



Universidade Federal do Ceará  
Centro de Ciências  
Departamento de Física

Efeitos de campo magnético dependente da posição em  
monocamadas e bicamadas de grafeno

Iolanda Mariano Tavares

Fortaleza - CE  
2014

**Iolanda Mariano Tavares**

**Efeitos de campo magnético dependente da posição em monocamadas e bicamadas de grafeno**

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção de título de Mestre em Física.

Orientador  
Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

**Fortaleza - CE**  
**2014**

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

- 
- T23e      Tavares, Iolanda Mariano  
            Efeitos de campo magnético dependente da posição em monocamadas e bicamadas de grafeno  
            / Iolanda Mariano Tavares. – Fortaleza, 2014.  
            60 f.: il. color. enc.; 30 cm.
- Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências,  
            Departamento de Física, Programa de Pós-Graduação em Física, Mestrado Acadêmico em Física,  
            Fortaleza, 2014.  
            Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.  
            Área de concentração: Física da Matéria Condensada.
1. Grafeno.    2. Níveis de Landau.    3. Estrutura eletrônica do grafeno.    I. Costa Filho,  
            Raimundo Nogueira da.    II. Título.

IOLANDA MARIANO TAVARES

EFEITOS DE CAMPO MAGNÉTICO DEPENDENTE DA POSIÇÃO EM  
MONOCAMADAS E BICAMADAS DE GRAFENO

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

Aprovada em 25 / 02 / 2014 .

BANCA EXAMINADORA



---

Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho (Orientador)

Universidade Federal do Ceará (UFC)



---

Dr. Andrey Chaves

Universidade Federal do Ceará (UFC)



---

Dr.ª Silvia Helena Roberto de Sena

UNILAB

A meus pais, minha querida irmã  
e amigos.

## ***AGRADECIMENTOS***

São inúmeras pessoas às quais eu sou imensamente grata, mas, primeiramente, agradeço a Deus por tê-las colocado no meu caminho, me proporcionando uma ótima experiência de vida. A começar pela minha família, minha mãe Ivani Mariano, meu pai Ricardo Tavares e minha doce irmã Iris, a realização deste trabalho só foi possível com o apoio constante deles. Devo muito à criação que tive dos meus pais, com certeza são as maiores referências que eu busco seguir. Sou muito grata pelo carinho e atenção que me dedicam, espero sempre corresponder à altura.

Ao Professor Raimundo Nogueira, manifesto minha admiração e respeito pela orientação que recebi na formulação deste trabalho, que contribuiu para o meu amadurecimento enquanto pessoa e pesquisadora. Seu profissionalismo e dedicação são referências que irei levar ao longo da minha carreira acadêmica.

Sou grata a todos professores que tive na Universidade Regional do Cariri - URCA, que fizeram crescer em mim a sede por conhecimento e me proporcionaram o ingresso no curso de mestrado, com destaque para os professores Alexandre Magno - meu primeiro orientador de iniciação científica - Francisco Augusto, Eduardo Souza e João Hermínio (UFCA), pela enorme ajuda durante a seleção do mestrado. Também aos professores da pós-graduação da Universidade Federal do Ceará - UFC, meu muito obrigada.

Agradeço aos meus amigos de longa data, da época de graduação, em especial a Ana Izabela pelo incentivo e excelentes conversas. Também aos amigos que fiz durante o mestrado, meus colegas de apartamento José Ilhano e Damiana Vieira, que amenizaram a saudade que senti estando fisicamente longe da minha família durante esses últimos dois anos. Dos amigos mais recentes, tenho muito a agradecer ao Marcus Vinícius, sem o qual o processo de composição deste trabalho seria muito mais difícil, nunca vou esquecer seu apoio emocional e intelectual durante os momentos bons e ruins.

Por fim, mas não menos importante, registro meu agradecimento à coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física da UFC. E ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro.

Muito obrigada a todos.

"[...] O que quero dizer é que não há somente a beleza nessa dimensão, em um centímetro; existe beleza também nas menores dimensões, na estrutura interna, e no seu processo".

(Richard Feynman - Ode a uma flor).

"[...] Em torno de teus passos, a paisagem que te abriga será sempre em tua apreciação aquilo que pensas dela, porque com a mesma medida que aplicares à Natureza, obra viva de Deus, a Natureza igualmente te medirá".

(Emmanuel - Contempla mais longe).

## ***RESUMO***

Nos últimos anos o grafeno tem se mostrado um interessante objeto de investigação para cientistas ao redor do mundo, tanto pelas suas características peculiares bem como suas propriedades eletrônicas. Muitas pesquisas já foram realizadas com o intuito de desvendar esse ainda recém descoberto alótropo do carbono, já tendo rendido um prêmio Nobel em 2010. Aqui serão abordadas algumas dessas características do grafeno focando em suas propriedades estruturais de rede e também suas propriedades eletrônicas. Será estudada a interação dos férmions de Dirac, partículas relativísticas sem massa, sob a ação de um campo magnético externo em uma e duas camadas de grafeno, com base na teoria de Dirac para baixas energias e no modelo de aproximação *tight – binding*, comprovando equivalência entre os dois modelos. Escrevendo o Hamiltoniano para uma folha de grafeno configura-se um problema de autovalor, sendo possível obter a dispersão das bandas de energias do material e os chamados níveis de Landau, estes últimos originados pela presença de um campo magnético perpendicular ao plano de interação. Em seguida esses mesmos passos serão realizados para o sistema de bicamada. Em adição, serão apresentados aqui os efeitos de um campo magnético dependente da posição, a fim de serem escritos os níveis de Landau. Este trabalho irá demonstrar assim, que um dos fatores que fazem o grafeno tão atrativo para pesquisa é justamente a interação de partículas neste material.

**Palavras-chave:** grafeno, níveis de Landau, estrutura eletrônica do grafeno.

## *ABSTRACT*

In the past few years graphene has been shown to be an interesting object of investigation to scientists around the world, due to its peculiar characteristics as well as its electronics properties. Much research have been done in order to unveil this still newly discovered carbon allotrope, having already rendered a Nobel prize in 2010. Here it'll be discussed some of these graphene characteristics focusing on the structural lattice properties and also on the electronics properties. The interaction of Dirac fermions, massless relativistic particles, under an external homogeneous magnetic field in one and two layers of graphene will be studied, based on the low-energy Dirac theory and the tight-binding approximation model, stating an equivalence between these two models. By writing the Hamiltonian for a single sheet of graphene, an eigenvalue problem is set up, and the energy band dispersion of the material and the so called Landau levels are found, the latter, originated by the presence of a magnetic field perpendicular to the interaction plane. Next, these same steps were performed to the bilayer sistem. In addition, the effects of a position dependent magnetic field will be presented here, so that the Landau levels can be written. This work will demonstrate that one of the factors that make graphene so attractive to research is precisely the particle interaction in this material.

**Keywords:** graphene, Landau levels, electronic structure of graphene.

# Lista de Figuras

1.1	O grafeno (a) pode ser empilhado formando 3D-grafite (b), pode ser enrolado formando 1D-nanotubo (c) ou envolto, formando 0D-fulereno (d) [1]. . . . .	2
1.2	(a)Esquema do efeito Hall quântico em um semiconductor bidimensional convencional, (b) na bicamada de grafeno e (c) na monocamada de grafeno. Os picos laranjas (elétrons) e azuis (buracos) mostram as sequências de níveis de Landau em função da densidade de portadores $n$ e do campo magnético $B$ . Em vermelho estão as medidas de $\sigma_{xy}$ . A constante $e$ representa a carga do elétron, $h$ é a constante de Planck e $g$ , a degenerescência de vale e de spin [6]. . . . .	4
1.3	Fotografia de uma zona com uma e duas camadas de grafeno utilizadas num ensaio de transmitância onde se verifica a absorção de 2,3% da luz [12].	4
1.4	Esquema de um dispositivo de grafeno na forma de uma ponte Hall construído em um substrato $Si$ coberto por uma camada de $SiO_2$ [18]. . . . .	6
1.5	(a) Arranjo hexagonal de átomos de carbono que formam uma folha de grafeno. Esta estrutura é uma rede de Bravais com dois átomos de carbono por célula unitária (em cinza), e seus vetores primitivos são $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ . Em (b) está representada a rede recíproca da rede mostrada em (a). $\mathbf{A}_1$ e $\mathbf{A}_2$ são os vetores primitivos da rede recíproca. A área em cinza é a primeira zona de Brillouin, os pontos K e K' são os pontos onde as bandas de valência e de condução se tocam [19]. . . . .	9
1.6	Formação dos orbitais $sp^2$ , através da combinação do orbital s com orbitais $p_x$ e $p_y$ , enquanto o orbital $p_z$ permanece invariante [20]. . . . .	9
1.7	Estrutura de bandas de energias para o grafeno [22]. . . . .	10
2.1	Campo magnético dependente da posição referente a Eq. 2.36. . . . .	19
2.2	Campo magnético dependente da posição referente a Eq. 2.43. . . . .	20

2.3	Níveis de Landau $E_n$ em função do campo magnético $\mathbf{B}$ , as curvas representam a variação $n=0, \dots, 4$ . Estes são resultados para a Eq.2.20. . . . .	21
2.4	Níveis de Landau $E_n$ em função do campo magnético $B_0$ , as curvas representam a variação $n=0, \dots, 4$ . Estes são resultados para a Eq.2.42. . . . .	22
3.1	Estrutura cristalina do grafeno com duas subredes A e B. Os vetores primitivos que formam a rede são $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ . Enquanto $\mathbf{R}_i$ (com $i=1,2,3$ ) localizam os vizinhos mais próximos [23]. . . . .	24
3.2	Dispersão das bandas de energias obtida a partir de Eq. 3.12. . . . .	27
3.3	Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético uniforme $B = B_0 \hat{z}$ . Onde usamos $B_0 = 0, 5\pi T$ . . . . .	28
3.4	Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético uniforme $B = B_0 \hat{z}$ . Aqui temos $k_x = 0$ . . . . .	28
3.5	Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético periódico $B = B_0 \cos(k_B x) \hat{z}$ . Aqui usamos $k_x = 0$ , e $B_0 = \pi T$ . . . . .	29
3.6	Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético periódico $B = B_0 \cos(k_B x) \hat{z}$ . Aqui usamos $k_y = 0$ , e $B_0 = 1, 5\pi T$ . . . . .	29
4.1	Ilustração esquemática da estrutura de duas folhas de grafeno. O salto direto entre os pontos vermelhos da folha de baixo e de cima é representado pelo parâmetro $\gamma_1$ . O salto de baixa energia entre os pontos azuis está representado pelo parâmetro $\gamma_3$ . Representando o salto entre os pontos vermelhos e os azuis tem-se $\gamma_4$ [27]. . . . .	31
4.2	Visão de cima da estrutura cristalina de duas folhas de grafeno. Átomos $A_1$ e $B_1$ da folha de baixo são mostrados em preto e azul. Na folha de cima $A_2$ e $B_2$ são os pontos azuis e vermelhos, respectivamente. A parte sombreada indica a célula unitária convencional. . . . .	32
4.3	Bandas de baixa energia da bicamada de grafeno crescendo a partir do orbital $2p_z$ plotados ao longo do eixo $k_x$ no espaço recíproco, intersectando os pontos $K'$ ( $K_-$ ) e $K$ ( $K_+$ ), $\Gamma$ corresponde a zona de Brillouin. Em destaque temos as bandas na proximidade do ponto $K$ [26]. . . . .	34
A.1	Os vetores primitivos $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ , o vetor espacial $\vec{x}$ conectando os centros de dois hexágonos e os vetores unitários $\vec{e}_A$ e $\vec{e}_B$ distinguindo a subrede A (azul) e B (vermelho). . . . .	43

# Lista de Tabelas

1.1	Condutividades térmicas do grafeno, nanotubo de carbono, diamante e cobre.	5
4.2	Valores dos parâmetros tight-binding determinados experimentalmente para o grafite e bicamada de grafeno. . . . .	33
4.3	Energia de formação para os diversos empilhamentos da bicamada de grafeno e para o grafite. Adaptada de [32]. . . . .	39

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>v</b>
<b>Resumo</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>viii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xi</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Grafeno: aspectos gerais . . . . .	2
1.2 Dispositivos de grafeno e suas aplicações . . . . .	5
1.3 Apresentação da teoria de Dirac para baixas energias . . . . .	7
1.3.1 Propriedades estruturais da rede . . . . .	8
1.4 Delineamento . . . . .	12
<b>2 Monocamada de grafeno sob efeito de um campo magnético</b>	<b>14</b>
2.1 Modelo contínuo . . . . .	14
2.1.1 Calibre de Landau . . . . .	16
2.1.2 Calibre simétrico . . . . .	17
2.1.3 Campo dependente da posição . . . . .	18
2.1.4 Resultados . . . . .	21
<b>3 Aproximação tight-binding</b>	<b>23</b>
3.1 Considerações iniciais . . . . .	23
3.2 Modelo teórico . . . . .	24
3.2.1 Resultados . . . . .	27

---

<b>4</b>	<b>Bicamada de grafeno</b>	<b>30</b>
4.1	Considerações gerais . . . . .	30
4.2	Modelo tight-binding para bicamada . . . . .	31
4.2.1	Empilhamento AA da bicamada . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	<b>40</b>
	<b>Apêndice - Coordenadas dos pontos de Dirac</b>	<b>42</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>46</b>

# 1. Introdução

Um dos elementos mais abundantes no universo é o átomo de carbono  $C$ , é também encontrado em todas as formas conhecidas de vida. Considerando sistemas à base de carbono encontramos várias estruturas que ligam seus átomos de carbono de diferentes maneiras, chamamos elas de alótropos. Os alótropos do carbono relativamente conhecidos são diamante e grafite. Ambos são formados por átomos de carbono mas têm propriedades diferentes. O diamante é um material dielétrico extremamente duro, consiste de quatro orbitais híbridos  $sp^3$ , isto é, todos os quatro elétrons fora da camada de valência permitem ligações covalentes a outros quatro átomos de carbono. Já o grafite é um dos materiais mais sofisticados e cristaliza-se em um sistema hexagonal, consiste de três orbitais híbridos  $sp^2$  e é um condutor elétrico. Podemos notar que ambos os alótropos têm propriedades quase opostas.

Aqui, iremos considerar o grafite em mais detalhe. Cada átomo de carbono desse alótropo usa apenas três dos quatro elétrons fora da camada de valência em ligações covalentes a três outros átomos de carbono. Portanto, eles se arranjam num plano, formando uma camada fortemente ligada com estrutura hexagonal. Ao contrário do diamante nós vemos que cada átomo de carbono no grafite tem um elétron deslocado. Este é livre para se mover através do plano. Por essa razão o grafite conduz eletricidade apenas ao longo de átomos de carbono no plano.

É possível entender a ligação entre o grafite e o grafeno tomando conhecimento de alguns fatos históricos. Em 1959, o químico Benjamin C. Brodie preparou um óxido de grafite tratando o material com fortes oxidantes até que as distâncias das várias camadas se tornassem muito mais largas e irregulares. Em soluções básicas, o grafite finalmente se dispersou levando a folhas monomoleculares, conhecidas como óxido de grafeno. Em 1962, Hanns-Peter Boehm formulou a expressão *grafeno*, uma camada monomolecular de átomos de carbono arrançados em uma rede planar hexagonal. Na Figura 1.1 podemos ver que o grafeno pode ser entendido como um material bidimensional capaz de formar outros materiais de carbono em todas as outras dimensões.

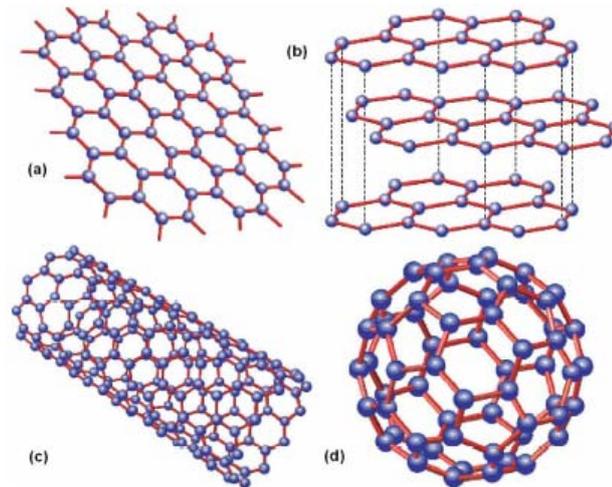


Figura 1.1: O grafeno (a) pode ser empilhado formando 3D-grafite (b), pode ser enrolado formando 1D-nanotubo (c) ou envolto, formando 0D-fulereno (d) [1].

Em resumo, o grafeno é mais duro que o diamante, porém extremamente flexível e um condutor de eletricidade muito melhor que outros materiais. Abaixo continuaremos a falar das interessantes características do grafeno, com destaque para suas propriedades eletrônicas.

## 1.1 Grafeno: aspectos gerais

O grafeno é uma forma alotrópica do carbono constituída de uma monocamada de átomos do elemento ligados em um arranjo hexagonal. De fato, o grafeno nada mais é do que uma das inúmeras camadas que constituem a grafite. Um cristal de grafite com  $1\text{mm}$  de espessura consiste de três milhões de camadas de grafeno, sobrepostas, unidas por interações intermoleculares. O Prêmio Nobel de Física em 2010 foi dado aos cientistas Andre Geim e Konstantin Novoselov<sup>1</sup>, pelo sucesso obtido na produção, isolamento, identificação e caracterização do grafeno.

No seu artigo<sup>2</sup>, os dois revelaram que tal camada podia ser isolada em quantidade suficiente para verificar suas propriedades e era estável. Em uma das etapas do trabalho eles utilizaram fita adesiva para remover camadas de grafeno de cristais de grafite. Segundo o comunicado da Academia Real Sueca de Ciências, que concedeu o prêmio, o grafeno é "o primeiro material cristalino verdadeiramente bidimensional e é representativo de toda uma classe de materias 2D, que inclui, por exemplo, monocamadas de nitreto de boro ( $BN$ ) e de dissulfeto de molibdênio ( $MoS_2$ ), ambos produzidos após 2004".

<sup>1</sup>Nascidos na Rússia, trabalham na Universidade de Manchester, Inglaterra.

<sup>2</sup>Revista Science, 2004. Ver referência [2].

O material é praticamente transparente, deixando passar 97,7% da luz visível. É mais resistente que uma amostra de aço de mesma dimensão e estica até 20% sem romper. Uma rede hipotética de  $1m^2$  de grafeno teria apenas  $0,77mg$  e, estendida, suportaria um objeto de  $4kg$ . O grafeno conduz calor e corrente elétrica melhor que o cobre, o que pode ser atribuído aos elétrons deslocalizados.

A conquista experimental do grupo de Geim motivou outras importantes pesquisas, tanto experimentais como teóricas, em vista das interessantes propriedades eletrônicas. Os resultados teóricos mostrados por Wallace [3] previam o grafeno como um importante cenário de discussão não só para um revolucionário desenvolvimento tecnológico, mas também para o estudo de situações físicas interessantes como as achadas na eletrodinâmica quântica (EDQ). De fato, Wallace, num estudo feito para as propriedades eletrônicas do grafite [3], mostrou como um comportamento semimetálico não usual era visto na estrutura eletrônica do grafeno. A particular estrutura de bandas do grafeno mostrava além, para baixas energias, uma dispersão da energia que era linear no vetor de onda, diferente do usualmente encontrado para semicondutores. Esta particular relação de dispersão, considerada um dos aspectos mais interessantes no grafeno, indica que para baixas energias as excitações são do tipo encontrado para férmions de Dirac na EDQ, diferenciada unicamente pela velocidade das quasipartículas, que no caso do grafeno é igual à velocidade de Fermi  $v_F = c/300$  ao invés da velocidade da luz  $c$ .

A história do estudo de transporte elétrico no grafeno começou nos primeiros trabalhos que apresentaram medidas do efeito Hall quântico anômalo e de oscilações de Shubnikov-de Haas em amostras de monocamada [4, 5] e de bicamada [6] de grafeno. Um fato interessante é que, sob ação de campos magnéticos muito elevados ( $B \approx 30T$ ), foi possível observar o efeito Hall quântico em amostras de grafeno à temperatura ambiente [7]. Campos magnéticos elevados também foram usados para levantar as degenerescências de spin e de vale dos primeiros níveis de Landau em medidas de efeito Hall quântico em monocamadas [8, 9] e bicamadas [10] de grafeno. A ação de *gates* laterais em amostras no regime Hall quântico foi estudada por Molitor et al. [11].

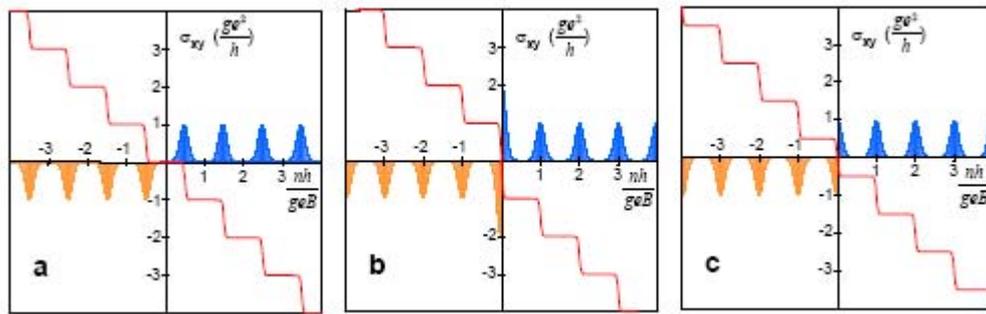


Figura 1.2: (a) Esquema do efeito Hall quântico em um semiconductor bidimensional convencional, (b) na bicamada de grafeno e (c) na monocamada de grafeno. Os picos laranjas (elétrons) e azuis (buracos) mostram as sequências de níveis de Landau em função da densidade de portadores  $n$  e do campo magnético  $B$ . Em vermelho estão as medidas de  $\sigma_{xy}$ . A constante  $e$  representa a carga do elétron,  $h$  é a constante de Planck e  $g$ , a degenerescência de vale e de spin [6].

Como citamos, o grafeno apresenta ainda propriedades ópticas interessantes, devido a sua absorção de luz. Estudos feitos através de ensaios de reflectância e transmitância [12] comprovam que o aumento da absorção da luz no grafeno se dá proporcionalmente com o número de camadas deste. Isso potencializa sua utilização em aplicações eletro-ópticas.

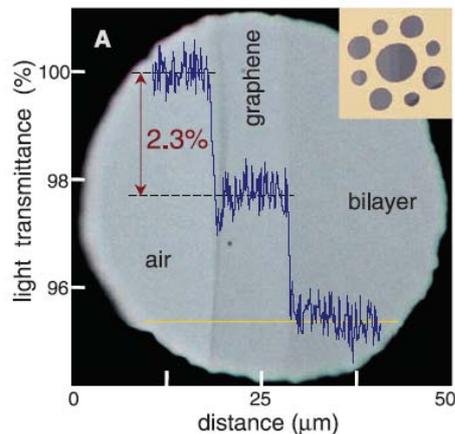


Figura 1.3: Fotografia de uma zona com uma e duas camadas de grafeno utilizadas num ensaio de transmitância onde se verifica a absorção de 2,3% da luz [12].

A condutividade térmica no grafeno é denominada pelas vibrações na rede, a condução térmica é efetuada por fônons<sup>3</sup>. Estudos realizados com nanotubos de carbono

<sup>3</sup>Na física de matéria condensada é uma quasipartícula que designa um quantum de vibração em um retículo cristalino rígido, originadas por oscilações térmicas.

demonstraram que a condutividade térmica está diretamente relacionada com o tamanho da amostra. Os valores obtidos para o grafeno [13] são extremamente elevados, ultrapassando os de diamante cvd<sup>4</sup> e ainda ligeiramente superiores aos de nanotubo de carbono, tanto para multicamada (MW) como para monocamada (SW). Na Tabela 1.1 são comparados os valores de condutividade térmica do grafeno, nanotubo de carbono (CNT), diamante e cobre à temperatura ambiente:

Material	K(W/mK) [14]
Grafeno	4840-5300
MW - CNT	>3000
SW - CNT	3500
Diamante CVD	2000
Cobre	400

Tabela 1.1: Condutividades térmicas do grafeno, nanotubo de carbono, diamante e cobre.

Muitos estudos teóricos têm sido feitos sobre nanofitas de grafeno que apontam propriedades magnéticas interessantes e alguns dados obtidos experimentalmente demonstraram que nanofitas de grafeno exibem propriedades de transporte magnético notáveis [15, 16]. Em geral, a estrutura ressonante da transmissão é significativamente mais notável para elétrons com espectro linear (Dirac) do que para os usuais elétrons com espectro parabólico.

O grafeno tem aplicações promissoras. É um condutor transparente, flexível e mecanicamente resistente, que poderia ser usado em telas ultrafinas, flexíveis e sensíveis ao toque para tv, computadores, celulares e livros digitais. Transistores de grafeno seriam mais rápidos que os de silício e *chips* com maior capacidade de processamento poderiam ser fabricados.

Por duas vezes a produção e a caracterização de um novo alótropo do carbono rendeu o Nobel. Em 1996, o prêmio de Química foi conferido a três cientistas pela descoberta e pelo estudo dos fulerenos.

A seguir falaremos mais da produção de dispositivos à base desse alótropo do carbono. Em seguida será feita uma introdução ao formalismo de Dirac para partículas relativísticas sem massa, que são os férmions, mostrando como se configura a estrutura da rede hexagonal do grafeno.

## 1.2 Dispositivos de grafeno e suas aplicações

Para investigar experimentalmente as interessantes propriedades eletrônicas do

<sup>4</sup>Do inglês: *Chemical Vapor Deposition*.

grafeno é necessário construir um dispositivo de grafeno. Em geral estes dispositivos são feitos depositando-se flocos de grafeno sobre um substrato de silício altamente dopado coberto por uma camada de espessura bem definida de óxido de silício.

A estrutura em multicamadas formada pelo silício altamente dopado, que funciona de forma semelhante a um contato metálico, o dióxido de silício, que é isolante, e o grafeno, que é um semiconductor de *gap* nulo, tem um funcionamento de efeito de campo que permite controlar a densidade de carga no grafeno através da aplicação de uma diferença de potencial entre o grafeno e o silício. Além disso, com este tipo de substrato é possível ver flocos de grafeno sobre a superfície utilizando-se apenas um microscópio óptico. Quando a camada de dióxido de silício tem espessura apropriada [17], ocorre interferência entre a luz refletida nas diferentes camadas gerando um bom contraste óptico entre as regiões com grafeno e sem grafeno na superfície.

Os dispositivos de grafeno mais básicos, que servem para medir sua resistência, são feitos utilizando técnicas de litografia, desenhando o transistor no grafeno. A princípio precisamos apenas saber que é possível contactar eletricamente o grafeno e corrobô-lo na forma de uma ponte Hall, que permite realizar medidas, na configuração de quatro terminais, da resistência do grafeno.

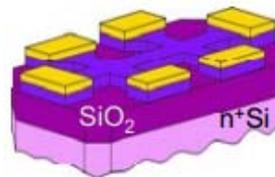


Figura 1.4: Esquema de um dispositivo de grafeno na forma de uma ponte Hall construído em um substrato *Si* coberto por uma camada de *SiO<sub>2</sub>* [18].

Nos primeiros estudos de grafeno dispositivos muito simples na forma de ponte Hall foram usados. Hoje, já foram feitos dispositivos de grafeno suspenso, em forma de nanofitas e em forma de pontos quânticos, dentre outros. Isso mostra que a pesquisa de transporte elétrico em grafeno avançou bastante e ainda apresenta várias possibilidades e rotas de investigação.

Conhecido como o "material do futuro" o grafeno não deixa de assombrar a comunidade científica e tecnológica por causa de suas incríveis propriedades e infinidade de aplicações. Acrescentado a outros compostos, como matéria-prima principal ou como componente de novos processos de laboratório e produção, o grafeno possibilitará, entre muitas outras coisas: fabricar filtros que separarão o sal da água duas ou três vezes mais rápido que as dessalinizadoras atuais, assim como obter combustíveis que permitirão que os aviões alcancem maiores velocidades, otimizando o funcionamento do motor e reduzindo

o consumo e a poluição ao meio ambiente. Jesús de la Fuente, CEO da *Graphenea*, uma das principais produtoras mundiais de grafeno laminado afirma que "o grafeno já é utilizado para fabricar eletrodos de baterias, telas táteis, células fotovoltaicas (solares), dispositivos de eletrônica digital e analógica de alta frequência, e compostos avançados para a indústria aeronáutica ou para a alta competição de vela"<sup>5</sup>.

Tal é a importância dada a este tipo de carbono, que a Comissão Europeia destinará US\$ 1,3 bilhão para apoiar nos próximos dez anos projetos europeus pioneiros para pesquisar as aplicações do grafeno. A lista de aplicações tecnológicas do grafeno, que segundo seus próprios descobridores são "tantas que não podem ser enumeradas", aumentam sem cessar, mês a mês.

Abaixo segue uma introdução à eletrodinâmica quântica do grafeno, com enfoque em suas propriedades estruturais de rede.

### 1.3 Apresentação da teoria de Dirac para baixas energias

Paul Adrien Maurice Dirac (Bristol, 8 de Agosto de 1902 - Tallahassee, 20 de Outubro de 1984) foi um físico teórico britânico. Estudou engenharia elétrica na Universidade de Bristol, completando o curso em 1921. Fez contribuições fundamentais para o desenvolvimento da Mecânica Quântica e Eletrodinâmica Quântica. Foi professor lucasiano de Matemática da Universidade de Cambridge e passou os últimos dez anos da sua vida na Florida State University. Entre outras descobertas, formulou a Equação de Dirac, que descreve o comportamento dos férmions e que o levou à previsão da existência da antimatéria.

Em sua tese, defendida em 1926, desenvolveu uma versão da mecânica quântica incorporando a mecânica matricial de Werner Heisenberg com a mecânica ondulatória de Erwin Schrödinger num único formalismo matemático. Em 1928, desenvolveu a chamada Equação de Dirac que o levou a prever a existência do pósitron, a antipartícula do elétron, que foi observado experimentalmente em 1932 por Carl David Anderson.

Na mecânica quântica, a equação de Dirac é uma equação de onda relativística que descreve com sucesso partículas elementares de spin  $-\frac{1}{2}$ , como o elétron. Anteriormente, a equação de Klein-Gordon (uma equação de segunda ordem nas derivadas temporais e espaciais) foi proposta para a mesma função, mas apresentou sérios problemas na definição de densidade de probabilidade.

Dirac tentou encontrar uma equação diferencial parcial com uma densidade de

---

<sup>5</sup>Fonte EFE - Agência EFE, disponível em <<http://tecnologia.terra.com.br/eletronicos/grafeno-de-telas-a-combustivel-veja-aplicacoes-do-material-do-futuro,fb742ca025cf310VgnVCM5000009ccceb0aRCRD.html>>.

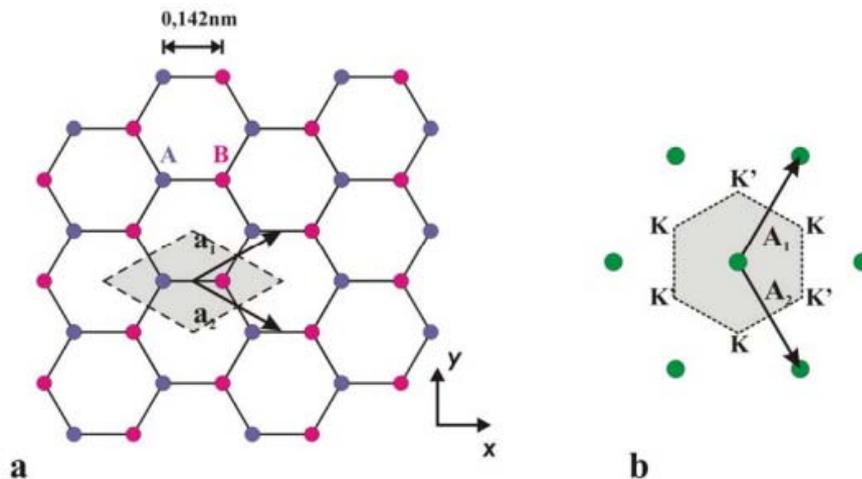
probabilidade positiva. A equação que formulou é de primeira ordem, portanto eliminou esse tipo de problema. E mostrou que o spin poderia ser deduzido facilmente da equação, ao invés de postulado. Contudo, a equação de Dirac não é perfeitamente compatível com a teoria da relatividade, pois não prevê a criação e destruição de partículas, algo que apenas uma teoria quântica de campos poderia tratar.

Paul Dirac elaborou sua equação como uma generalização relativística da equação de Schrödinger com o intuito de descrever o movimento de um elétron na mecânica quântica. Originalmente foi concebida para ser aplicada a elétrons massivos se movendo no espaço tridimensional (3D) e depois gerou uma eletrodinâmica quântica. No entanto, a equação de Dirac pode ser aplicada a outras situações além de elétrons massivos em 3D, como por exemplo em outras dimensões e outros tipos de partículas - sem massa ou sem carga. Recebeu em 1933, junto com Erwin Schrödinger, o Nobel de Física com o trabalho *Theory of Electrons and Positrons*.

Na física da matéria condensada, os férmions de Dirac (assim chamadas as partículas que obedecem a equação de Dirac), aparecem como quasipartículas em algumas estruturas de bandas a baixas energias. O exemplo mais famoso é com certeza o grafeno, mas não é o único. Como veremos mais a frente, o grafeno contém férmions de Dirac sem massa em duas dimensões.

### 1.3.1 Propriedades estruturais da rede

O grafeno é uma simples estrutura bidimensional de átomos de carbono agrupados em redes hexagonais ou tipo colméia de abelha. É vista como uma rede de Bravais através de uma rede triangular com dois átomos A e B na base como aparece ilustrado na Figura 1.5:



onde  $a \approx 1,42 \text{ \AA}$  é a distância entre átomos de carbono mais próximos. Dessa forma

Figura 1.5: (a) Arranjo hexagonal de átomos de carbono que formam uma folha de grafeno. Esta estrutura é uma rede de Bravais com dois átomos de carbono por célula unitária (em cinza), e seus vetores primitivos são  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$ . Em (b) está representada a rede recíproca da rede mostrada em (a).  $\mathbf{A}_1$  e  $\mathbf{A}_2$  são os vetores primitivos da rede recíproca. A área em cinza é a primeira zona de Brillouin, os pontos K e K' são os pontos onde as bandas de valência e de condução se tocam [19].

se definem duas subredes<sup>6</sup> A e B. As ligações dos átomos da subrede A aos da subrede B são formadas por três ligações covalentes entre orbitais  $sp^2$ , os quais são originados como consequência de uma hibridização do orbital  $s$  mais externo com os orbitais  $p_x$  e  $p_y$  segundo a estrutura eletrônica do átomo de carbono:  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Esse tipo de ligação entre orbitais  $sp^2$  no plano da camada são denominadas comumente como ligações do tipo  $\sigma$  e são responsáveis pela forte estrutura do grafeno. Outro tipo de ligação mais fraca é a denominada ligação tipo  $\pi$  que acontece entre os orbitais  $p_z$ , os quais ficam em direção perpendicular ao plano da camada.

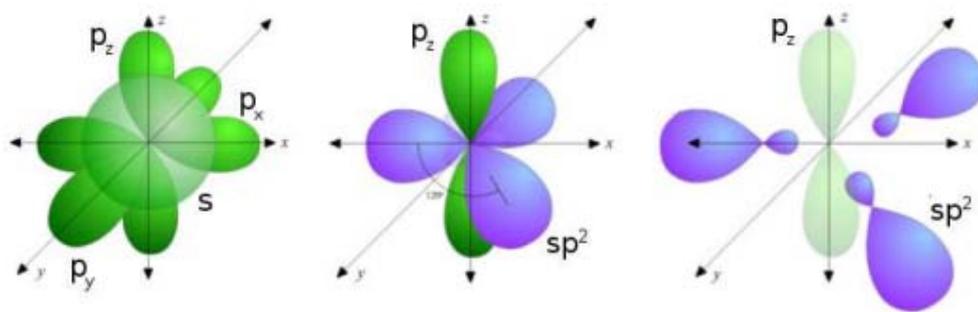


Figura 1.6: Formação dos orbitais  $sp^2$ , através da combinação do orbital  $s$  com orbitais  $p_x$  e  $p_y$ , enquanto o orbital  $p_z$  permanece invariante [20].

As ligações  $\sigma$  e  $\pi$  resultam em bandas de energias mostradas na Figura 1.7 calculadas mediante o modelo tight-binding [22]. Como podemos notar, o espectro da Figura 1.7 está composto por uma série de bandas denominadas  $\pi$ ,  $\pi^*$ ,  $\sigma$  ou  $\sigma^*$  dependendo da ligação a qual acha-se relacionada. Isto é, as bandas  $\sigma$  e  $\sigma^*$  são provenientes da ligação no plano dos orbitais  $sp^2$ , enquanto as bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  resultam da interação entre os orbitais  $p_z$ .

<sup>6</sup>As coordenadas que localizam os pontos de Dirac K e K' podem ser observadas no Apêndice do presente trabalho.

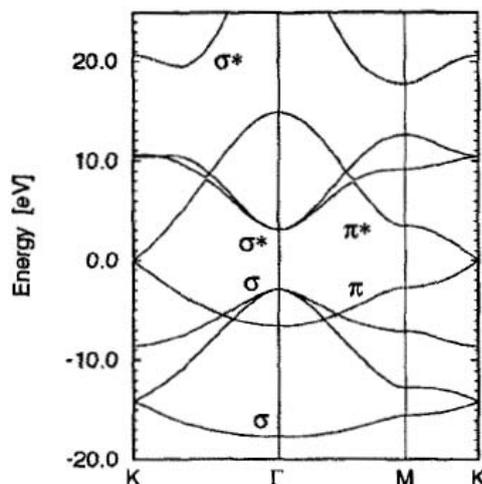


Figura 1.7: Estrutura de bandas de energias para o grafeno [22].

As características mais interessantes do grafeno são obtidas para baixas excitações perto da região dos pontos K (ou K') na primeira zona de Brillouin, considerando só a interação entre os orbitais  $p_z$ .

No grafeno existem portadores de cargas (elétrons ou buracos) que se propagam como se fossem férmions sem massa com velocidades da ordem de  $10^6$  m/s ao invés da velocidade da luz  $3 \times 10^8$  m/s. Assim, nesse sistema eles devem ser escritos pela equação de Dirac ao invés da equação de Schrödinger usualmente usada. A descrição dos portadores de carga por funções de onda com duas componentes é semelhante a usada para escrever funções de onda de spin. No entanto, as duas componentes da função de onda estão relacionadas a cada uma das subredes da estrutura do grafeno e não ao spin das partículas. Dessa forma, diz-se que os portadores de carga no grafeno tem associado a eles um pseudospin,  $\sigma$ . O pseudospin está relacionado a contribuição de cada uma das subredes para a função de onda dos portadores de carga, assim, elétrons e buracos cujos pseudospins apontam em uma mesma direção podem ser imaginados como tendo origem em uma mesma subrede. Em consequência da descrição através de uma equação como a de Dirac e do espectro de energia semelhante ao de partículas relativísticas, os portadores de carga no grafeno são chamados de férmions de Dirac sem massa ou de partículas quirais sem massa.

O espectro linear de energia do grafeno e a descrição dos portadores de carga por uma equação do tipo de Dirac levam a várias analogias entre os fenômenos de transporte no grafeno e fenômenos estudados pela eletrodinâmica quântica. Dada a equação de Dirac sem massa em 2+1 dimensões:

$$v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y)\Psi(r, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} \quad (1.1)$$

onde  $\sigma_i$ , são as matrizes de Pauli com  $i = x, y, z$ , e  $p_j$  é a componente do operador momento  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  com  $j = x, y$ . Tendo em vista estados estacionários é possível fazer a substituição  $\Psi(r, t) = \psi(r)e^{-i\epsilon t/\hbar}$ . Isso transforma a eq. de Dirac num problema de autovalor da seguinte forma:

$$v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y)\psi(r) = \epsilon\psi(r). \quad (1.2)$$

Aqui consideramos a unidade relativística  $e = 1$ . Dessa forma o Hamiltoniano que descreve os portadores de carga é do tipo de Dirac, escrito da seguinte forma:

$$H = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}. \quad (1.3)$$

Devido ao fato de  $\sigma$  ser o pseudospin da subrede, o autoestado  $|\Psi_K\rangle = (\psi_A, \psi_B)$  é chamado de pseudospinor, onde  $\psi_A$  fornece a amplitude de probabilidade de encontrar o elétron na subrede A, assim como  $\psi_B$  o faz, na subrede B. O Hamiltoniano que descreve os estados em torno dos pontos de  $K$  da zona de Brillouin é:

$$H_K = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

Diagonalizando o Hamiltoniano acima, encontramos os autovetores:

$$E = \pm \hbar v_F k, \quad (1.5)$$

e os autoestados:

$$|\Psi_K^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

com  $\theta = \arctg(\frac{k_y}{k_x})$ . Considerando os estados por volta do ponto  $K'$ , encontramos, de forma análoga:

$$H_{K'} = v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p} \\ |\Psi_{K'}^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{-i\theta} \end{pmatrix}. \quad (1.7)$$

Por fim, vemos também que a relação entre o Hamiltoniano ao redor dos pontos de Dirac se dá através da relação  $\mathbf{H}_K = \mathbf{H}_{-K}^*$ , e conseqüentemente exibem o mesmo espectro de energia.

Na seção abaixo consta a apresentação desta dissertação com uma breve descrição do será feito nos capítulos subsequentes.

## 1.4 Delineamento

Em resumo, as características peculiares e superlativas do grafeno são mostradas abaixo através de suas propriedades:

- **Propriedades mecânicas:** material mais fino possível, extremamente forte porém flexível e de baixa densidade;
- **Propriedades eletrônicas:** boa condutividade elétrica, portadores de carga sem massa efetiva, elevada mobilidade intrínseca, transporte eletrônico balístico, sensibilidade à aplicação de campos elétricos, efeito Hall quântico em temperatura ambiente;
- **Propriedades ópticas:** condutor elétrico opticamente transparente;
- **Propriedades térmicas:** elevada condutividade térmica;
- **Propriedades magnéticas:** ferromagnetismo induzido por defeitos estruturais.
- **Propriedades químicas:** alta pureza, estável em condições ambientes, quimicamente inerte, sensível à presença de moléculas adsorvidas.

A dispersão de energia incomum e sua natureza bidimensional rendem ao grafeno um lugar de destaque na física de matéria condensada. A aplicação desse material deve beneficiar a tecnologia e até mesmo a saúde, como por exemplo a fabricação de monitores cardíacos mais práticos e precisos. Diariamente estão sendo descobertas novas aplicações para as propriedades eletrônicas do grafeno, como vemos laboratórios e universidades se empenhando em descobrir como usar o grafeno para criar superbaterias, capazes de armazenar muito mais energia e recarregar em questão de minutos.

As medidas em laboratório<sup>7</sup> para o máximo de tensão que uma folha de grafeno pode sofrer antes que seus átomos se desprendam de suas ligações foi de  $42Nm^{-1}$ . Essa força intrínseca do grafeno é a maior até hoje estabelecida para qualquer tipo de material. Esse fato levou os pesquisadores a sugerirem que o grafeno seja considerado o padrão para força intrínseca da mesma forma que o diamante, o material de maior dureza conhecido, é usado como padrão de dureza.

Ao longo deste trabalho serão estudados férmions na camada de grafeno sujeitos a um campo magnético. Tomando o campo magnético perpendicular ao plano iremos variar o calibre da aplicação, um deles será o calibre de Landau, e em seguida faremos um estudo comparativo dos resultados obtidos para os níveis de energia.

---

<sup>7</sup>James Hone, Jeffrey Kysar, Changgu Lee e Xiaoding Wei realizaram o experimento, descrito no artigo do PhysicsWorld.Com, *Graphene has record-breaking strength*, disponível em <<http://physicsworld.com/cws/article/news/2008/jul/17/graphene-has-record-breaking-strength>>.

Analizaremos no segundo capítulo o modelo contínuo descrito por Dirac para uma camada de grafeno imersa em um campo magnético. Escreveremos o campo inicialmente constante,  $B = B_0$ , para obtenção dos níveis de Landau. Na subseção 2.1.3 será visto o caso em que o campo é variável, dependente da posição, em particular em função da coordenada  $x$ . Assim, ao fim do capítulo será feita uma comparação dos resultados, focando o espaçamento dos níveis de energia em cada caso.

No terceiro capítulo utilizaremos o método de aproximação tight-binding para uma camada de grafeno para obtenção da dispersão das bandas de energias e também dos níveis de Landau, considerando o campo constante e em seguida variável.

No capítulo seguinte iremos mostrar o modelo teórico para uma bicamada de grafeno. Ao fim de cada capítulo os resultados serão comentados e as conclusões serão mostradas no capítulo 5.

## 2. Monocamada de grafeno sob efeito de um campo magnético

Neste capítulo descreveremos o modelo teórico para aplicação de um campo magnético externo numa folha de grafeno. Considerando o campo perpendicular ao plano, usaremos diferentes calibres (*gauges*) para o potencial vetor. A análise será feita no modelo contínuo, baseado na teoria de Dirac para baixas energias que foi comentada no capítulo introdutório deste trabalho, para obtenção dos níveis de Landau.

### 2.1 Modelo contínuo

O Hamiltoniano de Dirac para os portadores de carga em uma folha de grafeno com um campo magnético externo aplicado na direção perpendicular à folha ( $B = B_0 \hat{z}$ ) pode ser escrito da seguinte forma:

$$\mathbf{H} = m\sigma_z + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} - i\nabla) \quad (2.1)$$

onde  $\mathbf{A} = (A_x, A_y)$ ,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  e  $\sigma_i$  são as matrizes de Pauli  $2 \times 2$ :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Temos, assim:

$$H = \begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & -m \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & A_x - iA_y \\ A_x + iA_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Por fim, obtemos a matriz correspondente ao Hamiltoniano:

$$H = \begin{pmatrix} m & -i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} + A_x - iA_y \\ -i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + A_x + iA_y & -m \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Temos que resolver agora a seguinte equação de autovalores  $H\psi = E\psi$ , e lembrando que os portadores de carga se comportam como se não tivessem massa ( $m=0$ ) no grafeno, a equação se torna

$$\begin{pmatrix} -E & -i\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) + (A_x - iA_y) \\ -i\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) + (A_x + iA_y) & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi^+ \\ \Psi^- \end{pmatrix} = 0, \quad (2.5)$$

resultando em duas equações

$$E\Psi^+ + \left[ i\left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right) - (A_x - iA_y) \right] \Psi^- = 0 \quad (2.6)$$

$$E\Psi^- + \left[ i\left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right) - (A_x + iA_y) \right] \Psi^+ = 0 \quad (2.7)$$

Desenvolvendo para  $\Psi^-$  teremos

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x}(A_y + iA_x) - (A_y - iA_x)\frac{\partial}{\partial x} - A_x^2 + \frac{E^2}{2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + i\frac{\partial}{\partial y}(A_y + iA_x) + i(A_y - iA_x)\frac{\partial}{\partial y} - A_y^2 + \frac{E^2}{2} \right] \Psi^- = 0, \quad (2.8)$$

enquanto que para  $\Psi^+$  temos

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x}(A_y - iA_x) + (A_y + iA_x)\frac{\partial}{\partial x} - A_x^2 + \frac{E^2}{2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + i\frac{\partial}{\partial y}(A_y - iA_x) + i(A_y + iA_x)\frac{\partial}{\partial y} - A_y^2 + \frac{E^2}{2} \right] \Psi^+ = 0, \quad (2.9)$$

Aqui é importante mencionar que temos várias possibilidades de calibre para um campo magnético uniforme aplicado na direção  $z$ , dentre elas as mais usadas são: o calibre de Landau, onde  $\mathbf{A} = Bx\hat{y}$ , que é apropriado para uma simetria em torno do eixo  $y$  tornando o sistema independente desta coordenada. O outro calibre é o chamado calibre simétrico  $\mathbf{A} = B(-y\hat{x} + x\hat{y})/2$ , aqui  $B$  é um campo magnético uniforme. E porque usar dois calibres? Tecnicamente o calibre de Landau é mais simples e provavelmente mais familiar enquanto que o calibre simétrico é necessário para escrever funções de onda do efeito Hall fracionário, e sistemas com simetria rotacional.

Nas subseções seguintes estudaremos a aplicação dos calibres de Landau e simétrico.

Em seguida veremos o caso em que o campo magnético é dependente da posição.

### 2.1.1 Calibre de Landau

Para o calibre de Landau temos que usar  $A_x = 0$  e  $A_y = B_0x$  nas Eqs. 2.8 e 2.9 que se tornam

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + B_0 \frac{\partial}{\partial x} x - B_0 x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{E^2}{2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + iB_0 \frac{\partial}{\partial y} x + iB_0 x \frac{\partial}{\partial y} - B_0 x^2 + \frac{E^2}{2} \right] \Psi^- = 0, \quad (2.10)$$

e

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} - B_0 \frac{\partial}{\partial x} x + B_0 x \frac{\partial}{\partial x} + \frac{E^2}{2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + iB_0 x \frac{\partial}{\partial y} + iB_0 x \frac{\partial}{\partial y} - B_0 x^2 + \frac{E^2}{2} \right] \Psi^+ = 0. \quad (2.11)$$

As equações acima não possuem dependência explícita em  $y$ . Dessa forma podemos escrever as funções de onda como o produto de duas funções  $\Psi^{+,-} = e^{ik_y y} \phi^{+,-}(y)$ , com isso temos

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + B_0 + E^2 - k_y^2 - 2B_0 k_y x - B_0 x^2 \right] \phi^- = 0, \quad (2.12)$$

e

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - B_0 + E^2 - k_y^2 - 2B_0 k_y x - B_0 x^2 \right] \phi^+ = 0, \quad (2.13)$$

e através da mudança de variável  $s = \sqrt{2}(u + k_y/\sqrt{B_0})$  chegamos finalmente nas equações

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial s^2} - \frac{s^2}{4} + \frac{1}{2} + \frac{E^2}{2B_0} \right] \phi^- = 0, \quad (2.14)$$

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial s^2} - \frac{s^2}{4} - \frac{1}{2} + \frac{E^2}{2B_0} \right] \phi^+ = 0, \quad (2.15)$$

que são similares à equação diferencial de Webber [21]

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \left( n + \frac{1}{2} - \frac{s^2}{4} \right) \right] \phi^- = 0, \quad (2.16)$$

quando

$$\frac{E^2}{2B_0} = n, \quad \text{para } \phi^-, \quad (2.17)$$

$$\frac{E^2}{2B_0} = n + 1, \quad \text{para } \phi^+, \quad (2.18)$$

resultando em

$$E_n = \pm\sqrt{2nB_0} \quad \text{para } \phi^- \quad (2.19)$$

$$E_n = \pm\sqrt{2B_0(n+1)} \quad \text{para } \phi^+, \quad (2.20)$$

Esses são os chamados níveis de Landau para o grafeno. Eles são os níveis quânticos que determinam o comportamento dos elétrons em um forte campo magnético. Tais níveis constituem a base do efeito Hall quântico. A quantização de Landau é a quantização do movimento orbital de partículas carregadas num campo magnético, como consequência a partícula carregada pode apenas ocupar órbitas com valores de energia discretos, que são os níveis de Landau. O número de elétrons por nível é proporcional à força do campo magnético aplicado. A quantização de Landau é diretamente responsável pelas oscilações nas propriedades eletrônicas dos materiais em função do campo magnético aplicado.

A equação diferencial de Webber tem como solução as funções parabólicas cilíndricas, que para o caso de  $n$  ser inteiro não negativo podem ser escritas como:

$$D_n(s) = 2^{-n/2} e^{-s^2/4} H_n \left( \frac{s}{\sqrt{2}} \right), \quad (2.21)$$

onde  $H_n(s)$  são os polinômios de Hermite. Voltando para a coordenada  $x$  a Eq. 2.21 se torna

$$D_n(x) = 2^{-n/2} e^{-B_0(x+k_y/B_0)^2/2} H_n \left( \sqrt{B_0}(x + k_y/B_0) \right), \quad (2.22)$$

e usando o fato de que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_m(x) D_n(x) dx = \delta_{mn} n! \sqrt{2\pi}, \quad (2.23)$$

assim as autofunções são dadas por:

$$\Psi_n(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2^n \sqrt{\pi} n!}} e^{ik_y y} e^{-B_0(x+k_y/B_0)^2/2} \begin{pmatrix} \sqrt{2n} H_{n-1} \left( \sqrt{B_0}(x + k_y/B_0) \right) \\ H_n \left( \sqrt{B_0}(x + k_y/B_0) \right) \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

## 2.1.2 Calibre simétrico

Como mencionamos anteriormente vamos agora fazer o cálculo para o calibre simétrico onde temos que usar  $A_x = -B_0 y/2$  e  $A_y = B_0 x/2$ . As Eqs. 2.6 e 2.7 são escritas como

$$E\Psi^+ + \left[ i \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) - \frac{B_0}{2}(-y - ix) \right] \Psi^- = 0, \quad (2.25)$$

$$E\Psi^- + \left[ i \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - \frac{B_0}{2}(-y + ix) \right] \Psi^+ = 0 \quad (2.26)$$

ou

$$E\Psi^+ + \left[ i \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) + i \frac{B_0}{2}(x - iy) \right] \Psi^- = 0, \quad (2.27)$$

$$E\Psi^- + \left[ i \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - i \frac{B_0}{2}(x + iy) \right] \Psi^+ = 0. \quad (2.28)$$

Nesse ponto vai ser muito útil escrever as coordenadas  $x$  e  $y$  em termos das variáveis complexas  $z \equiv x + iy$  e  $\bar{z} \equiv x - iy$  e como consequência

$$\frac{\partial}{\partial z} \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad \text{e} \quad \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \equiv \frac{1}{2} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right). \quad (2.29)$$

Temos

$$E\Psi^+ + i \left( 2 \frac{\partial}{\partial z} + \frac{B_0}{2} \bar{z} \right) \Psi^- = 0, \quad (2.30)$$

$$E\Psi^- + i \left( 2 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} - \frac{B_0}{2} z \right) \Psi^+ = 0. \quad (2.31)$$

Resolvendo para  $\Psi^-$

$$\left( 4 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \frac{\partial}{\partial z} + B_0 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \bar{z} - B_0 z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{B_0^2}{4} z \bar{z} \right) \Psi^- = 0, \quad (2.32)$$

$$\left( 4 \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \frac{\partial}{\partial z} + B_0 \bar{z} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} - B_0 z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{B_0^2}{4} z \bar{z} + B_0 + E^2 \right) \Psi^- = 0, \quad (2.33)$$

e fazendo a seguinte mudança de variável  $u = \sqrt{z\bar{z}}$  obtemos a equação diferencial

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{3}{u} \frac{\partial}{\partial u} + B_0 + E^2 + \frac{1}{u^2} - \frac{B_0^2 u^2}{4} \right) \Psi^- = 0, \quad (2.34)$$

que é uma variante da Equação diferencial de Kummer que tem como soluções as funções hipergeométricas confluentes e os polinômios de Laguerre generalizados [21]. Tais soluções implicam na condição  $E_n = \sqrt{2B_0 n}$ .

### 2.1.3 Campo dependente da posição

É interessante analisar agora o caso quando o campo magnético depende da

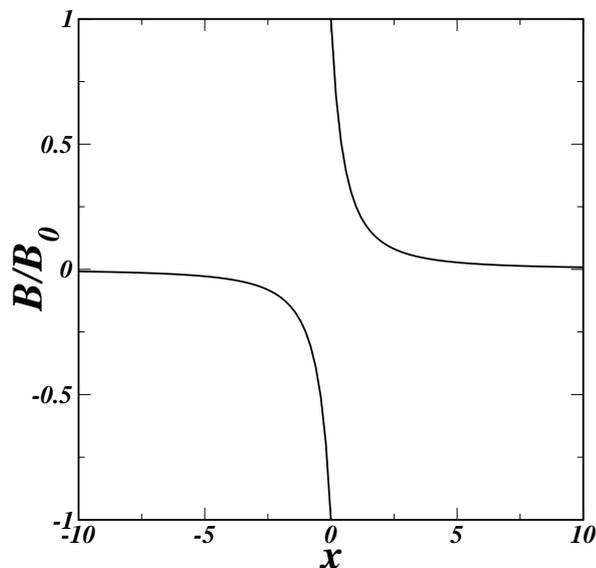


Figura 2.1: Campo magnético dependente da posição referente a Eq. 2.36.

posição. Devemos mencionar aqui que a literatura apresenta alguns trabalhos sobre campos dependente da posição em bicamadas de grafeno. Neste capítulo, vamos usar um campo que depende da posição em monocamadas. Para introduzirmos um campo dependente da posição vamos deixar a equação para  $\Psi^-$  da forma mais geral possível no calibre de Landau, ou seja

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + A'_y + E^2 - (k_y + A_y)^2 \right] \phi^- = 0. \quad (2.35)$$

Vamos usar dois campos como exemplo. O primeiro campo é dado pela equação

$$\mathbf{B} = B_0 \frac{\text{sgn}(x)}{(1 + |x|)^2} \hat{k}, \quad (2.36)$$

e é mostrado na Figura 2.1 abaixo. Este é um campo que decai rapidamente quando se afasta da origem e se inverte quando vai para o lado positivo da coordenada  $x$ . O campo descrito acima é dado pelo potencial vetor

$$\mathbf{A} = -\frac{B_0}{(1 + |x|)} \hat{j}. \quad (2.37)$$

A solução da Eq. 2.35 usando esse potencial vetor é dado em termos das funções hipergeométricas confluentes do segundo tipo e do polinômio generalizado de Laguerre.

$$\phi^-(x) = e^{-\sqrt{K_y^2 - E_n^2}(-1-x)} (2 + 2x)^{B_0} [C_1 U(n, a, c) + C_2 L_{-n}^{a-1}(c)], \quad (2.38)$$

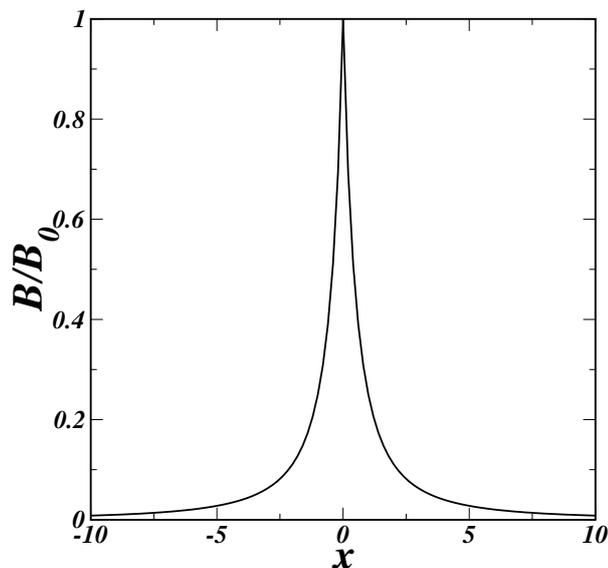


Figura 2.2: Campo magnético dependente da posição referente a Eq. 2.43.

onde

$$n = B_0 \frac{E_n^2 - k_y^2 + k_y \sqrt{k_y^2 - E_n^2}}{E_n^2 - k_y^2}, \quad (2.39)$$

$$a = 2B_0, \quad (2.40)$$

$$c = 2\sqrt{k_y^2 - E_n^2}(1 + x). \quad (2.41)$$

Para que tenhamos soluções convergentes o argumento  $n$  das funções acima tem que ser inteiros negativos. Logo, isso nos resulta na seguinte equação para a energia

$$E_n = \pm k_y \sqrt{1 - \frac{B_0^2}{(|n| + B_0)^2}}. \quad (2.42)$$

Um outro campo magnético que vamos considerar também depende da posição dado pela equação

$$\mathbf{B} = \frac{B_0}{1 + |x|} \left(1 - \frac{|x|}{1 + |x|}\right) \hat{k}, \quad (2.43)$$

que é mostrado na Figura 2.2 abaixo. Este é um campo que decai rapidamente quando se afasta da origem e tem seu valor máximo em  $B_0$ . O campo descrito acima é dado pelo potencial vetor

$$\mathbf{A} = \frac{B_0 x}{(1 + |x|)} \hat{j}. \quad (2.44)$$

A solução da Eq. 2.35 para esse potencial vetor é dada pelas mesmas funções do

caso anterior mas agora temos

$$n = -B_0 \frac{k'_y{}^2 - E^2 + k'_y \sqrt{k'_y{}^2 - E^2}}{k'_y{}^2 - E^2}, \quad (2.45)$$

$$a = -2B_0, \quad (2.46)$$

$$c = 2\sqrt{k'_y{}^2 - E^2}(1 + x), \quad (2.47)$$

onde  $k'_y = (B_0 - k_y)$ , e as energias dos níveis de Landau se tornam

$$E_n = k'_y \sqrt{1 + \frac{B_0^2}{(n + B_0)^2}}. \quad (2.48)$$

Abaixo analizaremos a dispersão dos níveis encontrados neste capítulo.

## 2.1.4 Resultados

Primeiramente vamos mostrar os níveis de Landau para uma monocamada de grafeno sob a ação de um campo magnético uniforme perpendicular ( $B_z$ ) a uma folha de grafeno infinita no plano  $x-y$ . A Figura 2.3 mostra a energia dos níveis de Landau contra o campo magnético uniforme.

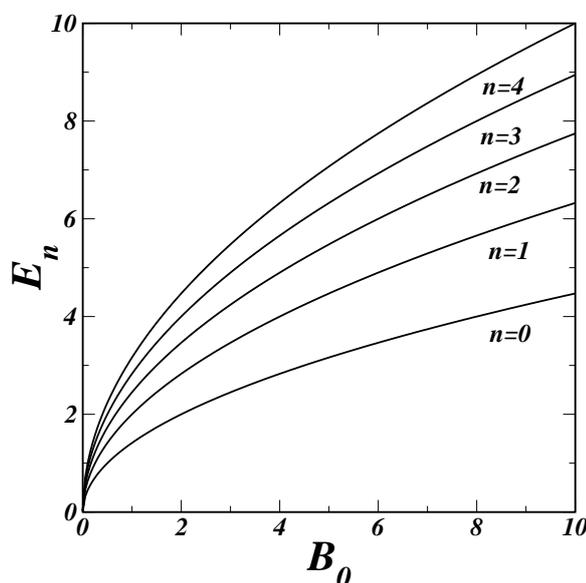


Figura 2.3: Níveis de Landau  $E_n$  em função do campo magnético  $\mathbf{B}$ , as curvas representam a variação  $n=0, \dots, 4$ . Estes são resultados para a Eq.2.20.

A Figura 2.3 nos mostra um comportamento dos níveis de energia bem diferente daquele para um gás de elétrons sob a influência de um campo magnético. Aqui as curvas

crecem com  $\sqrt{B}$  enquanto que no gás de elétrons a energia cresce linearmente com  $B$ .

Devemos mencionar a degenerescência existente das funções  $\phi_n^+$  e  $\phi_{n+1}^-$ , e que existe um nível com energia zero. Esse comportamento muda totalmente quando consideramos o campo magnético dependente da posição de acordo com a Equação 2.42. Para este campo a Figura 2.4 mostra os níveis de energia. Para  $n = 0$  podemos ver que a energia não depende do campo e é dada por  $E = k_y\sqrt{2}$ . Interessante notar que os níveis vão diminuindo à medida que  $n$  cresce. Contudo, todos convergem para o mesmo ponto quando temos grandes valores de  $B_0$ .

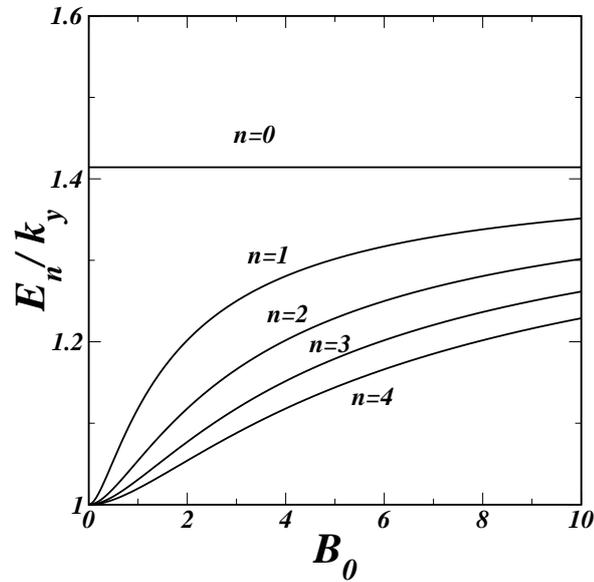


Figura 2.4: Níveis de Landau  $E_n$  em função do campo magnético  $B_0$ , as curvas representam a variação  $n=0, \dots, 4$ . Estes são resultados para a Eq.2.42.

## 3. Aproximação tight-binding

Nesse capítulo será feito cálculo das bandas de energias baseado na superposição de funções de onda para átomos isolados localizados em cada ponto, proporcionando bons resultados qualitativos para a dispersão das bandas de energia do grafeno, com e sem a aplicação de um campo magnético.

### 3.1 Considerações iniciais

Essa é uma das descrições microscópicas mais simples de elétrons em um cristal. Assumimos aqui que o elétron está fortemente ligado ao átomo, como consequência a função de onda do cristal pode ser expandida em termos das funções de onda de átomos isolados. Consideraremos que os elétrons possam saltar apenas para os vizinhos mais próximos, nos orbitais- $\pi$ , já que as bandas  $\pi$  são as mais importantes na determinação das propriedades de estado sólido do grafeno quando se trata de excitações de baixa energia [22].

O modelo *tight – binding* de um sistema é obtido ao discretizar o Hamiltoniano na rede. Quanto menor for o tamanho da célula escolhida na rede, melhor será a aproximação para o limite contínuo. Sendo assim, nem todo ponto da rede corresponde a um átomo como nas teorias *ab – initio*, é como se um ponto pudesse representar uma região contendo muitos átomos, mas essa região sendo pequena comparada a quantidades físicas relevantes como os comprimentos de onda de Fermi.

A estratégia para escrever o Hamiltoniano do sistema nesse tipo de aproximação será:

$$\mathbf{H} = \sum_{\alpha} \mathbf{H}_{\alpha}^{atomo} + \mathbf{H}^{cristal}$$

com  $H^{atomo} \gg H^{cristal}$ .

A seguir mostramos a aplicação do modelo ao sistema de uma folha de grafeno sob um campo magnético homogêneo.

## 3.2 Modelo teórico

No modelo *tight – binding*, o Hamiltoniano que descreve elétrons no grafeno pode ser escrito como<sup>8</sup>:

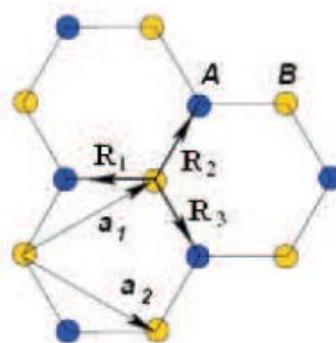


Figura 3.1: Estrutura cristalina do grafeno com duas subredes A e B. Os vetores primitivos que formam a rede são  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$ . Enquanto  $\mathbf{R}_i$  (com  $i=1,2,3$ ) localizam os vizinhos mais próximos [23].

$$\mathbf{H} = - \sum_{i,j} \gamma_0 \left( \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{b}_j + \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{a}_i \right), \quad (3.1)$$

onde  $\gamma_0 \approx 2,8eV$  é o parâmetro do salto para o vizinho mais próximo. Os operadores  $\mathbf{a}_i^\dagger$  e  $\mathbf{a}_i$  criam e aniquilam elétrons nos pontos  $i$  na subrede A, respectivamente,  $\mathbf{b}_j^\dagger$  e  $\mathbf{b}_j$  agem igualmente nos pontos  $j$  da subrede B. O termo relacionado à energia *onsite* apenas deslocaria o espectro, pois A e B possuem a mesma energia, sendo assim foi omitido.

Considerando uma rede infinita e periódica ideal em ambas as direções, é possível realizar uma transformada de Fourier nos operadores de criação e aniquilação. Para isso, escrevemos:

$$\mathbf{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \mathbf{a}_k, \quad \mathbf{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \mathbf{a}_k^\dagger, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{b}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}, \quad \mathbf{b}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}^\dagger. \quad (3.3)$$

Ao substituirmos as Eqs. 3.2 e 3.3 na Eq. 3.1, o Hamiltoniano toma a forma:

$$\mathbf{H} = - \sum_{i,j} \frac{\gamma_0}{N} \left[ \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} + \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right]. \quad (3.4)$$

<sup>8</sup>Tratado em termos de segunda quantização, para uma notação mais simples. Apesar de o tratamento em termos de primeira quantização ser mais intuitivo, ver segundo capítulo da referência [22].

E pode ser reescrito:

$$\mathbf{H} = -\frac{\gamma_0}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left[ e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} e^{ik'\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i} e^{-ik'\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right]. \quad (3.5)$$

Como cada átomo tem três vizinhos que são mais próximos, colocando a origem no ponto  $i$  e fazendo  $j$  variar sobre esses vizinhos, localizados pelas coordenadas  $\vec{R}_1 = (-a, 0)$ ,  $\vec{R}_2 = (a/2, a\sqrt{3}/2)$ ,  $\vec{R}_3 = (a/2, -a\sqrt{3}/2)$ , obtemos:

$$H = -\frac{\gamma_0}{N} \sum_i \sum_{k,k'} \left[ e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} \left( e^{-ik'_x a} + e^{ik'_x a/2} e^{ik'_y \sqrt{3}a/2} + e^{ik'_x a/2} e^{-ik'_y \sqrt{3}a/2} \right) + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \left( e^{ik'_x a} + e^{-ik'_x a/2} e^{-ik'_y \sqrt{3}a/2} + e^{-ik'_x a/2} e^{ik'_y \sqrt{3}a/2} \right) \right]. \quad (3.6)$$

Aqui estamos considerando um conjunto discreto de pontos do espaço, então é possível fazer a seguinte substituição pelo delta de Kroneker:

$$\frac{1}{N} \sum_i e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i} = \delta_{k'k}. \quad (3.7)$$

O Hamiltoniano é reduzido a:

$$\mathbf{H} = -\gamma_0 \sum_k \left[ g(\vec{k}) \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_k + g^*(\vec{k}) \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{a}_k \right], \quad (3.8)$$

onde,

$$g(\vec{k}) = e^{ik_x a} + e^{-ik_x a/2} e^{-ik_y \sqrt{3}a/2} + e^{-ik_x a/2} e^{ik_y \sqrt{3}a/2}, \quad (3.9)$$

é o fator de estrutura do cristal. O Hamiltoniano acima ainda pode ser reescrito como:

$$\mathbf{H} = \sum_k \langle \Psi_k | \mathbf{H}_k | \Psi_k \rangle \quad (3.10)$$

onde  $|\Psi_k\rangle = (\mathbf{a}_k \ \mathbf{b}_k)^T$  e  $\mathbf{H}_k$  representam o estado eletrônico e o Hamiltoniano para um dado  $\vec{k}$  (respectivamente). O  $\mathbf{H}_k$  é:

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} 0 & -\gamma_0 g(\vec{k}) \\ -\gamma_0 g^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Os autovalores de  $\mathbf{H}_k$  são:

$$E_{\pm} = \pm \gamma_0 \sqrt{|g(\vec{k})|^2}. \quad (3.12)$$

Calculando  $|g(\vec{k})|$  obtemos:

$$|g(\vec{k})|^2 = 3 + 4\cos(3k_x a/2)\cos(\sqrt{3}k_y a/2) + 2\cos(\sqrt{3}k_y a). \quad (3.13)$$

Obtemos a seguinte expressão para a relação de dispersão das bandas de energias:

$$E_{\pm} = \pm\gamma_0\sqrt{3 + f(\vec{k})}, \quad (3.14)$$

com  $f(\vec{k}) = 4\cos(3k_x a/2)\cos(\sqrt{3}k_y a/2) + 2\cos(\sqrt{3}k_y a)$ .<sup>9</sup>

Vamos incluir agora o efeito do campo magnético homogêneo, através da substituição de Peierls [16]:

$$\gamma_0 \rightarrow \gamma_0 e^{ie/\hbar \int_i^j \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}}, \quad (3.15)$$

onde os limites de integração  $i$  e  $j$  indicam sítios que correspondem a primeiros vizinhos na rede, dessa forma temos a integral do potencial vetor ao longo do caminho do salto<sup>10</sup>. Este termo vai entrar como uma fase adicional na Eq. 3.8 que possui a mesma forma de antes mas agora é escrita como

$$\mathbf{H} = -\gamma_0 \sum_k [\alpha(\vec{k}) \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} + \alpha^*(\vec{k}) \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k], \quad (3.16)$$

usando o calibre de Landau  $\mathbf{A} = B_0 x \hat{y}$  teremos

$$\alpha(\vec{k}) = e^{ik_x a} + e^{i\sqrt{3}w a/2} e^{-i(k_x a/2 - \sqrt{3}k_y a/2)} + e^{-i\sqrt{3}w a/2} e^{-i(k_x a/2 + \sqrt{3}k_y a/2)} \quad (3.17)$$

onde  $w = eB_0 a/2\hbar$ . Substituindo  $\alpha(\vec{k})$  e  $\alpha^*(\vec{k})$  na fórmula do Hamiltoniano, encontramos os autovalores:

$$E_{\pm} = \pm\gamma_0 \sqrt{|\alpha(\vec{k})|^2} \quad (3.18)$$

com

$$|\alpha(\vec{k})|^2 = 3 + 2\cos[\sqrt{3}(k_y + w)a] + 4\cos(3k_x a/2)\cos[\sqrt{3}(k_y + w)a/2]. \quad (3.19)$$

Escrevendo agora o potencial vetor  $\mathbf{A} = \frac{B_0}{k_B} \text{sen}(k_B x) \hat{y}$  para um campo magnético dependente da posição oscilante  $\mathbf{B} = B_0 \cos(k_B x) \hat{z}$ , teremos:

$$|\alpha(\vec{k})|^2 = 3 + 2\cos[\sqrt{3}(k_y + w')a] + 4\cos(3k_x a/2)\cos[\sqrt{3}(k_y + w')a/2]. \quad (3.20)$$

$$w' = eB_0[\cos(k_B a/2) - 1]/k_B \hbar. \quad (3.21)$$

<sup>9</sup>Utilizando a relação trigonométrica  $\cos(\theta + \varphi) + \cos(\theta - \varphi) = 2\cos\theta\cos\varphi$ , assumindo  $\theta = 3k_x a/2$  e  $\varphi = \sqrt{3}k_y a/2$ .

<sup>10</sup>O significado físico da Eq.3.15 é discutido na referência [24].

Na seção seguinte discutiremos os resultados que obtivemos aqui para o estudo feito com uma folha de grafeno, segundo o modelo *tight – binding*.

### 3.2.1 Resultados

Na Figura 3.2 observamos a banda de condução do grafeno obtida pela aproximação *tight – binding*. Os destaques em azul correspondem aos pontos de Dirac (K e K'), seis pontos no espaço recíproco, coincidentes com a primeira zona de Brillouin, possíveis de ser visualizados no Apêndice da presente dissertação.

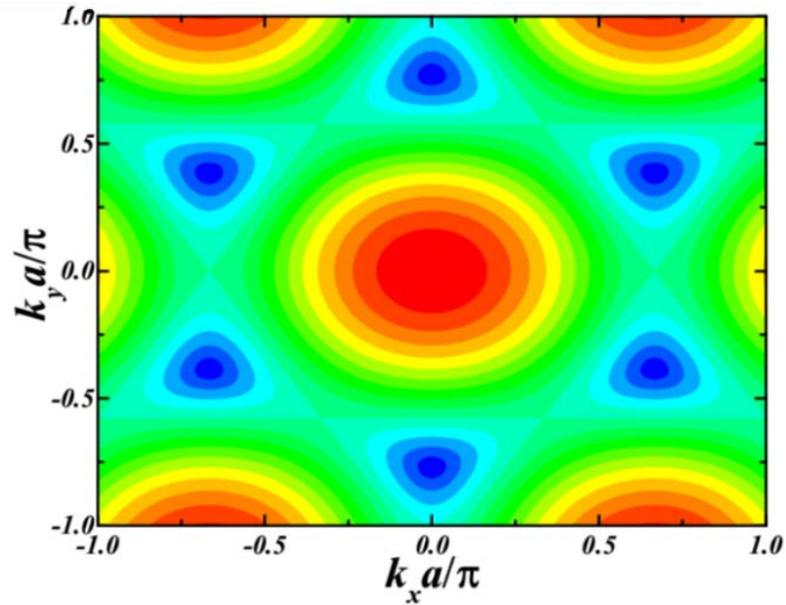


Figura 3.2: Dispersão das bandas de energias obtida a partir de Eq. 3.12.

Utilizando o resultado para a energia obtido na Eq. 3.18 podemos visualizar a modificação na dispersão das bandas representada acima causada pelo campo magnético uniforme:

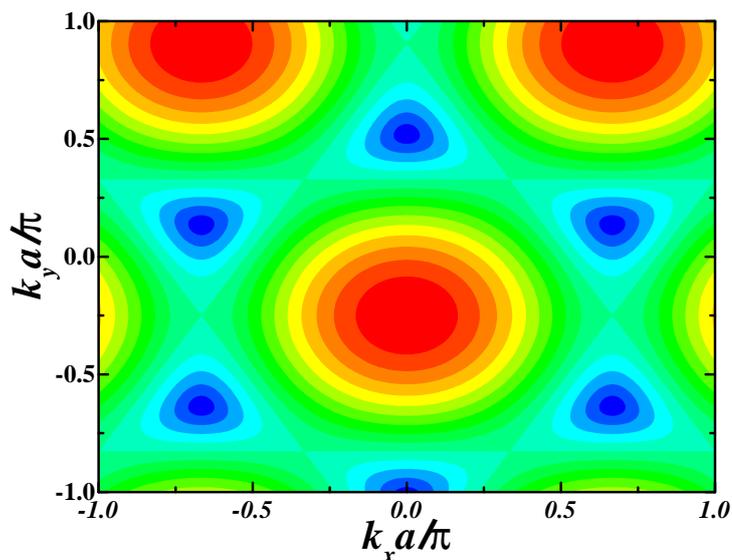


Figura 3.3: Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético uniforme  $B = B_0 \hat{z}$ . Onde usamos  $B_0 = 0,5\pi T$ .

Como era de se esperar devido à relação de dispersão a figura mostra que há um deslocamento no eixo do gráfico quando aplicamos o campo. Na Figura 3.4 podemos observar a dispersão em função do campo magnético  $\mathbf{B}$ .

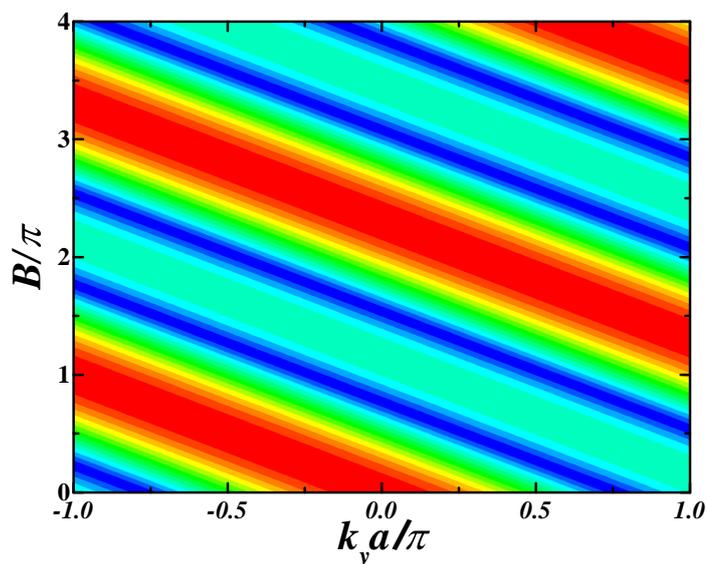


Figura 3.4: Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético uniforme  $B = B_0 \hat{z}$ . Aqui temos  $k_x = 0$ .

Para os resultados obtidos com a Eq. 3.20, a Figura 3.5 mostra a alteração sofrida na primeira zona de Brillouin, com um campo  $B_0 = \pi T$ .

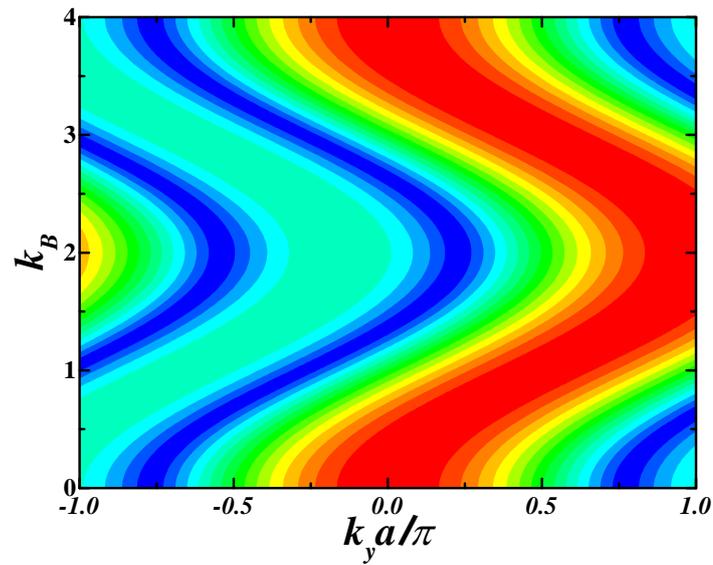


Figura 3.5: Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético periódico  $B = B_0 \cos(k_B x) \hat{z}$ . Aqui usamos  $k_x = 0$ , e  $B_0 = \pi T$ .

Com um campo magnético  $B_0 = 1,5\pi T$  podemos notar que aparecem agora sete pontos no espaço recíproco e não mais os seis vistos na Figura 3.2.

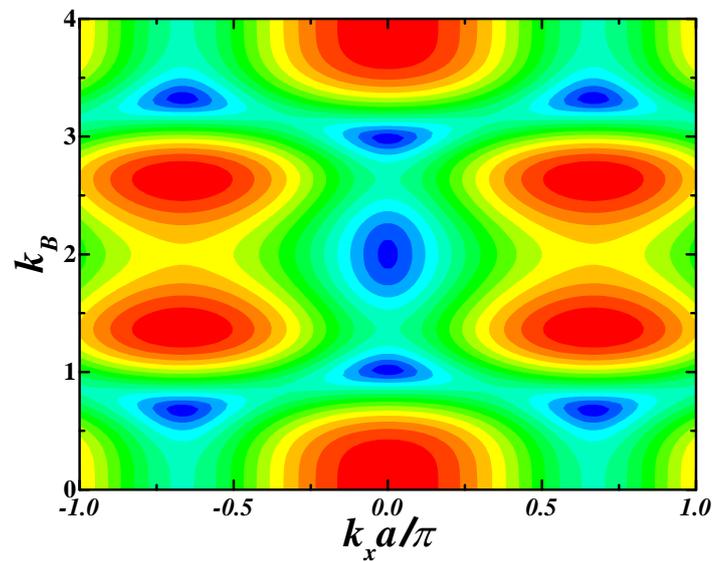


Figura 3.6: Monocamada de grafeno imersa em um campo magnético periódico  $B = B_0 \cos(k_B x) \hat{z}$ . Aqui usamos  $k_y = 0$ , e  $B_0 = 1,5\pi T$ .

## 4. Bicamada de grafeno

Aqui será estudado o caso da bicamada de grafeno, sendo duas folhas independentes sobrepostas imersas em um campo magnético perpendicular. O Hamiltoniano do sistema será escrito seguindo o modelo tight-binding para obtenção dos níveis de Landau, a exemplo do que foi feito para uma única camada de grafeno.

### 4.1 Considerações gerais

O desenvolvimento da teoria da bicamada de grafeno foi feito por uma colaboração internacional<sup>11</sup>, tendo o material sido preparado e medido no laboratório de Andre Geim. Os resultados foram apresentados na *Physical Review Letters*, uma entre as várias publicações da colaboração, neste prestigiado jornal, sobre o grafeno.

A bicamada de grafeno pode servir de base para semicondutores com características bastante interessantes do ponto de vista das aplicações. Primeiramente porque possui um intervalo de energias proibidas variável, podemos então pensar em *lasers* cujo comprimento de onda da luz pode ser escolhido, ou fotodetectores sintonizáveis. Por outro lado, estamos falando de um dispositivo que tem a altura de duas folhas atômicas sobrepostas, para aplicações em eletrônica isso é uma ótima notícia, quanto menores as dimensões, melhor. Este novo tipo de semicondutor tem claramente potencial para vir a ser usado em tecnologia comercial.

A bicamada consiste de duas folhas sobrepostas separadas por uma distância de  $\approx 3,33\text{Å}$ . O posicionamento das folhas pode ser feito de várias maneiras, na Figura 4.1 temos um esquema tal que os átomos  $A_2$  da folha superior estão localizados exatamente em cima dos átomos  $A_1$  da folha de baixo (empilhamento AA).

O efeito Hall quântico em uma amostra de bicamada de grafeno também é diferente desse efeito numa monocamada de grafeno e em um semicondutor tradicional. Na bicamada os picos de condutância ocorrem para valores inteiros do quantum de condutân-

---

<sup>11</sup>Os países envolvidos são EUA, Espanha, Reino Unido e Portugal.

cia, mas não há picos de condutância nula, como ocorre num semiconductor tradicional. Assim, é possível distinguir uma amostra de monocamada de grafeno de uma amostra de bicamada pelo efeito Hall quântico.

O modelo tight-binding para o grafeno pode ser adaptado para um número infinito de folhas empilhadas, com o caso mais simples sendo para a bicamada [26]. Na seção seguinte será descrito o modelo para solução do problema da bicamada na presença de uma campo magnético homogêneo.

## 4.2 Modelo tight-binding para bicamada

Observando a Figura 4.1 visualizamos a estrutura de duas folhas de grafeno sobrepostas:

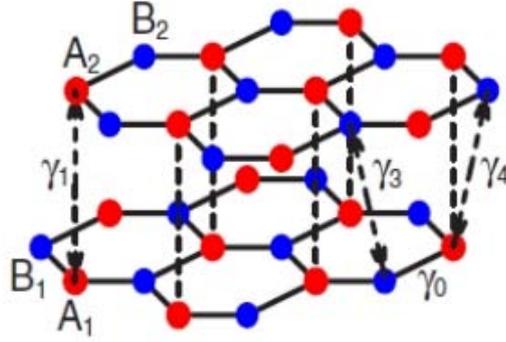


Figura 4.1: Ilustração esquemática da estrutura de duas folhas de grafeno. O salto direto entre os pontos vermelhos da folha de baixo e de cima é representado pelo parâmetro  $\gamma_1$ . O salto de baixa energia entre os pontos azuis está representado pelo parâmetro  $\gamma_3$ . Representando o salto entre os pontos vermelhos e os azuis tem-se  $\gamma_4$  [27].

Considerando as contribuições dos parâmetros de cada folha podemos escrever o Hamiltoniano que descreve o sistema de bicamada:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -\gamma_0 \sum_{i,j} \sum_{m=1}^2 (\mathbf{a}_{i,m}^\dagger \mathbf{b}_{j,m} + \mathbf{b}_{j,m}^\dagger \mathbf{a}_{i,m}) \\ & -\gamma_1 \sum_{i,j} (\mathbf{a}_{i,1}^\dagger \mathbf{b}_{j,2} + \mathbf{b}_{j,2}^\dagger \mathbf{a}_{i,1}) \\ & -\gamma_3 \sum_{i,j} (\mathbf{a}_{i,2}^\dagger \mathbf{b}_{j,1} + \mathbf{b}_{j,1}^\dagger \mathbf{a}_{i,2}) \\ & -\gamma_4 \sum_{i,j} (\mathbf{a}_{i,1}^\dagger \mathbf{a}_{j,2} + \mathbf{a}_{j,2}^\dagger \mathbf{a}_{i,1} + \mathbf{b}_{i,1}^\dagger \mathbf{b}_{j,2} + \mathbf{b}_{j,2}^\dagger \mathbf{b}_{i,1}) \end{aligned}$$

$$+ \sum_{i,j} \sum_{m=1}^2 (E_{A_m} \mathbf{a}_{i,m}^\dagger \mathbf{a}_{i,m} + E_{B_m} \mathbf{b}_{j,m}^\dagger \mathbf{b}_{j,m}) \quad (4.1)$$

O Hamiltoniano é o somatório das contribuições de cada uma das folhas, na primeira linha da Eq. 4.1 vemos o Hamiltoniano de duas folhas independentes, onde  $\mathbf{a}_{i,m}^\dagger$  ( $\mathbf{a}_{i,m}$ ) é o operador de criação (aniquilação) de elétrons nos pontos  $i$  da subrede A da folha  $m$ , da mesma forma em que  $\mathbf{b}_{j,m}^\dagger$  ( $\mathbf{b}_{j,m}$ ) age nos pontos  $j$  da subrede B. Os termos contendo  $\gamma_1$  representam o acoplamento direto entre os pontos sobrepostos  $A_1$  e  $B_2$ , os termos  $\gamma_3$  descrevem o salto entre os pontos não-sobrepostos  $B_1$  e  $A_2$ , e os termos  $\gamma_4$  acoplam os pontos sobrepostos  $A_1$  e  $B_2$  com os pontos não-sobrepostos  $A_2$  e  $B_1$ , respectivamente. O último termo do Hamiltoniano representa a energia local da subrede A e B nas duas folhas.

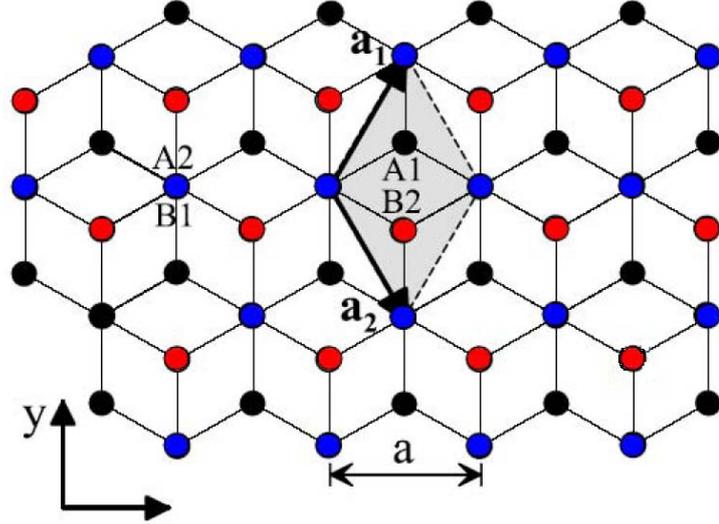


Figura 4.2: Visão de cima da estrutura cristalina de duas folhas de grafeno. Átomos  $A_1$  e  $B_1$  da folha de baixo são mostrados em preto e azul. Na folha de cima  $A_2$  e  $B_2$  são os pontos azuis e vermelhos, respectivamente. A parte sombreada indica a célula unitária convencional.

A amplitude do salto  $A_1 - A_2$  entre as folhas é descrito por  $\gamma_{A_1-A_2} \equiv \gamma_1 \approx 0.4eV$  e leva à formação de um estado dímero dos orbitais  $A_1 - A_2$ . O processo de salto de  $B_1$  para  $B_2$ , tem amplitude tal que  $\gamma_{B_1-B_2} \equiv \gamma_3 \ll \gamma_1$ .

Parâmetro	Grafite [28]	Bicamada [29]
$\gamma_0$	3.16(5) eV	3.16(3) eV
$\gamma_1$	0.39(1) eV	0.381(3) eV
$\gamma_2$	-0.020(2) eV	-
$\gamma_3$	0.315(15) eV	0.38(6) eV
$\gamma_4$	0.044(24) eV	0.14(3) eV
$\gamma_5$	0.38(5) eV	-
$\Delta$	-0.008(2) eV	0.022(3) eV

Tabela 4.2: Valores dos parâmetros tight-binding determinados experimentalmente para o grafite e bicamada de grafeno.

As energias locais são descritas por:

$$E_{A_1} = U_1 + \Delta \quad (4.2)$$

$$E_{B_1} = U_1 \quad (4.3)$$

$$E_{B_2} = U_2 + \Delta \quad (4.4)$$

$$E_{A_2} = U_2 \quad (4.5)$$

onde  $U_1$  e  $U_2$  descrevem a assimetria intercalar, e  $\Delta$  é a diferença de energia entre os pontos sobrepostos e não-sobrepostos. Na Tabela 4.1 podemos observar valores experimentais para os parâmetros de salto e  $\Delta$ . Na Figura 4.3 vemos a forma estrutural das bandas de energias previstas pelo modelo tight-binding:

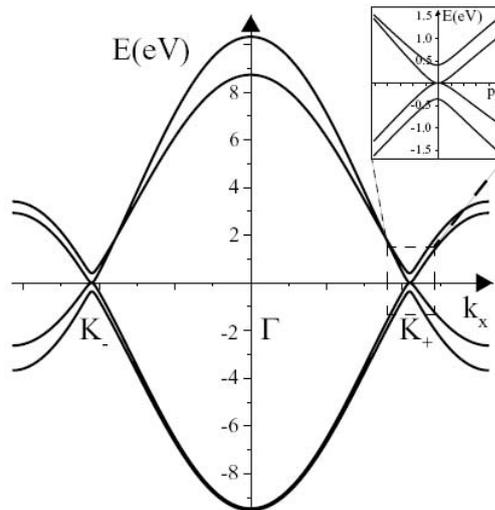


Figura 4.3: Bandas de baixa energia da bicamada de grafeno crescendo a partir do orbital  $2p_z$  plotados ao longo do eixo  $k_x$  no espaço recíproco, intersectando os pontos  $K'$  ( $K_-$ ) e  $K$  ( $K_+$ ),  $\Gamma$  corresponde a zona de Brillouin. Em destaque temos as bandas na proximidade do ponto  $K$  [26].

Seguindo os mesmos passos de que quando tínhamos apenas uma folha de grafeno, mostardos nos capítulos anteriores, obtemos:

$$\mathbf{H}_k = \begin{bmatrix} E_{A_1} & -\gamma_0 g(\vec{k}) & -\gamma_1 & -\gamma_4 g^*(\vec{k}) \\ -\gamma_0 g^*(\vec{k}) & E_{B_1} & -\gamma_4 g^*(\vec{k}) & -\gamma_3 g(\vec{k}) \\ -\gamma_1 & -\gamma_4 g(\vec{k}) & E_{B_2} & -\gamma_0 g^*(\vec{k}) \\ -\gamma_4 g(\vec{k}) & -\gamma_3 g^*(\vec{k}) & -\gamma_0 g(\vec{k}) & E_{A_2} \end{bmatrix}$$

Aqui,  $g(k_x, k_y)$  é escrito como na Eq. 3.8, expandindo seus termos ao redor de  $\vec{k}_1$ , encontramos:

$$g(\delta\vec{k}) \approx g(\vec{k}_1) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_x} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_1} (k_x - k_{1x}) + \left. \frac{\partial g}{\partial k_y} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_1} (k_y - k_{1y}) + O(\delta k^2)$$

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} e^{i\pi/2} (k_x - ik_y) \quad (4.7)$$

onde  $\delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{k}_1$ . A fase  $e^{i\pi/2}$  que aparece na Eq. 4.7 pode ser incluída no autoestado sem nenhuma mudança física, já que a sua norma é um.

Agora, substituindo a Eq. 4.7 na 4.6, obtemos:

$$\mathbf{H}_k = \begin{bmatrix} U_1 + \Delta & v\pi^\dagger & \gamma_1 & v_4\pi \\ v\pi & U_1 & v_4\pi & v_3\pi^\dagger \\ \gamma_1 & v_4\pi^\dagger & U_2 + \Delta & v\pi \\ v_4\pi^\dagger & v_3\pi & v\pi^\dagger & U_2 \end{bmatrix}$$

onde  $v = \frac{3a\gamma_0}{2\hbar}$ ,  $v_3 = \frac{3a\gamma_3}{2\hbar}$ ,  $v_4 = \frac{3a\gamma_4}{2\hbar}$  são as velocidades efetivas. E os momentos,  $\pi = p_x + ip_y$  e  $\pi^\dagger = p_x - ip_y$ .

Para descrever elétrons livres na presença de um campo magnético externo, o momento canônico dá lugar ao momento cinético no Hamiltoniano, e temos  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ , onde  $e$  é o valor absoluto da carga elétrica e  $\mathbf{A}$  é o vetor potencial. Tratando o caso para um campo magnético uniforme  $\mathbf{B} = B\hat{z}$  gerado por  $\mathbf{A} = Bx\hat{y}$ , o problema de autovalor

que devemos resolver é:

$$\begin{bmatrix} U & v\pi^\dagger & \gamma_1 & 0 \\ v\pi & U & 0 & v_3\pi^\dagger \\ \gamma_1 & 0 & U & v\pi \\ 0 & v_3\pi & v\pi^\dagger & U \end{bmatrix} \Psi = E\Psi$$

aqui ignoramos os termos  $\gamma_4$  e  $\Delta$ . E as autofunções correspondentes são  $\Psi = (\Psi_{A_1}, \Psi_{B_1}, \Psi_{B_2}, \Psi_{A_2})^T$ .

Calculando os autovalores, temos:

$$\begin{aligned} \det(H - EI) &= \det \begin{bmatrix} U - E & v\pi^\dagger & \gamma_1 & 0 \\ v\pi & U - E & 0 & v_3\pi^\dagger \\ \gamma_1 & 0 & U - E & v\pi \\ 0 & v_3\pi & v\pi^\dagger & U - E \end{bmatrix} \\ &= \gamma_1 A_{13} + (U - E)A_{33} + v\pi^\dagger A_{44} \end{aligned}$$

Os elementos  $A_{13}$ ,  $A_{33}$  e  $A_{44}$  correspondem a:

$$A_{13} = \gamma_1 v_3^3 \pi \pi^\dagger - v^2 v_3 \pi^3 - (U - E)^2 \gamma_1 \quad (4.10)$$

$$A_{33} = (U - E)^3 - (U - E)v^2 \pi \pi^\dagger - (U - E)v_3^2 \pi \pi^\dagger \quad (4.11)$$

$$A_{44} = v^3 \pi^2 \pi^\dagger - \gamma_1 v v_3 (\pi^\dagger)^2 - (U - E)^2 v \pi \quad (4.12)$$

Para simplificação de cálculo,  $U=0$ . Substituindo as Eqs. 4.10, 4.11 e 4.12 na fórmula do determinante, obtemos:

$$\begin{aligned} E^4 - E^2(\gamma_1^2 + v^2 \pi \pi^\dagger + v_3^2 \pi \pi^\dagger + v^2 \pi \pi^\dagger) + \gamma_1^2 v_3 v \pi \pi^\dagger - \gamma_1 v^2 v_3 \pi^3 \\ + v^4 (\pi^\dagger)^2 \pi^2 - \gamma_1 v^2 v_3 (\pi^\dagger)^3 = 0 \end{aligned} \quad (4.13)$$

Fazendo a substituição  $\lambda = E^2$ , a equação de segundo grau resulta em, seguindo a fórmula de Báskara:

$$\lambda = \frac{(\gamma_1^2 + 2v^2p^2 + v_3^2p^2)}{2} \pm \left[ \frac{(\gamma_1^2 + 2v^2p^2 + v_3^2p^2)^2}{4} - 2\gamma_1v^2v_3p^3\cos(3\phi) - v^4p^4 \right]^{1/2}$$

$$\lambda = \frac{\gamma_1^2}{2} + \left( v^2 + \frac{v_3^2}{2} \right) p^2 \pm \left[ \frac{(\gamma_1^2 + 2v^2p^2 + v_3^2p^2)^2}{4} - 2\gamma_1v^2v_3p^3\cos(3\phi) - v^4p^4 \right]^{1/2}$$

Rearranjando alguns termos, obtemos por fim:

$$E_{\pm}^2 = \frac{\gamma_1^2}{2} + \left( v^2 + \frac{v_3^2}{2} \right) p^2 \pm \left[ \frac{(\gamma_1^2 + v_3^2p^2)^2}{4} + v^2p^2(\gamma_1^2 + v_3^2p^2) - 2\gamma_1v^2v_3p^3\cos(3\phi) \right]^{1/2} \quad (4.14)$$

O sinal negativo (positivo) corresponde a bandas mais baixas (altas) e  $\phi = \arctg(p_y/p_x)$  é o ângulo polar do momento  $\mathbf{p} = (p_x, p_y) = p(\cos\phi, \sin\phi)$ .

Lembrando que:

$$\pi = p_x + ip_y, \quad \pi^\dagger = p_x - ip_y$$

$$p = -i\hbar\nabla - e\mathbf{A}$$

$$B = \text{rot}\mathbf{A}$$

$$[\pi, \pi^\dagger] = 2eB$$

Fazendo  $\gamma_3 = 0$  recuperamos as bandas cilindricamente simétricas:

$$E_{\pm}^2 = \frac{\gamma_1^2}{2} \left[ 1 \pm \sqrt{\frac{4v^2p^2}{\gamma_1^2} + 1} \right] + v^2p^2 \quad (4.15)$$

A equação acima pode ser reescrita como:

$$E_{\alpha} = \left[ \frac{\gamma_1^2}{2} \left[ 1 + (-1)^{\alpha} \sqrt{\frac{4v^2p^2}{\gamma_1^2} + 1} \right] + v^2p^2 \right]^{1/2}$$

ou

$$E_{\alpha} = \frac{\gamma_1}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{2v^2p^2}{\gamma_1^2} + (-1)^{\alpha} \sqrt{\frac{4v^2p^2}{\gamma_1^2} + 1} \right]^{1/2}$$

onde  $\alpha = 1, 2$ . Considerando a forma dos níveis de Landau para o grafeno:

$$\epsilon_n = l_B \sqrt{2n+1} \quad (4.16)$$

com  $l_B = \sqrt{B}$ , escrevemos então a expressão [30]

$$\begin{aligned} l_B E_n &= \frac{\gamma_1 l_B}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{2(2n+1)}{\gamma_1^2 l_B^2} \pm \sqrt{\frac{4(2n+1)}{\gamma_1^2 l_B^2} + 1} \right]^{1/2} \\ \epsilon_n &= \frac{\gamma'_1}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{2}{\gamma_1'^2} (2n+1) \pm \sqrt{\frac{4}{\gamma_1'^2} (2n+1) + 1} \right]^{1/2} \\ \epsilon_n &= \frac{\gamma'_1}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{2}{\gamma_1'^2} (2n+1) \pm \sqrt{\left( 1 + \frac{2}{\gamma_1'^2} (2n+1) \right)^2 - \frac{16}{\gamma_1'^4} n(n+1)} \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde  $\epsilon_n = l_B E_n$  e  $\gamma'_1 = \gamma_1 l_B$ .

Quando  $n/\gamma_1' \ll 1$  a expressão acima pode ser simplificada por:

$$\epsilon_n = \pm \frac{2}{\gamma_1'} \sqrt{n(n+1)} \quad (4.18)$$

assumindo uma  $B$ -dependência linear para pequenas energias. Assim esses níveis de Landau seguem um espectro linear com uma dependência em  $B$  e a medida que a energia aumenta passa a obedecer uma dependência em  $\sqrt{B}$ , criando outro tipo de efeito Hall [6].

Abaixo modificaremos a configuração do sistema de bicamada, considerando a folha superior deslocada em relação a folha de baixo, para assim compararmos a relação de dispersão de energia.

### 4.2.1 Empilhamento AA da bicamada

A Figura 4.1 mostra a esquematização de duas folhas de grafeno empilhadas de tal forma que o ponto da subrede  $A_2$  fique exatamente sobre o ponto da subrede  $A_1$ . Seguindo essa configuração iremos aqui obter a dispersão de energia do sistema de bicamada. Os

vetores primitivos da subrede triangular são:

$$\mathbf{a}_1 = a(\sqrt{3}/2, 1/2) \quad \mathbf{a}_2 = a(\sqrt{3}/2, -1/2) \quad (4.19)$$

Diferente do empilhamento AB, feito anteriormente,  $\gamma_1 \approx 0.2eV$ . A representação matricial do operador Hamiltoniano é [31]:

$$\mathbf{H}_k = \begin{bmatrix} 0 & \gamma_1 & v\pi^\dagger & U \\ v_3\pi^\dagger & 0 & U & v\pi \\ v\pi & U & 0 & \gamma_1 \\ U & v\pi^\dagger & v_3\pi & 0 \end{bmatrix}$$

onde  $v = \frac{\sqrt{3}a\gamma_0}{2\hbar}$ ,  $v_3 = \frac{\sqrt{3}a\gamma_3}{2\hbar}$ . Montando o problema de autovalor  $\mathbf{H}_k\Psi = E\Psi$ , encontramos a dispersão de energia através de:

$$\det(H - EI) = \det \begin{bmatrix} -E & \gamma_1 & v\pi^\dagger & U \\ v_3\pi^\dagger & -E & U & v\pi \\ v\pi & U & -E & \gamma_1 \\ U & v\pi^\dagger & v_3\pi & -E \end{bmatrix}$$

$$= \gamma_1 A_{12} - E A_{22} + U A_{32} + v\pi^\dagger A_{42}$$

onde

$$A_{12} = E^2 v_3 \pi^\dagger + v^2 v_3 \pi^2 + v_3 \pi^\dagger \pi \gamma_1$$

$$A_{22} = -E^2 + E v^2 \pi \pi^\dagger + E v_3 \pi \gamma_1$$

$$A_{42} = v^3 \pi^2 \pi^\dagger - v v_3 \pi^{\dagger 2} \gamma_1 - E^2 v \pi$$

Para simplificação de cálculo, consideramos  $U=0$ . Substituindo os elementos encontrados na expressão do determinante obtemos:

$$\gamma_1(E^2 v_3 \pi^\dagger + v^2 v_3 \pi^2 + v_3 \pi^\dagger \pi \gamma_1) - E(-E^2 + E v^2 \pi \pi^\dagger + E v_3 \pi \gamma_1)$$

$$v\pi^\dagger(v^3 \pi^2 \pi^\dagger - v v_3 \pi^{\dagger 2} \gamma_1 - E^2 v \pi) = 0$$

$$E^4 - E^2(2v^2\pi\pi^\dagger + v_3\pi\gamma_1 + v_3\pi^\dagger\gamma_1) + \gamma_1^2 v_3^2 \pi^\dagger \pi + v^4 \pi^2 \pi^{\dagger 2} = 0$$

Por fim, obtemos a dispersão da energia no grafeno para o sistema de bicamada com empilhamento AA:

$$E_{\pm}^2 = \left( \gamma_1 + \frac{v^2 p}{v_3} \right) v_3 p \pm [2v^4 p^4 + 2v^2 v_3 p^3 \gamma_1 \cos(3\phi)]^{1/2} \quad (4.21)$$

A tabela abaixo compara os tipos de empilhamento para a bicamada de grafeno e grafite, em relação à energia de formação  $E_f$ :

Empilhamento	Grafite( $E_f$ )	Bicamada( $E_f$ )
0° (AB)	-65,86 eV	-21,8 eV
60° (AA)	-59,21 eV	-19,5 eV
21,79°	-63,70 eV	-21,2 eV
13,17°	-63,38 eV	-21 eV
9,43°	-63,35 eV	-21,1 eV
7,34°	-63,31 eV	-21,1 eV
6,01°	-63,18 eV	-20,9 eV
5,09°	-63,20 eV	-20,9 eV

Tabela 4.3: Energia de formação para os diversos empilhamentos da bicamada de grafeno e para o grafite. Adaptada de [32].

Experimentos recentes para uma bicamada de grafeno suspensa [33] e para outra crescida sobre um substrato de óxido de silício [10], conseguiram mostrar a quebra completa da degenerescência do nível de Landau de energia zero com o aumento do campo magnético, revelando a aparição de novos picos na condutância Hall com fator de preenchimento correspondentes a picos de efeito Hall quântico inteiro. Isto trata-se de uma observação experimental bastante clara da abertura de uma série de *gaps* entre níveis que inicialmente são degenerados no nível de Fermi ( $E=0$ ). As possíveis origens físicas para esta quebra na degenerescência são atribuídas a uma assimetria no sistema originada provavelmente por diferença na concentração de impurezas entre as camadas ou por interação elétron-elétron, entre outras causas.

## 5. Conclusões e perspectivas

Nesta dissertação fizemos um estudo teórico das propriedades eletrônicas básicas de monocamada e bicamada de grafeno.

No capítulo 1 foi feita uma breve introdução acerca das primeiras descobertas realizadas no estudo das características intrigantes do grafeno, características essas que vêm atraindo a atenção de cientistas ao redor do mundo e motivaram a formulação do presente trabalho. Dentre as muitas qualidades desse material, demos destaque às suas propriedades eletrônicas, como apresentado na seção 1.3.1.

No segundo capítulo observamos os efeitos da aplicação de um campo magnético externo, na dispersão das bandas de energias do grafeno. Durante esse estudo foi feita uma variação de calibre - inicialmente utilizamos o calibre de Landau e em seguida, o simétrico - como uma alternativa ao calibre de Landau comumente estudado. Obtivemos os níveis de energia de Landau, devido ao acoplamento do campo com o movimento orbital dos férmions, para o modelo contínuo. Na seção 2.1.3 o campo magnético aplicado foi escrito com uma dependência em  $x$ . Foi possível notar que os espaçamentos dos mesmos no grafeno são diferentes do que se espera normalmente para os níveis de Landau. Os mesmos resultados foram obtidos no capítulo 3, mas dessa vez seguindo o modelo de aproximação *tight – binding*.

Por fim, no capítulo 4 foi escrito o formalismo para o sistema de bicamada de grafeno, seguindo o modelo *tight – binding*, também para obtenção e análise dos níveis de Landau. Para a monocamada foi possível notar uma semidegenerescência quando  $n = 0$ , ou seja, nesse nível uma das componentes ( $\Psi^+$  ou  $\Psi^-$ )<sup>12</sup> sempre some.

---

<sup>12</sup>Dependendo do referencial, os pontos K ou K'.

Ao fim deste trabalho, pudemos demonstrar que, quando consideramos elétrons com baixas energias, o problema de um elétron sob a influência apenas do potencial devido aos infinitos átomos de carbono que compõem o grafeno torna-se equivalente ao problema de uma quasipartícula livre sem massa obedecendo à equação de Dirac.

Um dos fatores que fazem o grafeno tão atrativo para pesquisa é a dinâmica de elétrons neste material. Várias características interessantes são provenientes da descrição de Dirac para os elétrons no grafeno [34]. Por exemplo, para uma incidência completamente normal a uma barreira de potencial, este elétron pode tunelar pela barreira com probabilidade 1. Este efeito, chamado "paradoxo de Klein", está relacionado com o fato dos elétrons no grafeno apresentarem um espectro com energias negativas e positivas, de forma que quando o elétron atinge a barreira, ele a penetra e aparece na região da barreira como um buraco, de energia negativa. Com isso, torna-se bastante difícil o controle do comportamento do elétron através de potenciais elétricos em grafeno, e a criação de potenciais confinantes nestas estruturas, como pontos quânticos [35], não é tão óbvia.

Em resumo, mostramos que o grafeno consiste de um material interessantíssimo, tanto do ponto de vista da ciência, por nos proporcionar a possibilidade de se simular em laboratório efeitos relativísticos (como o tunelamento de Klein), como também do ponto de vista da tecnologia, por ser um material resistente, perfeitamente bidimensional, e que traz ainda dois novos graus de liberdade manipuláveis para a eletrônica: os vales e o pseudospin.

O estudo realizado aqui, apesar de ainda ser um tópico relativamente novo já está inserido num dos ramos principais da física de matéria condensada. É tanto pelo interesse nas incríveis propriedades quânticas de tais sistemas de grafeno, como pelas possibilidades futuras de aplicação tecnológica que o tópico já reuniu uma grande quantidade de pesquisadores teóricos e experimentais. Aqui tentamos contribuir com esse crescente campo de pesquisa.

# Apêndice - Coordenadas dos pontos de Dirac

A diferença entre as subredes A e B é uma rotação de  $\pi$ . Expressando isso de forma mais formal, escolhemos os dois vetores primitivos da rede da seguinte maneira:

$$\vec{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

onde  $a$  é a distância entre dois pontos da rede. A origem desses vetores primitivos está localizada no meio da célula hexagonal. Como queremos aqui as posições dos átomos de carbono, com dois vetores unitários  $\vec{e}_A$  e  $\vec{e}_B$  podemos distinguir as duas subredes e também caracterizar toda a rede por um vetor espacial. Os vetores unitários são dados por:

$$\vec{e}_A = a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \end{pmatrix}, \quad \vec{e}_B = -a \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

A visualização desses vetores unitários pode ser feita com a figura abaixo:

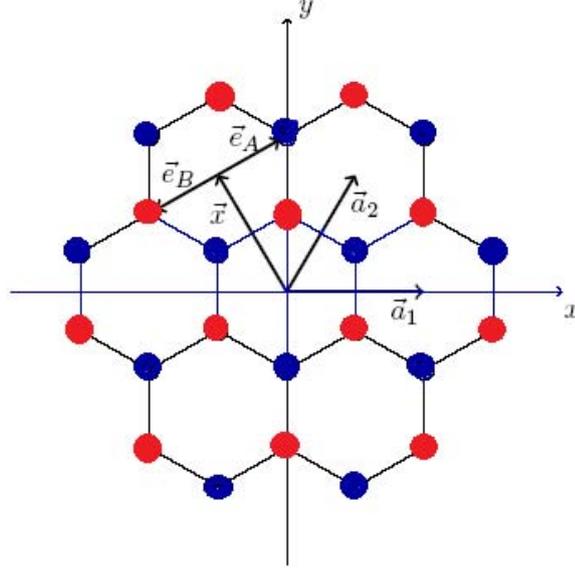


Figura A.1: Os vetores primitivos  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ , o vetor espacial  $\vec{x}$  conectando os centros de dois hexágonos e os vetores unitários  $\vec{e}_A$  e  $\vec{e}_B$  distinguindo a subrede A (azul) e B (vermelho).

Os vetores primitivos da rede recíproca são encontrados pela relação A.1 e a condição de Laue:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad i, j \in 1, 2$$

com isso escrevemos os vetores

$$\vec{b}_1 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \vec{b}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

Assim, na primeira zona de Brillouin contamos seis extremidades, que podem ser arranjadas em dois conjuntos, o primeiro deles corresponde aos pontos K:

$$\frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} -\frac{\sqrt{3}}{6} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

O segundo conjunto de pontos, correspondendo aos pontos K', é:

$$\frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{6} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Referente à periodicidade da zona de Brillouin, apenas dois pontos são realmente

importantes, por essa razão, escolhemos como representação para os pontos  $K$  e  $K'$  as seguintes coordenadas:

$$K = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad K' = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

Esses dois pontos são de particular importância para o estudo do grafeno [36]. Coincidentemente, a dispersão das bandas de energias tocam em seis pontos do espaço recíproco, são os chamados pontos de Dirac, e têm as mesmas coordenadas das extremidades da primeira zona de Brillouin aqui encontradas. É por essa razão que os pontos  $K$  e  $K'$  são chamados de pontos de Dirac.

A estrutura das bandas mostrada na Eq. 3.12 é composta de uma parte de valência ( $E_v \leq 0$ ) e outra de condução ( $E_c \geq 0$ ), encontramos as coordenadas dos seis pontos em que elas tocam seguindo a condição  $E(k_x, k_y) = 0$ , ou seja, igualando a zero a parte real e imaginária de  $g(k_x, k_y)$  na Eq. 3.8 [23].

## Referências Bibliográficas

- [1] 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**, 109. 54p. (2009).
- [2] B. Gharekhanlou, S. Khorasani, *Graphene: Properties, Synthesis and Applications*, Zhiping Xu, 2011.
- [3] P. R. Wallace, *The Band Theory of Graphite*, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
- [4] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, *Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene*, Nature **438**, 197(2005).
- [5] Y. Zhang, YW. Tan, H. L. Stormer, P. Kim, *Experimental Observation of The Quantum Hall Effect and Berry's Phase in Graphene*, Nature **438**, 201(2005).
- [6] K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Fal'ko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, A. K. Geim, *Unconventional Quantum Hall Effect and Berry's Phase of  $2\pi$  in Bilayer Graphene*, Nat. Phys. **2**, 177(2006).
- [7] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, A. K. Geim, *Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene*, Science **315**, 1379(2007).
- [8] Y. Zhang, Z. Jiang, J. Small, M. Purewal, YW. Tan, M. Fazlollahi, J. Chudow, J. Jaszczak, H. Stormer, P. Kim, *Landau-Level Splitting in Graphene in High Magnetic Fields*, Phys. Rev. Lett. **96**, 136806(2006).
- [9] Z. Jiang, Y. Zhang, H. Stormer, P. Kim, *Quantum Hall States near the Charge-Neutral Dirac Point in Graphene*, Phys. Rev. Lett. **99**, 106802(2007).
- [10] Y. Zhao, P. Cadden-Zimansky, Z. Jiang, P. Kim, *Symmetry Breaking in The Zero-Energy Landau Level in Bilayer Graphene*, Phys. Rev. Lett. **104**, 066801(2010).
- [11] F. Molitor, J. Güttinger, C. Stampfer, D. Graf, T. Ihn, K. Ensslin, *Local Gating of a Graphene Hall Bar by Graphene Side Gates*, Phys. Rev. B **76**, 245426(2007).
- [12] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, *Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene*, Science (New York, N.Y.) **320**, 1308. (2008).

- [13] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C. N. Lau, *Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene*, Nano Letters **8**, 902-907. (2008).
- [14] S. R. Das, C. J. Delker, D. Zakharov, Y. P. Chen, T. D. Sands, D. B. Janes, *Room Temperature Device Performance of Electrodeposited InSb Nanowire Field Effect Transistors*, Applied Physics Letters **98**, 243504-3. (2011).
- [15] Y. W. Son, M. L. Cohen, S. G. Louie, *Energy Gaps in Graphene Nanoribbons*, arXiv:cond-mat/0611602v1 [cond-mat.mes-hall]. 4p. (2006).
- [16] R. E. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Clarendon, Oxford. (1955).
- [17] P. Blake, E. W. Hill, A. H. Castro Neto, K. S. Novoselov, D. Jiang, R. Yang, T. J. Booth, A. K. Geim, *Making Graphene Visible*, Appl. Phys. Lett. **91**, 063124. (2007).
- [18] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubons, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films*, Science, vol. 306, n° 5696 pp. 666-669. (2004).
- [19] J. C. Brant, *Transporte Elétrico em Nanoestruturas de Grafeno: Influência da Funcionalização, da Geometria e da Dopagem do Substrato*, Tese (Doutorado em Física). Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais. 2011. 106p.
- [20] W. A. Muñoz, *Efeitos de Desordem e Localização Eletrônica em Bicamada de Grafeno*, Dissertação (Mestrado em Física). Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas. 2010. 75p.
- [21] M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Dover, Nova York, nona edição, pp. 686. (1972).
- [22] R. Saito, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press. 1998.
- [23] S. H. R. Sena, *Propriedades Eletrônicas de Tri-camada de Grafeno e Nanofitas de Carbono Tensionadas*, Tese (Doutorado em Física). Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará. 2012. 113p.
- [24] R. P. Feynman, *Lectures on Physics*, Addison-Wesley, New York. Vol.III. 1965.
- [25] G. Metalidis, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Tese (Doutorado em Física), Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät (mathematisch-naturwissenschaftlicher Bereich) der Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. Genk, Belgien. 147p. (1980).
- [26] E. McCann, M. Koshino, *The Electronic Properties of Bilayer Graphene*, Rep. Prog. Phys. **76**, 056503. 28p. (2013).
- [27] Y. Barlas, K. Yang, A. H. MacDonald, *Quantum Hall Effects in Graphene-Based Two-Dimensional Electron Systems*, arXiv:1110.1069v1 [cond-mat.mes-hall]. 21p. (2011).

- [28] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, *Intercalation Compounds of Graphite*, Adv. Phys. **51**, 1 (2002).
- [29] A. B. Kuzmenko, I. Crassee, D. van der Marel, P. Blake, K. S. Novoselov, *Determination of the Gate-Tunable Bandgap and Tight-Binding Parameters in Bilayer Graphene Using Infrared Spectroscopy*, arXiv:0908.0672v1. [cond-mat.str-el]. 13p. (2009).
- [30] J. M. Pereira Jr., F. M. Peeters, P. Vasilopoulos, *Landau Levels and Oscillator Strength in a Biased Bilayer of Graphene*, arXiv:0708.0843v1 [cond-mat.mes-hall]. 9p. (2007).
- [31] C. J. Tabert, E. J. Nicol, *Dynamical Conductivity of AA-Stacked Bilayer Graphene*, arXiv:1208.1698v1. [cond-mat.mes.hall]. 13p. (2012).
- [32] T. G. Mendes-de-Sa, A. M. B. Gonçalves, M. J. S. Matos, P. M. Coelho, R. Magalhães-Paniago, R. G. Lacerda, *Correlation Between (in)Commensurate Domains of Multilayer Epitaxial Graphene Grown on SiC and Single Layer Electronic Behavior*, Nanotechnology. **23**, 475602. (2012).
- [33] B. E. Feldman, J. Martin, A. Yacoby, *Broken-Symmetry States and Divergent Resistance in Suspended Bilayer Graphene*, Nature Physics **5**, 889 (2009).
- [34] P. Hewageegana, V. Apalkov, *Electron Localization in Graphene Quantum Dots*, Phys. Rev. B **77**, 245426 (2008).
- [35] J. M. Pereira Jr., P. Vasilopoulos, F. M. Peeters, *Tunable Quantum Dots in Bilayer Graphene*, Nano. Lett. **7**, 946 (2007).
- [36] S. Schwarz, *Properties of Graphene in a External Magnetic Field*, Monografia (Bacharelado em Física), Philosophisch-naturwissenschaftlichen Fakultät, Universität Bern, Zürich. 51p. (2011).
- [37] F. Munoz-Fojas, J. Fernandez-Rossier, J. J. Palacios, *Giant Magnetoresistance in Ultra-Small Graphene Based Devices*, arXiv:0811.3831v1 [cond-mat.mes-hall]. 5p. (2008).
- [38] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology*, John Wiley & Sons, Inc. 1972.
- [39] N. W. Ashcroft, *Solid State Physics*, Harcourt, Inc. 1976.
- [40] H. C. Ohanian, *Gravitation and Spacetime*, W. W. Norton & Company, Inc. 1976.
- [41] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Quantum Mechanics*, Hermann and John Wiley & Sons, Paris. Vol. 1. 1997.
- [42] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, 2nd ed.
- [43] J. D. Bjorken, S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, Inc. 1964.
- [44] A. Chaves, *Dinâmica de Pacotes de Onda em Semi-Condutores e Grafeno e de Vórtices em Supercondutores*, Tese (Doutorado em Física). Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal do Ceará. 2010. 224p.

- [45] N. M. R. Peres, E. V. Castro, *Algebraic Solution of a Graphene Layer in a Transversive Electric and Perpendicular Magnetic Fields*, arXiv:0709.0646v1 [cond-mat.mes-hall]. 11p. (2007).
- [46] JN. Fuchs, *Dirac Fermions in Graphene and Analogues: Magnetic Field and Topological Properties*, arXiv:1306.0380v1 [cond-mat.mes-hall]. 77p. (2013).
- [47] V. Lukose, R. Shankar, G. Baskaran, *Novel Electric Field Effects on Landau Levels in Graphene*, arXiv:cond-mat/0603594v3 [cond-mat.mes-hall]. 4p. (2007).
- [48] J. F. Donoghue, B. R. Holstein, *Quantum Mechanics in Curved Space*, Am. J. Phys. **54**, 827. 6p. (1986).
- [49] E. McCann, V. I. Fal'ko, *Landau-Level Degeneracy and Quantum Hall Effect in a Graphite Bilayer*, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805. 4p. (2006).
- [50] S. H. R. Sena, J. M. Pereira Jr., G. A. Farias, F. M. Peeters, R. N. Costa Filho, *The Electronic Properties of Graphene and Graphene Ribbons Under Simple Shear Strain*, J. Phys. Condens Matter **24**, 375301. 9p. (2012).
- [51] T. D. Lee, *Particle Physics and Introduction to Field Theory*, OPA, Amsterdam, B.V. 1981.
- [52] D. J. P. De Sousa, *Nanofitas de Nitreto de Boro Dopadas Sob Efeito de um Campo Magnético Uniforme*, Monografia (Bacharelado em Física). Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará. 2013. 53p.
- [53] R. Peierls, *On The Theory of The Diamagnetism of Conduction Electrons*, Z. Physik **80**,763. (1933).
- [54] H. Caldas, R. O. Ramos, *Magnetization of Planar Four-Fermion Systems*, arXiv:0907.0723v3 [cond-mat.soft]. 10p. (2009).
- [55] P. H. A. Manso, *Teoria Quântica de Campos para Férmions Interagentes no Plano a Temperatura e Potencial Químico Finitos, na Presença de um Campo Magnético Externo Oblíquo*, Dissertação (Mestrado em Física). Programa de Pós-Graduação em Física, Instituto de Física Armando Dias Tavares, Universidade Estadual do Rio de Janeiro. 2011. 90p.
- [56] K. G. Klimenko, R. N. Zhokhov, *Magnetic Catalysis Effect in The (2+1)-Dimensional Gross-Neveu Model with Zeeman Interaction*, arXiv:1307.7265v3. [hep-ph]. 14p. (2013).
- [57] M. Ezawa, *Intrinsic Zeeman Effect in Graphene*, arXiv:0707.0353v1. [cond-mat.mes-hall]. 24p. (2007).