}) + (1 - \sqrt{3}i)(k_y - k_{y0})] \quad (2.25)$$

Sendo $\vec{q} = (q_x, q_y) = (k_x - k_{x0}, k_y - k_{y0})$ um vetor deslocamento de pequeno módulo com origem em \vec{K} , reescrevemos (2.25) como:

$$f(\vec{q}) \approx \frac{3}{4} at [(\sqrt{3} + i)q_x + (1 - \sqrt{3}i)q_y] \quad (2.26)$$

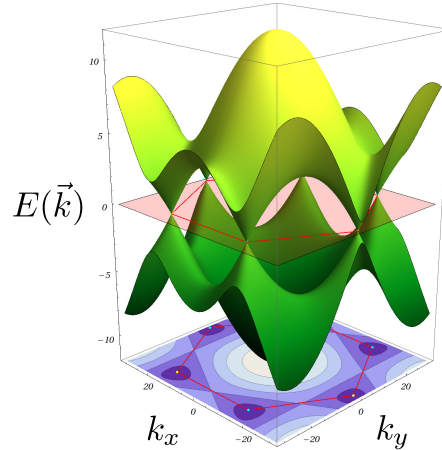


Figura 2.3: Bandas de condução e valência do grafeno, considerando apenas as interações entre átomos de carbono que são primeiros vizinhos. Fonte: adaptada de <http://oer.physics.manchester.ac.uk>.

Com isso, as bandas de condução e valência do grafeno em torno do ponto \vec{K} são dadas por:

$$E_{\pm}(\vec{q}) \approx \pm \frac{3}{2}at\sqrt{q_x^2 + q_y^2} = \pm v_F\sqrt{q_x^2 + q_y^2}, \quad (2.27)$$

em que $v_F = \frac{3}{2}at$ é a velocidade de Fermi dos portadores de carga elétrica com baixas energias no grafeno. Substituindo os valores de $t \approx 2.8$ eV e de $a \approx 1.42$ Å, encontramos o valor de $v_F \approx \frac{c}{300}$ para a velocidade de Fermi, em que $c \approx 3 \times 10^8$ m/s é a velocidade da luz no vácuo. A Figura 2.4 apresenta o gráfico de (2.27). A banda de valência (cone de Dirac inferior) abrange os autoestados ocupados por elétrons, já a banda de condução (cone de Dirac superior) está completamente vazia. Podemos notar que próximo ao ponto \vec{K} (limite de baixas energias) as bandas de condução e valência do grafeno possuem o formato de cones.

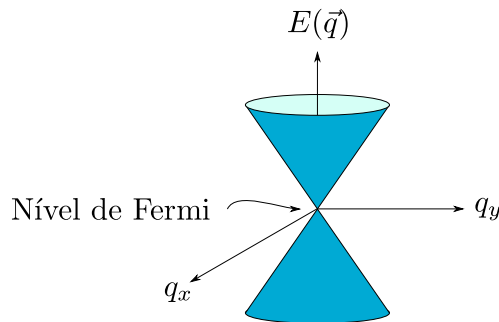


Figura 2.4: Bandas de condução e valência do grafeno no limite de baixas energias, considerando apenas as interações entre átomos de carbono que são primeiros vizinhos.

Como vimos, nas proximidades do ponto \vec{K} (e do ponto \vec{K}') há uma relação de linearidade entre a energia e o momento. Essa relação é verificada para partículas relativísticas de massa nula, descritas pela equação de Dirac. Com isso, no limite de baixas energias e considerando todas as aproximações anteriores, podemos escrever o operador Hamiltoniano como:

$$H = \sum_{\vec{k}} \Psi_{\sigma, \vec{k}}^\dagger \begin{bmatrix} 0 & \frac{3}{4}at(\sqrt{3} + i)(q_x - q_y i) \\ \frac{3}{4}at(\sqrt{3} - i)(q_x + q_y i) & 0 \end{bmatrix} \Psi_{\sigma, \vec{k}}, \quad (2.28)$$

$$H = v_F \sum_{\vec{k}} \Psi_{\sigma, \vec{k}}^\dagger \begin{bmatrix} 0 & q_x - q_y i \\ q_x + q_y i & 0 \end{bmatrix} \Psi_{\sigma, \vec{k}}, \quad (2.29)$$

ou ainda, de forma resumida:

$$H = \sum_{\vec{k}} \Psi_{\sigma, \vec{k}}^\dagger (v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{q}) \Psi_{\sigma, \vec{k}}, \quad (2.30)$$

em que $\vec{\sigma}$ é um vetor que possui as matrizes de Pauli como componentes, dadas por:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

Para retornarmos ao espaço das posições, devemos fazer uma transformada discreta de Fourier inversa. Como fizemos a aproximação de que $\vec{q} \ll \vec{K}$, e \vec{K} é inversamente proporcional a a , as distâncias envolvidas são muito pequenas e podemos considerar o vetor posição como sendo uma variável contínua [7]. Sendo assim, os somatórios em \vec{R} podem ser substituídos por integrais. Após realizar essas considerações, chegamos ao seguinte resultado:

$$H = -iv_F \int_S \Psi_{\sigma, \vec{R}}^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) \Psi_{\sigma, \vec{R}} d^2 \vec{R}, \quad (2.32)$$

e, portanto, os elétrons com baixas energias no grafeno são agora descritos pela equação de Dirac para partículas relativísticas de massa nula:

$$-iv_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \Psi_{\sigma, \vec{R}} = E_\pm(\vec{q}) \Psi_{\sigma, \vec{R}} \quad (2.33)$$

Diante disso, podemos fazer uma analogia entre o comportamento de fótons e elétrons com baixas energias no grafeno, levando em conta, é claro, o fato de existir uma diferença em seus spins. Os fótons são bósons, e possuem spin 1, já os elétrons são férmions, e possuem spin 1/2.

2.4 Paradoxo de Klein

O paradoxo de Klein foi relatado pela primeira vez no contexto da Eletrodinâmica Quântica. Em 1929, O. B. Klein chegou a um resultado incomum ao analisar a propagação de um elétron em uma barreira de potencial utilizando a equação de Dirac. Em seu resultado, O. B. Klein verificou que as autofunções correspondentes aos elétrons que penetravam na barreira de potencial não sofriam amortecimento em determinadas circunstâncias, resultado esse que não é verificado para partículas (não relativísticas) descritas pela equação de Schrödinger, por exemplo.

Como os elétrons com baixas energias no grafeno podem ser descritos pela equação de Dirac para partículas de massa nula, é natural procurar evidências do paradoxo de Klein desses elétrons em uma barreira de potencial. Chamaremos os elétrons com baixas energias que propagam-se no grafeno simplesmente de elétrons a partir de agora. Seja uma barreira de potencial (Figura 2.5) definida por:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \leq 0 \text{ ou } x \geq d, \\ V_0, & \text{se } 0 < x < d. \end{cases}$$

Seja uma autofunção escrita como [17]:

$$\Psi_{\sigma, \vec{R}} = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (2.34)$$

Substituindo essa autofunção em (2.33), temos:

$$v_F \begin{bmatrix} 0 & q_x - q_y i \\ q_x + q_y i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = E_{\pm}(\vec{q}) \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

Sendo $E_{\pm}(\vec{q}) = sv_F q$, em que $s = +1$ (banda de condução do grafeno) ou $s = -1$ (banda de valência do grafeno), temos:

$$A_2 = A_1 s e^{i\theta}, \quad \theta = \tan^{-1}\left(\frac{q_y}{q_x}\right) \quad (2.36)$$

Utilizando a condição de normalização para as autofunções:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\sigma, \vec{R}}^{\dagger} \Psi_{\sigma, \vec{R}} d^2 \vec{R} = 1, \quad (2.37)$$

encontramos o valor de $A_1 = \frac{1}{\sqrt{2L}}$, com isso:

$$\Psi_{\sigma, \vec{R}} = \frac{1}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} 1 \\ s e^{i\theta} \end{bmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \quad (2.38)$$

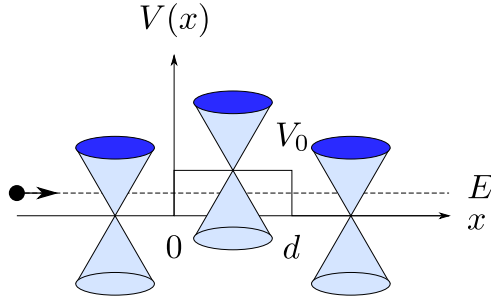


Figura 2.5: Propagação de um elétron (com baixa energia) em uma barreira de potencial no grafeno.

Existem diversos trabalhos que abordam o paradoxo de Klein no grafeno, duas importantes referências são [23] e [28]. Seguiremos nesse momento o desenvolvimento apresentado em [17]. Consideremos a incidência de um elétron propagando-se no grafeno sobre uma barreira de potencial. Seja θ o ângulo entre o vetor de onda \vec{k} e a direção do eixo x (regiões 1 e 3 na Figura 2.6). Após esse elétron penetrar através da barreira de potencial (região 2 na Figura 2.6), o ângulo descrito anteriormente passa a ser φ . Escreveremos as autofunções nas regiões 1, 2 e 3 como:

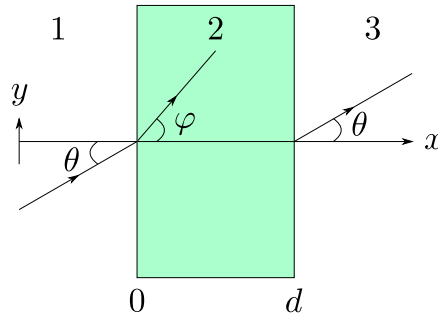


Figura 2.6: Incidência de um elétron propagando-se no grafeno sobre uma barreira de potencial com os respectivos ângulos de incidência θ e refração φ .

$$\Psi_{\sigma, \vec{R}}^1 = \frac{1}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} 1 \\ se^{i\theta} \end{bmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} 1 \\ se^{i(\pi-\theta)} \end{bmatrix} e^{i(-k_x x + k_y y)}, \quad (2.39)$$

$$\Psi_{\sigma, \vec{R}}^2 = \frac{a}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} 1 \\ s'e^{i\varphi} \end{bmatrix} e^{i(\kappa_x x + k_y y)} + \frac{b}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} 1 \\ s'e^{i(\pi-\varphi)} \end{bmatrix} e^{i(-\kappa_x x + k_y y)}, \quad (2.40)$$

$$\Psi_{\sigma, \vec{R}}^3 = \frac{t}{\sqrt{2L}} \begin{bmatrix} 1 \\ se^{i\theta} \end{bmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (2.41)$$

em que $s = \text{sgn}(E)$, $s' = \text{sgn}(E - V_0)$ e:

$$\kappa_x = \sqrt{(E - V_0)^2/v_F^2 - k_y^2}, \quad (2.42)$$

$$\tan \varphi = \frac{k_y}{\sqrt{(E - V_0)^2/v_F^2 - k_y^2}} \quad (2.43)$$

Podemos obter os coeficientes a , b , r e t a partir das condições de contorno para as autofunções nas interfaces 1|2 e 2|3. Para o nosso propósito, é suficiente obter apenas o coeficiente de transmissão, t . As condições de contorno em questão são:

$$\Psi_{\sigma,(0,y)}^1 = \Psi_{\sigma,(0,y)}^2, \quad (2.44)$$

$$\Psi_{\sigma,(d,y)}^2 = \Psi_{\sigma,(d,y)}^3 \quad (2.45)$$

Da condição de contorno (2.44), temos:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ se^{i\theta} \end{bmatrix} + r \begin{bmatrix} 1 \\ se^{i(\pi-\theta)} \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 1 \\ s'e^{i\varphi} \end{bmatrix} + b \begin{bmatrix} 1 \\ s'e^{i(\pi-\varphi)} \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

O que resulta em:

$$1 + r = a + b, \quad (2.47)$$

$$s[e^{i\theta} + re^{i(\pi-\theta)}] = s'[ae^{i\varphi} + be^{i(\pi-\varphi)}] \quad (2.48)$$

Da condição de contorno (2.45), temos:

$$a \begin{bmatrix} 1 \\ s'e^{i\varphi} \end{bmatrix} e^{i\kappa_x d} + b \begin{bmatrix} 1 \\ s'e^{i(\pi-\varphi)} \end{bmatrix} e^{-i\kappa_x d} = t \begin{bmatrix} 1 \\ se^{i\theta} \end{bmatrix} e^{ik_x d} \quad (2.49)$$

O que resulta em:

$$ae^{i\kappa_x d} + be^{-i\kappa_x d} = te^{ik_x d}, \quad (2.50)$$

$$s'[ae^{i(\varphi+\kappa_x d)} + be^{i(\pi-\varphi-\kappa_x d)}] = tse^{i(\theta+k_x d)} \quad (2.51)$$

Combinando (2.47), (2.48), (2.50) e (2.51), encontramos o valor de t [6]:

$$t = \frac{e^{-ik_x d}}{\cos(\kappa_x d) + i \sin(\kappa_x d)(\tan \varphi \tan \theta - ss' \sec \varphi \sec \theta)} \quad (2.52)$$

Sendo $T = tt^*$ a probabilidade de transmissão do elétron da região 1 para a região 3, encontramos o valor de T a partir de (2.52):

$$T = \frac{\cos^2 \varphi \cos^2 \theta}{\cos^2(\kappa_x d) \cos^2 \varphi \cos^2 \theta + \sin^2(\kappa_x d)(1 - ss' \sin \varphi \sin \theta)^2} \quad (2.53)$$

Inspecionando (2.53) concluímos duas coisas: i) se o ângulo de incidência θ for nulo, obteremos uma probabilidade de transmissão de 100%, independente das características da barreira de potencial, e ii) quando $\kappa_x d = n\pi$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) também obteremos uma probabilidade de transmissão de 100%. No limite em que a altura da barreira de potencial é muito maior que a energia do elétron, ou seja, $|V_0| \gg |E|$, o ângulo de refração φ tende a zero, com isso reescrevemos (2.53):

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{\cos^2 \theta}{\cos^2(\kappa_x d) \cos^2 \theta + \sin^2(\kappa_x d)} \\
 &= \frac{\cos^2 \theta}{\cos^2(\kappa_x d) \cos^2 \theta + 1 - \cos^2(\kappa_x d)} \\
 &= \frac{\cos^2 \theta}{1 - \cos^2(\kappa_x d)(1 - \cos^2 \theta)} \\
 &= \frac{\cos^2 \theta}{1 - \cos^2(\kappa_x d) \sin^2 \theta}
 \end{aligned} \tag{2.54}$$

Nesse caso, mesmo sendo $|V_0| \gg |E|$, obteremos uma probabilidade de transmissão de 100% quando, assim como no caso comentado anteriormente:

$$1 = \frac{\cos^2 \theta}{1 - \cos^2(\kappa_x d) \sin^2 \theta} \Rightarrow \kappa_x d = n\pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \tag{2.55}$$

Esses resultados incomuns estão diretamente associados ao paradoxo de Klein da Eletrodinâmica Quântica. O gráfico de T em função de θ , equação (2.53), está ilustrado na Figura 2.7.

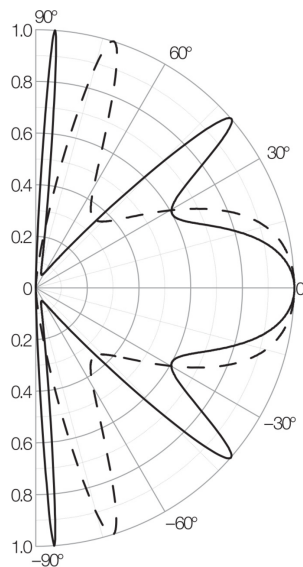


Figura 2.7: Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência θ . Fonte: referência [17].

Considerando uma incidência com ângulo de 0° , determinaremos o valor do coeficiente de transmissão t . Substituindo $\theta = 0^\circ$ em (2.52), temos:

$$t = \frac{e^{-ik_x d}}{\cos(\kappa_x d) - i \sin(\kappa_x d) s s'} \quad (2.56)$$

Sendo a altura da barreira de potencial maior que a energia do elétron, temos que $s = +1$ e $s' = -1$. Então:

$$\begin{aligned} t &= \frac{e^{-ik_x d}}{\cos(\kappa_x d) + i \sin(\kappa_x d)} \\ &= \frac{e^{-ik_x d}}{e^{i\kappa_x d}} \\ &= e^{-id(k_x + \kappa_x)} \end{aligned} \quad (2.57)$$

Substituindo o valor de κ_x , de acordo com (2.42), temos:

$$\begin{aligned} t &= e^{-id[k_x + \sqrt{(E-V_0)^2/v_F^2 - k_y^2}]} \\ &= e^{-iV_0 d/v_F}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

supondo $k_y = 0$. E assim a autofunção na região 3 fica:

$$\Psi_{\sigma, \vec{R}}^3 = \frac{e^{-iV_0 d/v_F}}{\sqrt{2}L} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} e^{ik_x x} \quad (2.59)$$

É visível que, comparada à autofunção na região 1, a mesma adquiriu um fator de fase ao atravessar a barreira de potencial. Tal fator de fase pode ser bastante útil para a modelagem de dispositivos eletrônicos baseados em fenômenos de interferência. Segundo (2.58), o fator de fase adquirido pela autofunção na região 3 depende do comprimento d da barreira de potencial e de sua altura V_0 , portanto é muito simples regular esse fator de fase.

Como exemplo de utilização desse fator de fase para a modelagem de dispositivos eletrônicos podemos citar a referência [34], em que os autores propuseram um anel quântico de grafeno com algumas barreiras de potencial com valores reguláveis para suas alturas e seus comprimentos. Ao atravessar as barreiras de potencial por caminhos distintos, o elétron adquire fatores de fase distintos, e assim as autofunções podem interferir de forma construtiva, correspondendo a um sinal eletrônico 1 (*on* \rightarrow ligado), ou destrutiva, correspondendo a um sinal eletrônico 0 (*off* \rightarrow desligado). Com isso, foi possível a obtenção de razões *on/off* muito boas.

2.5 Nanofitas de grafeno

Como foi dito no Capítulo 1, a partir do grafeno é possível obter diversas outras nanoestruturas de carbono. Uma delas é a nanofita de grafeno (*graphene nanoribbon - GNR*), que é uma fita com comprimento e largura na escala nanométrica, sendo sua largura muito menor que seu comprimento, e espessura de um único átomo de carbono. Pode ser obtida a partir do corte de uma monocamada de grafeno, privilegiando uma dada direção. Uma vez obtida a GNR, os portadores de carga elétrica ficam confinados em apenas uma direção de propagação e, assim, as autofunções associadas a essas partículas são discretizadas. Essa discretização depende basicamente das condições de contorno para as autofunções nas bordas da GNR.

O grafeno pode ser considerado como um material semicondutor de gap de energia nulo [27], no entanto, as GNR's podem apresentar um gap de energia em algumas situações. Sabe-se que a estrutura eletrônica delas possui diferenças em relação à do grafeno e, nessa Seção, discutiremos algumas dessas diferenças. Considerando a forma de suas bordas, podem ser classificadas como *armchair* ou *zigzag* (Figura 2.8). Cada tipo dessas duas classificações possui propriedades eletrônicas particulares. Como veremos a seguir, as bandas de energia das GNR's dependem drasticamente de seu tipo de borda e de sua largura.

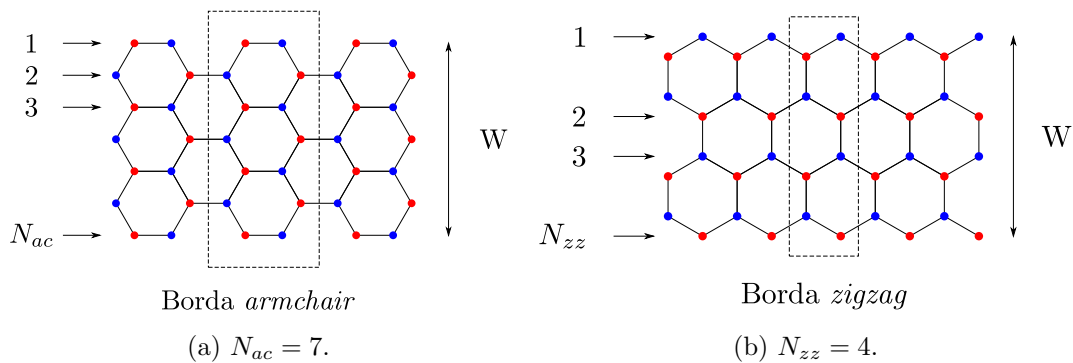


Figura 2.8: Tipos de bordas de nanofitas de grafeno. Os números N_{ac} (a) e N_{zz} (b) estão associados, respectivamente, às larguras das bordas *armchair* e *zigzag*. Os retângulos tracejados representam as células unitárias que geram tais nanoestruturas de carbono.

Em particular, uma borda *zigzag* possui autoestados de bordas localizados com energia próxima ao nível de Fermi, o que não acontece com uma borda *armchair* [29]. Definimos a largura de uma GNR como N , em que N é o número de linhas de dímeros

(dois sítios) para a GNR *armchair* e o número de linhas em *zigzag* para a GNR *zigzag*. Supomos que átomos de hidrogênio são ligados quimicamente aos átomos de carbono das bordas e, assim, os últimos não contribuem para os autoestados com energia próxima ao nível de Fermi [29]. As larguras são dadas por:

$$W = \begin{cases} [(N_{ac} - 3)\sqrt{3}/2 + \sqrt{3}]a, & \text{Armchair} \\ [3N_{zz}/2 - 1]a, & \text{Zigzag} \end{cases}$$

As bordas *zigzag* serão formadas por números N_{zz} múltiplos de 2 e as bordas *armchair* serão formadas por números N_{ac} ímpares maiores ou iguais a 3. A Figura 2.9 ilustra as bandas de energia de uma GNR *armchair* para quatro valores distintos de sua largura, obtidas pelo método *tight-binding* similarmente ao que foi feito na Seção 2.2 para o grafeno. As GNR's *zigzag* apresentam um comportamento predominantemente metálico [16]. Por esse motivo, elas são o foco quando estão sendo investigadas as propriedades magnéticas da nanoestrutura de carbono. Já em uma GNR *armchair* podemos observar que existe uma relação entre sua largura e o fato de a mesma ser metálica ou semicondutora: será metálica se $N_{ac} = 3M - 1$ ($M \in \mathbb{Z}$). Para GNR's *armchair* semicondutoras, o gap de energia (direto) diminui com o aumento de sua largura e tende a zero no limite em que N_{ac} tende ao infinito, obtemos nesse caso o grafeno. Uma investigação sobre estados eletrônicos de nanofitas de grafeno estudadas com a equação de Dirac foi feita na referência [22].

2.5.1 Bordas *armchair*

Não discutiremos as bandas de energia das nanofitas de grafeno com bordas *zigzag* porque usaremos apenas as com bordas *armchair*, para mais detalhes sobre nanofitas de grafeno com bordas *zigzag* consulte a referência [27]. Na presente aproximação, o operador Hamiltoniano nas proximidades do ponto \vec{K} é dado por:

$$H_{\vec{K}} = v_F \begin{bmatrix} 0 & q_x - q_y i \\ q_x + q_y i & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.60)$$

e nas proximidades do ponto \vec{K}' é dado por:

$$H_{\vec{K}'} = v_F \begin{bmatrix} 0 & q_x + q_y i \\ q_x - q_y i & 0 \end{bmatrix} \quad (2.61)$$

A função de onda para a sub-rede A , no espaço das posições, é dada por:

$$\Phi_A(\vec{R}) = e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} \Psi_A(\vec{R}) + e^{i\vec{K}' \cdot \vec{R}} \Psi'_A(\vec{R}), \quad (2.62)$$

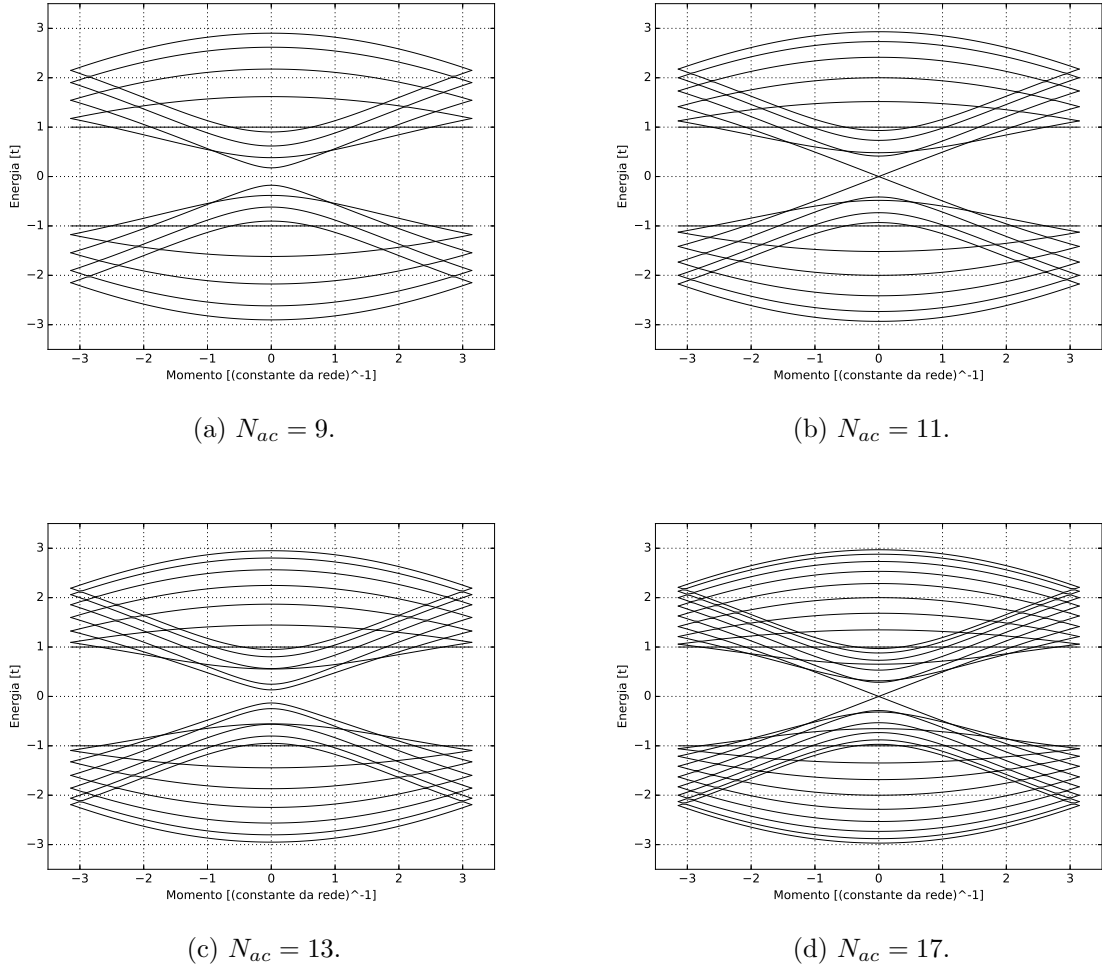


Figura 2.9: Bandas de energia de uma nanofita de grafeno *armchair* para quatro valores distintos de sua largura. A mesma apresenta comportamento metálico quando $N_{ac} = 3M - 1$ ($M \in \mathbb{Z}$), como nos casos (b) e (d). Quando essa condição não é verificada, temos um comportamento semiconductor, como nos casos (a) e (c).

e para a sub-rede B é dada por:

$$\Phi_B(\vec{R}) = e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} \Psi_B(\vec{R}) + e^{i\vec{K}' \cdot \vec{R}} \Psi'_B(\vec{R}), \quad (2.63)$$

em que $\Psi_A(\vec{R})$ e $\Psi_B(\vec{R})$ são componentes das autofunções de (2.60) e $\Psi'_A(\vec{R})$ e $\Psi'_B(\vec{R})$ são componentes das autofunções de (2.61). De acordo com a Figura 2.8, estamos considerando que a borda *armchair* seja paralela ao eixo y . Nesse caso, a simetria translacional permite que escrevamos a autofunção de (2.60) como:

$$\Psi_\mu(\vec{R}) = e^{ik_y y} \begin{bmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{bmatrix}, \quad \mu = A, B \quad (2.64)$$

Aplicando (2.60) em (2.64), temos:

$$\begin{bmatrix} 0 & q_x - \partial_y \\ q_x + \partial_y & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{bmatrix} = \epsilon \begin{bmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{bmatrix}, \quad \epsilon = E_{\pm}(\vec{q})/v_F \quad (2.65)$$

Portanto:

$$(q_x - \partial_y)\phi_B(x) = \epsilon\phi_A(x), \quad (2.66)$$

$$(q_x + \partial_y)\phi_A(x) = \epsilon\phi_B(x) \quad (2.67)$$

Aplicando o operador linear $(q_x + \partial_y)$ em (2.66), chegamos aos seguintes resultados:

$$(-\partial_y^2 + q_x^2)\phi_B(x) = \epsilon^2\phi_B(x), \quad (2.68)$$

$$\frac{1}{\epsilon}(q_x - \partial_y)\phi_B(x) = \phi_A(x) \quad (2.69)$$

Para uma GNR *armchair*, as condições de contorno são:

$$\Phi_A(x=0) = \Phi_B(x=0) = \Phi_A(x=L) = \Phi_B(x=L) = 0 \quad (2.70)$$

Temos então:

$$0 = e^{ik_y y}\phi_A(0) + e^{ik_y y}\phi'_A(0), \quad (2.71)$$

$$0 = e^{ik_y y}\phi_B(0) + e^{ik_y y}\phi'_B(0), \quad (2.72)$$

$$0 = e^{iKL}e^{ik_y y}\phi_A(L) + e^{-iKL}e^{ik_y y}\phi'_A(L), \quad (2.73)$$

$$0 = e^{iKL}e^{ik_y y}\phi_B(L) + e^{-iKL}e^{ik_y y}\phi'_B(L), \quad (2.74)$$

que são satisfeitas para qualquer y se:

$$\phi_{\mu}(0) + \phi'_{\mu}(0) = e^{iKL}\phi_{\mu}(L) + e^{-iKL}\phi'_{\mu}(L) = 0 \quad (2.75)$$

As soluções de (2.68) são:

$$\phi_B(x) = Ae^{ik_n x} + Be^{-ik_n x}, \quad (2.76)$$

$$\phi'_B(x) = Ce^{ik_n x} + De^{-ik_n x} \quad (2.77)$$

Aplicando as condições de contorno apresentadas em (2.75), temos:

$$0 = A + B + C + D, \quad (2.78)$$

$$0 = Ae^{i(k_n+K)L} + De^{-i(k_n+K)L} + Be^{-i(k_n-K)L} + Ce^{i(k_n-K)L} \quad (2.79)$$

Tais condições de contorno são satisfeitas se $A = -D$ e $B = C = 0$, o que leva a $\sin[(k_n + K)L] = 0$. Com isso, os valores permitidos de k_n e ϵ são, respectivamente: $k_n = \frac{n\pi}{L} - \frac{4\pi}{3a}$, $\epsilon^2 = k_y^2 + k_n^2$. Para finalizar esse Capítulo, é importante comentar que o gap de energia em uma GNR *armchair*, Δ_a , possui o seguinte aspecto [29]:

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

A Figura 2.10 mostra a dependência de Δ_a com W .

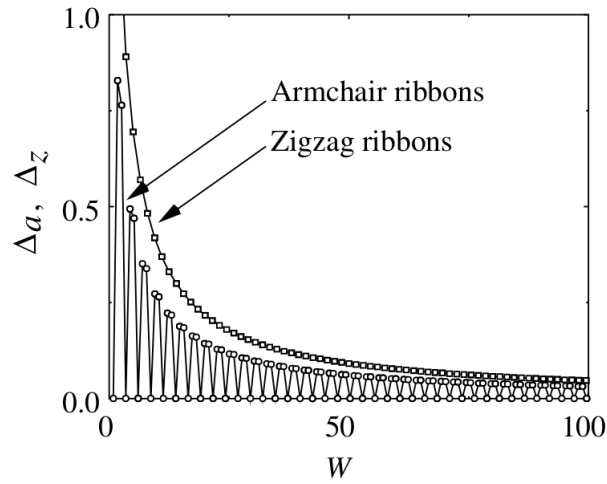


Figura 2.10: Dependência do gap de energia com a largura de uma nanofita de grafeno *armchair* (em $k = 0$) e *zigzag* (em $k = \frac{2\pi}{3}$). Adaptada da referência [29].

Capítulo 3

Transporte eletrônico e metodologia computacional

A Física de sistemas mesoscópicos sofreu um grande avanço a partir da década de 1980, com experimentos em dispositivos eletrônicos bem pequenos [3]. Sua área de concentração encontra-se na região intermediária entre os efeitos quânticos, presentes em sistemas microscópicos, e os efeitos clássicos, presentes em sistemas macroscópicos.

3.1 Transporte eletrônico

Um aspecto importante dos dispositivos eletrônicos é o comportamento dos portadores de carga elétrica quando os mesmos são submetidos a um campo elétrico ou magnético. Classicamente, a presença de um campo externo implica em uma força aplicada ao portador de carga elétrica e o mesmo pode adquirir uma aceleração. No entanto, essa partícula sofre diversas colisões. Nesse sentido, podem ocorrer três tipos diferentes de regimes de transporte eletrônico: balístico, difuso e localizado. Em breve discutiremos sobre cada tipo. Sabe-se que a condutância G de um material condutor bidimensional retangular é diretamente proporcional à sua largura W e inversamente proporcional ao seu comprimento L (lei de Ohm):

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

em que σ é uma propriedade física, obtida experimentalmente, relacionada ao tipo de material condutor e não depende de suas dimensões. Esse comportamento é verificado

apenas quando suas dimensões são muito maiores que as três seguintes escalas de tamanhos característicos: comprimento de onda de Fermi, caminho livre médio e comprimento de relaxação de fase. Essas escalas de tamanhos característicos mudam bastante de substância para substância e são fortemente afetadas pela temperatura [3]. Na Tabela 3.1 estão listadas algumas escalas de tamanhos característicos relevantes para a Física de sistemas mesoscópicos.

Tabela 3.1: Ordens de grandeza de algumas escalas de tamanhos característicos relevantes para a Física de sistemas mesoscópicos. λ_F é o comprimento de onda de Fermi, L_m é o caminho livre médio e L_ϕ é o comprimento de relaxação de fase. Fonte: adaptada da referência [3].

1 mm	L_m no regime Hall quântico.
100 μm	L_m e L_ϕ em materiais semicondutores de alta mobilidade eletrônica em $T < 4$ K.
10 μm	
1 μm	
100 nm	Dispositivos semicondutores comerciais (1990).
10 nm	λ_F em materiais semicondutores e L_m em filmes de metais policristalinos.
1 nm	
Å	λ_F em metais e distância entre átomos.

Comprimento de onda de Fermi

Em materiais condutores com baixas temperaturas, são os elétrons com energias próximas à energia de Fermi que basicamente participam do processo de condução, de modo que o comprimento de onda de Fermi seja relevante quanto à escala de tamanho característico. O comprimento de onda de Fermi (λ_F) é definido como:

$$\lambda_F = \frac{2\pi}{k_F}, \quad (3.2)$$

em que k_F é o número de onda de Fermi. Além do comprimento de onda de Fermi, podemos definir a velocidade de Fermi v_F como:

$$v_F = \frac{\hbar k_F}{m} \quad (3.3)$$

Caminho livre médio

Um elétron em um material que possui estrutura cristalina move-se como se estivesse no vácuo, mas com uma massa diferente [3]. Além disso, qualquer desvio da cristalinidade, como por exemplo impurezas, defeitos, vibrações na rede cristalina (fônons) ou outros elétrons, leva a colisões que espalham o elétron de um autoestado para outro, alterando assim seu momento inicial. O tempo de relaxação do momento τ_m está relacionado ao tempo de colisão τ_c (tempo médio entre duas colisões sucessivas do elétron) por:

$$\frac{1}{\tau_m} \rightarrow \frac{1}{\tau_c} \alpha_m, \quad (3.4)$$

em que α_m ($0 \leq \alpha_m \leq 1$) representa a efetividade da colisão individual em alterar o momento inicial do elétron. O caminho livre médio L_m é então a distância média que um elétron percorre antes que seu momento inicial seja alterado, isso é:

$$L_m = v_F \tau_m \quad (3.5)$$

Comprimento de relaxação de fase

De acordo com a Mecânica Quântica, uma partícula é descrita por sua função de onda, que possui uma fase. Tal fase está relacionada a fenômenos de interferência. Dessa forma, como o momento pode ser alterado por processos de espalhamento, a fase de uma função de onda pode mudar por meio de interações com campos externos ou outras partículas. Com isso, o comprimento de relaxação de fase L_ϕ pode ser definido como a distância média que um elétron percorre antes de sofrer um espalhamento inelástico, que altera sua fase inicial e sua energia inicial. Além disso, ao alterar sua fase inicial, o movimento do elétron torna-se aleatório, de modo que o transporte eletrônico é dito decoerente [5]. Em analogia com o tempo de relaxação do momento, podemos escrever o tempo de relaxação de fase como:

$$\frac{1}{\tau_\phi} \rightarrow \frac{1}{\tau_c} \alpha_\phi, \quad (3.6)$$

em que α_ϕ ($0 \leq \alpha_\phi \leq 1$) representa a efetividade da colisão individual em alterar a fase inicial do elétron. O comprimento de relaxação de fase para materiais semicondutores de alta mobilidade eletrônica é escrito como:

$$L_\phi = v_F \tau_\phi, \quad (3.7)$$

já para materiais semicondutores de baixa mobilidade eletrônica e filmes metálicos policristalinos, é escrito como:

$$L_\phi^2 = D \tau_\phi, \quad (3.8)$$

em que $D = v_F^2 \tau_m / 2$ é o coeficiente de difusão [3].

No regime de transporte eletrônico localizado, o caminho livre médio é maior que o comprimento de espalhamento inelástico, que é a distância média que o elétron percorre antes de sofrer uma colisão com alteração na energia cinética. No regime difuso, o caminho livre médio é maior que o comprimento de espalhamento elástico, que é a distância média que o elétron percorre antes de sofrer uma colisão sem alteração na energia cinética. O comprimento de espalhamento elástico é menor que o inelástico. Por último, no regime balístico, o caminho livre médio é menor que o comprimento de espalhamento elástico. Um mesmo dispositivo eletrônico pode passar do regime difuso para o balístico se a temperatura for diminuída [15]. A Figura 3.1 ilustra os tipos de regimes de transporte eletrônico difuso e balístico.

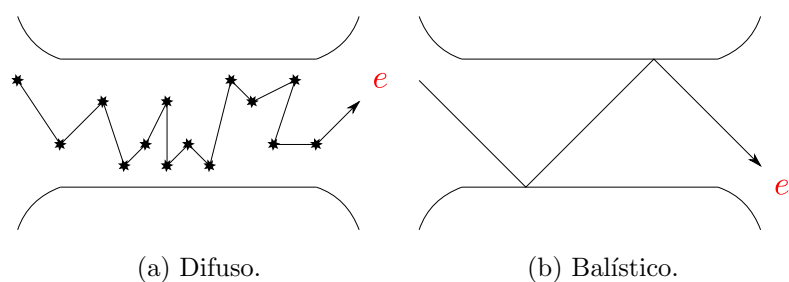


Figura 3.1: Representação de dois dos três tipos de regimes de transporte eletrônico. Fonte: adaptada da referência [6].

3.1.1 Formalismo de Landauer-Büttiker

Nessa Subseção discutiremos uma abordagem muito útil para a descrição do transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos. Nessa abordagem, a corrente elétrica

através de um material condutor é escrita em termos da probabilidade de transmissão de um elétron através do mesmo. De acordo com (3.1), podemos observar que a condutância elétrica aumentaria indefinidamente quando o comprimento tendesse a zero, caso tal relação fosse mantida para um comprimento muito pequeno. Entretanto, isso não é verificado experimentalmente. Quando o valor do comprimento é muito menor que o valor do caminho livre médio, a condutância elétrica tende a um valor limite, G_c [3]. Isso significa que a resistência elétrica não é nula mesmo não havendo qualquer tipo de espalhamento dos elétrons. Essa resistência elétrica é originada na interface entre o material condutor e o bloco de contato, que são de materiais diferentes. Por essa razão, é chamada de resistência elétrica de contato.

Para calcular a resistência elétrica de contato consideramos um material condutor (balístico), Figura 3.2, e calculamos a corrente elétrica que surge quando um potencial elétrico $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$ é estabelecido. A corrente elétrica pode ser escrita como:

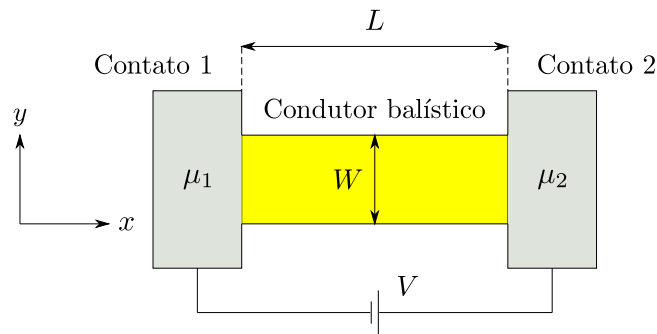


Figura 3.2: Condutor balístico de comprimento L e largura W ligado a dois contatos mantidos por potenciais químicos μ_1 e μ_2 . O potencial elétrico estabelecido é $V = (\mu_1 - \mu_2)/e$. Fonte: adaptada da referência [3].

$$I = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} f(E)N(E)dE, \quad (3.9)$$

em que e é a carga elétrica elementar, h é a constante de Planck, $f(E)$ é a função de Fermi e $N(E)$ é o número de modos transversais. Assumindo que a temperatura seja nula e que o número de modos transversais seja constante sobre o intervalo de energias $\mu_1 > E > \mu_2$, a corrente elétrica pode ser reescrita como:

$$I = \frac{2e^2N(\mu_1 - \mu_2)}{he} \quad (3.10)$$

Sendo $R = V/I$, a resistência elétrica de contato pode ser escrita como:

$$R = \frac{h}{2e^2N} \quad (3.11)$$

Existe portanto uma diferença notável entre as resistências elétricas de um material condutor que apresenta comportamento ôhmico (condutor ôhmico) e de um condutor balístico.

3.1.2 Fórmula de Landauer

Como vimos, em um condutor balístico existe uma resistência elétrica de contato que não depende dos valores de L e de W , depende apenas do número de modos transversais N , sendo que a mesma diminui quando N aumenta. A Fórmula de Landauer leva em conta essas características, para deduzi-la consideramos um condutor ligado a dois contatos por dois *leads* (Figura 3.3). Supomos que os *leads* são condutores balísticos, cada um contendo N modos transversais. Seja T a probabilidade de um elétron injetado no *lead* 1 ser transmitido para o *lead* 2. Assumimos que os elétrons podem sair do condutor para os contatos sem haver reflexão alguma. Com isso, os autoestados $+k_x$ ($-k_x$) no *lead* 1 (2) são ocupados apenas por elétrons provenientes do contato 1 (2) e, portanto, esses autoestados devem ter um potencial químico μ_1 (μ_2).

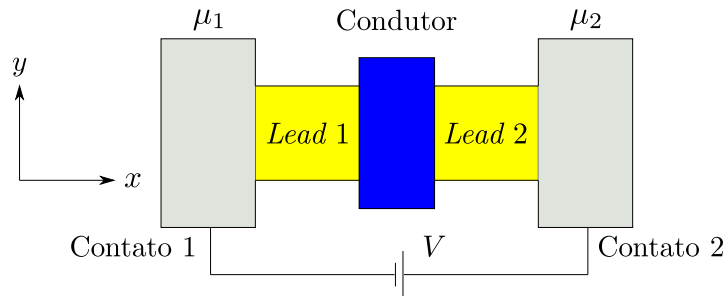


Figura 3.3: Condutor com probabilidade de transmissão T ligado a dois contatos através de dois *leads*. Fonte: adaptada da referência [3].

Novamente, supomos que a temperatura seja nula. O fluxo de elétrons ocorre apenas sobre o intervalo de energias entre μ_1 e μ_2 . O fluxo de elétrons no *lead* 1 é dado por:

$$I_1^+ = \frac{2e}{h}N(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.12)$$

Para encontrar o fluxo de elétrons que sai do *lead* 1 para o *lead* 2 multiplicamos a equação acima pela probabilidade de transmissão T :

$$I_2^+ = \frac{2e}{h}NT(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.13)$$

Há também o fluxo de elétrons que é refletido a partir do condutor para o *lead* 1, que é dado por:

$$I_1^- = \frac{2e}{h} N(1 - T)(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.14)$$

A corrente elétrica líquida que flui em qualquer ponto do dispositivo eletrônico (e no circuito elétrico externo) é dada por:

$$I = I_1^+ - I_1^- = I_2^+ = \frac{2e}{h} NT(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.15)$$

Portanto, a condutância elétrica é dada por:

$$G = \frac{I}{(\mu_1 - \mu_2)/|e|} = \frac{2e^2}{h} NT, \quad (3.16)$$

essa é a chamada Fórmula de Landauer. Notamos que se a probabilidade de transmissão for unitária, recuperamos a equação apresentada em (3.11) para a resistência elétrica de um condutor balístico que inclui a resistência elétrica de contato.

3.1.3 Fórmula de Büttiker

A fórmula de Landauer, deduzida na Subseção anterior para dois terminais, foi generalizada por M. Büttiker para vários terminais. O mesmo observou que uma vez que não há realmente nenhuma diferença qualitativa entre as medições de tensão e corrente elétricas, é possível simplesmente estender a fórmula de resposta linear de dois terminais:

$$I = \frac{2e}{h} \bar{T}(\mu_1 - \mu_2) \quad (3.17)$$

Somando sobre todos os terminais, indexados por p e q , temos:

$$I_p = \frac{2e}{h} \sum_q (\bar{T}_{q \leftarrow p} \mu_p - \bar{T}_{p \leftarrow q} \mu_q), \quad (3.18)$$

em que $\bar{T}_{q \leftarrow p}$ denota os elétrons transferidos do terminal p para o terminal q e $\bar{T}_{p \leftarrow q}$ denota os elétrons transferidos do terminal q para o terminal p . Sendo $V = \mu/e$, reescrevemos (3.18) como:

$$I_p = \sum_q (G_{qp} V_p - G_{pq} V_q), \quad (3.19)$$

em que:

$$G_{pq} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{p \leftarrow q}, \quad G_{qp} = \frac{2e^2}{h} \bar{T}_{q \leftarrow p} \quad (3.20)$$

Para garantir que a corrente elétrica seja nula quando todos os potenciais elétricos forem iguais, os coeficientes G acima descritos devem satisfazer a:

$$\sum_q G_{qp} = \sum_q G_{pq} \quad (3.21)$$

Com isso, podemos reescrever (3.19) como:

$$I_p = \sum_q G_{pq}(V_p - V_q) \quad (3.22)$$

A importância da discussão sobre o transporte eletrônico feita nas Seções anteriores para condutores balísticos pode ser justificada pelo fato de que recentemente [31] foi relatado que nanofitas de grafeno de 40 nanômetros de largura crescidas epitaxialmente em carboneto de silício são condutores balísticos de único canal em temperatura ambiente em uma escala de tamanho maior que 10 micrômetros, o que é semelhante ao desempenho de nanotubos de carbono metálicos.

3.2 Introdução ao Kwant

Analisar o espalhamento de portadores de carga elétrica em uma dada região (problema de espalhamento) é uma das tarefas mais comuns no contexto da Física da Matéria Condensada. Geralmente, em vez de descrever os autoestados em um sistema físico fechado, considera-se o espalhamento de partículas em um sistema físico finito acoplado (possivelmente fortemente) a *leads* infinitos. A solução para isso fornece diretamente a condutância elétrica e várias outras propriedades de transporte, mas também pode ser usada como um bloco de construção para a análise de fenômenos mais complicados [32].

Simulações numéricas para o espalhamento de portadores de carga elétrica em uma dada região têm sido feitas desde o início da Física de sistemas mesoscópicos. Existem diversos algoritmos que destinam-se a realizar essa tarefa, porém o mais utilizado é o recursivo da função de Green (RFG). Vários grupos de pesquisa pelo mundo criaram suas próprias implementações, o que rapidamente tornou-se em uma ferramenta inestimável para verificar, estender ou mesmo substituir a abordagem analítica, mesmo estando restrita a sistemas físicos quase-unidimensionais e a um tipo particular de operador Hamiltoniano *tight-binding*. Além do transporte quântico, o problema de espalhamento surge em outros contextos e muitos pacotes com um foco diferente (como por exemplo a DFT, *density functional theory*) foram desenvolvidos nas últimas décadas [32].

Nesse trabalho utilizamos o Kwant¹, um pacote Python (publicamente disponível) destinado a realizar cálculos numéricos de transporte quântico. Segundo seus autores, o mesmo foi projetado para:

- Resolver o problema de espalhamento de forma robusta e altamente eficiente;
- Exibir um elevado grau de interoperabilidade com outros pacotes e algoritmos a partir de qualquer parte do código, incluindo tanto a definição como a resolução dos problemas de espalhamento;
- Suportar uma maneira fácil e expressiva de definir diversos sistemas físicos *tight-binding*, conforme necessário para a pesquisa exploratória.

Embora o Kwant também seja adequado para investigar sistemas físicos finitos, seu foco principal são os sistemas físicos infinitos compostos por uma região de espalhamento finita em que são ligados alguns eletrodos periódicos semi-infinitos. Como foi visto, no contexto do formalismo de Landauer-Büttiker, esses *leads* funcionam como guias de onda que conduzem ondas planas para dentro e para fora da região de espalhamento e correspondem aos contatos de uma experiência de transporte quântico. O operador Hamiltoniano para esse sistema físico pode ser escrito como:

$$H = \sum_{i,j} H_{ij} c_i^\dagger c_j, \quad (3.23)$$

em que c_μ (c_μ^\dagger), com $\mu = i, j$, são operadores que aniquilam (criam) férmions, i e j rotulam os diferentes graus de liberdade do sistema em questão e H_{ij} são os elementos de uma matriz Hermitiana infinita. Sem perda de generalidade, podemos considerar o caso de um único *lead*. Essa consideração é razoável porque podemos tratar um único *lead* como sendo formado por várias derivações. Na base em que os sítios são ordenados de acordo com a distância inversa à região de espalhamento, o operador Hamiltoniano possui a forma de bloco tridiagonal [32]:

$$H = \begin{bmatrix} \ddots & V_L & & & \\ V_L^\dagger & H_L & V_L & & \\ & V_L^\dagger & H_L & V_{LS} & \\ & & & V_{LS}^\dagger & H_S \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

em que H_L corresponde ao operador Hamiltoniano de uma célula unitária do *lead* e H_S corresponde ao operador Hamiltoniano da região de espalhamento. A matriz em bloco

¹Disponível em: <https://kwant-project.org>. Acesso em: 24 de maio de 2017.

V_L conecta uma célula unitária ao próximo *lead* e a matriz, também em bloco, V_{LS} , está associada ao parâmetro de *hopping* entre o sistema físico e os *leads*.

A função de onda é dada por $\Psi = (\dots, \phi^L(2), \phi^L(1), \phi^L(0))$, em que $\phi^L(i)$, para $i > 0$, correspondem às soluções para a *i-ésima* célula unitária e $\phi^L(0)$ correspondem às soluções para a região de espalhamento. Vamos assumir uma solução com a forma $\Psi = (\lambda_n)^j \chi_n$, em que χ_n é o *n-ésimo* autovetor e λ_n é o *n-ésimo* autovalor de H . Aplicando a equação de Schrödinger (independente do tempo) a essa solução, temos:

$$(V_L^\dagger \lambda_n + V_L \lambda_n^{-1} + H_L) \chi_n = E \chi_n \quad (3.25)$$

Pela exigência de normalização das funções de onda devemos ter $|\lambda_n| \leq 1$. Os modos com $|\lambda_n| < 1$ são evanescentes, isso é, soluções que tendem a zero no infinito, e os modos com $|\lambda_n| = 1$ são propagantes. O valor esperado do operador corrente elétrica pode ser escrito como:

$$\langle I \rangle = 2Im \langle \phi_n(j) | V_L | \phi_n(j-1) \rangle = \pm 1 \quad (3.26)$$

Podemos classificar os modos de três formas: ondas planas propagando-se para dentro da região de espalhamento ($\langle I \rangle = +1$), ondas planas propagando-se para fora da mesma ($\langle I \rangle = -1$) e ondas planas evanescentes ($\langle I \rangle = 0$). Com essas notações, os autoestados de espalhamento nos *leads* assumem a forma [4]:

$$\Psi_n(i) = \phi_n(i)^{in} + \sum_m S_{mn} \phi_m(i)^{out} + \sum_p C_{pn} \phi_p(i)^{ev} \quad (3.27)$$

Para nosso propósito, consideramos um único modo propagando-se para dentro da região de espalhamento e que é espalhado para uma combinação dos outros modos possíveis. Os coeficientes S_{mn} correspondem aos elementos da matriz de espalhamento S de um modo m para os diversos modos n . A solução na região de espalhamento é então determinada resolvendo-se a seguinte equação de autovalores [4]:

$$V_{SL}^\dagger \phi_n(1) + H_S \phi_n(0) = E \phi_n(0) \quad (3.28)$$

O problema de encontrar os coeficientes da matriz de espalhamento é resolvido combinando-se as duas soluções, (3.27) e (3.28). Assim, podemos encontrar as condutâncias elétricas aplicando-se a fórmula de Landauer vista anteriormente. A Figura 3.4 ilustra as condutâncias elétricas de uma GNR *armchair* para quatro valores distintos de sua largura obtidas a partir do Kwant. Usamos os mesmos valores de L que usamos no Capítulo 2, Seção 2.5, para o cálculo das bandas de energia para essa nanoestrutura de carbono.

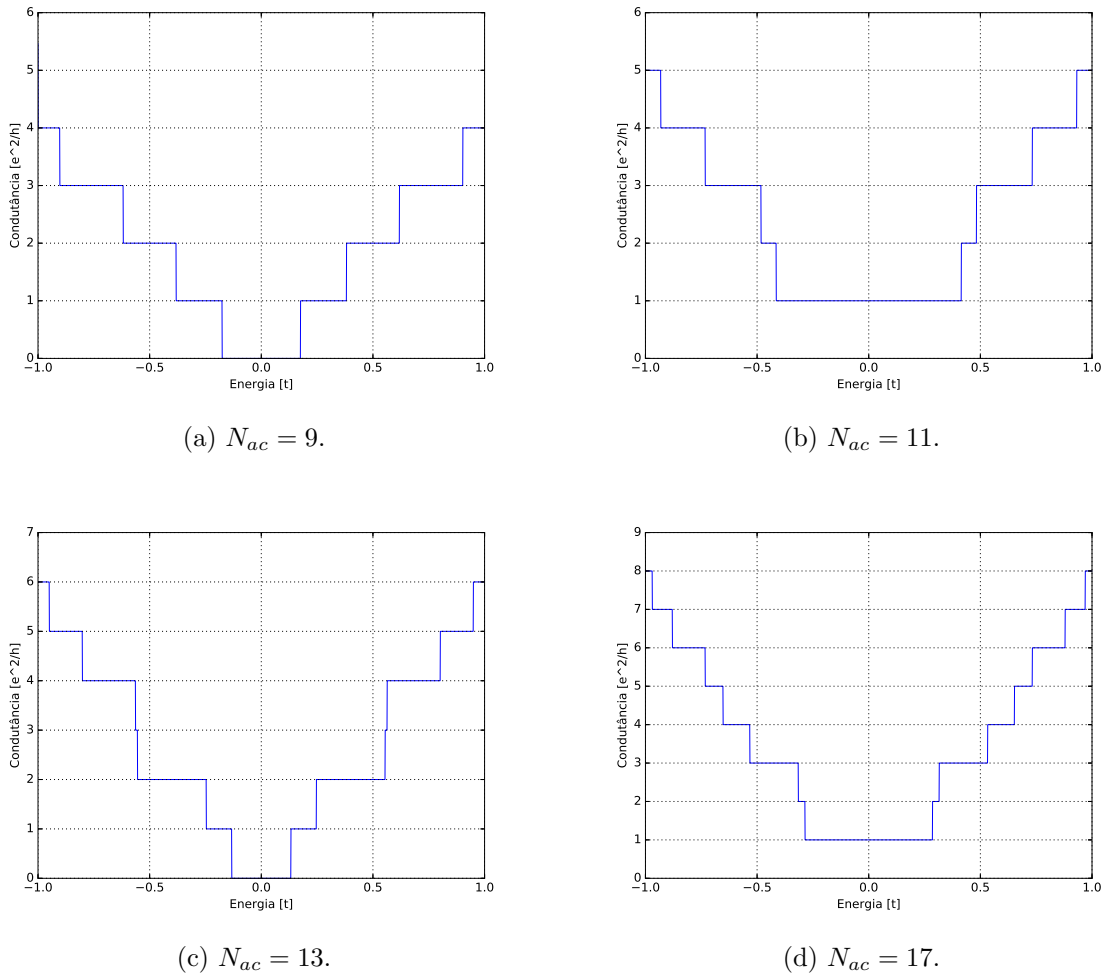


Figura 3.4: Condutância elétrica de uma nanofita de grafeno *armchair* para quatro valores distintos de sua largura.

3.3 *Phased arrays*

Phased array é o nome dado a um sistema eletrônico que possui vários emissores de ondas, que podem ser mecânicas ou eletromagnéticas, devidamente organizados. Essas ondas, após serem emitidas, podem interferir umas com as outras e o resultado disso é a possibilidade de elas serem reforçadas em uma dada orientação e atenuadas nas outras. A orientação passa a ser modificada então de forma eletrônica, evitando a necessidade de realizar essa tarefa de forma mecânica. Graças às suas capacidades únicas, *phased arrays* possuem diversas aplicações tecnológicas, podemos citar duas delas: o teste de *phased array* por ultrassom, que é uma poderosa tecnologia destinada a realizar ensaios não-destrutivos e a utilização em Radioastronomia (estudo dos corpos celestes através das

ondas de rádio que os mesmos emitem).

Para entender o funcionamento de um *phased array* simples, como o mostrado na Figura 3.5, consideremos N emissores de ondas planas, com comprimentos de onda λ , separados por uma distância D . Supomos que essas ondas planas são emitidas fazendo um ângulo θ com a reta normal ao eixo dos emissores. Devido à separação dos emissores, haverá uma diferença de fase entre duas ondas planas sucessivas, dada por:

$$\Delta\varphi = \frac{360^\circ D \sin \theta}{\lambda}, \quad (3.29)$$

mantendo-se constante a distância D e o comprimento de onda λ , podemos ajustar a orientação do feixe resultante, ou seja, o valor de θ , simplesmente ajustando a diferença de fase $\Delta\varphi$ entre ondas planas sucessivas.

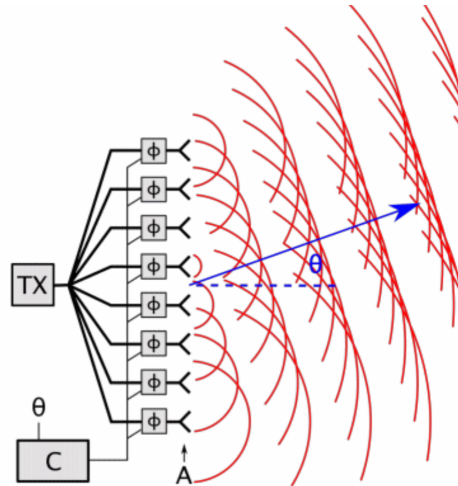


Figura 3.5: *Phased array* simples contendo N emissores de ondas planas, com comprimento de onda λ , separados por uma distância D .

3.3.1 *Phased arrays* de nanofitas de grafeno

Nesse trabalho propomos dois modelos de *phased arrays* baseados em GNR's *armchair* e estudamos o transporte eletrônico nesses sistemas físicos. Vimos no Capítulo 2 que os elétrons que propagam-se no grafeno (e também em GNR's), em circunstâncias particulares, podem ser transmitidos através de uma barreira de potencial sem que suas autofunções sofram qualquer amortecimento, devido ao paradoxo de Klein. Nesse contexto, consideremos a Figura 3.6, que ilustra uma GNR *armchair* com três barreiras de potencial de mesmos comprimentos, mas de alturas diferentes. Supomos que os elétrons

propagam-se a partir do *lead* 0, da esquerda para a direita, e atingem essas três barreiras de potencial. Vimos, também no Capítulo 2, que embora as autofunções dos elétrons não sofram qualquer amortecimento, as mesmas adquirem um fator de fase ao atravessar a barreira de potencial, sendo que tal fator de fase depende basicamente da altura e do comprimento da barreira de potencial. Como em nosso modelo as alturas das barreiras de potencial são diferentes, podemos concluir que as ondas planas associadas aos elétrons que emergem delas possuem fatores de fases diferentes.

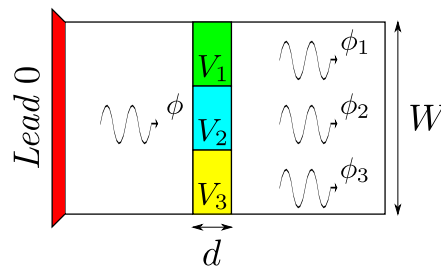


Figura 3.6: Nanofita de grafeno *armchair* de largura W com três barreiras de potencial de mesmos comprimentos d , mas de alturas V diferentes. Os fatores de fase adquiridos pelas autofunções dependem basicamente das alturas e dos comprimentos das barreiras de potencial.

No próximo Capítulo calcularemos algumas propriedades de transporte em dois modelos de *phased arrays* simples que utilizam como base o sistema físico descrito acima.

Capítulo 4

Resultados e discussão

Nesse Capítulo investigaremos o transporte eletrônico em dois dispositivos eletrônicos de nanofitas de grafeno que podem ser reconhecidos como *phased arrays*. A motivação para isso decorre do que foi apresentado na Seção 3.3 do Capítulo 4. Os dois modelos propostos foram: um com a forma de um retângulo e outro com a forma de um “Y”. Os dois modelos são baseados em nanofitas de grafeno com bordas *armchair* por motivos que já foram esclarecidos na Seção 2.5 do Capítulo 2. Primeiro analisaremos o *phased array* com a forma de um retângulo (Seção 4.1) e posteriormente analisaremos o *phased array* com a forma de um “Y” (Seção 4.2).

Consideramos a nanoestrutura de grafeno como sendo a região de espalhamento no contexto do formalismo de Landauer-Büttiker. Os elétrons são injetados sempre do *lead* da esquerda para o(s) *lead(s)* da direita. Todos os resultados apresentados nesse Capítulo foram obtidos a partir do método numérico apresentado no Capítulo 3 e com a utilização do Kwant.

4.1 *Phased array* com a forma de um retângulo

Nesse dispositivo eletrônico consideramos uma região de espalhamento com a forma de um retângulo de largura $N_{ac} = 23$. Como foi visto no Capítulo 3, sendo $N_{ac} = 3M - 1$ ($M \in \mathbb{Z}$), trata-se de uma nanofita de grafeno metálica para $M = 8$. Duas barreiras de potencial (regiões em azul e verde na Figura 4.1) com alturas $V_1 = 0.5 [t]$ e $V_2 = 1.2 [t]$ e mesmas larguras d foram inseridas, como está ilustrado também na Figura 4.1. Os *leads* de entrada e de saída são nanofitas com a mesma largura dos braços do

retângulo e são representados pelas regiões em vermelho.

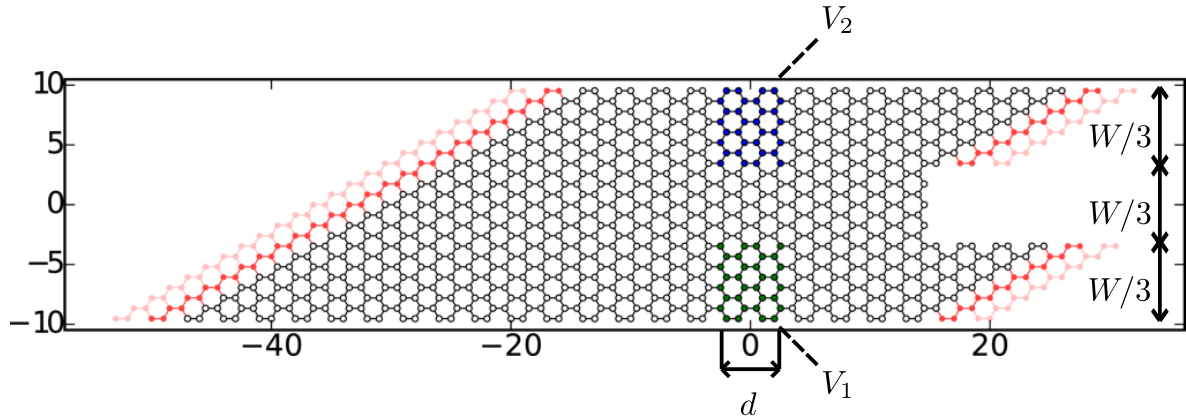


Figura 4.1: *Phased array* com a forma de um retângulo de largura $N_{ac} = 23$.

Logo após o elétron ser injetado na região de espalhamento através do *lead* da esquerda, o mesmo atravessará as duas barreiras de potencial. Como vimos na Seção 2.4 do Capítulo 2, o elétron, ao atravessar essas barreiras de potencial, adquire fatores de fase dados por:

$$t_1 = e^{-iV_1 d/v_F}, \quad t_2 = e^{-iV_2 d/v_F} \quad (4.1)$$

Podemos controlar esses fatores de fase alterando-se os valores das alturas (V_1, V_2) e das larguras (d_1, d_2) das barreiras de potencial. Escolhemos deixar as larguras constantes, ou seja, $d_1 = d_2 = d$, e tornar os valores das alturas variáveis e, dessa forma, os fatores de fase dependerão simplesmente dos valores das alturas das barreiras de potencial. Poderíamos inserir uma terceira barreira de potencial entre as duas já inseridas, e o faremos quando abordarmos o outro dispositivo eletrônico em breve.

4.1.1 Condutância elétrica em função da energia

Nessa Subseção investigaremos a condutância elétrica em função da energia para um elétron injetado através da região de espalhamento proposta anteriormente. Inicialmente consideraremos o caso em que não há potencial elétrico, isso é, sem a presença de barreiras de potencial. A Figura 4.2 mostra o resultado obtido. Foram plotadas as condutâncias elétricas em função da energia para os dois braços de saída do retângulo.

Como não há potencial elétrico não há uma direção de propagação privilegiada para o elétron e, portanto, os dois resultados são iguais. Na Figura 4.2 as linhas e os

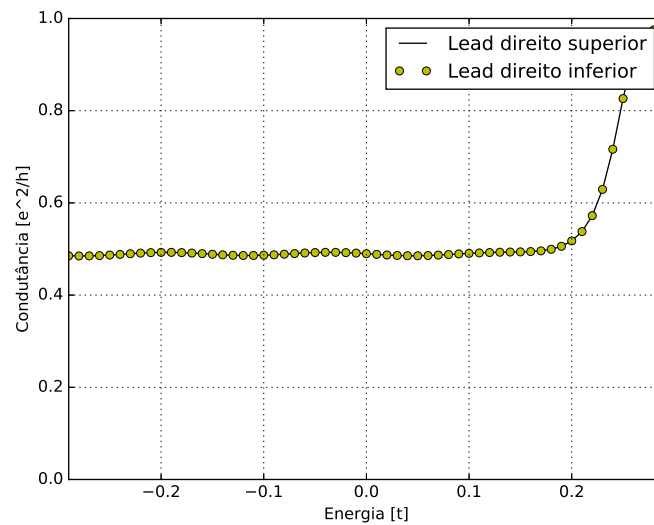


Figura 4.2: Condutância elétrica em função da energia para um *phased array* com a forma de um retângulo sem a presença de barreiras de potencial.

símbolos estão sobrepostos. Podemos observar que as condutâncias elétricas são diferentes de zero mesmo para $E = 0$ [t], evidenciando o caráter metálico desse sistema físico.

Vamos agora considerar o caso em que barreiras de potencial são inseridas. A Figura 4.3 mostra o resultado obtido. Foram plotadas as condutâncias elétricas em função da energia para os dois braços de saída do retângulo.

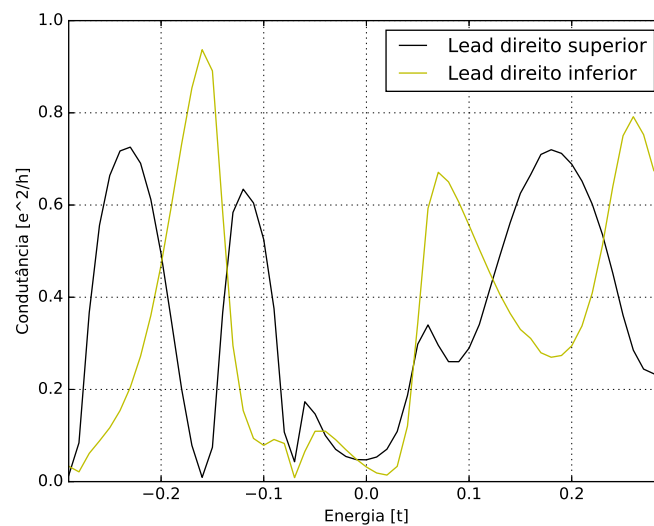


Figura 4.3: Condutância elétrica em função da energia para um *phased array* com a forma de um retângulo com a presença de barreiras de potencial de alturas $V_1 = 0.5$ [t] e $V_2 = 1.2$ [t].

Como podemos observar, com a presença das barreiras de potencial, as condutâncias elétricas em função da energia para os dois braços de saída do retângulo apresentam comportamento oscilatório. Nesse contexto, para um dado valor de energia, se tivermos um valor para a condutância elétrica em um dos braços de saída bem maior que no outro, podemos relacionar isso ao fato de o elétron propagar-se em direção ao braço de maior condutância elétrica. Dizer que um valor da condutância elétrica em um dos braços é bem maior que no outro significa que se for aplicada uma diferença de potencial elétrico entre o *lead* da esquerda e cada um dos braços do dispositivo eletrônico, a corrente elétrica no braço de maior condutância elétrica será bem maior que no de menor condutância elétrica. Vamos agora analisar o *phased array* com a forma de um “Y”.

4.2 *Phased array* com a forma de um “Y”

Nesse dispositivo eletrônico consideramos uma região de espalhamento com a forma de um “Y” com braços de largura $N_{ac} = 23$. Assim como no caso do *phased array* com a forma de um retângulo, sendo $N_{ac} = 3M - 1$ ($M \in \mathbb{Z}$), também trata-se de uma nanofita de grafeno metálica para $M = 8$. Esse sistema físico consiste de três fitas formando um ângulo de 120° entre si (esse ângulo foi escolhido para torná-lo metálico ao longo de toda sua extensão). Três barreiras de potencial (regiões em vermelho, amarelo e azul na Figura 4.4) com alturas $V_1 = 1.0$ [t], $V_2 = 0.5$ [t] e $V_3 = 1.5$ [t] e mesmas larguras d' foram inseridas, como está ilustrado também na Figura 4.4. Os *leads* de entrada e de saída são nanofitas com a mesma largura dos braços do “Y” e são representados pelas regiões em vermelho.

Logo após o elétron ser injetado na região de espalhamento através do *lead* da esquerda, o mesmo atravessará as três barreiras de potencial. Os fatores de fase adquiridos são agora dados por:

$$t_1 = e^{-iV_1 d' / v_F}, \quad (4.2)$$

$$t_2 = e^{-iV_2 d' / v_F}, \quad (4.3)$$

$$t_3 = e^{-iV_3 d' / v_F} \quad (4.4)$$

Novamente escolhemos deixar as larguras ($d'_1 = d'_2 = d'_3 = d'$) constantes e tornar os valores das alturas (V_1, V_2, V_3) variáveis e, dessa forma, os fatores de fase dependem

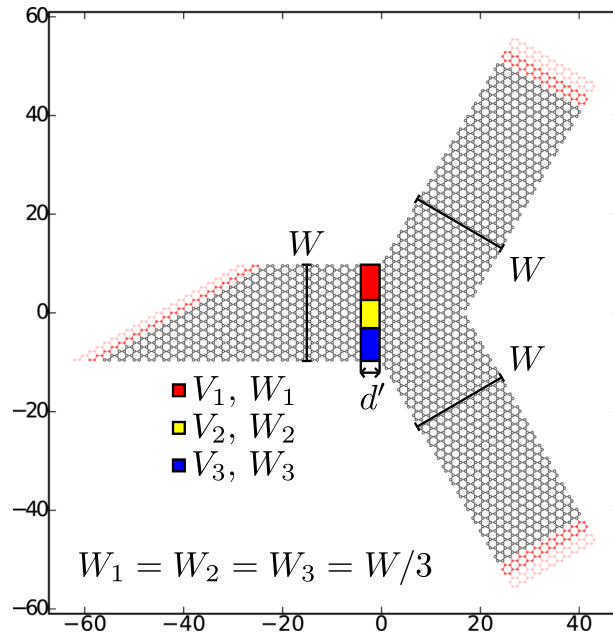


Figura 4.4: *Phased array* com a forma de um “Y” com braços de largura $N_{ac} = 23$.

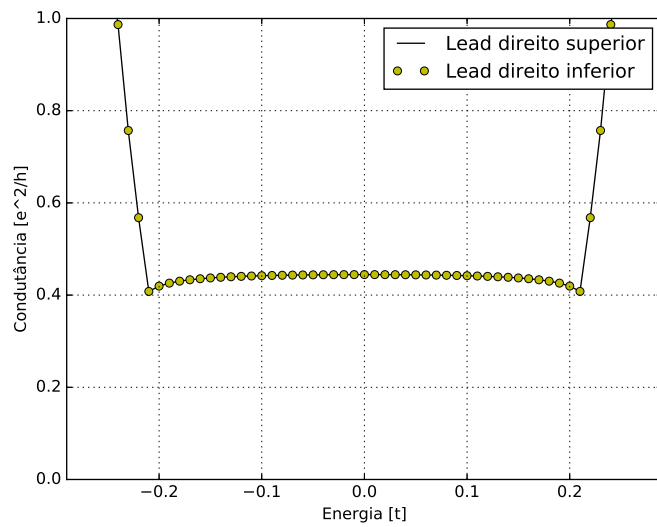
simplesmente dos valores das alturas das barreiras de potencial. Quando analisamos, na Seção anterior, o *phased array* com a forma de um retângulo, consideramos apenas duas barreiras de potencial. Já para o *phased array* com a forma de um “Y” consideramos três barreiras de potencial, resultando em um outro fator de fase disponível para a interferência posterior à passagem pelas barreiras de potencial do elétron. Do ponto de vista computacional isso é simples de realizar, no entanto, do ponto de vista experimental pode ser complicado.

4.2.1 Condutância elétrica em função da energia

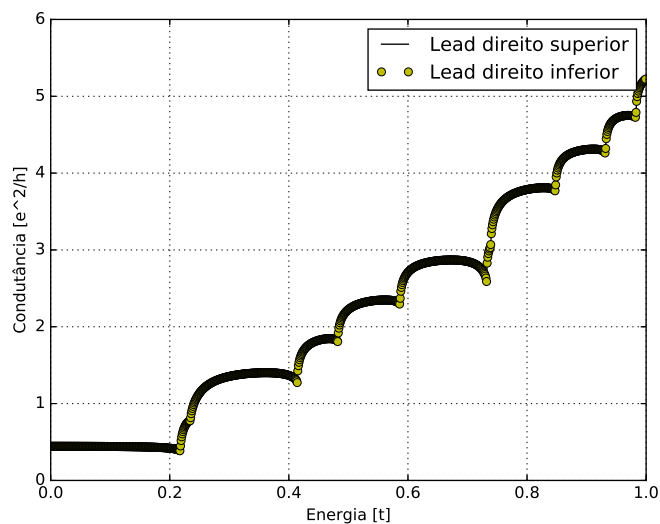
Assim como fizemos para o *phased array* com a forma de um retângulo, primeiro vamos investigar a condutância elétrica em função da energia para um elétron injetado através da região de espalhamento sem a presença de barreiras de potencial. A Figura 4.5 mostra os resultados obtidos. Foram plotadas as condutâncias elétricas em função da energia para os dois braços de saída do “Y”.

O gráfico mostrado na Figura 4.5(a) representa os valores negativos e positivos para a energia, em um intervalo de $-0.29 [t]$ a $0.29 [t]$. Já o gráfico mostrado na Figura 4.5(b) representa apenas os valores positivos para a energia, em um intervalo de $0.00 [t]$ a $1.00 [t]$.

O resultado obtido é análogo ao obtido para o *phased array* com a forma de um



(a)



(b)

Figura 4.5: Condutância elétrica em função da energia para um *phased array* com a forma de um “Y” sem a presença de barreiras de potencial: (a) intervalo de energias de $-0.29 [t]$ a $0.29 [t]$ e (b) intervalo de energias de $0.00 [t]$ a $1.00 [t]$.

retângulo. Como não há potencial elétrico, novamente, não há uma direção de propagação privilegiada para o elétron.

Vamos agora considerar o caso em que barreiras de potencial são inseridas. A Figura 4.6 mostra o resultado obtido. Foram plotadas as condutâncias elétricas em função da energia para os dois braços de saída do “Y”.

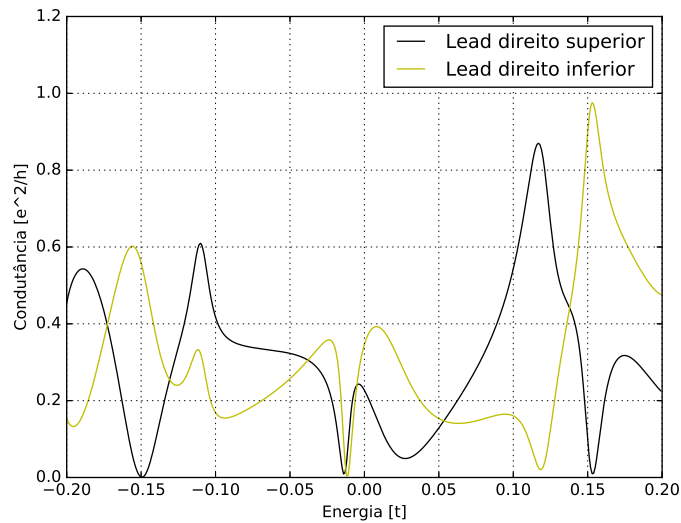


Figura 4.6: Condutância elétrica em função da energia para um *phased array* com a forma de um “Y” com barreiras de potencial de alturas $V_1 = 1.0 [t]$, $V_2 = 0.5 [t]$ e $V_3 = 1.5 [t]$.

Com a presença das barreiras de potencial, as condutâncias elétricas em função da energia para os dois braços de saída do “Y” apresentam comportamento oscilatório. De acordo com a Figura 4.6 podemos observar que ligeiramente após a energia $0.15 [t]$ a condutância elétrica para o *lead* direito inferior está bem próxima de 1.0, enquanto que a condutância elétrica para o *lead* direito superior está bem próxima de 0.0. Isso significa que se um elétron for injetado na região de espalhamento através do *lead* da esquerda temos uma probabilidade bem próxima de 1.0 de o mesmo ser direcionado para o *lead* direito inferior. Invertendo-se os valores das barreiras de potencial V_1 e V_3 (e deixando o valor da barreira de potencial V_2 inalterado) obteríamos o processo inverso, ou seja, o elétron seria direcionado para o *lead* direito superior. Na próxima Subseção investigaremos o comportamento da condutância elétrica em função do potencial elétrico aplicado para o *phased array* com a forma de um “Y”.

4.2.2 Condutância elétrica em função do potencial elétrico

Por fim investigamos o comportamento da condutância elétrica em função do potencial elétrico aplicado. Para isso, consideramos que o valor da altura da barreira de

potencial 2 seja nulo, $V_2 = 0.0 [t]$. Além disso, temos:

$$V_1 = V(x) [t], \quad (4.5)$$

$$V_2 = 0.0 [t], \quad (4.6)$$

$$V_3 = V(x) + 1.4 [t] \quad (4.7)$$

Fixando-se o valor para a energia em $0.0 [t]$, obtemos o resultado mostrado na Figura 4.7. O valor de $V(x) [t]$ varia de $0.0 [t]$ a $2.0 [t]$.

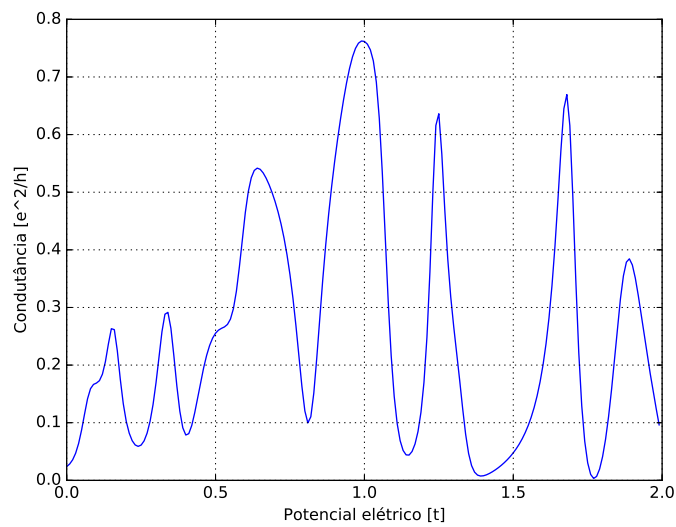


Figura 4.7: Condutância elétrica em função do potencial elétrico para um *phased array* com a forma de um “Y” com barreiras de potencial de alturas $V_1 = V(x) [t]$, $V_2 = 0.0 [t]$ e $V_3 = V(x) + 1.4 [t]$.

Podemos notar que ocorrem oscilações na condutância elétrica em função do potencial elétrico das barreiras de potencial, que é uma consequência direta dos efeitos de ressonância no sistema físico para $E < V_0$. Esses resultados são válidos apenas para o regime de transporte eletrônico balístico. Na presença de desordem, os resultados da condutância elétrica devem ser modificados.

Capítulo 5

Considerações finais

No Capítulo 1 introduzimos o trabalho a partir de uma perspectiva histórica no contexto da Nanotecnologia e mostramos algumas das motivações para o estudo de materiais nanoestruturados. Além disso, explicamos os principais aspectos de orbitais híbridos, que possibilitam que átomos de carbono sejam capazes de realizar diversas ligações químicas resultando em complexas moléculas.

No Capítulo 2 fizemos uma revisão sobre as propriedades estruturais e, posteriormente, através do método *tight-binding*, sobre as propriedades eletrônicas elementares do grafeno. Nosso objetivo foi justificar o fato de podermos considerar os elétrons com baixas energias que propagam-se no grafeno como partículas (férmions) relativísticas de massa nula. Devido a esse fato, podemos descrevê-las pela equação de Dirac e diversas características interessantes surgem, umas delas é a possibilidade de ocorrer o paradoxo de Klein. Uma breve descrição sobre nanofitas de grafeno também foi feita no Capítulo 2, com foco nas bordas *armchair*, pois foi o tipo de borda utilizado no trabalho.

No Capítulo 3 fizemos uma revisão sobre transporte eletrônico em sistemas mesoscópicos através do formalismo de Landauer-Büttiker. Nessa abordagem, a corrente elétrica através de um material condutor é descrita em termos da probabilidade de transmissão de um elétron através do mesmo. Deduzimos as fórmulas de Landauer e de Büttiker. Em seguida introduzimos o Kwant, que trata-se de um pacote Python (publicamente disponível) destinado a realizar cálculos numéricos de transporte quântico. Uma breve descrição sobre *phased arrays* também foi feita no Capítulo 3. Mostramos que devido ao paradoxo de Klein podemos propor dispositivos eletrônicos, objetos de estudo desse trabalho, baseados em nanofitas de grafeno com bordas *armchair*, que podem ser

reconhecidos como *phased arrays*.

No Capítulo 4 apresentamos os resultados obtidos no trabalho e os discutimos. Investigamos o transporte eletrônico em dois dispositivos eletrônicos: um com a forma de um retângulo e outro com a forma de um “Y”. Todos os resultados apresentados foram obtidos a partir do método numérico apresentado no Capítulo 3 e com a utilização do Kwant. Plotamos as condutâncias elétricas em função da energia para ambos sistemas físicos. Observamos que, com a presença de barreiras de potencial nas regiões de espalhamento é possível provocar uma defasagem considerável nas condutâncias elétricas dos dois braços de saída de ambos dispositivos eletrônicos. Tal resultado indica que podemos controlar a direção de propagação de um elétron a partir do ajuste dos valores das alturas das barreiras de potencial inseridas no dispositivo eletrônico. Para o *phased array* com a forma de um “Y” plotamos também a condutância elétrica em função do potencial elétrico aplicado.

REFERÊNCIAS

- [1] 50 anos da Lei de Moore. Disponível em: \langle <http://www.intel.com.br> \rangle . Acesso em: 8 de abril de 2017.
- [2] DA COSTA, D. R. Transportes e confinamento em monocamada e bicamada de nanoestruturas de grafeno com diferentes bordas, interfaces e potenciais. 2014. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal do Ceará, Fortaleza.
- [3] DATTA, S. Electronic transport in mesoscopic systems. Nova York: Cambridge University Press, 1995.
- [4] DE CASTRO, L. V. Transporte balístico em dispositivos de grafeno nanoestruturados. 2015. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Ceará, Fortaleza.
- [5] DE OLIVEIRA, E. J. Transporte quântico decoerente em sistemas mesoscópicos. 2015. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão.
- [6] DE SOUSA, D. J. P. Transporte eletrônico em anéis quânticos de grafeno. 2015. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal do Ceará, Fortaleza.
- [7] DE SOUZA, J. F. O. Nanoestruturas de grafeno e o problema do confinamento de partículas de Dirac na descrição do contínuo. 2015. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa.
- [8] DURÁN, N.; MATTOSO, L. H. C.; DE MORAIS, P. C. Nanotecnologia: introdução, preparação e caracterização de nanomateriais e exemplos de aplicação. São Paulo: Artliber, 2006.
- [9] FELTRE, R. Química Orgânica. 6. ed. São Paulo: Moderna, 2004.

- [10] Intel apresenta transistores 3-D de 22 nanômetros. Disponível em: <http://www.inovacaotecnologica.com.br>. Acesso em: 8 de abril de 2017.
- [11] JIMENEZ, M. J. S. Estudo de transporte e tunelamento quântico em estruturas de grafeno dopadas. 2015. Tese (Doutorado em Engenharia e Ciência dos Materiais) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba.
- [12] MCTI lança a Iniciativa Brasileira em Nanotecnologia. Disponível em: <http://www.mcti.gov.br>. Acesso em: 8 de abril de 2017.
- [13] MOORE, G. Nanotecnologia em embalagens. São Paulo: Blucher, 2009.
- [14] OLIVEIRA, I. S.; VIEIRA, C. L. Física hoje, uma aventura pela natureza: dos átomos ao universo. Rio de Janeiro: Instituto Ciência Hoje - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 2007.
- [15] SANTOS, E. J. P. Nanotecnologia eletrônica. São Paulo: Livraria da Física, 2014.
- [16] TEIXEIRA, J. F. Dinâmica de carga em nanofitas de grafeno. 2013. Tese (Doutorado em Física) - Universidade de Brasília, Brasília.
- [17] TORRES, L. E. F. F.; ROCHE, S.; CHARLIER, J. C. Introduction to graphene-based nanomaterials: from electronic structure to quantum transport. Nova York: Cambridge University Press, 2014.
- [18] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Physical Review* 71, 9 (1947).
- [19] KROTO, H. W. et al. C_{60} : buckminsterfullerene. *Nature* 318, 6042 (1985).
- [20] IJIMA, S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354, 6348 (1991).
- [21] NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* 306, 5696 (2004).
- [22] BREY, L.; FERTIG, H. A. Electronic states of graphene nanoribbons studied with the Dirac equation. *Physical Review B* 73, 23 (2006).
- [23] KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. *Nature Physics* 2, 9 (2006).

- [24] GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials* 6, 3 (2007).
- [25] KATSNELSON, M. I. Graphene: carbon in two dimensions. *Materials Today* 10, 1 (2007).
- [26] BENA, C.; MONTAMBAUX, G. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics* 11, 9 (2009).
- [27] CASTRO NETO, A. H. et al. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics* 81, 1 (2009).
- [28] PEREIRA JR., J. M. et al. Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene. *Semiconductor Science and Technology* 25, 3 (2010).
- [29] WAKABAYASHI, K. et al. Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions. *Science and Technology of Advanced Materials* 11, 5 (2010).
- [30] NOVOSELOV, K. S. Nobel lecture: graphene: materials in the flatland. *Reviews of Modern Physics* 83, 3 (2011).
- [31] BARINGHAUS, J. et al. Exceptional ballistic transport in epitaxial graphene nanoribbons. *Nature* 506, 7488 (2014).
- [32] GROTH, C. W. et al. Kwant: a software package for quantum transport. *New Journal of Physics* 16, 6 (2014).
- [33] DARTORA, C. A.; JIMENEZ, M. J. S.; ZANELLA, F. Os fundamentos da física dos férmions de Dirac sem massa em (1+2)-D e o grafeno. *Revista Brasileira de Ensino de Física* 37, 3 (2015).
- [34] DE SOUSA, D. J. P. et al. Interferometry of Klein tunnelling electrons in graphene quantum rings. *Journal of Applied Physics* 121, 2 (2017).

Apêndice A

Bandas de energia e condutância elétrica em função da energia para uma nanofita de grafeno *armchair* de largura $N_{ac} = 17$

```
from math import pi, sqrt, tanh

import kwant

import scipy.sparse.linalg as sla

from matplotlib import pyplot

# Define a rede cristalina do grafeno
sin_30, cos_30 = (1 / 2, sqrt(3) / 2)
graphene = kwant.lattice.general([(3 / 2, cos_30), (3 / 2, - cos_30)],
                                [(- 0.5, 0), (0.5, 0)])
a, b = graphene.sublattices

def make_system(L=10.0, W=7.0, d1=0.0, d2=0.0, pot1=0.0, t=1.0, pot=0.0):
```

```

# Define a região de espalhamento
# Região de espalhamento com a forma de um retângulo
def circle(pos):
    x, y = pos
    return - L <= x <= L and - W <= y <= W

sys = kwant.Builder()

# Define o potencial elétrico
# Potencial elétrico com a forma de uma barreira
def potential(site):
    (x, y) = site.pos
    if d1 <= x <= d2 and - W <= y <= W:
        return pot1
    else:
        return 0

sys[graphene.shape(circle, (0, 0))] = potential
sys[graphene.neighbors()] = - t
sys.eradicate_dangling()

# Define os leads
# Lead da esquerda
sym0 = kwant.TranslationalSymmetry(graphene.vec((- 1, - 1)))

def lead0_shape(pos):
    x, y = pos
    return (- W <= y <= W)

lead0 = kwant.Builder(sym0)
lead0[graphene.shape(lead0_shape, (0, 0))] = - pot

```

```

lead0[graphene.neighbors()] = - t
lead0.eradicate_dangling()

# Lead da direita
sym1 = kwant.TranslationalSymmetry(graphene.vec((1, 1)))

def lead1_shape(pos):
    x, y = pos
    return (- W <= y <= W)

lead1 = kwant.Builder(sym1)
lead1[graphene.shape(lead1_shape, (0, 0))] = - pot
lead1[graphene.neighbors()] = - t
lead1.eradicate_dangling()

return sys, [lead0, lead1]

def compute_evs(sys):
    # Compute some eigenvalues of the closed system
    sparse_mat = sys.hamiltonian_submatrix(sparse=True)

    evs = sla.eigs(sparse_mat, 2)[0]
    print(evs.real)

def plot_conductance(sys, energies):
    # Compute transmission as a function of energy
    data = []
    for energy in energies:
        smatrix = kwant.smatrix(sys, energy)
        data.append(smatrix.transmission(0, 1))

```

```
pyplot.figure()
pyplot.plot(energies, data)
pyplot.xlabel("Energia [t]")
pyplot.ylabel("Condutância [e2/h]")
pyplot.axis((- 1.0, 1.0, 0.0, 9.0))
pyplot.grid(True)
pyplot.show()
```

```
def plot_bandstructure(flead, momenta):
    bands = kwant.physics.Bands(flead)
    energies = [bands(k) for k in momenta]
```

```
pyplot.figure()
pyplot.plot(momenta, energies, 'k')
pyplot.xlabel("Momento [(constante da rede)-1]")
pyplot.ylabel("Energia [t]")
pyplot.grid(True)
pyplot.axis((- 3.5, 3.5, - 3.5, 3.5))
pyplot.show()
```

```
def main():
```

```
    pot = 0.0
    sys, leads = make_system(pot=pot)
    W = 7.0
    d1 = 0.0
    d2 = 0.0
```

```
# To highlight the two sublattices of graphene, we plot one with
# a filled, and the other one with an open circle:
```

```
def family_colors(site):
    (x, y) = site.pos
    if d1 <= x <= d2 and - W <= y <= W:
        return 'red' if site.family == a else 'red'
    else:
        return 'gray' if site.family == a else 'white'

# Plot the closed system without leads.
kwant.plot(sys, site_color=family_colors, site_lw=0.1, colorbar=False)

# Compute some eigenvalues.
compute_evs(sys.finalized())

# Attach the leads to the system.
for lead in leads:
    sys.attach_lead(lead)

# Then, plot the system with leads.
kwant.plot(sys, site_color=family_colors, site_lw=0.1,
           lead_site_lw=0, colorbar=False)

# Finalize the system.
sys = sys.finalized()

# Compute the band structure of lead 0.
momenta = [-pi + 0.02 * pi * i for i in range(101)]
plot_bandstructure(sys.leads[0], momenta)

# Plot conductance.
energies = [0.001 * i for i in range(- 1000, 1000)]
plot_conductance(sys, energies)
```

```
# Call the main function if the script gets executed (as opposed to imported).  
# See <http://docs.python.org/library/\_\_main\_\_.html>.  
if __name__ == '__main__':  
    main()
```