



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
GRADUAÇÃO EM FÍSICA

GABRIEL OLIVEIRA DE SOUSA

**TUNELAMENTO DE KLEIN ATRAVÉS  
DE UMA BARREIRA DEPENDENTE DO  
TEMPO**

FORTALEZA

2014

**GABRIEL OLIVEIRA DE SOUSA**

**TUNELAMENTO DE KLEIN ATRAVÉS  
DE UMA BARREIRA DEPENDENTE DO  
TEMPO**

Monografia de Bacharelado apresentada à  
Coordenação da Graduação do Curso de  
Física, da Universidade Federal do Ceará,  
como requisito parcial para a obtenção do  
Título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Andrey Chaves

Coorientador: Prof. Dr. João Milton Pereira  
Junior

**FORTALEZA**

**2014**

GABRIEL OLIVEIRA DE SOUSA

# TUNELAMENTO DE KLEIN ATRAVÉS DE UMA BARREIRA DEPENDENTE DO TEMPO

Monografia de Bacharelado apresentada à  
Coordenação da Graduação do Curso de  
Física, da Universidade Federal do Ceará,  
como requisito parcial para a obtenção do  
Título de Bacharel em Física.

Aprovada em 16/06/2014

## BANCA EXAMINADORA

---

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

---

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

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

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

---

S696t de Sousa, Gabriel oliveira .  
Tunelamento de Klein através de uma barreira dependente do tempo / Gabriel  
Oliveira de Sousa. – Fortaleza, 2014.  
41 f.:il.

Monografia (bacharelado) - Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,  
Departamento de Física, Fortaleza, 2014.

Orientação: Prof. Dr. Andrey Chaves

1. Mecânica Quântica. 2. ., 3. Física do estado sólido. 4. ., 5. Matéria Condensada. I. Título.

CDD:530.12

---

*Dedico este trabalho  
com muito amor e  
carinho à memória  
do meu pai....*

# AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar aos meus pais Maria do Carmo e José Oliveira, por todo o apoio, incentivo, dedicação e amor. Aos meus irmãos Lorena Oliveira e Rafael Oliveira, pelo apoio e incentivo. Aos meus tios, tias, primos e primas pelo apoio.

Ao meu orientador Prof. Andrey Chaves, por ser um orientador sempre presente, pelo incentivo, e paciência ao repassar seus conhecimentos.

Aos professores Raimundo Nogueira da Costa Filho, José Ramos Gonçalves, Afonso Oliveira, João Milton Pereira Junior, Murilo Pereira de Almeida e Ascânio Dias de Araújo pela contribuição na minha formação.

Aos amigos João Paulo, Duarte, Nelson, Yan Bruno, Luan Vieira, Lilyan Alves, Vradiane, Rafael Pinheiro, Vanderley, Samara, Diego Felix, Ravenna, Jê, Andréia, Ermeson, Gustavo Barbosa, Carlos Eduardo, Thiago (Mukuin), Mateus Andrade, Lucas Moreira, Cicero, Manoel Lorenço, Daniel, Laura, Joel e Bruno por todos os bons momentos.

Ao Diego Rabelo que forneceu o código para a realização deste trabalho.

Ao Prof. Josué Mendes Filho por sua contribuição ao departamento de física.

# RESUMO

Neste trabalho, nós estudamos como um pacote de onda que descreve um férmion de Dirac sem massa, representando um elétron de baixa energia no grafeno, se comporta ao incidir em uma barreira de potencial dependente do tempo. Investigamos como a energia e a densidade de probabilidade do pacote se altera ao atravessar tal barreira. Para isso, usamos o método Split-Operator, que permite aplicar separadamente os termos devido às energias potencial e cinética no operador de evolução temporal. Com isso, a parte da energia cinética é resolvida analiticamente, enquanto a parte da energia potencial é aplicada sobre a função de onda de maneira trivial. Os resultados mostram que o pacote de onda que sofre tunelamento de Klein através da barreira de potencial adquire uma fase extra que, no nosso caso, depende do tempo. Assim, considerando um pacote de onda incidindo em uma barreira que depende linearmente com o tempo, demonstramos que tal fase acaba alterando a energia final do pacote de onda. Isso nos torna capaz de controlar a energia do elétron que se propaga no grafeno simplesmente ajustando a largura e a taxa de variação do potencial no tempo.

Mecânica Quântica , Física do estado sólido , Matéria Condensada

# ABSTRACT

In this work, we studied how a wave packet describing a massless Dirac fermion representing a low-energy electron in graphene, behaves when it tunnels through a time dependent potential barrier. We investigate how the energy and probability density of this package changes when going through such a barrier. For this purpose, we use the Split-Operator method, which allows us to separately apply the terms due the potential and kinetic energies in the time evolution operator. With this, the kinetic energy part is solved analytically, while the potential energy part is applied to the wave function in a trivial way. Our results show that wave packet undergoing Klein tunneling through the potential barrier acquires an additional phase that, in our case, depends on time. Thus, considering a wave packet scattering on a barrier which depends linearly on time, it is shown that this phase eventually changes the final energy of the wave packet. This enables us to control the energy of the electron that propagates in graphene by simply adjusting the width and rate of change of potential in time.

Quantum Mechanics,Solid State Physics,Condensed Matter



# LISTA DE FIGURAS

- 1 (a) o mineral grafite e (b) sua estrutura, que consiste de folhas de carbonos empilhadas. (c) um cristal de diamante e (d) sua estrutura cristalina. [27] . . . . . p. 12
- 2 (a) três tipos de nanotubos, de cima para baixo eles são classificados como: armchair, zigzag e quiral [25].(b) um nanotubo desenrolado [26]. p. 13
- 3 (a) Rede honeycomb composta por duas redes triangulares superpostas, em que  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  são os vetores primitivos, que são responsáveis por gerarem a rede. Os vetores  $\vec{\delta}_1$ ,  $\vec{\delta}_2$  e  $\vec{\delta}_3$  representam vetores para vizinhos próximos. (b) Primeira zona de Brillouin.  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  são os vetores da rede recíproca. Os cones de Dirac estão localizados em  $K$  e  $K'$  [20]. . . . . p. 14
- 4 Ligações entre átomos de carbono. Em (a) a Ligação do tipo  $\sigma$  está ao longo do plano, que surge devido a hibridização dos orbitais s e p. Em (b) a ligação do tipo  $\pi$  está perpendicular ao plano [27]. . . . . p. 15
- 5 Relação de dispersão eletrônica de uma monocamada de grafeno. A direita um zoom de uma região próximo a um dos pontos de Dirac [20]. p. 16
- 6 Região de espalhamento. A partícula vem de menos infinito (região I) se propagando livremente, penetra uma barreira de potencial (região II) de largura  $W$  e se propaga livremente para infinito (região III) [20]. . . . . p. 21
- 7 Curvas de nível da (a) densidade de probabilidade no espaço recíproco como função do tempo, e (b) da parte real da função de onda como função do tempo. . . . . p. 28
- 8 (a) Densidade de probabilidade no espaço real como função do tempo. (b) Energia cinética média do pacote de onda como função do tempo. . . . . p. 28

9	Uma partícula se propagando em uma dimensão, sujeita a uma barreira de potencial que varia linearmente com o tempo. As linhas azul e verde ilustram a energia cinética final do elétron ao sair da barreira, para $\alpha > 0$ e $\alpha < 0$ respectivamente. . . . .	p. 29
10	Valor esperado da energia cinética em função do tempo. (a) Para a largura da barreira fixa, $W = 200\text{\AA}$ . (b) Para a taxa de variação da altura da barreira fixa, $\alpha = 7\text{meV/fs}$ . . . . .	p. 30
11	Valor esperado da energia cinética final do pacote de onda: (a) Como função da largura da barreira. (b) Como função da taxa de variação da altura da barreira para $W$ fixo em cada reta. Os símbolos representam o resultado analítico e as linhas representam o resultado numérico. . . .	p. 31
12	Densidade de probabilidade no espaço recíproco (a) para $\alpha = -7\text{meV/fs}$ (b) para $\alpha = 7\text{meV/fs}$ . . . . .	p. 31
13	Parte real da função de onda como função do tempo. (a) $\alpha = -7\text{meV/fs}$ . (b) $\alpha = 7\text{meV/fs}$ . . . . .	p. 31

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	p. 11
1.1	Grafeno . . . . .	p. 13
1.1.1	O que é o grafeno . . . . .	p. 13
1.1.2	Autoestados e Autoenergias para o Hamiltoniano de Dirac independente do tempo . . . . .	p. 16
1.1.3	Aplicações . . . . .	p. 19
1.2	Tunelamento de Klein . . . . .	p. 20
<b>2</b>	<b>MODELO TEÓRICO</b>	p. 24
2.1	O método split-operator . . . . .	p. 24
2.2	Hamiltoniano que envolve spin . . . . .	p. 25
<b>3</b>	<b>RESULTADOS</b>	p. 27
<b>4</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	p. 33
<b>5</b>	<b>APÊNDICE</b>	p. 34
5.1	Equação de Dirac . . . . .	p. 34
5.1.1	Como obter a equação de Dirac . . . . .	p. 34
5.1.2	Solução para equação de Dirac . . . . .	p. 38
	<b>REFERÊNCIAS</b>	p. 41

# 1 INTRODUÇÃO

O carbono é um elemento fundamental para os seres vivos e pode ser considerado como matéria-prima para a vida. Há uma variedade de estruturas compostas por carbono. Algumas delas são: o dióxido de carbono, formado pelas ligações entre carbono e oxigênio, de extrema importância para o crescimento das plantas; hidrocarbonetos, resultante das ligações entre carbono e hidrogênio, presentes em combustíveis; DNA, que contém informações genéticas de um indivíduo e uma infinidade de outros compostos orgânicos.

Como átomos do mesmo elemento, ao se ligarem, formam estruturas com propriedades físicas tão distintas? Devido à sua natureza alotrópica, átomos de carbono se ligam de diferentes maneiras para formarem diferentes estruturas, como: grafite, diamante, fulereno e nanotubos. A grafite e o diamante são encontradas na natureza, já o fulereno e o nanotubo são encontrados de forma artificial. Há um grande interesse no estudo das formas alotrópicas do carbono, devido às suas propriedades serem de grande relevância tecnológica.

A grafite é formada por folhas, compostas por átomos de carbono, empilhadas ao longo de uma direção, a distância de  $3,35\text{Å}$  umas das outras, mantendo-se unidas por interação de Van der Waals. Entre suas principais características estão: sua alta condutividade elétrica e seu poder lubrificante. O caráter condutor é devido à liberdade com que os elétrons se movem ao longo da folha. A característica lubrificante está associada a fraca interação entre suas folhas de átomos, de forma que há uma facilidade com que deslizam entre si. O diamante difere dos demais alótropos pelo fato dos carbonos em sua estrutura terem hibridização do tipo  $sp^3$ , e encontrar-se ligado a outros 4 átomos de carbono em um arranjo tetraédrico, como mostra na Fig.1. Pode ser convertido em grafite em condições apropriadas. Possui um alto grau de dureza, tendo valor máximo na escala de Mohs, ou seja, não pode ser riscado por nenhum outro material, exceto o próprio diamante.

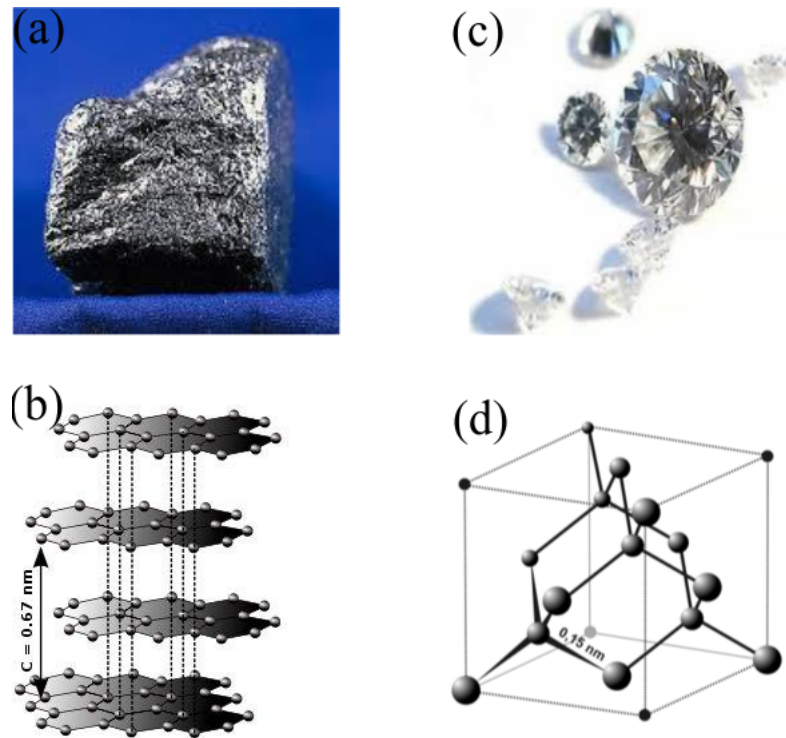


Figura 1: (a) o mineral grafite e (b) sua estrutura, que consiste de folhas de carbonos empilhadas. (c) um cristal de diamante e (d) sua estrutura cristalina. [27]

Os nanotubos formam estruturas cilíndricas e possuem propriedades de altíssima relevância em sistemas óticos e em eletrônica. De forma bem simples, nanotubos nada mais são do que folhas de grafenos enroladas, possuindo assim uma excelente condutividade térmica e elétrica. Os nanotubos se distinguem uns dos outros pela maneira que as folhas de grafeno são enroladas. Um nanotubo é definido através do vetor quiral  $\vec{C}_h$  e do ângulo  $\theta$  ( $0 \leq \theta \leq 30^\circ$ ), responsável pela orientação desse vetor em relação a uma direção zigzag, como mostra a Fig.2, onde  $m$  e  $n$  são inteiros que denotam o número de vetores unitários  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  ao longo das duas direções na folha de grafeno. Se  $m=0$  e  $\theta=0$ , os nanotubos são ditos zigzag. Se  $m=n$  e  $\theta=30^\circ$ , são ditos armchair. Se não se enquadram nos casos anteriores são ditos quirais. As propriedades eletrônicas dos nanotubos estão intimamente ligadas ao seu diâmetro e ao ângulo quiral [1], tendo comportamento metálico para todos os nanotubos armchair, zigzag quando  $n$  é múltiplo de 3 e se comportam como semicondutores nas demais situações[2].

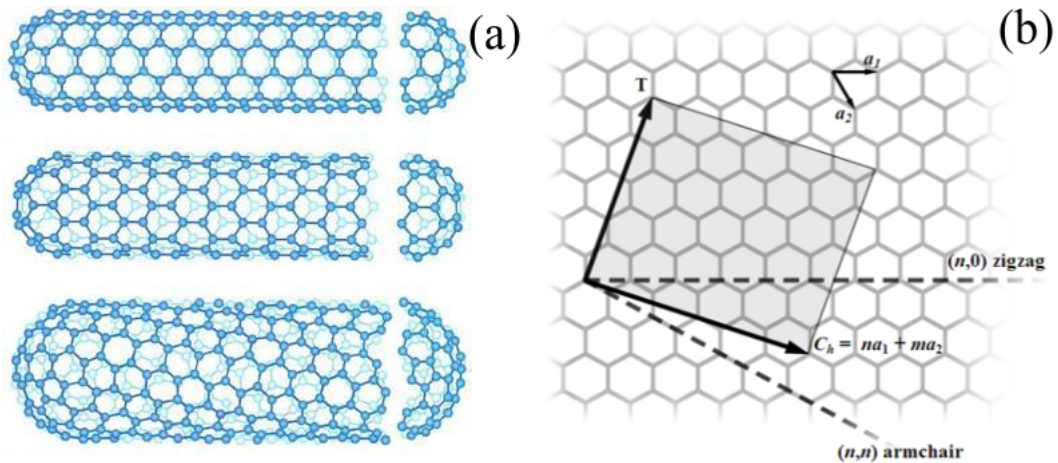


Figura 2: (a) três tipos de nanotubos, de cima para baixo eles são classificados como: armchair, zigzag e quiral [25].(b) um nanotubo desenrolado [26].

## 1.1 Grafeno

### 1.1.1 O que é o grafeno

O grafeno é um material bidimensional composto por carbonos reunidos em uma estrutura cristalina hexagonal, com espessura de um átomo. Já havia estudos teóricos desde o fim da década de quarenta [3] [4] [5], mas acreditava-se que uma única folha não poderia ser produzida de forma isolada de tal modo que as medições elétricas pudessem ser realizadas, mas em 2004 para surpresa da comunidade científica, através de uma clivagem micromecânica da grafite [6], Geim, Novoselov e colaboradores conseguiram produzir, isolar, identificar e caracterizar uma folha de grafeno.

Os átomos dessa estrutura formam uma rede do tipo honeycomb, que pode ser tratada como a superposição de duas sub-redes A e B. Esse tratamento é necessário, pois ela não representa uma rede de Bravais, ou seja, um arranjo infinito de pontos discretos, tal que a disposição e a orientação desses pontos é idêntica a partir de qualquer ponto da rede. Uma rede triangular é uma rede de Bravais, então pode-se descrever uma rede hexagonal através da superposição de redes triangulares.

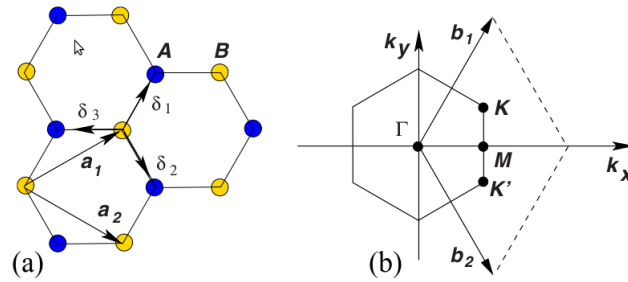


Figura 3: (a) Rede honeycomb composta por duas redes triangulares superpostas, em que  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  são os vetores primitivos, que são responsáveis por gerarem a rede. Os vetores  $\vec{\delta}_1$ ,  $\vec{\delta}_2$  e  $\vec{\delta}_3$  representam vetores para vizinhos próximos. (b) Primeira zona de Brillouin.  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  são os vetores da rede recíproca. Os cones de Dirac estão localizados em  $K$  e  $K'$  [20].

Os vetores de rede são escrito da seguinte forma:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3}). \quad (1.1)$$

Os vetores de rede no espaço recíproco são dados por:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}). \quad (1.2)$$

Os pontos  $K$  e  $K'$  têm uma importância particular no estudo teórico do grafeno, e são escrito no espaço recíproco da seguinte forma

$$K = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad K' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right). \quad (1.3)$$

Os vetores para os três vizinhos próximos no espaço real são dados por

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \quad \vec{\delta}_3 = -a(1, 0). \quad (1.4)$$

No átomo de carbono ( $C_6: 1s^2 2s^2 2p^2$ ) os elétrons do orbital  $1s$  estão fortemente ligados ao núcleo. Os outros quatro, os elétrons de valência, ocupam os orbitais  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  e  $2p_z$ . Os três primeiros formam orbitais híbridos que levam à formação de estruturas trigonais planares, ou seja, cada átomo de carbono se liga a três vizinhos, à distância de  $a \approx 1,42\text{\AA}$  uns dos outros e formam ângulos de  $120^\circ$  entre si. As ligações envolvidas são do tipo  $\sigma$  (ligações fortes), que são responsáveis por manter a estrutura compacta. O orbital  $2p_z$  que é perpendicular ao plano formado pelos átomos de carbono não sofre hibridização. Esses orbitais que estão parcialmente preenchidos se sobrepõem ao longo da folha de grafeno, formando ligações  $\pi$  (ligações fracas). Estes elétrons, que estão localizados nos

orbitais  $2p_z$ , são responsáveis pelas propriedades eletrônicas no grafeno.

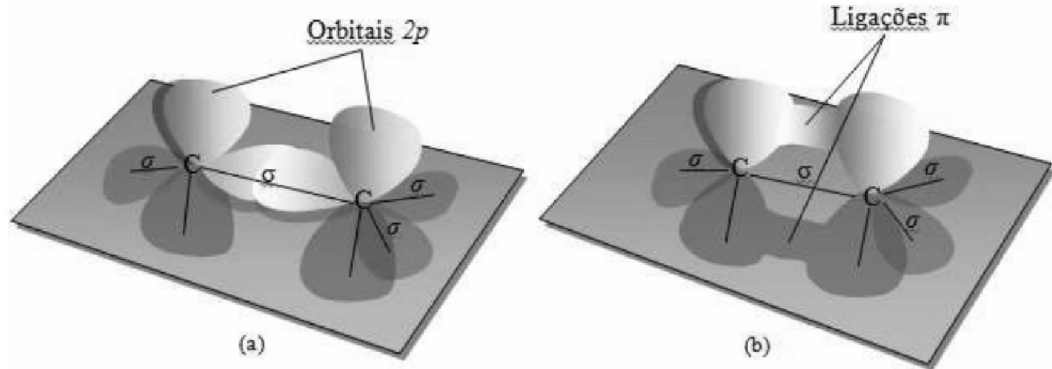


Figura 4: Ligações entre átomos de carbono. Em (a) a Ligação do tipo  $\sigma$  está ao longo do plano, que surge devido a hibridização dos orbitais  $s$  e  $p$ . Em (b) a ligação do tipo  $\pi$  está perpendicular ao plano [27].

O grafeno possui características peculiares se comparado a outros materiais. Acima do zero de energia, na banda de condução, o transporte dos estados eletrônicos no grafeno é dado por elétrons que estão carregados negativamente. Para energias negativas, e levando-se em conta que a banda de valência não está totalmente preenchida, seus estados eletrônicos desocupados se comportam como partículas carregadas positivamente (buracos). Na física da matéria condensada, elétrons e buracos são normalmente descritos separadamente pela equação de Schrödinger, de forma que não há nenhuma conexão entre eles. Em contraste, elétrons e buracos no grafeno estão interligados, com propriedades análogas à simetria carga-conjugação da eletrodinâmica quântica. A banda de valência ( $E < 0$ ) toca a banda de condução ( $E > 0$ ) em seis pontos, localizados na primeira zona de Brillouin. Nesses pontos observa-se a ausência de gap e para pequenos valores da energia há uma dispersão cônica (a energia é linear com o momento). Os vértices de três desses cones são ditos equivalentes entre si, pois estão relacionados pelo mesmo vetor da rede recíproca. De forma semelhante, os outros três são equivalentes entre si. A velocidade do elétron é constante e independente da sua energia, e é dada por  $v_F = 3at/2\hbar \approx 1 \times 10^6 m/s$ , onde  $a$  é o parâmetro de rede e  $t \approx 2.8eV$  é o parâmetro de hopping para vizinhos próximos, que está associado à transição do elétron entre os sítios mais próximos. A dinâmica desses portadores de carga no grafeno não pode ser descrita pela equação de Schrödinger, pois se comportam como partículas relativísticas sem massa e o sistema possui um grau de liberdade associado as sub-redes A e B denominado pseudospin, que é tratado de forma análoga ao spin, sendo necessário descrevê-la via equação de Dirac. Pode-se atribuir às



sub-redes A e B as direções up e down respectivamente, gerando spinores

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

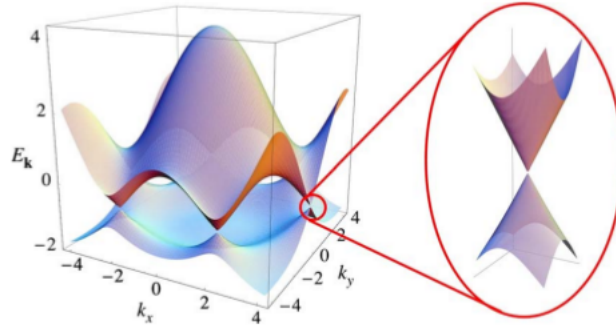


Figura 5: Relação de dispersão eletrônica de uma monocamada de grafeno. A direita um zoom de uma região próximo a um dos pontos de Dirac[20].

### 1.1.2 Autoestados e Autoenergias para o Hamiltoniano de Dirac independente do tempo

No tratamento de um elétron de baixa energia em uma folha de grafeno, resolve-se a equação de Dirac independente do tempo

$$H_D \psi = E \psi, \quad (1.5)$$

$$H_D = \hbar v_f \vec{\sigma} \cdot \vec{k} + V(x)I,$$

em que as componente deste vetor  $\vec{\sigma} = \sigma_x \vec{i} + \sigma_y \vec{j} + \sigma_z \vec{k}$  representam as matrizes de Pauli, dadas por:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Para  $V(x) = 0$ , o Hamiltoniano de Dirac pode ser escrito por:

$$H_D = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & (k_x - ik_y) \\ (k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.6)$$

As soluções que interessam do sistema linear homogêneo  $(H_D - EI)\psi = 0$ , são aquelas na qual a condição  $\det(H_D - EI) = 0$  deva ser satisfeita. Então as autoenergias são dadas por

$$\det \begin{pmatrix} -E & \hbar v_F(k_x - ik_y) \\ \hbar v_F(k_x + ik_y) & -E \end{pmatrix} = 0,$$

$$E^2 - \hbar^2 v_F^2 (k_x - ik_y)(k_x + ik_y) = 0,$$

$$E = \pm \hbar v_F k. \quad (1.7)$$

Para achar os autoestados basta resolver a Eq. (1.5) para os dois valores possíveis de  $E$ .

• Para  $E = \hbar v_F k$

$$\begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F(k_x - ik_y) \\ \hbar v_F(k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = \hbar v_F k \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix},$$

$$\hbar v_F(k_x - ik_y)\psi_B = \hbar v_F k \psi_A,$$

$$\hbar v_F(k_x + ik_y)\psi_A = \hbar v_F k \psi_B.$$

Seja  $k_x \pm ik_y = ke^{\pm i\phi}$ , de modo que  $\phi = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right)$ , então pode-se escrever

$$\hbar v_F k e^{-i\phi} \psi_B = \hbar v_F k \psi_A,$$

$$\hbar v_F k e^{i\phi} \psi_A = \hbar v_F k \psi_B,$$

tal que  $\psi_A = 1$  e  $\psi_B = e^{i\phi}$  é solução para o sistema acima, e o autoestado  $\psi$  é escrito como:

$$\psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix}.$$

• Para  $E = -\hbar v_F k$

$$\begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F(k_x - ik_y) \\ \hbar v_F(k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = -\hbar v_F k \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$$

$$\hbar v_F(k_x - ik_y)\psi_B = -\hbar v_F k \psi_A,$$

$$\hbar v_F(k_x + ik_y)\psi_A = -\hbar v_F k \psi_B.$$

Como feito anteriormente, o termo entre parênteses é a exponencial de um ângulo  $\phi$

$$\begin{aligned}\hbar v_F k e^{-i\phi} \psi_B &= -\hbar v_F k \psi_A, \\ \hbar v_F k e^{i\phi} \psi_A &= -\hbar v_F k \psi_B,\end{aligned}$$

tal que  $\psi_A = 1$  e  $\psi_B = -e^{i\phi}$  é solução para o sistema acima, e o autoestado  $\psi$  é escrito como:

$$\psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\phi} \end{pmatrix}.$$

Então a função de onda no espaço dos momentos normalizada, é dada por:

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad s = \text{sgn}(E). \quad (1.8)$$

Para  $V(x) = V_0$ , o Hamiltoniano de Dirac é escrito como:

$$H_D = \begin{pmatrix} V_0 & \hbar v_F (q_x - ik_y) \\ \hbar v_F (q_x + ik_y) & V_0 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

Utilizando a mesma condição descrita anteriormente, na qual  $\det(H - EI) = 0$  para soluções de interesse, tem-se

$$\det \begin{pmatrix} V_0 - E & \hbar v_F (q_x - ik_y) \\ \hbar v_F (q_x + ik_y) & V_0 - E \end{pmatrix} = 0,$$

$$(V_0 - E)^2 - \hbar^2 v_F^2 (q_x - ik_y)(q_x + ik_y) = 0,$$

$$E = V_0 \pm \hbar v_F \kappa. \quad (1.10)$$

E obtém-se os autoestados desse sistema resolvendo-se (1.5) para os valores dessas autoenergias.

- Para  $E = V_0 + \hbar v_F \kappa$

$$\begin{pmatrix} V_0 & \hbar v_F (q_x - ik_y) \\ \hbar v_F (q_x + ik_y) & V_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = (V_0 + \hbar v_F \kappa) \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix},$$

$$V_0 \psi_A + \hbar v_F (q_x - ik_y) \psi_B = (V_0 + \hbar v_F \kappa) \psi_A,$$

$$\hbar v_F (q_x + ik_y) \psi_A + V_0 \psi_B = (V_0 + \hbar v_F \kappa) \psi_B.$$

seja  $q_x \pm ik_y = \kappa e^{\pm i\theta}$ , de modo que  $\theta = \arctan\left(\frac{k_y}{q_x}\right)$ , o sistema pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}\hbar v_F \kappa e^{-i\theta} \psi_B &= \hbar v_F \kappa \psi_A, \\ \hbar v_F \kappa e^{i\theta} \psi_A &= \hbar v_F \kappa \psi_B,\end{aligned}$$

tal que  $\psi_A = 1$  e  $\psi_B = e^{i\theta}$  é solução para o sistema acima. E o autoestado para essa autoenergia é

$$\psi(\kappa) = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix}$$

- Para  $E = V_0 - \hbar v_F k$

$$\begin{pmatrix} V_0 & \hbar v_F (q_x - ik_y) \\ \hbar v_F (q_x + ik_y) & V_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = (V_0 - \hbar v_F \kappa) \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix},$$

$$V_0 \psi_A + \hbar v_F (q_x - ik_y) \psi_B = (V_0 - \hbar v_F \kappa) \psi_A,$$

$$\hbar v_F (q_x + ik_y) \psi_A + V_0 \psi_B = (V_0 - \hbar v_F \kappa) \psi_B.$$

Como feito anteriormente, o termo entre parênteses do lado esquerdo é a exponencial de um ângulo  $\theta$

$$\begin{aligned}\hbar v_F \kappa e^{-i\theta} \psi_B &= -\hbar v_F \kappa \psi_A, \\ \hbar v_F \kappa e^{i\theta} \psi_A &= -\hbar v_F \kappa \psi_B,\end{aligned}$$

tal que  $\psi_A = 1$  e  $\psi_B = -e^{i\theta}$  é solução para o sistema acima. E o autoestado é dado por:

$$\psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\theta} \end{pmatrix}.$$

Então a função de onda no espaço dos momentos normalizada, é dada por:

$$\psi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s' e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad s' = \text{sgn}(V_0 - E) \quad (1.11)$$

### 1.1.3 Aplicações

As características do grafeno fazem dele muito interessante para aplicações tecnológicas. Possui alta condutividade térmica e elétrica, é um material praticamente transparente,

além disso é flexível e muito resistente [15, 16, 17]. Devido as suas propriedades, o grafeno é um material muito versátil quanto as possibilidades de aplicações, dentre elas estão: desalinização da água, tornando-a pura [7]. Pode-se usar óxido de grafeno na purificação da água sujeita a materiais radioativos [8]. Capacitores feitos a base de grafeno carregam mais rápido que capacitores comuns [9][10]. Um sensor de gás, no qual uma folha de grafeno absorve uma molécula, havendo uma mudança na sua condutividade elétrica, possibilitando sua detecção [11]. Aproveitando a alta mobilidade dos portadores de carga no grafeno, pode-se obter comunicação em altíssima velocidade [12]. Pesquisadores desenvolveram um dispositivo a base de óxido de grafeno capaz de analisar amostras de sangue em busca de células cancerígenas [13]. Dispositivos, que em tempo real, detectam a presença de bactérias [14]. Espera-se que dentro de alguns anos o grafeno venha a protagonizar o cenário tecnológico.

## 1.2 Tunelamento de Klein

Efeitos de tunelamento contrariam os resultados clássicos, pois permitem a entrada em regiões não acessíveis classicamente, ou seja, há uma probabilidade de uma partícula ser encontrada dentro de uma região na qual sua energia é menor que o potencial. Em 1929, Oskar Klein obteve um resultado surpreendente ao aplicar a equação de Dirac para o espalhamento de um elétron, conhecido como o paradoxo de Klein [18]. Mostrou que se o potencial é da ordem da massa de repouso do elétron  $mc^2$ , a barreira é aproximadamente transparente. Isso também é válido para um potencial muito grande, contrastando com o resultado não relativístico no qual a transmissão decai exponencialmente com o aumento do potencial. Esse resultado está intimamente ligado ao fato de que na equação de Dirac estados com energias positivas (elétrons) e negativas (pósitrons) são descritos por diferentes componentes do mesmo spinor. Então, ao penetrar em uma barreira de potencial é permitido ao elétron ocupar estados com energias negativas, ou seja, se comportar como um pósitron e seguir no mesmo sentido de propagação.

O que foi descrito acima está no âmbito da eletrodinâmica quântica, e pode ser testado em termos de um experimento de matéria condensada usando barreiras eletrostáticas em uma folha de grafeno [19, 20], e pelo que foi dito anteriormente sobre o comportamento do elétron em uma folha de grafeno, esse sistema tem todos os ingredientes para se testar a teoria de Klein. Pode-se mostrar que resolvendo o problema do espalhamento de um elétron para uma incidência normal sobre uma barreira de potencial, a transmissão é total. Utiliza-se os cálculos feitos anteriormente das funções de onda para defini-las nas

três regiões de interesse, que pode ser vista na Fig.6, onde uma partícula incide na barreira com um ângulo  $\phi$ , adentra a região do potencial de largura  $W$  com ângulo  $\theta$  e sai com ângulo  $\phi$ . Então as funções de onda nas três regiões são dadas respectivamente por:

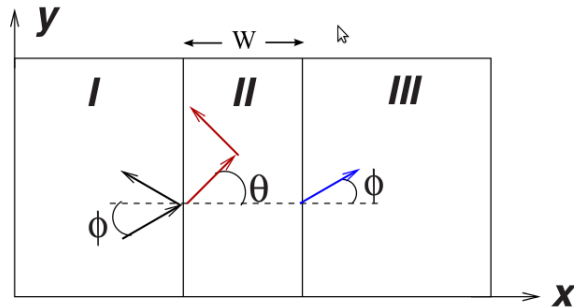


Figura 6: Região de espalhamento. A partícula vem de menos infinito (região I) se propagando livremente, penetra uma barreira de potencial (região II) de largura  $W$  e se propaga livremente para infinito (região III) [20].

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

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

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

Nas funções de onda  $\psi_I$  e  $\psi_{II}$  o primeiro termo do lado direito represente a onda incidente e o segundo termo representa a parte refletida dessa onda, ambas em suas respectivas regiões. Para  $\psi_{III}$  não há onda refletida, pois a onda incidente se propaga para o infinito. Utilizando a continuidade das funções de onda, temos que:

- Em  $x = 0$ ,  $\psi_I = \psi_{II}$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad (1.12)$$

- Em  $x = W$ ,  $\psi_{II} = \psi_{III}$

$$a \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{iq_x W} + b \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-iq_x W} = t \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik_x W} \quad (1.13)$$

Substituindo (1.12) em (1.13) isolando o termo do coeficiente  $a$ , obtém-se:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{iq_x W} + r \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{iq_x W} - 2ib \sin(q_x W) \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ik_x W},$$

a qual divide-se em duas equações, dadas por:

$$te^{ik_x W} = e^{iq_x W} + re^{iq_x W} - 2ib \sin(q_x W), \quad (1.14)$$

$$ste^{i\phi} e^{ik_x W} = se^{i\phi} e^{iq_x W} - rse^{-i\phi} e^{iq_x W} + 2s'ibe^{i\theta} \sin(q_x W). \quad (1.15)$$

Substituindo (1.14) em (1.15), isolando o termo em  $r$  e fazendo-se as devidas manipulações algébricas, obtém-se:

$$2s \cos(\phi)(te^{ik_x W} - e^{iq_x W}) = -2ib \sin(q_x W)(s'e^{-i\theta} - se^{-i\phi}) \quad (1.16)$$

A Eq.(1.13) será utilizada para achar o coeficiente  $b$  e pode ser dividida em

$$te^{ik_x W} = ae^{iq_x W} + be^{-ik_x W}, \quad (1.17)$$

e

$$ste^{i\phi} e^{ik_x W} = s'ae^{i\theta} e^{iq_x W} - s'be^{-i\theta} e^{-ik_x W}. \quad (1.18)$$

Isolando o coeficiente  $a$  nas Eq's (1.17) e (1.18) e dividindo-as, tem-se:

$$b = \frac{t(s'e^{i\theta} - se^{i\phi})e^{ik_x W}}{2s' \cos(\theta)e^{-iq_x W}}. \quad (1.19)$$

Substituindo (1.19) em (1.16) e fazendo as devidas manipulações, obtém-se

$$\left( e^{ik_x W} - \frac{e^{iq_x W}}{t} \right) = \frac{i \sin(q_x W)(1 - ss' \cos(\theta - \phi))}{ss' \cos(\phi) \cos(\theta) e^{-iq_x W} e^{-ik_x W}}.$$

O coeficiente de transmissão  $t$  pode ser escrito da seguinte forma, de modo a deixar evidente a fase  $e^{i(q_x+k_x)W}$ . Então  $t$  é dado por:

$$t(\phi) = \frac{ss' \cos(\phi) \cos(\theta) e^{i(q_x+k_x)W}}{e^{iq_x W} [ss' \cos(q_x W) \cos(\phi) \cos(\theta) - i \sin(q_x W)(1 - ss' \sin(\theta) \sin(\phi))]}.$$
 (1.20)

Para  $k_y = 0$ ,  $q_x = (V_0 - E)/\hbar v_F$ , a fase se torna

$$e^{i(q_x+k_x)W} = e^{\frac{iV_0 W}{\hbar v_F}}.$$
 (1.21)

O interesse é obter a probabilidade de transmissão  $T(\phi) = tt^*$ , dado por:

$$T(\phi) = \frac{\cos^2(\phi) \cos^2(\theta)}{(\cos(q_x W) \cos(\phi) \cos(\theta))^2 + \sin^2(q_x W)(1 - ss' \sin(\theta) \sin(\phi))^2}.$$
 (1.22)

Considerando-se uma incidência normal, ou seja, na qual  $\phi = 0$  e  $\theta = 0$ , obtém-se:

$$T(0) = 1.$$
 (1.23)

Então mostra-se que esse sistema está em concordância com a teoria de Klein para uma incidência normal a barreira.



## 2 MODELO TEÓRICO

### 2.1 O método split-operator

A evolução temporal de pacotes de onda é uma ferramenta útil no estudo de propriedades eletrônicas e de transportes em sistemas de baixa dimensionalidade. Investigar a propagação desses pacotes de onda em um dado sistema, permite-nos obter informações sobre o seu espectro de energia e a sua densidade de estados. A propagação de pacotes de onda tem sido investigado recentemente em monocamadas de grafeno, nesse caso, o método split-operator terá como objetivo resolver a equação de Dirac dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H_D \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

onde  $H_D$  é o Hamiltoniano de Dirac e  $\Psi$  não é tratado simplesmente como uma função de onda, mas como um spinor. A equação (2.1) tem como solução para um intervalo de tempo  $\Delta t$

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H_D dt} \Psi(\vec{r}, t), \quad (2.2)$$

o operador definido pela exponencial na Eq.(2.2) é identificado como o operador de evolução temporal, onde  $H_D$  é responsável por gerar "translação" no tempo.

O método split-operator consiste em separar a exponencial do Hamiltoniano em duas partes, uma delas dependendo apenas do potencial a outro apenas do termo cinético. Sejam  $A$  e  $B$  operadores, a exponencial da soma  $\exp(A + B)$  pode ser separada de forma exata como a multiplicação das exponenciais  $\exp(A)\exp(B)$  apenas quando os operadores comutam. Mas nem sempre essa propriedade é válida, por exemplo a exponencial do Hamiltoniano  $H = T + V$  presente no operador de evolução temporal não pode ser separada dessa forma, pois  $T$  e  $V$  não comutam. De forma aproximada, pode-se escrever

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H dt} = e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_t^{t+\Delta t} V dt} e^{-\frac{i}{\hbar} T \Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_t^{t+\Delta t} V dt} + O(\Delta t^3), \quad (2.3)$$

onde  $O(\Delta t^3)$  pode ser desprezado, pois considera-se  $\Delta t$  muito pequeno. Então a função

de onda em um tempo posterior é escrita da seguinte forma

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_t^{t+\Delta t} V dt} e^{-\frac{i}{\hbar} T \Delta t} e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_t^{t+\Delta t} V dt} \Psi(\vec{r}, t).$$

Discretiza-se o tempo, o potencial e a função de onda. Dessa forma, como as exponenciais do potencial não envolvem derivadas, pode-se simplesmente multiplicá-las pela função de onda, e tem-se

$$\xi_j = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} V_j dt} \Psi_{j,t_j}. \quad (2.4)$$

Deve-se tomar cuidado ao multiplicar a exponencial do termo cinético a (2.4), pois estando no espaço real o termo cinético envolve derivadas. A melhor maneira de solucionar esse problema é aplicar uma transformada de Fourier a  $\xi_j$ , e levando-se em conta que no espaço recíproco o termo cinético envolve números, assim a exponencial do termo cinético pode ser simplesmente multiplicada a  $\xi_j$ . Com esse resultado em mãos, basta aplicar uma transformada de Fourier inversa e depois multiplicar pelo último termo exponencial, que envolve o potencial, obtendo assim a função de onda em um tempo  $t + \Delta t$ . Dessa forma obtém-se a dinâmica do sistema.

## 2.2 Hamiltoniano que envolve spin

Nesta seção será considerado um Hamiltoniano que pode ser escrito em termos das matrizes de Pauli, tal que sua forma seja

$$H = \vec{\Xi} \cdot \vec{\sigma}. \quad (2.5)$$

A exponencial de  $H$  pode ser escrita da seguinte forma:

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar} H \Delta t\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \Delta t \vec{\Xi} \cdot \vec{\sigma}\right] = \exp\left[-i \vec{S} \cdot \vec{\sigma}\right], \quad (2.6)$$

expandindo-a em série de Taylor

$$\exp\left[-i \vec{S} \cdot \vec{\sigma}\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i \vec{S} \cdot \vec{\sigma})^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (\vec{S} \cdot \vec{\sigma})^{2n}}{(2n)!} - i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (\vec{S} \cdot \vec{\sigma})^{2n+1}}{(2n+1)!},$$

e usando as propriedades das matrizes de Pauli  $\sigma_i \sigma_i = I$  e  $[\sigma_i, \sigma_j] = 0$ , obtém-se

$$(\vec{S} \cdot \vec{\sigma})^{2n} = S^{2n} I \quad (\vec{S} \cdot \vec{\sigma})^{2n+1} = S^{2n} (\vec{S} \cdot \vec{\sigma}),$$

então a exponencial pode ser escrita como

$$\exp[-i\vec{S} \cdot \vec{\sigma}] = I \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n S^{2n}}{(2n)!} - \frac{i(\vec{S} \cdot \vec{\sigma})}{S} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n S^{2n+1}}{(2n+1)!}. \quad (2.7)$$

O primeiro termo do lado direito da Eq.(2.7) nada mais é que a expansão da função  $\cos(S)$ , e o segundo termo da função  $\sin(S)$ , então

$$\exp[-i\vec{S} \cdot \vec{\sigma}] = I \cos(S) - \frac{i(\vec{S} \cdot \vec{\sigma})}{S} \sin(S),$$

$$\exp[-i(\vec{S} \cdot \vec{\sigma})] = \cos(S) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \frac{i \sin(S)}{S} \begin{pmatrix} S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & -S_z \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Note que esta forma matricial é uma representação exata do operador de evolução temporal, pois não houve nenhuma aproximação para chegar nesse resultado. Para um Hamiltoniano do tipo de Dirac para o grafeno  $H = \hbar v_F (\vec{k} \cdot \vec{\sigma})$  nas equações (2.5) e (2.6) resulta em  $\vec{\Xi} = \hbar v_F \vec{k}$  e  $\vec{S} = v_F \Delta t \vec{k}$ . Neste trabalho resolveu-se o problema de um pacote de onda se propagando em uma dimensão, o que leva

$$\vec{S} = v_F \Delta t (k_x, 0, 0) \quad \vec{\Xi} = \hbar v_F (k_x, 0, 0), \quad (2.9)$$

tal que a equação (2.8) se torna

$$\exp[-i(S_x \sigma_x)] = \begin{pmatrix} \cos(S_x) & -i \sin(S_x) \\ -i \sin(S_x) & \cos(S_x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(v_F \Delta t k_x) & -i \sin(v_F \Delta t k_x) \\ -i \sin(v_F \Delta t k_x) & \cos(v_F \Delta t k_x) \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

A Eq.(2.10) está relacionada com a exponencial do termo cinético da Eq.(2.3). Quando se tem em mãos a função de onda (2.4) no espaço recíproco, o próximo passo é uma mera multiplicação matricial com (2.10).

### 3 RESULTADOS

Inicialmente, considerou-se um pacote de onda Gaussiano se propagando em uma dimensão com largura  $d_x = 100\text{\AA}$  e energia inicial de  $E_0 = 100\text{meV}$  descrito pela função

$$\Psi(x, 0) = N \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \exp \left[ -\frac{(x - x_0)^2}{d_x^2} + ik_0x \right] \quad (3.1)$$

onde  $N$  é o fator de normalização,  $k_0 = E_0/\hbar v_F$  o vetor de onda inicial,  $A$  e  $B$  a contribuição das sub-redes, sujeito a uma barreira de potencial com altura  $V = 200\text{meV}$  e largura  $W = 300\text{\AA}$  localizada em  $0 \leq x \leq 300\text{\AA}$ . Com estes parâmetros, iniciando a evolução temporal em  $x_0 = -300\text{\AA}$ , o pacote de onda entra na região da barreira em  $t \approx 30\text{fs}$  e deixa essa região cerca de  $t \approx 40\text{fs}$  depois. Na Fig.7(a), que mostra em curvas de nível o módulo quadrado da função de onda no espaço recíproco como função do tempo, mostra-se que dentro da barreira é mais provável que o pacote de onda tenha  $k < 0$ , já na Fig.7(b) mostra-se a parte real da função de onda ao longo do tempo, observa-se que a velocidade de fase é negativa dentro da barreira, pois a inclinação no gráfico é negativa (velocidade é dada pela inclinação em um gráfico de posição pelo tempo), sugerindo que o elétron se comporta como um buraco nessa região. Ao sair da barreira porém, a velocidade de fase volta a ser positiva e o pacote de onda adquire uma fase, que pode ser vista na Fig.7(b) a partir de  $x \geq 300\text{\AA}$ , e que não tem relevância na dinâmica do pacote de onda. Supreendentemente, para o potencial dependente do tempo que foi considerado neste trabalho, a fase adquirida após sair da barreira desempenha um papel importante na dinâmica do pacote de onda, que será explicado posteriormente em mais detalhes.

Na Fig.8(a), está ilustrado a evolução temporal da densidade de probabilidade, onde é visto um aumento linear da posição do pico em  $x$  no tempo, o qual indica velocidade constante, como esperado. Verificou-se então que o pico passa pela região  $0 \leq x \leq 300\text{\AA}$  em  $30\text{fs} \leq t \leq 70\text{fs}$ , como discutido anteriormente. Dentro dessa região, a energia cinética passa a ser negativa, como mostra a Fig.8(b), o que explica a velocidade de fase negativa observada na Fig.7(b). Note que não há motivo para a energia total do sistema  $E = 100\text{meV}$

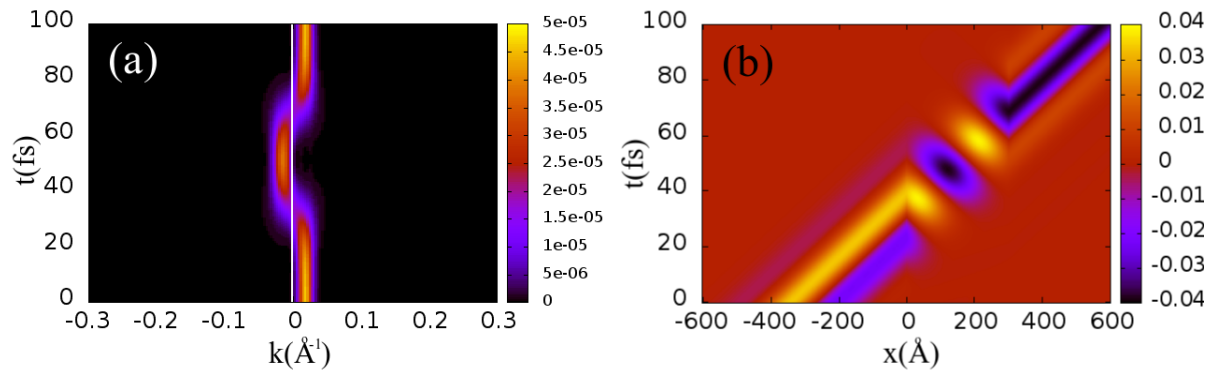


Figura 7: Curvas de nível da (a) densidade de probabilidade no espaço recíproco como função do tempo, e (b) da parte real da função de onda como função do tempo.

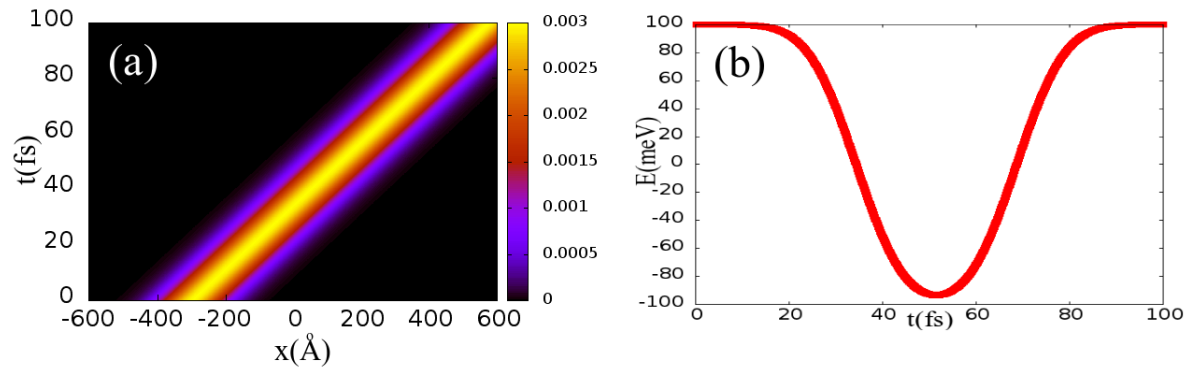


Figura 8: (a) Densidade de probabilidade no espaço real como função do tempo. (b) Energia cinética média do pacote de onda como função do tempo.

mudar nesse caso, então  $E = \hbar\omega > 0$  e a velocidade de fase se torna  $v_p = \omega/k < 0$ , pois  $k < 0$  na barreira (ver Fig.7(a)).

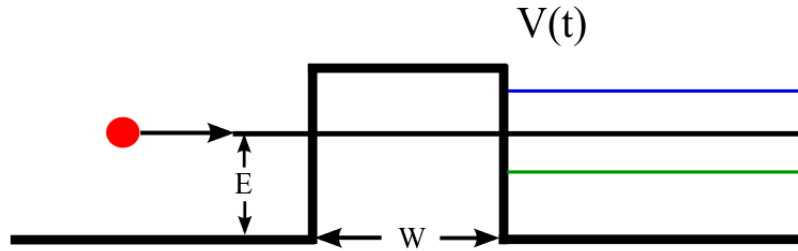


Figura 9: Uma partícula se propagando em uma dimensão, sujeita a uma barreira de potencial que varia linearmente com o tempo. As linhas azul e verde ilustram a energia cinética final do elétron ao sair da barreira, para  $\alpha > 0$  e  $\alpha < 0$  respectivamente.

Agora, considera-se novamente um pacote de onda Gaussiano que representa um elétron de baixa energia se propagando em uma dimensão, com os mesmos valores anteriores, exceto que  $W = 200\text{\AA}$  localizada em  $0 \leq x \leq 200\text{\AA}$  e a altura da barreira varia no tempo como  $V(t) = \alpha t$ , em que  $\alpha$  é a taxa de variação da altura da barreira, como mostra a Fig.9. Funções de onda podem ser escritas como uma combinação linear de autofunções de um observável, e atrela-se a essa função de onda a parte temporal, de forma que

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (3.2)$$

A partir da Eq.(1.21) é visto que, após sofrer o tunelamento de Klein através de uma barreira, o pacote de onda adquire uma fase, que neste trabalho é dada por  $\phi = \alpha W t / \hbar v_F$ . Então, pode-se escrever a função de onda da seguinte forma

$$\bar{\Psi}(x, t) = \Psi(x, t) e^{-i\alpha W t / \hbar v_F}, \quad \bar{\Psi}(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n e^{-i(E_n + \alpha W / v_F) t / \hbar}. \quad (3.3)$$

Isso ilustra que a fase adquirida é equivalente a um fator de energia extra, sugerindo que o elétron adquire uma energia extra ao deixar a barreira. A Fig.10 mostra o valor esperado da energia cinética como função do tempo para (a) a largura da barreira fixa e muitos valores de  $\alpha$  e para (b)  $\alpha$  fixo e muitos valores de  $W$ . A energia cinética final do pacote de onda é alterada para  $\alpha \neq 0$ . Para  $\alpha > 0$  ( $\alpha < 0$ ) a energia é afetada de tal forma que o elétron tem um acréscimo (decréscimo) de energia cinética ao sair da barreira, como mostra a Fig.10(a) e considerando um  $\alpha > 0$  fixo, o ganho de energia cinética é maior a medida que a largura aumenta, Fig.10(b). Após deixar a barreira, o pacote de onda passa a ter energia cinética constante, pois esse pacote de onda deixa de sofrer influência da barreira e a função de onda é zero dentro da barreira. A Fig.11 mostra a energia cinética final do pacote de onda como função da (a) largura da barreira e da (b) taxa de variação da altura da barreira, em que cada linha indica uma determinada largura da barreira. Ambas

as figuras mostram a dependência linear da energia cinética final do pacote de onda, como função de  $\alpha$  e  $W$ . A Fig.11(b) mostra a concordância do resultado numérico (linhas) com o resultado analítico (símbolos). No resultado analítico a energia final é dada pela energia inicial mais a energia extra  $E = \alpha W/\hbar v_F$ . A Fig.12, que é a densidade de probabilidade como função do tempo e do vetor de onda, ajuda a reforçar o que foi dito anteriormente da Fig.10(a), pois a energia está relacionada com o vetor de onda, onde (a) representa um decréscimo de energia para  $\alpha = -7\text{meV}$  e (b) representa um acréscimo de energia para  $\alpha = 7\text{meV}$ . Pelo que foi discutido anteriormente, para certos valores de  $\alpha < 0$  a energia final do elétron se torna negativa, sugerindo que o elétron se comporta como um buraco mesmo depois de sair da barreira. Espera-se que para estados de buraco a velocidade de fase seja negativa. A Fig.13 mostra a parte real da função de onda como função do tempo e da posição para (a)  $\alpha = -7\text{meV}$  e (b)  $\alpha = 7\text{meV}$ . Na Fig.13(a) a velocidade de fase do pacote de onda ao sair da barreira, por volta de  $t \approx 60\text{fs}$ , é positiva. Como  $E < 0$  e  $k < 0$  para  $\alpha = -7\text{meV}$  ao sair da barreira, então  $v_p = E/\hbar k > 0$ , que está em concordância com a Fig.13(a). Sabe-se que o número de picos é proporcional ao vetor de onda  $k$ , da Fig.12(b) o valor de  $k$  aumenta ao sair da barreira, o que leva o aumento do número de picos, que está de acordo com a Fig.13(b).

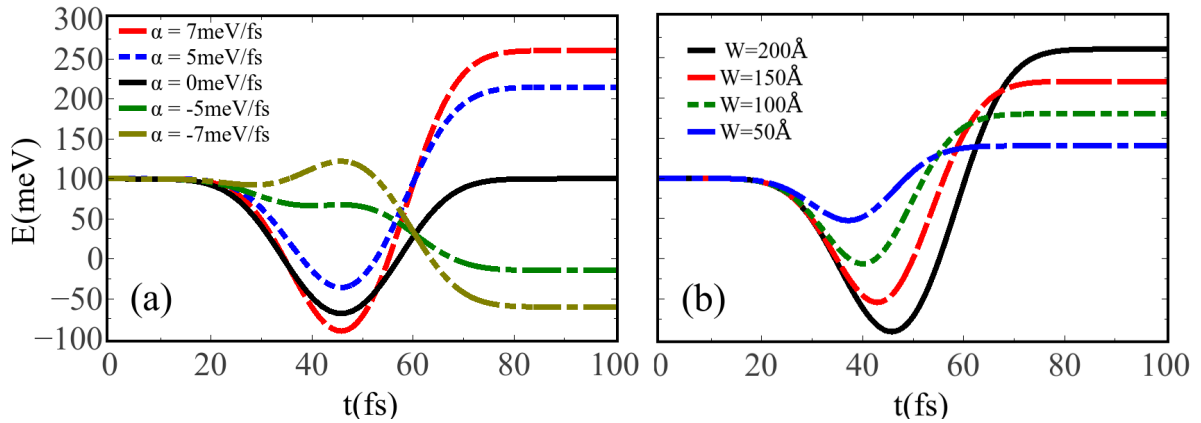


Figura 10: Valor esperado da energia cinética em função do tempo. (a) Para a largura da barreira fixa,  $W = 200 \text{ \AA}$ . (b) Para a taxa de variação da altura da barreira fixa,  $\alpha = 7 \text{ meV/fs}$

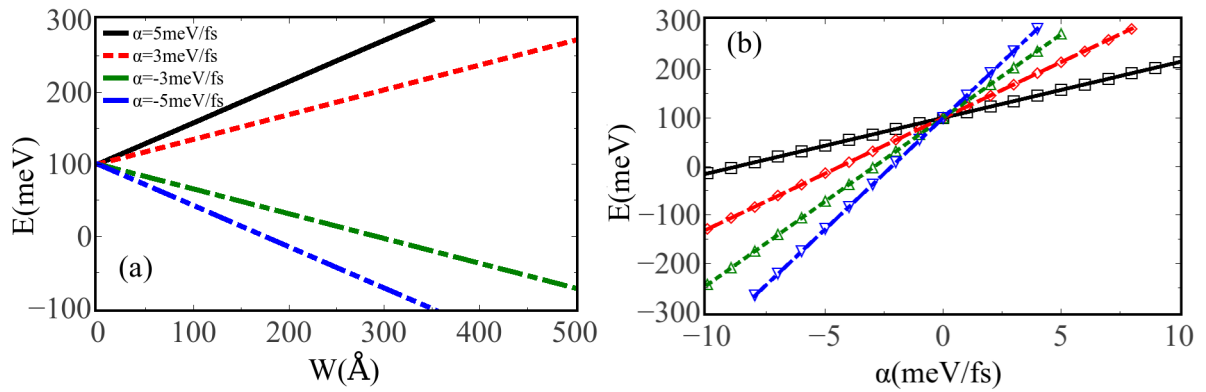


Figura 11: Valor esperado da energia cinética final do pacote de onda: (a) Como função da largura da barreira. (b) Como função da taxa de variação da altura da barreira para  $W$  fixo em cada reta. Os símbolos representam o resultado analítico e as linhas representam o resultado numérico.

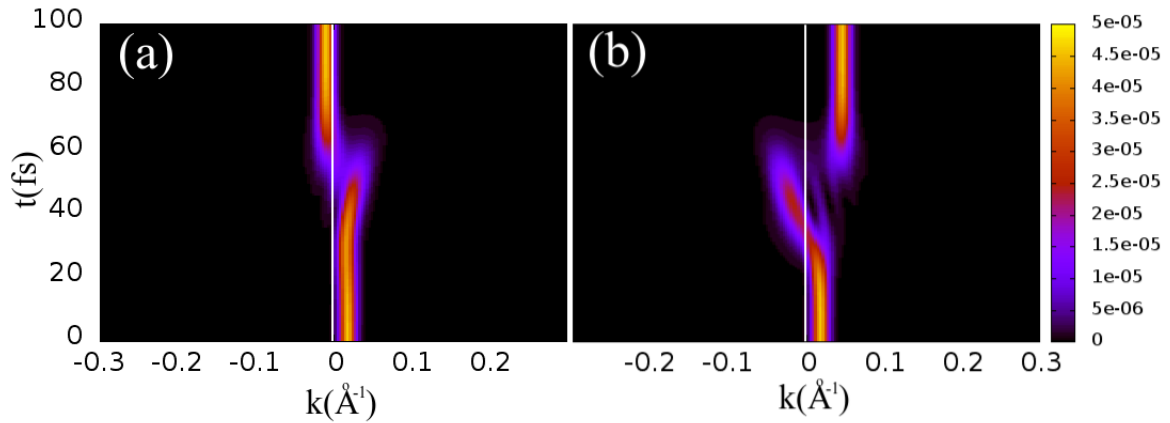


Figura 12: Densidade de probabilidade no espaço recíproco (a) para  $\alpha = -7$  meV/fs (b) para  $\alpha = 7$  meV/fs

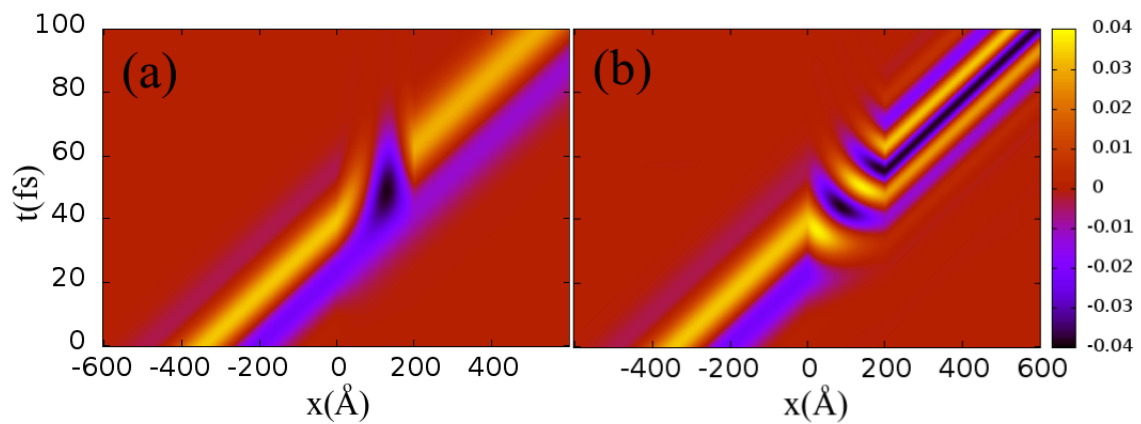


Figura 13: Parte real da função de onda como função do tempo. (a)  $\alpha = -7$  meV/fs. (b)  $\alpha = 7$  meV/fs.



Os resultados mostram que a partir de certo valor de  $\alpha < 0$  o elétron perde energia o suficiente para ficar com energia negativa, se comportando como buraco. Em estado sólido, um buraco sob o efeito de um campo magnético se comporta como se fosse uma partícula de carga positiva. Então, para atestar a validade do comportamento desse pacote de onda como buraco ao sair da barreira, pode-se aplicar um campo magnético, que devido à força de Lorentz, deverá defletir o pacote em sentido oposto ao de um elétron.

## 4 CONCLUSÃO

Os resultados mostram que para essa forma específica do potencial, a fase adquirida pelo pacote de onda é responsável por uma energia extra da forma  $E = \alpha W/v_F$ . Para um valor fixo de  $W$ , o elétron tunelado ganha(perde) energia para  $\alpha > 0(\alpha < 0)$  e para  $\alpha$  fixo, o ganho de energia se torna maior a medida que  $W$  aumenta. Verificou-se a consistência do resultado analítico com o numérico da energia final do elétron, que tem dependência linear com  $\alpha$  e  $W$ . Mostrou-se que há a possibilidade de ter um estado de buraco mesmo fora da barreira no problema do espalhamento de um elétron, a partir de certos valores de  $\alpha < 0$ . Mesmo quando o elétron perde energia suficiente para se comportar como um buraco ao sair da barreira, a velocidade de fase do pacote de onda se mantém positiva. De fato, resultados preliminares feitos para um pacote de onda circular em um sistema bidimensional sugere que o elétron realmente ocupa um estado de buraco ao sair da barreira para  $\alpha = -7\text{meV/fs}$ , pois quando submetido a um campo magnético, o pacote tunelado é defletido em sentido contrário ao de um elétron (lembre-se que o buraco possui carga positiva). Estes resultados para o caso bidimensional porém, são deixados para melhor detalhamento em trabalhos futuros.

## 5 APÊNDICE

### 5.1 Equação de Dirac

Como foi visto nos capítulos anteriores, a equação de Dirac aparece como uma aproximação para elétrons de baixa energia no grafeno, que se comportam como partículas relativísticas sem massa e possui graus de liberdades associadas as sub-redes A e B, que desempenham um papel análogo ao spin. Torna-se interessante fazer aqui uma discussão mais geral sobre essa equação.

#### 5.1.1 Como obter a equação de Dirac

Em mecânica quântica relativística, a equação de Dirac descreve partículas elementares que carregam spin- $\frac{1}{2}$ , como o elétron. Essa equação ainda introduz o conceito de antipartícula, verificado experimentalmente por Carl David Anderson e Victor Franz Hess em 1932, levando a descoberta do pósitron. Mostra-se que o spin surge naturalmente dessa equação, ao invés de postular sua existência, como é feito na mecânica quântica não relativística. A estratégia básica para obter a equação de Dirac é utilizar a relação energia-momento

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = 0 \quad (5.1)$$

onde  $p^\mu = (E/c, p_x, p_y, p_z)$  é o quadrivetor energia-momento, e levando-se em conta as seguintes relações:

$$p_\mu \rightarrow i\hbar\partial_\mu, \quad \partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} \quad (5.2)$$

$$\partial_0 = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \partial_1 = \frac{\partial}{\partial x}, \quad \partial_2 = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \partial_3 = \frac{\partial}{\partial z}. \quad (5.3)$$

Considerando-se que a Eq.(5.1) possa ser fatorada da seguinte forma:

$$p^\mu p_\mu - m^2 c^2 = (\lambda^\alpha p_\alpha + mc)(\gamma^\beta p_\beta - mc), \quad (5.4)$$

onde  $\lambda^\alpha$  e  $\gamma^\beta$  são coeficientes a serem determinados, de modo que

$$\begin{aligned} (\lambda^\alpha p_\alpha + mc)(\gamma^\beta p_\beta - mc) &= \lambda^\alpha p_\alpha \gamma^\beta p_\beta - mc(\lambda^\alpha p_\alpha - \gamma^\beta p_\beta) - m^2 c^2 \\ &= \lambda^\alpha \gamma^\beta p_\alpha p_\beta - mc(\lambda^\alpha - \gamma^\alpha) p_\alpha - m^2 c^2. \end{aligned}$$

Procura-se uma equação que não seja linear em  $p_\alpha$ , tal que tenha a forma de (5.1), então ela deve ser satisfeita para  $\lambda^\alpha = \gamma^\alpha$  e  $p^\mu p_\mu = \gamma^\alpha \gamma^\beta p_\alpha p_\beta$ , tal que

$$\begin{aligned} (p^0)^2 - (p^1)^2 - (p^2)^2 - (p^3)^2 &= (\gamma^0)^2 (p^0)^2 + (\gamma^1)^2 (p^1)^2 + (\gamma^2)^2 (p^2)^2 + (\gamma^3)^2 (p^3)^2 \\ &\quad + (\gamma^0 \gamma^1 + \gamma^1 \gamma^0) p_0 p_1 + (\gamma^0 \gamma^2 + \gamma^2 \gamma^0) p_0 p_2 \\ &\quad + (\gamma^0 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^0) p_0 p_3 + (\gamma^1 \gamma^2 + \gamma^2 \gamma^1) p_1 p_2 \\ &\quad + (\gamma^1 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^1) p_1 p_3 + (\gamma^2 \gamma^3 + \gamma^3 \gamma^2) p_2 p_3. \end{aligned}$$

A princípio pode-se fazer  $\gamma^0 = 1$  e  $\gamma^1 = \gamma^2 = \gamma^3 = i$ , pois os quatros primeiros termos do lado direito se tornam os do lado esquerdo, mas os termos cruzados não desaparecem, dessa forma a igualdade não é válida. Dirac propôs que os  $\gamma$ 's não fossem números, mas matrizes que satisfaçam as seguintes relações

$$\begin{aligned} (\gamma^0)^2 &= \mathbf{1}, \quad (\gamma^1)^2 = (\gamma^2)^2 = (\gamma^3)^2 = -\mathbf{1}, \\ \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu &= 0, \quad \text{para } \mu \neq \nu. \end{aligned}$$

De forma compacta,

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu},$$

onde o bracket denota uma relação de anticomutação e  $g^{\mu\nu}$  é a métrica de Minkowski. Para obter a equação de Dirac, toma-se um dos termos do lado direito de (5.4) que satisfaça (5.1), tal que

$$\gamma^\mu p_\mu - mc = 0 \tag{5.5}$$

usando-se (5.2) e aplicando o resultado em uma spinor  $\psi$ , obtém-se a equação de Dirac:

$$i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu \psi - mc\psi = 0, \tag{5.6}$$

onde  $\mu = 0, 1, 2, 3$ . Também pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \left[ i\hbar \left( \frac{\beta}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) - mc\mathbf{1} \right] \psi &= 0, \\ i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -i\hbar \sum_{i=1}^3 \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + \beta mc\psi, \end{aligned} \tag{5.7}$$

onde  $\gamma^0 = \beta$  e  $\gamma^i = \beta\alpha_i$ . Ao usar a relação energia-momento para achar a equação de Dirac, cada componente da solução dessa equação deve satisfazer a equação de Klein-Gordon, dada por:

$$-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \nabla^2 \psi = \left( \frac{mc}{\hbar} \right)^2 \psi. \quad (5.8)$$

Da equação de Dirac (5.7) toma-se sua derivada segunda em relação ao tempo, que é dada por:

$$-\hbar \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\hbar c^2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^i \partial x^j} - i\hbar mc^3 \sum_{i=1}^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + \beta^2 m^2 c^4 \psi,$$

comparando-a a (5.8), as matrizes  $\alpha_i$  e  $\beta$  devem satisfazer as relações (5.9) para que as componentes do spinor  $\psi$  sejam soluções da equação de Klein-Gordon

$$\begin{aligned} \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i &= 2\delta_{ij} \mathbf{1}, \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i &= 0, \\ \alpha_i^2 &= \beta^2 = \mathbf{1}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

A menor ordem das matrizes  $\alpha_i$  e  $\beta$  na qual as relações (5.9) sejam satisfeitas é se elas forem de ordem 4. Essas matrizes são dadas por:

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix},$$

onde  $\sigma_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) são as matrizes de Pauli e  $\mathbf{1}$  a matriz identidade. De forma explicita as matrizes de Dirac são:

$$\beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

$$\alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

então o spinor de Dirac é

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Próximo passo é construir uma densidade de corrente que satisfaça a equação de continuidade, de modo que se possa esperar uma lei de conservação. Usando a Eq.(5.7) e multiplicando o seu lado esquerdo por  $\psi^\dagger$

$$i\hbar\psi^\dagger \frac{1}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar \sum_{i=1}^3 \psi^\dagger \alpha_i \frac{\partial \psi}{\partial x^i} + mc\psi^\dagger \beta \psi, \quad (5.13)$$

e tomando

$$-i\hbar \frac{1}{c} \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial t} \psi = i\hbar \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^i} \alpha_i^\dagger \psi + mc\psi^\dagger \beta^\dagger \psi, \quad (5.14)$$

onde  $\alpha_i^\dagger = \alpha_i$  e  $\beta^\dagger = \beta$ . Subtraindo-as, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) = - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^i} (c\psi^\dagger \alpha_i \psi), \quad (5.15)$$

que tem a forma da equação da continuidade

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (5.16)$$

onde

$$\rho = \psi^\dagger \psi = \sum_{i=1}^4 \psi_i^\dagger \psi_i, \quad \mathbf{j} = c\psi^\dagger \boldsymbol{\alpha} \psi. \quad (5.17)$$

De (5.16) a lei de conservação segue imediatamente

$$\int \int \int_V \frac{\partial(\psi^\dagger \psi)}{\partial t} dV = - \int \int \int_V (\nabla \cdot \mathbf{j}) dV = - \int \int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (5.18)$$

$$\int \int \int_V \rho dV = \text{Constante}, \quad (5.19)$$

onde  $V$  é um certo volume, no qual está contida uma densidade de corrente volumétrica, de modo que na superfície não há corrente. Desde de que  $\rho$  é positivo por definição devido lei de conservação (5.16),  $\rho$  para a equação de Dirac pode ser interpretado como uma densidade de probabilidade, contrastando com a densidade de probabilidade obtida da equação de Klein-Gordon, que em um tempo  $t$  ambos  $\psi$  e  $\partial\psi/\partial t$  devem ter valores arbitrários, de modo que há a possibilidade da densidade ser negativa, contrariando a definição.

A equação de Dirac deve ser invariante com respeito a transformação de Lorentz, ou

seja, para um  $\psi$  no referencial A e um  $\psi'$  em A', ambas devem satisfazer a equação de Dirac, que tem a mesma forma nos dois sistemas. Para mais detalhes veja [20] [21] [22].

### 5.1.2 Solução para equação de Dirac

Considera-se soluções para a equação de Dirac do tipo onda plana

$$\psi(r, t) = u(p)e^{-(i/\hbar)\mathbf{P} \cdot \mathbf{r}}. \quad (5.20)$$

Espera-se encontrar um spinor  $u(p)$  tal que  $\psi$  satisfaça a equação de Dirac (5.6), então

$$\partial_\mu \psi = -\frac{i}{\hbar} p_\mu e^{-(i/\hbar)\mathbf{P} \cdot \mathbf{r}},$$

de modo que

$$\begin{aligned} \gamma^\mu p_\mu e^{-(i/\hbar)\mathbf{P} \cdot \mathbf{r}} - mc u e^{-(i/\hbar)\mathbf{P} \cdot \mathbf{r}} &= 0 \\ \gamma^\mu p_\mu u - mc u &= 0, \end{aligned} \quad (5.21)$$

que nada mais é que a equação de Dirac no espaço dos momentos. Seja

$$\gamma^\mu p_\mu = \gamma^0 p_0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} E/c & -\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -E/c \end{pmatrix}$$

tal que

$$\begin{aligned} (\gamma^\mu p_\mu - mc)u &= \begin{pmatrix} (\frac{E}{c} - mc) & -\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} & (-\frac{E}{c} - mc) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix}, \quad u = \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} (\frac{E}{c} - mc)u_A - \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} u_B \\ \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} u_A + (-\frac{E}{c} - mc)u_B \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ u_A &= \frac{c}{E - mc^2} (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) u_B, \quad u_B = \frac{c}{E + mc^2} (\mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma}) u_A. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Considera-se uma solução na qual  $u_A = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , e usando-a para obter  $u_B$  na equação do lado direito de (5.22), obtém-se

$$u_B = \frac{c}{E + mc^2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{c}{E + mc^2} \begin{pmatrix} p_z \\ p_x + ip_y \end{pmatrix},$$

de modo que

$$u = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{cp_z}{E+mc^2} \\ \frac{c(p_x+ip_y)}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \quad (5.23)$$

e depois tomando  $u_A = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  na mesma equação do lado direito de (5.22)

$$u_B = \frac{c}{E+mc^2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{c}{E+mc^2} \begin{pmatrix} p_x + ip_y \\ -p_z \end{pmatrix},$$

de modo que

$$u = C \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(p_x-ip_y)}{E+mc^2} \\ \frac{-cp_z}{E+mc^2} \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

onde  $C$  é uma constante de normalização. Ambas as soluções são validas para  $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ , caso contrário quando  $p \rightarrow 0$  as soluções não seriam definidas.

Fazendo as mesmas considerações anteriores para  $u_B$  na equação do lado esquerdo de (5.22), obtém-se

$$u_A = \frac{c}{E-mc^2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{c}{E-mc^2} \begin{pmatrix} p_z \\ p_x + ip_y \end{pmatrix}$$

$$u = C \begin{pmatrix} \frac{cp_z}{E-mc^2} \\ \frac{c(p_x+ip_y)}{E-mc^2} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.25)$$

e

$$u_A = \frac{c}{E-mc^2} \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{c}{E-mc^2} \begin{pmatrix} p_x + ip_y \\ -p_z \end{pmatrix}$$

$$u = C \begin{pmatrix} \frac{c(p_x-ip_y)}{E-mc^2} \\ \frac{-cp_z}{E-mc^2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$



Essas soluções só são validas para  $E = -\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ , pelo mesmo argumento usado anteriormente. A constante de normalização é dada por

$$u^\dagger u = 1 \implies C = \sqrt{\frac{E + m}{2m}} \quad (5.27)$$

As soluções para a energia positiva (5.23) e (5.24) representam elétrons com spin up e spin down respectivamente, (5.25) e (5.26) representam soluções para pósitrons com spin up e spin down respectivamente.

# REFERÊNCIAS

- [1] Jeroen W. G. Wilder, Liesbeth C. Venema, Andrew G. Rinzler, Richard E. Smalley, Cees Dekker, *Electronic structure of atomically resolved carbon nanotubes*, Nature 391, 59-62, (1998).
- [2] Teri Wang Odom, Jin-Lin Huang, Philip Kim, Charles M. Lieber, *atomic structure and electronic properties of single-walled carbon nanotubes* Nature 391, 62-64, (1998).
- [3] P. R. Wallace, *the Band theory of Graphite*, Phys. Rev. 71, 622-634 (1947).
- [4] J. W. McClure, *Diamagnetism of Graphite*, Phys. Rev. 104, 666-671 (1956).
- [5] J. C. Slonczewski, P. R. Weiss, *Band structure of graphite*, Phys. Rev. 109, 272-279 (1958).
- [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I.V. Grigorieva, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science 306, 666-669 (2004).
- [7] David Cohen-Tanugi, Jeffrey C. Grossman, *Water Desalination across Nanoporous Graphene*, Nano Lett. 12(7), 3602-3608 (2012).
- [8] Anna Yu. Romanchuk, Alexander S. Slesarev, Stepan N. Kalmykov, Dmitry V. Kosynkin, James M. Tour, *Graphene oxide for effective radionuclide removal*, Phys. Chem. Chem. Phys. 15, 2321-2327 (2013).
- [9] Meryl D. Stoller, Sungjin Park, Yanwu Zhu, Jinho An, Rodney S. Ruoff, *Graphene-Based Ultracapacitors*, Nano Lett. 8, 3498-3502, (2008).
- [10] Yue Hu, Yang Zhao, Gewu Lu, Nan Chen, Zhipan Zhang, Hui Li, Huibo Shao, Liangti Qu, *Graphene quantum dots-carbon nanotube hybrid arrays for supercapacitors*, Nanotechnology 24, 195401 (2013).
- [11] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, *Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene*, Nature Materials 6, 652-655, (2007).
- [12] Xiang Zhang, *Graphene optical modulators could lead to ultrafast communications*, <http://newscenter.berkeley.edu/tag/graphene/> (2011).
- [13] Hyeun Joong Yoon, Tae Hyun Kim, Zhuo Zhang, Ebrahim Azizi, Trinh M. Pham, Costanza Paoletti, Jules Lin, Nithya Ramnath, Max S. Wicha, Daniel F. Hayes, Diane M. Simeone, Sunitha Nagraath, *Sensitive capture of circulating tumour cells by functionalized graphene oxide nanosheets*, Nature Nanotechnology 8, 735-741 (2013).

- [14] Manu S. Mannoor, Hu Tao, Jefferson D. Clayton, Amartya Sengupta, David L. Kaplan, Rajesh R. Naik, Naveen Verma, Fiorenzo G. Omenetto, Michael C. McAlpine, *Graphene-based wireless bacteria detection on tooth enamel*, Nature Communications (2012).
- [15] M. A. Rafiee, J. Rafiee, Z. Z. Yu, N. Koratkar, *Buckling resistant graphene nanocomposites*, Appl. Phys. Lett. 95, 223103, (2009).
- [16] Mohammad A. Rafiee, Javad Rafiee, Zhou Wang, Huaihe Song, Zhong-Zhen Yu, Nikhil Koratkar, *Enhanced Mechanical Properties of Nanocomposites at Low Graphene Content*, ACS Nano 3, 3884–389, (2009).
- [17] Mohammad A. Rafiee, Javad Rafiee, Iti Srivastava, Zhou Wang, Huaihe Song, Zhong-Zhen Yu, Nikhil Koratkar, *Fracture and Fatigue in Graphene Nanocomposites* small 6, 179–183, (2010).
- [18] O. Klein, Z. Phys. 53, 157 (1929).
- [19] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene*, Nature Physics 2, 620-625 (2006).
- [20] A. H. Castro neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. 81, 1 (2009).
- [21] Andrey Chaves, *Tese: Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores*, Universidade Federal do Ceará, University of Antwerp (2010).
- [22] W. Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics*, Springer-Verlag (1997).
- [23] Dirac, P, A, M, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford at the Clarndon Press (1958).
- [24] Bipin R. Desai, *Quantum Mechanics with Basic field Theory*, Cambridge University press (2010).
- [25] Márcio Dias Lima, *NANOTUBOS DE CARBONO OBTIDOS NO LACER POR DEPOSIÇÃO QUÍMICA DE VAPOR CATALISADA*, <http://www.ufrgs.br/lacer/gmn/nanotubosbr.htm>.
- [26] *Nanotubo de carbono*, [http://pt.wikipedia.org/wiki/Nanotubo de carbono](http://pt.wikipedia.org/wiki/Nanotubo_de_carbono).
- [27] Denille Brito de Lima, *VARIAÇÕES DO GRAFENO: UMA ABORDAGEM AB-INITIO DE NOVAS ESTRUTURAS BIDIMENSIONAIS*, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, (2012).