

MIGUEL JORGE SALDAÑA JIMENEZ

**ESTUDO DE TRANSPORTE E TUNELAMENTO
QUÂNTICO EM ESTRUTURAS DE GRAFENO DOPADAS**

Tese apresentada como requisito parcial à obtenção de grau de Doutor. Área de concentração: Engenharia e Ciência dos Materiais, Programa de Pós-graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais - PIPE. Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná

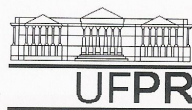
Orientador: Prof. Dr. César Augusto Dartora

CURITIBA

2015

-
- J61e Jimenez, Miguel Jorge Saldaña
 Estudo de transporte e tunelamento quântico em estruturas de grafeno dopadas / Miguel Jorge Saldaña Jimenez. – Curitiba, 2015.
 82f. : il. [algumas color.] ; 30 cm.
- Tese (doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais, 2015.
- Orientador: César Augusto Dartora.
 Bibliografia: p. 79-82.
1. Grafeno. 2. Correntes polarizadas em spin. I. Universidade Federal do Paraná. II. Dartora, César Augusto. III. Título.

CDD: 537.622



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
 Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais
 Setor de Tecnologia

RELATÓRIO DE DEFESA DE TESE DE DOUTORADO

Aos vinte e um dias do mês de outubro de 2015, no TC/DELT/Predio anexo sala PL 10 - no Centro Politécnico - UFPR, foi instalada pela Prof.^a Dr.^a Ana Sofia C. M. de Oliveira, coordenadora do PIPE – Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais, a Banca Examinadora para a septuagésima sétima defesa de tese de doutorado na área de concentração: Engenharia e Ciência dos Materiais. Estiveram presentes no ato, professores, alunos e visitantes. A Banca Examinadora, atendendo a determinação do colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciência dos Materiais, foi constituída pelos professores doutores: César Augusto Dartora (UFPR), Dante Homero Mosca Junior (UFPR), José Varalda (UFPR), Kléber Zuza Nóbrega (IFMA), Guillermo Geraldo Cabrera Oyarzun (Unicamp). Às 14:00 horas, a banca iniciou os trabalhos, convidando o candidato **MIGUEL JORGE SALDAÑA JIMENEZ** a fazer a apresentação da tese de doutorado intitulada “**ESTUDO DO TRANSPORTE E TUNELAMENTO QUÂNTICO EM ESTRUTURAS DE GRAFENO DOPADAS**”. Encerrada a apresentação, iniciou-se a fase de argüição pelos membros participantes. Tendo em vista a tese e a argüição, a banca decidiu pela APROVAÇÃO do candidato, (de acordo com a determinação dos artigos 68 e 69 da resolução 65/09 de 09.11.2009).

Curitiba, 21 de outubro de 2015.

Prof. Dr. César Augusto Dartora.
Orientador

Prof. Dr. Dante Homero Mosca Junior
Examinador

Prof. Dr. José Varalda
Examinador

Prof. Dr. Kléber Zuza Nóbrega
Examinador

Prof. Dr. Guillermo Geraldo Cabrera
Oyarzun
Examinador

Prof.^a Dr.^a Ana Sofia C. M. d'Oliveira
Coordenadora do PIPE

"Imaginação é mais importante que inteligência"

Albert Einstein

AGRADECIMENTOS

- Ao meu pai, pela educação exemplar e por sua visão que despertou em mim, desde criança, a de estudar sempre sem parar , pois todo o conhecimento adquirido, de alguma forma, algum dia será aproveitado;
- A minha mãe, pelo seu amor e dedicação, que me ensinou através de minha vida, sempre amar e respeitar;
- A minha irmã Maria Luisa, pelo apoio incondicional durante minha formatura e parte do mestrado e doutorado, desejando-lhe sempre muita saúde e anos de vida;
- Aos meus amigos de Perú, Brasil, Colômbia, Argentina, Costa Rica, Venezuela, Equador, Honduras, El Salvador, França, etc, que fizeram parte de momentos inesquecíveis nestes quase quatro anos em Curitiba, desejando-lhes muitos êxitos em suas vidas pessoal e acadêmica;
- Em especial ao professor Dr. César Augusto Dartora, por esta oportunidade contribuindo para meu enriquecimento acadêmico, respectivamente, com sua orientação, dedicação e paciência nesta etapa muito importante para todo aluno que faz Doutorado;
- Aos meus amigos Christian Vega, Felipe Wisniewski e Rafael Pazin que fazem até hoje parte de uma grande amizade, por sua ajuda em momentos que precisava durante este periodo transcurrido de estudo.
- Aos meus caros colegas do LAMMI da Engenharia Elétrica da UFPR, Bruno, Leonardo, Henrique, Eduardo, Thais, Lucas, Célia, Bruna, Cassiano, Igor, Pedro, William, Matheus, Thiago e Lécio por fazer parte e compartilhar dia a dia suas amizades, momentos agradáveis e seu apoio incondicional em momentos que precisava, e os professores Doutores Márlio e Horácio por suas conversas muito produtivas que ajudaram e ainda continuam ajudando em meus projetos futuros;
- Ao Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior(CAPES), pelo apoio financeiro.

RESUMO

O grafeno é uma forma alotrópica do carbono em duas dimensões espaciais formada por uma única camada de átomos de carbono que se arranjam para formar uma estrutura cristalina do tipo favo de mel. Apesar de estudos seminais no grafeno terem se iniciado ainda em 1947 com R.P. Wallace, sua obtenção experimental somente ocorreu nos anos 2000, devido ao trabalho de A. Geim e K. Novoselov, dentre outros. O enorme interesse despertado pelo grafeno deve-se ao fato de que ele é um material bidimensional onde os elétrons tem comportamento efetivo de férmions de Dirac sem massa nos chamados pontos de Dirac, ou seja, agem efetivamente como partículas “relativísticas” sem massa em um espaço-tempo de $(2+1)$ dimensões, permitindo emular a física de altas energias em um sistema de matéria condensada. Além disso, o grafeno promete revolucionar a eletrônica de alta velocidade, e atualmente estudos com o grafeno estão sendo direcionados para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos e utilização na spintrônica, que estuda as propriedades de transporte quântico de carga e spin na escala de dimensões nanométricas. Neste sentido, é de fundamental interesse compreender a dinâmica do transporte quântico de carga e spin em nanoestruturas utilizando o grafeno, como junções de tunelamento. O objetivo principal deste trabalho é apresentar um modelo simples para o transporte de carga e spin com base no método do hamiltoniano de transferência em segunda quantização, permitindo obter as características $I - V$ de junções túnel no grafeno. Tanto as características $I - V$ em junções de tunelamento de grafeno não dopadas quanto aquelas dopadas são estudadas. As nanoestruturas propostas são compostas de eletrodos de grafeno separados por uma barreira de potencial U_o . Essa região de barreira de potencial pode ser obtida através da aplicação de um potencial de gate em uma região previamente determinada. No caso de dopagem das regiões à esquerda e à direita da barreira, junções do tipo $p - n$ são obtidas, podendo-se observar o efeito diodo túnel, com uma clara região de condutância diferencial negativa. O efeito de dopagem nesse caso altera o potencial químico próximo dos pontos de Dirac em ambos os lados da barreira de potencial, mostrando como resultado a típica curva $I - V$ de um diodo túnel. As correntes de spin também foram calculadas na presença de campos magnéticos baixos, que são menores que 5T no caso do grafeno, mostrando claramente a existência da passagem de uma corrente polarizada em spin através da barreira.

Palavras-Chave: grafeno, férmions de Dirac, tunelamento, correntes polarizadas em spin.

ABSTRACT

Graphene is an allotropic form of carbon in two spatial dimensions, in which a single atomic layer is arranged in a honeycomb lattice structure. Despite the seminal work in graphene is due to R.P. Wallace already in 1947, the experimental production occurred only in the years of 2000 by A. Geim, K. Novoselov and othes. The enormous interest in graphene studies is due to the fact that it is a truly two-dimensional material, in which electrons behave as massless Dirac fermions at the so-called Dirac points, i.e., they act as massless relativistic particles in a (2+1)-dimensional space-time, allowing to emulate high energy physics through a condensed matter system. Besides that, graphene promises to revolutionize the field of high speed electronics. Currently, the research is being directed towards the development of electronic devices and uses in spintronics, which is concerned with the study of properties of the charge and spin quantum transport in nanostructures. This way, it is of fundamental importance to understand the dynamics of charge and spin quantum transport in graphene nanostructures, such as graphene tunneling junctions. The main goal of the present work is to put forward a simple model of charge and spin transport based on the transfer hamiltonian method, written using second quantized operators. It allows one to obtain the $I - V$ characteristics of graphene tunnel junctions, in undoped as well as doped graphene junctions. The proposed nanostructures consist of graphene electrodes separated by a potential barrier region, which can be obtained by means of an applied gate potential. In the doped case the regions at the left and right sides of the barrier can be properly doped, to obtain a $p - n$ junction, in which a tunnel diode effect is observed, for which a clear voltage bias region of negative differential conductance. The doping affects the chemical potential near the Dirac points at both sides of the potential barrier, and such structures display typical tunnel diode $I - V$ curves. The spin-polarized currents were also calculated in the presence of low magnetic fields, lesser than 5T in graphene, clearly showing the existence of a spin-polarized current traversing the tunnel junction.

Keywords: graphene, Dirac fermions, tunneling, spin-polarized currents.

SUMÁRIO

RESUMO	v
ABSTRACT	vi
LISTA DE FIGURAS	viii
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Justificativa e Objetivos	5
1.2 Estrutura da Tese	5
2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS	7
2.1 Grafeno	7
2.2 Modelo de <i>tight-binding</i> com primeiros vizinhos	11
2.3 Bandas de Energia no Grafeno	16
2.4 A equação de Dirac em um espaço-tempo de (1+2) dimensões	19
2.5 A quantização canônica do campo de Dirac	24
3 JUNÇÃO DE TUNELAMENTO BASEADA NO GRAFENO	31
3.1 Lagrangeano de Dirac em duas dimensões espaço - tempo $(1 + 2)D$	31
3.2 Hamiltoniano de transferência na junção de tunelamento.	32
3.3 Efeito de Tunelamento aplicando um campo magnético considerando a densidade de corrente de spin	49
3.3.1 A spintrônica e correntes spin-polarizadas	50
3.3.2 A corrente spin-polarizada através da junção de tunelamento no grafeno	53
4 RESULTADOS	55
4.1 A junção túnel de grafeno intrínseco	56
4.2 Junção de grafeno do tipo p-n	61
5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	69
A FORMULISMO TENSORES E FERRAMENTAS RELATIVÍSTICAS	71
A.1 Definição de um tensor	71
A.2 Convenção do Somatório de Einstein e o tensor métrico g	71
A.3 Quadri vetores covariantes e contravariantes	72

B FERMIONS DE DIRAC SEM MASSA (1+2)D NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO \perp AO PLANO	76
Bibliografia	79

LISTA DE FIGURAS

1.1	Curva característica I-V de um diodo túnel.	4
2.1	Rede hexagonal do grafeno no espaço real com seus respectivos vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2	8
2.2	Os orbitais p_z e sp^2 do carbono. Os orbitais sp^2 formam ângulos de 120° entre si no plano (x, y) e são todos ortogonais no espaço ao orbital p_z , que é perpendicular ao plano (x, y) e comporta dois elétrons com spins contrários. A combinação de átomos de carbono com hibridização sp^2 contidos no plano leva automaticamente à estrutura de favo de mel.	10
2.3	Rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco, com seus respectivos vetores unitários \vec{b}_1 e \vec{b}_2	11
2.4	Os primeiros e segundos vizinhos na rede hexagonal do grafeno no espaço real.	12
2.5	Representação dos 3 primeiros vizinhos da sub-rede A são $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ respectivamente.	14
2.6	Primeira Zona de Brillouin para a rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco.	15
2.7	Primeira Zona de Brillouin mostrando os 2 pontos de Dirac \vec{k} e \vec{k}' no espaço recíproco.	16
2.8	Dispersão de energia das bandas de condução e valência do grafeno.	19
2.9	Zona de Brillouin em 2D - Banda de condução.	19
2.10	Zona de Brillouin em 2D - Banda de valência.	19
3.1	Esquema de uma junção túnel no grafeno: Uma barreira de potencial de altura U_0 e espessura d é formada ao longo do eixo x , por meio de um potencial de gate aplicado. Os lados esquerdo e direito da barreira podem ser distintamente dopados de forma a tornarem-se semicondutores tipo-p ou tipo-n.	33
3.2	Criação da barreira de potencial na rede do grafeno quando aplica-se um potencial externo V e representação esquemática da distribuição das bandas de energia nas regiões 1 e 3, longe da região de barreira.	34
3.3	Formação da barreira de potencial experimentalmente no grafeno.	35
3.4	Relação de dispersão e potencial químico no grafeno intrínseco.	43
3.5	(a) Deslocamento do potencial químico no grafeno para cima por efeito de dopagem tipo n, ou alternativamente (b) o deslocamento do ponto de Dirac no sentido contrário.	44

3.6	(a) Deslocamento do potencial químico no grafeno para baixo por efeito de dopagem tipo p, ou alternativamente (b) o deslocamento do ponto de Dirac no sentido contrário.	44
3.7	A estrutura das bandas de ambos os lados da barreira de tunelamento, quando não há dopagem.	45
3.8	Estrutura das bandas para dopagem tipo p em ambos os lados da barreira de potencial.	45
3.9	Estrutura das bandas para dopagem tipo n em ambos os lados da barreira de potencial.	46
3.10	Estrutura da banda de energia $\mathbf{E}_{\mathbf{k}}$ versus $ \mathbf{k} $, para uma dopagem n do lado esquerdo e p do lado direito da barreira.	46
3.11	A Lei de Snell através da barreira de potencial.	48
3.12	Transporte de portadores convencional, onde $I_Q \neq 0$ e $I_S = 0$ versus transporte spin-polarizado, onde $I_Q \neq 0$ e $I_S \neq 0$	51
3.13	Transporte de portadores ideal na spintrônica onde onde $I_Q = 0$ e $I_S \neq 0$	52
4.1	Característica $I - V$ para uma junção de tunelamento no grafeno intrínseco (não dopado) para barreiras de altura $U_0 = 5, 10$ e 15eV : (a) Densidade de corrente $J(V)$ e (b) Condutividade diferencial $G(V) = dJ/dV$, em unidades arbitrárias apresentadas na Ref. [67].	56
4.2	Estudo experimental das características $I - V$ numa junção de tunelamento no grafeno, apresentado na Ref. [25].	58
4.3	a) Estudo das características não lineares na relação $I - V$ e b) Condutância através de uma barreira de potencial em uma monocamada de grafeno, de acordo com medidas efetuadas e apresentadas pela Ref. [68].	59
4.4	a) Estudo das características não lineares na relação $I - V$ e b) Condutância através de uma barreira de potencial em uma monocamada de grafeno, de acordo com medidas efetuadas e apresentadas pela Ref. [68].	60
4.5	Características $I - V$ para uma junção de tunelamento no grafeno intrínseco (não dopado) para barreiras de espessura $d=5, 50, 100$ e 150 nm, fixando a altura da barreira para $U_0 = 15\text{eV}$	61
4.6	Características $I - V$ numa junção de tunelamento para o grafeno p-n para $\mu_{q-L} = -0.4\text{eV}$ e $\mu_{q-R} = 0.5\text{eV}$ considerando altura da barreira de potencial nos valores $U_0 = 5, 10$ e 15eV : (a) Densidade de corrente $J(V)$ e (b) Condutividade diferencial $G(V) = dJ/dV$, em unidades arbitrárias [67].	63
4.7	Características $I - V$ numa junção de tunelamento no grafeno p-n (dopado) para $\mu_{q-L} = -0.4\text{eV}$ e $\mu_{q-R} = 0.5\text{eV}$ considerando a espessura da barreira de potencial nos valores $d = 5, 50, 100$ e 150nm , fixando a altura da barreira de potencial $U_0 = 15\text{eV}$	64

4.8	Densidade de corrente de spin, em unidades arbitrárias, na ausência de campo magnético, ou seja, $B = 0T$	64
4.9	Comportamento da densidade de corrente elétrica $J(V)$ em unidades arbitrárias, para 3 temperaturas diferentes, $T = 4,2K$, $77K$ e $300K$ com campo magnético $B = 1T$	65
4.10	Densidade de corrente de spin em unidades arbitrárias, com campo magnético $B = 1T$	66
4.11	A densidade de corrente de spin em função da tensão aplicada, em unidades arbitrárias, para valores de campo magnético $B = 0, 0.5$ e $1T$	67
4.12	Condutividade diferencial $G(V) = dJ/dV$, em unidades arbitrárias, com campo magnético $B = 1T$	68
4.13	Condutividade diferencial de spin $G_s(V) = dJ_s/dV$, em unidades arbitrárias, com campo magnético $B = 1T$	68

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Na atualidade o silício é o principal material utilizado na indústria eletrônica e microeletrônica, o que deve-se ao fato de ser o semicondutor mais abundante (o Si é o segundo elemento mais abundante na crosta terrestre, ficando atrás somente do oxigênio, que está presente na composição dos mais variados óxidos) e barato dentre todos elementos semicondutores clássicos, que incluem o germânio e o arseneto de gálio, sendo de fácil extração a partir da sílica, e é utilizado na produção de transistores, chips, células solares e uma infinidade de outros dispositivos eletrônicos. Todavia, com o avanço tecnológico a era da chamada microeletrônica está dando lugar ao campo da nanoeletrônica, onde não somente a carga eletrônica como também o spin tem papel relevante no transporte e nas propriedades dos dispositivos eletrônicos, vide a descoberta dos dispositivos de GMR (Giant Magnetoresistance), que revolucionaram a indústria de armazenamento de dados [1, 2]. Essa nova área de estudos que inclui o spin na dinâmica do transporte denomina-se spintrônica e para a sua concretização se faz necessário o uso de novos materiais capazes de transportar correntes polarizadas em spin, onde o livre caminho médio do spin seja suficientemente longo, comparado aos semicondutores tradicionais. Por volta de 2004 os russos Andre Geim e Konstantin Novoselov demonstraram experimentalmente a existência de um material bastante promissor, denominado grafeno, que poderá ser combinado ao Si ou eventualmente até mesmo substituí-lo em dispositivos nanoestruturados com potenciais aplicações para a spintrônica. Pelo feito os pesquisadores ganharam o prêmio Nobel de Física em 2010 [3, 4]. O grafeno é uma forma alotrópica do carbono, obtido originalmente através de uma técnica bastante simples de esfoliação, onde uma fita adesiva foi aplicada a uma placa de grafite sucessivamente até chegar ao grafeno de espessura de uma única camada de átomos de carbono. O grafeno é um material extremamente resistente, flexível, com excelentes propriedades térmicas, transparente, impermeável e com uma mobilidade dos elétrons 100 vezes mais rápida que o cobre. Esta propriedade do grafeno permite-nos fazer eletrônica flexível e pode ser utilizado em muitas aplicações tecnológicas: dispositivos fotônicos, compósitos, indústria aeronáutica, biomédica, indústria automotiva, aeroespacial, telecomunicações, energia de componentes e sensores.

No grafeno os átomos de carbono se arranjam em uma estrutura cristalina com o formato de favo de mel (ou *honeycomb*), onde os vértices dos hexágonos estão ocupados por um carbono. Trata-se do primeiro material verdadeiramente bidimensional porque possui apenas uma camada atômica, que adquire estabilidade quando repousa sobre um substrato adequado. Na mais espetacular previsão teórica para o grafeno, confirmada

experimentalmente, os elétrons tem comportamento de férmions de Dirac sem massa próximo dos chamados pontos de Dirac, ou seja, atuam efetivamente como partículas "relativísticas" sem massa em um espaço-tempo de $(2+1)$ dimensões, sendo duas dimensões espaciais e uma temporal. Esse comportamento exótico parece abrir as portas para a eletrônica de alta velocidade, bem como para a simulação de problemas de altas energias através de sistemas de matéria condensada. O caráter de férmion de Dirac sem massa para os elétrons de condução faz com que o grafeno situe-se na transição entre um metal e um semicondutor, podendo ser considerado efetivamente um material semicondutor sem gap entre as bandas de valência e condução. O fato de os elétrons se comportarem efetivamente como partículas relativísticas sem massa faz com que relação entre energia e momento, chamada de relação de dispersão, seja linear nos pontos de Dirac [3, 5, 6]. Nesse caso, a densidade de estados do grafeno varia linearmente com a energia, sendo típica de uma partícula relativística sem massa, e anula-se exatamente no chamado ponto de Dirac, que separa as bandas de condução e valência. No grafeno não dopado, a energia de Fermi encontra-se exatamente no dois pontos de Dirac [7]. A conservação destas características na síntese experimental do grafeno é de fundamental importância para a observação de suas propriedades eletrônicas. A presença de defeitos no grafeno como vacâncias e impurezas na sua estrutura altera suas propriedades, como por exemplo, a diminuição da mobilidade dos elétrons.

O caráter relativístico dos elétrons no grafeno tem sido provado através de medidas da densidade de estados, ou também através do uso de campos magnéticos altos, produzindo anomalias no efeito Hall quântico que é característica exclusiva dos férmions de Dirac sem massa [8, 9], abrindo caminho para o estudo dos efeitos de densidade de corrente de spin, que são essenciais no campo da spintrônica [10, 11, 12, 13, 14, 15]. Outra evidência em favor do comportamento efetivamente relativístico dos elétrons no grafeno é a existência do chamado tunelamento de Klein através de uma barreira potencial [16], cuja principal característica é que quanto maior a altura da barreira de potencial, mais transparente ela torna-se para as partículas relativísticas incidentes [17, 18, 19]. Vários experimentos baseados em junções de tunelamento foram criados com a finalidade de pesquisar o efeito túnel de férmions de Dirac no grafeno.

Indo adiante, uma questão da maior relevância para a formação de junções tipo p-n ou p-p de grafeno é o contato do grafeno com metais, produzindo efeitos de interface sobre os portadores de carga elétron-buraco. Na referência [20], pode-se observar que os pesquisadores realizaram várias medições para analisar o comportamento do transporte elétrico no grafeno para vários tipos de geometria. Em uma primeira instância fizeram-se medições de propriedades elétricas de transporte em uma monocamada de grafeno sem colocar contatos metálicos nas bordas laterais da lâmina de grafeno, demonstrando um comportamento linear e simétrico nas curvas da condutância e densidade de estados. Quando os pesquisadores fizeram as mesmas medições colocando os contatos metálicos nas

bordas da lâmina de grafeno, um forte comportamento assimétrico e não linear na curva da condutância foi percebido, devido ao efeito de interface na junção metal/grafeno, tendo este comportamento assimétrico na curva da condutância sido atribuído a uma possível assimetria no número de ocupação de elétrons e buracos que ocasiona uma tendência de polaridade de carga no transporte no grafeno.

Os pesquisadores Malec e Davidovic [21] produziram experimentalmente junções túnel entre óxido de grafeno e metais como o alumínio (*Al*) e cobre (*Cu*), com o objetivo de fabricar um transistor com efeito de campo e estudar o comportamento da energia e as densidades de estado deste dispositivo eletrônico quando se aplica um campo elétrico externo. Além disso, foi realizado o estudo teórico usando o hamiltoniano de *tight-binding* com condições de fronteira periódicas, adicionando um potencial com impurezas colocadas aleatoriamente no hamiltoniano, para determinar o comportamento da energia e densidades de estados. As medidas experimentais sugeriram a existência de um processo de tunelamento inelástico dentro da junção devido a interação elétron-fônon, que produz mecanismos de relaxação e deformação local na estrutura cristalina bidimensional, provocando um deslocamento nos níveis eletrônicos [22]. Essas flutuações na energia afetam diretamente as densidades de estado no grafeno, impedindo uma clara observação da condutância, no tunelamento perto dos pontos de Dirac.

Finalmente, a transmissão de férmions de Dirac através da barreira potencial foi estudada no trabalho de Lejarreta et al [19], onde expressões analíticas para o coeficiente de transmissão foram apresentadas, demonstrando uma dependência crítica da transmissividade dos elétrons através da barreira com o ângulo de incidência, de modo que para os ângulos de incidência mais elevados o coeficiente de transmissão cai praticamente a zero, deixando a barreira opaca. Além disso, os pesquisadores obtiveram um resultado teórico da condutância devido a uma barreira de potencial no grafeno, sendo o resultado válido apenas para baixos valores de tensão aplicada, ou seja, somente no regime linear.

O diodo túnel foi descoberto pelo físico japonês Leo Esaki em 1958, o que o levou a receber o prêmio Nobel em Física em 1973, por descobertas experimentais referentes ao fenômeno de tunelamento em semicondutores, tendo este diodo um interesse para aplicações eletrônicas por causa de sua notável característica na curva de I-V [23].

O diodo túnel é fabricado dopando-se intensamente os materiais semicondutores que irão formar a junção p-n, com um nível de 100 até 1000 vezes maior do que o empregado em um diodo semicondutor típico. Isto produz uma região de depleção muito reduzida, com uma largura da ordem de 10^{-6} cm, ou cerca de 1/100 da largura da região de carga espacial de um diodo semicondutor típico. Esta fina região de depleção pode ser atravessada por muitos portadores mesmo que não possuam energia suficiente para superar a altura da barreira, produzindo assim o efeito de tunelamento, e pode-se observar na curva característica de corrente versus tensão aplicada um pico na corrente para potenciais de polarização reduzidos. Suas características, são diferentes das de qualquer diodo porque

possuem uma região de resistência diferencial negativa, conforme ilustrado na figura 1.1. Nesta região, o aumento da tensão nos terminais do dispositivo reduz a corrente. Esta característica de resistência diferencial negativa é aproveitada em projetos de osciladores, circuitos de chaveamento, geradores de pulso e amplificadores. O diodo túnel pode, portanto, ser utilizado em aplicações de alta velocidade, como por exemplo, em computadores, onde se necessita de tempos de chaveamento da ordem de nano ou picos-segundos. Na eletrônica estão sendo realizadas pesquisas experimentais para fabricar dispositivos para uma escala de frequência de 200-300 GHz usando este tipo de diodo túnel [24].

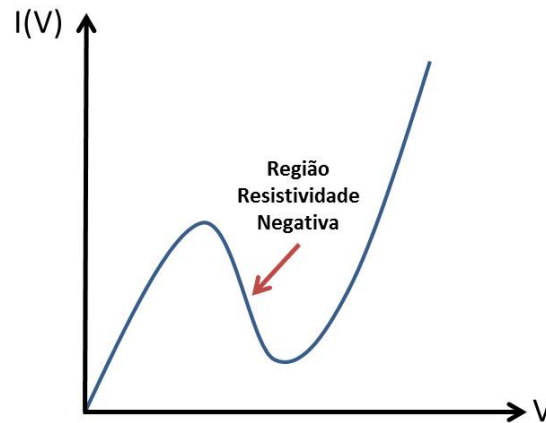


Figura 1.1: Curva característica I-V de um diodo túnel.

Estudos recentes tem proposto a fabricação de diodos de tunelamento utilizando o grafeno. Por exemplo, em um trabalho da pesquisadora Bárbara Canto dos Santos [25] da Universidade Federal de Rio Grande do Sul, foi possível obter o grafeno usando a técnica convencional de esfoliação, e posteriormente foi formada uma região de barreira de potencial de espessura entre 1 a 2 nm entre duas regiões do grafeno, para formar uma junção túnel. Para realizar as medições foi utilizado como contato metálico o cobalto (*Co*). As medidas da curva de I - V (corrente versus tensão) mostraram um comportamento característico de um dispositivo com contato túnel. Na referência [26] estruturas de dispositivos novos são propostos, incorporando poços quânticos e uma estrutura de diodo p-n. Tais dispositivos combinam a estrutura e o comportamento de ambos os diodos de tunelamento ressonante e diodos túnel convencionais, levando a uma alta velocidade de transporte dos elétrons (buracos) e baixo excesso de corrente na região onde a resistividade diferencial é negativa.

Quanto ao processo de dopagem do grafeno para alterar suas propriedades de transporte, Pi e McCreary [27] estudaram o efeito dos metais de transição como o titânio (Ti), o ferro (Fe) e platina (Pt) quando em contato com as bordas de lâminas de grafeno. Sabendo-se que na junção entre um metal e um semiconductor haverá migração de cargas devido a diferença nas funções de trabalho, o resultado desses casos será uma dopagem

tipo n, já que estes metais tem elétrons sobrando na camada de valência. A dopagem mais favorável ocorreu utilizando o titânio, já que sua função trabalho (4.3 eV) é menor da que a função trabalho do grafeno (4.7 eV a qual encontra-se no intervalo de 4.4 eV e 5.2 eV [28]). Podemos mencionar também segundo outras referências que átomos de potássio (K) [29] e moléculas de NH_3 [30] são dopantes do tipo n para o grafeno, enquanto NO_2 [31] e F4-TCNQ (tetrafluoro-tetracianoquinodimetano) [32, 33] são moléculas dopantes tipo p.

1.1 Justificativa e Objetivos

Do exposta acima, percebe-se a importância de desvendar a física de junções de tunelamento no grafeno em configurações distintas, sobretudo sob o efeito de dopagem do grafeno, o que permitiria a obtenção de um diodo túnel de grafeno, situação que será aqui explorada. Além disso, o estudo da polarização da corrente em spin faz-se fundamental para possíveis aplicações em spintrônica. Dentre os objetivos gerais da presente tese destacamos a introdução de um modelo de transferência na junção de tunelamento utilizando um hamiltoniano em formalismo de segunda quantização descrevendo os férmions de Dirac sem massa no grafeno, para modelar o transporte de carga e spin no grafeno. Como objetivos específicos queremos apresentar uma teoria simples, porém o mais completa possível, para descrever as características $I - V$ em junções túnel de grafeno contendo minimamente:

- i) A descrição de elétrons distante da barreira de potencial na região dos férmions de Dirac sem massa.
- ii) O efeito de dopagem, quando modificamos o potencial químico distintamente, o lado direito e esquerdo da barreira potencial.
- iii) A presença de uma barreira potencial na região de contato, cuja altura pode ser ajustada por meio de potenciais.
- iv) A corrente que atravessa a junção de tunelamento, pode ser modelada pelo hamiltoniano de transferência.

1.2 Estrutura da Tese

O conteúdo desta tese será desenvolvido da seguinte maneira. No capítulo 2 se apresenta uma discussão mais detalhada dos conceitos fundamentais relacionados ao grafeno, como sua estrutura cristalina, características e propriedades do grafeno e a emergência da equação de Dirac em $(1 + 2)D$ no grafeno, próximo do nível de Fermi. No capítulo 3 apresentamos a física da junção de tunelamento do grafeno, a qual será modelada através

do uso do hamiltoniano de transferência, o que permitirá o cálculo das propriedades de transporte de carga e spin da junção de tunelamento. No capítulo 4 são apresentados os resultados e discussões para a estrutura estudada, e finalmente, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Este capítulo apresenta os conceitos fundamentais para a compreensão das principais características e propriedades ligadas ao grafeno. Partindo-se das propriedades do átomo de carbono serão abordadas as redes real e recíproca do grafeno e a justificativa para a descrição do transporte através de um modelo de *tight-binding*, expresso na forma da segunda quantização. Serão apresentadas as bandas de energia do grafeno e por último a derivação da equação de Dirac para o grafeno em (1+2)D próximo aos pontos de Dirac, onde os elétrons tem comportamento de partículas relativísticas sem massa.

2.1 Grafeno

O termo *grafeno* foi proposto como uma combinação de "grafite" e o sufixo "eno" por Hanns Peter Boehm [34] ainda no ano de 1962, já que não era apropriado falar de uma folha de grafite, porque o grafite é um material tridimensional com uma estrutura hexagonal não compacta e a distância interatômica entre duas camadas sucessivas de carbono no grafite é de 3.35 Å. No entanto, como já mencionamos, foi somente no ano de 2004 que os professores russos da Universidade de Manchester Andre Geim e Konstantin Novoselov [3] conseguiram isolar experimentalmente uma monocamada plana de átomos de carbono e medir suas propriedades físicas. Estes átomos de carbono estão ordenados de tal modo a formar uma estrutura hexagonal do tipo *honeycomb* ou favo de mel, composta de duas sub-redes triangulares A e B, conforme mostrado na figura 2.1, onde os pontos da cor azul representam os átomos de carbono da sub-rede A e os pontos da cor vermelha representam os átomos de carbono da sub-rede B. Para que se possa descrever o grafeno, como uma rede de Bravais bidimensional, precisa-se de dois vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 e uma base de dois átomos de carbono (ver figura 2.1), que pode ser tomada como um "haltere" formado por um átomo da rede sub-rede A e um de seus primeiros vizinhos da sub-rede B.

No espaço real, uma possível representação para os vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 , seguindo a convenção mostrada na figura 2.1, é dada em coordenadas cartesianas, na forma abaixo:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= (\sqrt{3}a, 0) \\ \vec{a}_2 &= \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{3a}{2}\right),\end{aligned}\tag{2.1}$$

onde o parâmetro de rede vale $a = 1.42\text{Å}$ [5, 34, 35, 36] e representa a distância interatômica entre os átomos de carbono na rede hexagonal do grafeno.

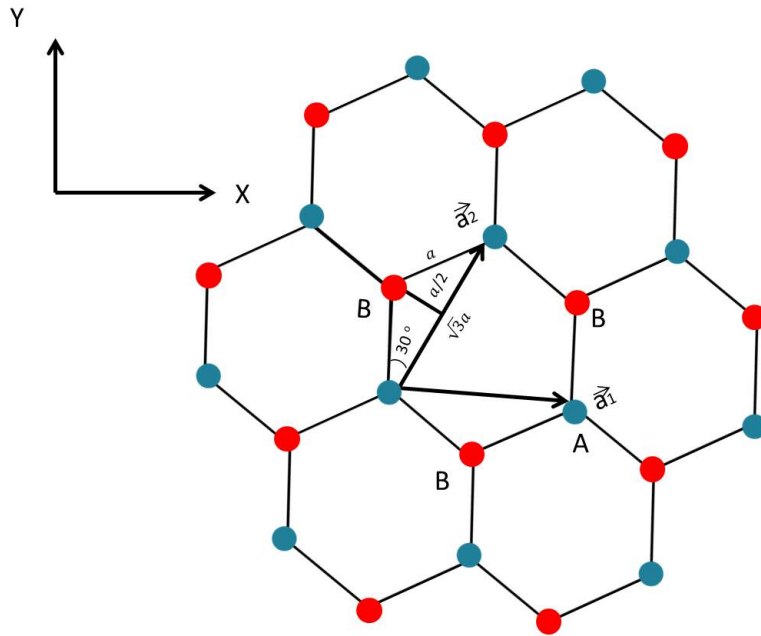


Figura 2.1: Rede hexagonal do grafeno no espaço real com seus respectivos vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 .

Para melhor compreender a forma estrutural adotada pelo grafeno precisa-se entender um pouco da configuração eletrônica do átomo de carbono. O carbono tem número atômico $Z = 6$, ou seja, contém seis prótons no núcleo e seis elétrons em sua eletrosfera, os quais ocupam os orbitais atômicos na configuração $1s^2 2s^2 2p^2$. Os elétrons do orbital $1s^2$ são fortemente ligados ao núcleo devido à forte atração eletrostática entre os prótons e esses elétrons, sendo conhecidos como elétrons de caroço ou internos. Os outros 4 elétrons, na camada de número quântico principal $n = 2$ não se encontram tão ligados ao núcleo, pois experimentam a atração devida a uma carga elétrica positiva efetivamente menor que $+6$ por efeito da blindagem da carga total do núcleo pelos os elétrons de caroço. Desse modo esses elétrons mais externos são conhecidos como elétrons de valência e ocupam os orbitais atômicos $2s$, $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$. Na fase cristalina ou para formar moléculas, como a diferença de energia entre os níveis $2s$ e $2p$ é pequena ou mesmo inexistente, as funções de onda desses quatro elétrons podem se sobrepor facilmente, num processo chamado hibridização [37]. No carbono as hibridizações mais importantes são dos tipos sp^2 e sp^3 . A estrutura cristalina formada na hibridização do tipo sp^3 é o diamante, onde todos os orbitais combinam-se linearmente para formar novos orbitais com a simetria do tetraedro e ângulo de aproximadamente 109° entre eles, ao passo que o grafite e o grafeno tem estruturas cristalinas que podem ser entendidas de maneira simples utilizando a hibridização do tipo sp^2 , onde dois orbitais do tipo p , no caso, p_x e p_y , se combinam com o orbital s gerando os seguintes orbitais híbridos:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|s\rangle + |p_x\rangle + |p_y\rangle), \quad (2.2)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|s\rangle + |p_x\rangle - 2|p_y\rangle), \quad (2.3)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle - |p_x\rangle), \quad (2.4)$$

enquanto o orbital p_z não se mistura aos demais, ficando perpendicular ao plano (x, y) que contém os orbitais hibridizados sp^2 . Não é difícil mostrar que as novas funções orbitais mostradas acima são ortogonais entre si no espaço de Hilbert, e formam um ângulo de 120° entre si no espaço real. A forma dos orbitais na hibridização denominada sp^2 é mostrada na figura 2.2. Assim, três orbitais de um dado átomo de carbono têm seus eixos principais de orientação contidos no plano $(x-y)$ com um ângulo entre eles de 120° , o que possibilita realizar três ligações e com grande energia de ligação química denominadas de σ com os átomos de carbono vizinhos. Essas ligações σ tem caráter altamente direcional, onde dois elétrons com spins contrários, um proveniente de cada átomo, são compartilhados pelos átomos de carbono e ficam fortemente localizados no plano e na região do ponto médio da reta que une os dois átomos vizinhos. As três ligações σ realizadas por um dado átomo de carbono formam um ângulo de 120° entre si, devido ao próprio formato dos orbitais hibridizados. Nesse caso, é fácil perceber que a estrutura formada por um arranjo de átomos de carbono nessa hibridização terá a forma do favo de mel.

Deve-se lembrar ainda que cada átomo de carbono tem 4 elétrons de valência, e para satisfazer a *regra do octeto* deve realizar 4 ligações químicas, compartilhando seus 4 elétrons com os 3 átomos de carbono vizinhos possíveis na hibridização sp^2 . Três desses elétrons de um dado átomo de carbono ficam fortemente localizados em algum dos orbitais sp^2 que associam-se a um dos orbitais sp^2 de um primeiro vizinho para formar uma ligação do tipo σ . O elétron restante ficará no orbital p_z , que é perpendicular ao plano da estrutura de favo de mel. No caso de uma ligação entre dois átomos de carbono apenas a interação entre os elétrons nos orbitais p_z leva à formação de orbitais moleculares híbridos devido à mistura dos orbitais p_z desses dois átomos e o tipo de ligação química realizada fica conhecida como do tipo π por conta do formato do orbital molecular resultante da combinação linear dos orbitais p_z desses átomos. Em uma estrutura cristalina do tipo favo de mel contendo um número muito grande de átomos de carbono, os orbitais p_z combinam-se para formar uma nuvem eletrônica, uma vez que é fácil perceber que os orbitais p_z tem *overlap* de mesma magnitude com qualquer dos orbitais p_z dos carbonos vizinhos, em contraste com o caso dos orbitais sp^2 . Essa nuvem dá origem a bandas de energia conhecidas como bandas π (menor energia) e π^* (maior energia). Os elétrons nesses orbitais π e π^* são fracamente ligados aos respectivos átomos de carbono e tem

funções de onda estendidas ou deslocalizadas, quando comparadas aos elétrons σ . Desse modo, é natural imaginar que os elétrons σ pouco contribuem no caso da rede favo de mel para o transporte de carga e spin, enquanto que praticamente toda a física do transporte deve-se aos elétrons ocupando as bandas π e π^* . Claramente nessa aproximação cada carbono contribui com um elétron apenas, e como a célula unitária do grafeno no espaço real contém uma base de dois átomos, há somente dois elétrons livres por cela primitiva, que permite determinar a densidade eletrônica facilmente. Na obtenção experimental do grafeno, efeitos de imperfeições de formação e a interação com o substrato podem alterar a densidade eletrônica ideal prevista pela teoria.

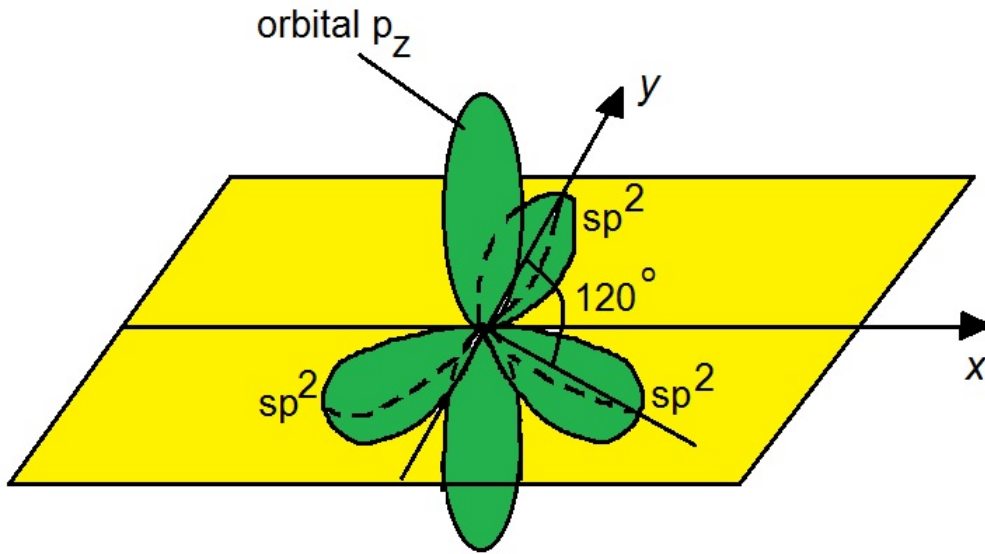


Figura 2.2: Os orbitais p_z e sp^2 do carbono. Os orbitais sp^2 formam ângulos de 120° entre si no plano (x, y) e são todos ortogonais no espaço ao orbital p_z , que é perpendicular ao plano (x, y) e comporta dois elétrons com spins contrários. A combinação de átomos de carbono com hibridização sp^2 contidos no plano leva automaticamente à estrutura de favo de mel.

Antes mesmo de apresentar o modelo de *tight-binding* do grafeno, serão obtidos, a partir dos vetores unitários da rede direta, os vetores da rede recíproca, mostrados a seguir:

$$\begin{aligned}\vec{b}_1 &= \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{z})}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{z})} = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right), \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi(\vec{z} \times \vec{a}_1)}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{z})} = \frac{4\pi}{3a} (0, 1),\end{aligned}\quad (2.5)$$

nos quais \vec{z} é um vetor unitário perpendicular ao plano (x, y) da rede direta que contém a monocamada de grafeno.

Os vetores \vec{b}_1 e \vec{b}_2 da rede recíproca são mostrados na figura 2.3. Na seção seguinte

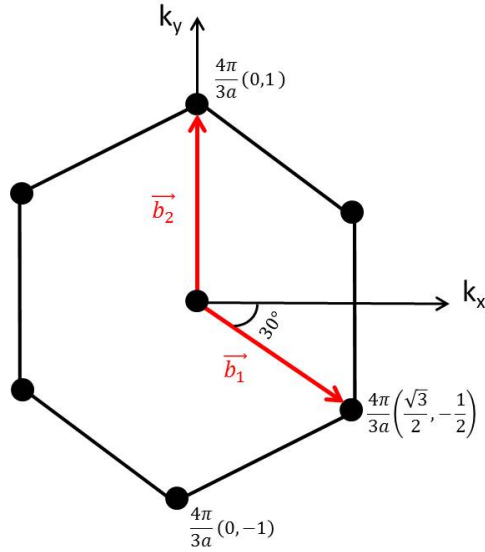


Figura 2.3: Rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco, com seus respectivos vetores unitários \vec{b}_1 e \vec{b}_2 .

procederemos a encontrar as bandas de energia do grafeno no chamado modelo de *tight-binding*, bem como mais adiante será demonstrada a emergência da teoria de Dirac para férmions sem massa no grafeno, próximo do nível de Fermi.

2.2 Modelo de *tight-binding* com primeiros vizinhos

O modelo de *tight-binding* do grafeno foi proposto originalmente por P.R. Wallace no ano de 1947, visando a descrição de um plano atômico no grafite, que consiste de múltiplas camadas de grafeno empilhadas [5, 38]. O hamiltoniano de *tight-binding* para o grafeno tem sido utilizado com enorme sucesso na previsão de suas propriedades [36, 38, 39, 40, 42, 43, 44]. É importante notar que a aproximação de *tight-binding* é bastante útil quando a superposição dos orbitais eletrônicos relevantes para a descrição do problema somente é significativa entre os vizinhos mais próximos (primeiros, segundos e eventualmente terceiros vizinhos, nos casos mais complicados) na rede cristalina, fazendo com que os orbitais atômicos possam servir de base para a representação do hamiltoniano que descreve o transporte de elétrons de um átomo para outro na rede e/ou as interações eletrônicas[45]. Esse parece ser o caso da descrição da física dos elétrons nos orbitais p_z no grafeno, que determinam todas as propriedades de transporte de carga e spin relevantes em regime de baixo campo aplicado. O modelo de *tight-binding* considerando a probabilidade de *hopping* (salto) de um elétron entre átomos que são primeiros e segundos vizinhos apenas está contemplado pelo seguinte hamiltoniano, expresso em termos dos operadores

de criação e aniquilação de elétrons formulados em segunda quantização:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + b_{j\sigma}^\dagger a_{i\sigma}) - t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + b_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + a_{j\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + b_{j\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) , \quad (2.6)$$

no qual $\hat{a}_{i\sigma}$ ($\hat{a}_{i\sigma}^\dagger$) é um operador fermiônico que aniquila (cria) um elétron de spin verdadeiro $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no i -ésimo átomo sub-rede A, $\hat{b}_{j\sigma}$ ($\hat{b}_{j\sigma}^\dagger$) é um operador fermiônico que aniquila(cria) elétrons na sub-rede B, o símbolo $\langle ij \rangle$ denota a soma sobre os primeiros vizinhos e $\langle\langle ij \rangle\rangle$ denota a soma para segundos vizinhos. Note que os primeiros vizinhos de um átomo da sub-rede A (pontos cor azul) são 3 átomos da sub-rede B (pontos cor vermelho), e vice-versa, enquanto que os segundos vizinhos de um dado átomo totalizam 6 e são da mesma sub-rede, como se pode observar na figura 2.4, onde o átomo de carbono central da sub-rede A na posição A_0 tem como primeiros vizinhos os três átomos de carbono da sub-rede B nas posições B_{11}, B_{12} e B_{13} , como segundos vizinhos os seis átomos de carbono da mesma sub-rede A nas posições $A_{21}, A_{22}, A_{23}, A_{24}, A_{25}$ e A_{26} , e o mesmo acontece em toda a rede do grafeno. O parâmetro de *hopping* entre primeiros vizinhos tem valor $t \approx 2,8\text{eV}$ e é de uma a duas ordens de magnitude maior do que entre os segundos vizinhos $t' < 0,2\text{eV}$. A repulsão coulombiana entre os elétrons não foi incluída e seria mais intensa para dois elétrons de spins contrários ocupando os orbitais p_z de um mesmo átomo, mas acredita-se que pode ser negligenciada em primeira aproximação [40, 46, 47, 35, 38, 41].

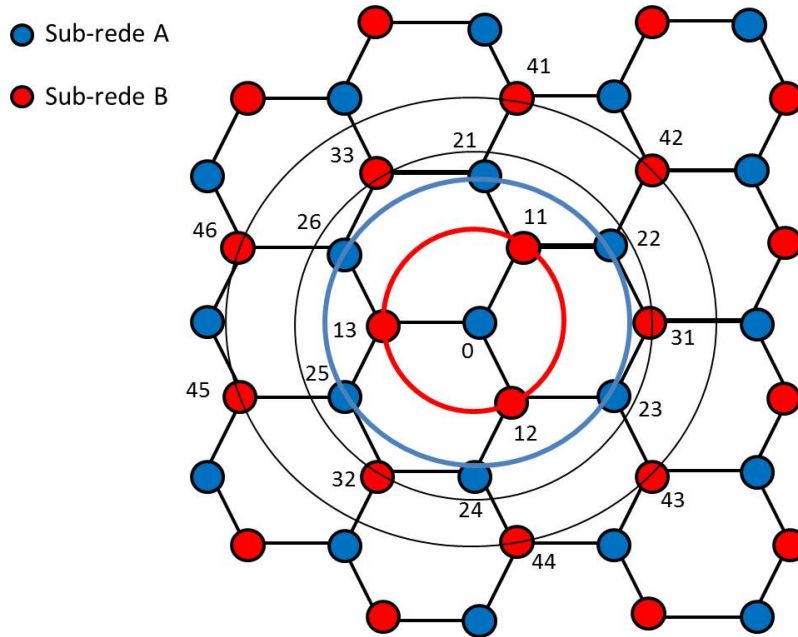


Figura 2.4: Os primeiros e segundos vizinhos na rede hexagonal do grafeno no espaço real.

Uma vez que o parâmetro de *hopping* t é o mais importante em pelo menos uma ordem de grandeza em relação a t' se negligenciara o segundo termo do hamiltoniano e somente

usa-se o primeiro termo do hamiltoniano de *tight-binding* para nossos cálculos. Pode-se mencionar também que quando se leva em conta o segundo parâmetro de hopping t' as bandas de energia no grafeno apresentam um pequeno gap próximo dos pontos de Dirac.

Agora, para diagonalizar o hamiltoniano (2.6) pode-se proceder à passagem ao espaço recíproco ou espaço de momento \vec{k} através da transformação discreta de Fourier abaixo:

$$\begin{aligned} a_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}, \\ a_{i\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i}, \\ b_{j\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j}, \\ b_{j\sigma}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

nas quais o vetor de onda no espaço recíproco é dado por $\vec{k} = (k_x, k_y)$, N é o número de átomos total em cada sub-rede. Substituindo os novos operadores de criação e aniquilação em função do vetor de onda \vec{k} no espaço recíproco (2.7) no primeiro termo do hamiltoniano de *tight-binding* (2.6), obtém-se

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle_\sigma} \left(\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}'\sigma} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \right), \quad (2.8)$$

e fixando o sub-índice j tem que $\vec{r}_j = \vec{r}_{jn} = \vec{r}_i + \vec{\delta}_n$, onde $\vec{\delta}_n$ denota o vetor relativo entre um átomo na posição r_i e seus primeiros vizinhos, para obter:

$$\hat{H} = -t \sum_{\sigma} \left(\sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}'\sigma} \frac{1}{N} \sum_i e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_n} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \sum_{n=1}^{n=3} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_n} \right), \quad (2.9)$$

se sabe que a delta de Kronecker está definida como $\delta_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{1}{N} \sum_i e^{\pm i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i}$, quando o vetor $\vec{k} = \vec{k}'$ a delta de Kronecker passa a valer 1 e quando $\vec{k} \neq \vec{k}'$ a delta anula-se, portanto substituindo em (2.9):

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \left(a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} (-t) \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} + b_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} (-t) \sum_{n=1}^{n=3} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} \right). \quad (2.10)$$

No modelo de *tight-binding* o termo $t \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n}$ é chamado de fator geométrico, o qual nos fornecerá a informação sobre a geometria da rede que se está tratando, então fazendo $f(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n}$ e $f^*(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^{n=3} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n}$ onde o vetor $\vec{\delta}_n$ representa os primeiros

vizinhos da sub-rede A ou B respectivamente, temos:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \left(f(\vec{k}) a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} + f^*(\vec{k}) b_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} \right). \quad (2.11)$$

Agora pode-se calcular os vetores $\vec{\delta}_n$ que conectam um átomo na sub-rede A aos primeiros vizinhos na sub-rede B na rede do grafeno. Uma vez que temos

$$f(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_n} = -t \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} \right), \quad (2.12)$$

na figura 2.5 se pode observar os 3 vetores primeiros vizinhos da sub-rede A, os quais estão em coordenadas cartesianas no espaço direto da rede do grafeno, dados abaixo:

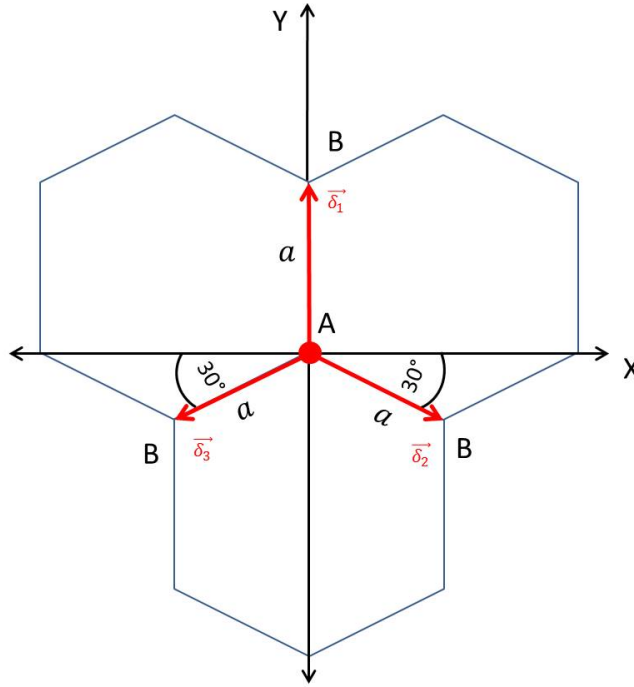


Figura 2.5: Representação dos 3 primeiros vizinhos da sub-rede A são $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ respectivamente.

$$\begin{aligned} \vec{\delta}_1 &= a\hat{y}, \\ \vec{\delta}_2 &= a \cos 30^\circ \hat{x} - a \sin 30^\circ \hat{y} = \frac{a}{2} (\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y}), \\ \vec{\delta}_3 &= -a \cos 30^\circ \hat{x} - a \sin 30^\circ \hat{y} = -\frac{a}{2} (\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Substituindo os 3 vetores primeiros vizinhos $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$ e fazendo $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ na equação (2.12) vamos encontrar o fator geométrico $f(\vec{k})$ e $f^*(\vec{k})$:

$$f(\vec{k}) = -te^{iak_y} \left[1 + 2e^{-i\frac{3}{2}ak_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right], \quad (2.14)$$

$$f^*(\vec{k}) = -te^{-iak_y} \left[1 + 2e^{i\frac{3}{2}ak_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right], \quad (2.15)$$

portanto as funções $f(\vec{k})$ e $f^*(\vec{k})$ representam as interações entre os primeiros vizinhos [48], no espaço recíproco em k_x e k_y .

Uma vez no espaço recíproco \vec{k} na rede hexagonal do grafeno (ver figura 2.3), pode-se estudar as suas propriedades na primeira zona de Brillouin, a qual está ilustrada na figura 2.6 dada a continuação:

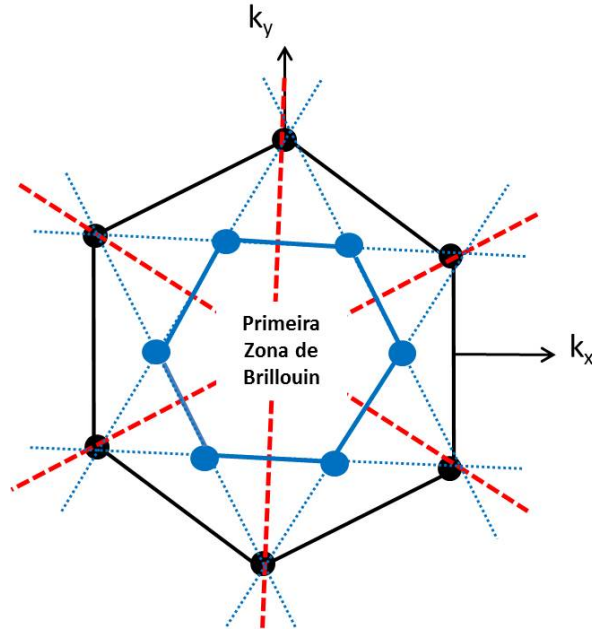


Figura 2.6: Primeira Zona de Brillouin para a rede hexagonal do grafeno no espaço recíproco.

Para construir a primeira zona de Brillouin, para uma rede hexagonal, desenha-se inicialmente as retas (linhas cor vermelha figura 2.6) a partir da origem até os pontos da rede recíproca hexagonal e bisecciona-se as mesmas, estabelecendo as interfaces (linhas cor azul), formando-se uma rede hexagonal também, com a diferença que este hexágono não apresenta uma origem comparado com a rede direta e recíproca do grafeno.

É próximo dos vértices da primeira zona de Brillouin que temos os chamados cones de Dirac, onde a dispersão da energia é linear, fazendo com que os elétrons tenham comportamento análogo ao de partículas relativísticas sem massa. Na figura 2.7 apresenta-se a primeira zona de Brillouin, onde é possível observar os dois pontos de Dirac \vec{K} e \vec{K}' , onde $|\vec{K}| = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$.

Como se pode ver na figura de acima, os pontos \vec{K} e \vec{K}' não são equivalentes na

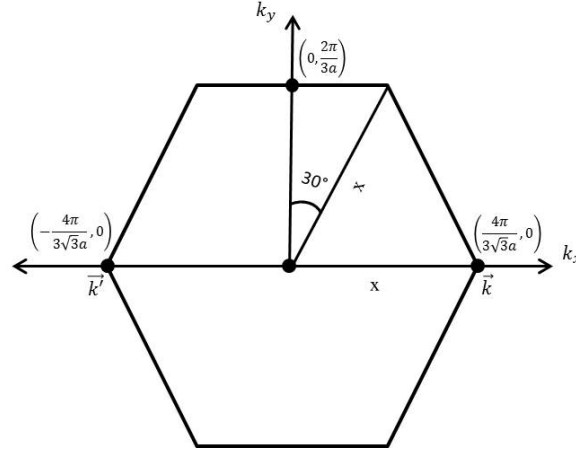


Figura 2.7: Primeira Zona de Brillouin mostrando os 2 pontos de Dirac \vec{k} e \vec{k}' no espaço recíproco.

primeira zona de Brillouin porque não há nenhum vetor da rede recíproca que possa conectá-los. A importância da primeira zona de Brillouin é que ela fornece a mais alta simetria na rede e a partir dela pode-se construir as bandas de energia para a rede hexagonal do grafeno.

2.3 Bandas de Energia no Grafeno

Para obter as bandas de energia no grafeno é necessário diagonalizar o hamiltoniano de *tight-binding* no espaço recíproco e para tanto é conveniente colocá-lo na seguinte forma que segue:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \psi_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{H}_0 \psi_{\vec{k}\sigma}, \quad (2.16)$$

onde $\psi_{\vec{k}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma} \\ b_{\vec{k}\sigma} \end{pmatrix}$ e $\psi_{\vec{k}\sigma}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger & b_{\vec{k}\sigma}^\dagger \end{pmatrix}$ são pseudo-spinores na chamada representação de Nambu [49] e \hat{H}_0 é o hamiltoniano do grafeno expresso em forma matricial conforme abaixo:

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} 0 & f_{\vec{k}} \\ f_{\vec{k}}^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

Facilmente pode-se obter as auto-energias do hamiltoniano \hat{H}_0 dado em (2.17), as quais representam as possíveis energias de um elétron de vetor de onda \vec{k} no grafeno:

$$\epsilon^2(\vec{k}) = |f(\vec{k})|^2. \quad (2.18)$$

Substituindo (2.14) e (2.15) em (2.18) pode-se obter $\epsilon(\vec{k})$:

$$\epsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_x\right) \cos\left(\frac{3}{2} a k_y\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_x\right)}, \quad (2.19)$$

cada uma dessas funções determina uma banda de energia no grafeno, sendo $\epsilon_+(\mathbf{k})$ a banda de maior energia e $\epsilon_-(\mathbf{k})$ a de menor energia, denominadas bandas π^* e π , respectivamente, e são simétricas em relação à linha de energia nula. O potencial químico $\mu(T=0) = E_F$ do grafeno em temperatura nula ($T=0$) passa exatamente por zero, ou seja, o nível de Fermi no grafeno é exatamente zero.

Indo adiante, vamos avaliar a função $f(\vec{k})$ nos pontos de Dirac $\vec{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(1,0)$ e $\vec{K}' = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}(-1,0)$, exatamente onde ela anula-se e por onde passa o nível de Fermi. Nota-se que nesse caso as bandas de energia se tocam e não existe gap de energia. Expandindo $f(\vec{k})$ em séries de Taylor para um vetor de onda \vec{k} próximo de um dos pontos de Dirac, tem-se:

$$f(\vec{k} - \vec{K}) = \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} = q_x \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} + q_y \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_y} \Big|_{\vec{k}}. \quad (2.20)$$

Nesta aproximação de Taylor a função $f(\vec{k})$ fica em função das componentes do vetor de onda relativo $\vec{q} = \vec{k} - \vec{K}$. Para achar as derivadas respectivas dadas na equação (2.20), usa-se as equações (2.14) e (2.15) que foram encontradas para o fator geométrico. E portanto para facilitar os cálculos das derivadas precisa-se introduzir o fator exponencial nas expressões já mencionadas acima, temos que $f(\vec{k}) = -t \left(2e^{-i\frac{a}{2}k_y} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) + e^{iak_y} \right)$.

Por tanto, as duas derivadas respectivas são:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= \frac{3}{2}at, \\ \frac{\partial f(\vec{k})}{\partial k_y} \Big|_{\vec{k}} &= -i\frac{3}{2}at. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Então, substituindo as expressões encontradas em (2.21) para (2.20), temos:

$$f(\vec{q}) \approx \frac{3}{2}at [q_x - iq_y], \quad (2.22)$$

onde a constante $\frac{3}{2}\frac{at}{\hbar}$ nos representa aproximadamente a velocidade de Fermi v_f , substituindo o valor do parâmetro da rede do grafeno $a = 1.42\text{nm}$, a constante de hopping $t = 2.8\text{eV}$ e a constante de Planck $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{J.s}$, vamos ter que $v_f \approx 0.9065 \times 10^6 \text{m/s}$. Esse valor corresponde aproximadamente 1/300 da velocidade da luz no vácuo e portanto os elétrons serão tratados como "relativísticos" apenas do ponto de vista da analogia formal com a teoria de elétrons de Dirac, conforme logo veremos.

Encontrado o fator geométrico,

$$f(\vec{q}) = \hbar v_f [q_x - i q_y] , \quad (2.23)$$

agora é possível achar o valor da energia em função do vetor \vec{q} , fazendo uso da equação (2.18), para obter próximo do ponto de Dirac \vec{K} o seguinte resultado:

$$\epsilon = \pm v_f |\vec{q}| . \quad (2.24)$$

Note a relação de dispersão linear para energia *versus* momento $\hbar|\vec{q}|$ no grafeno, o que leva a formular analogias matemáticas entre os fenômenos de transporte no grafeno e aquelas teorias estudados pela Eletrodinâmica Quântica Relativística [50]. É muito interessante notar que a dispersão de energia linear dada pela equação (2.24) é semelhante à dispersão de energia de partículas relativísticas $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ para $m_0 = 0$, com a velocidade de Fermi substituindo a velocidade da luz. Por isso, os portadores de carga no grafeno podem ser vistos como partículas relativísticas sem massa.

Pode-se atribuir ainda uma pseudo-helicidade aos portadores de carga no grafeno. A pseudo-helicidade é dada pela projeção do pseudo-spin na direção do movimento dos portadores de carga [51]. Ela é positiva para os elétrons e negativa para os buracos.

Esta relação linear para a dispersão de energia próxima ao ponto de Dirac implica uma alta mobilidade eletrônica, mesmo com baixa densidade eletrônica de portadores para energias próximas ao nível de Fermi. Na figura 2.8 pode-se observar as bandas de energia de valência e de condução no grafeno as quais não apresentam um gap, sendo por este motivo o grafeno referido muitas vezes como um semiconductor de gap zero [52, 53], diferentemente de outro material semiconductor. Na figura 2.8 as bandas de energia são mostradas, onde a banda de valência, abaixo do nível de Fermi encontra-se totalmente preenchida e a banda de condução, acima do nível de Fermi, totalmente desocupada.

Como o gap é nulo pouca energia é necessária para levar elétrons da banda de valência até a banda de condução, criando um par elétron-buraco, ambos de massa nula.

Nas figuras 2.9 e 2.10, apresenta-se a primeira zona de Brillouin da rede do grafeno, onde pode-se observar os cones de Dirac ao redor de cada hexágono da rede no espaço recíproco e em cada vértice dentro do hexágono da zona de Brillouin temos um terço de cada cone de Dirac que somados todos vai ter dois cones de Dirac dentro da primeira zona de Brillouin, respectivamente. Na figura 2.9 pode-se observar um ponto vermelho mais pronunciado no centro do hexágono o qual nos representa o nível de energia máximo da banda de condução totalmente desocupado e de maior simetria no espaço recíproco da rede do grafeno e na figura 2.10 observa-se também um ponto azul escuro no centro do hexágono, o qual nos indica o nível de energia mais baixo na banda de valência totalmente preenchido por elétrons e de maior simetria.

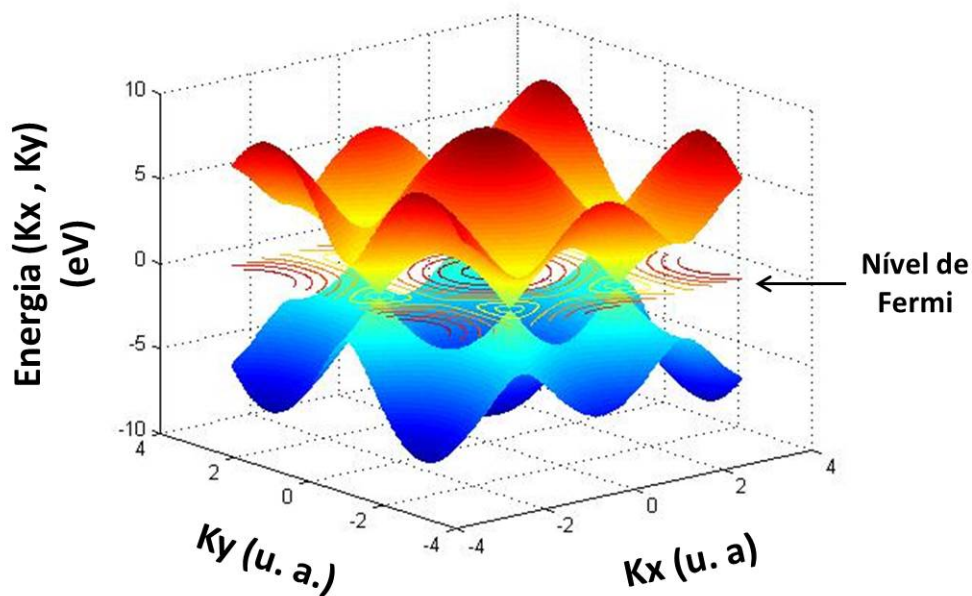


Figura 2.8: Dispersão de energia das bandas de condução e valência do grafeno.

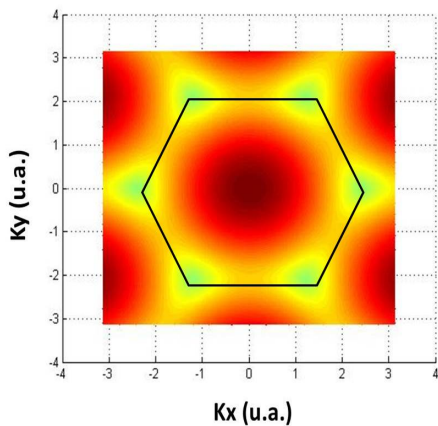


Figura 2.9: Zona de Brillouin em 2D
- Banda de condução.

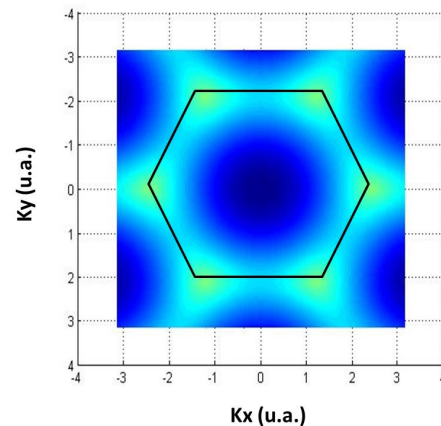


Figura 2.10: Zona de Brillouin em 2D - Banda de valência.

As figuras 2.8, 2.9 e 2.10 foram plotadas no Matlab, usando a equação da energia (2.19) e as grandezas físicas de energia em unidade de eV e o momento em unidades arbitrárias (u.a.).

2.4 A equação de Dirac em um espaço-tempo de (1+2) dimensões

Conforme mencionado anteriormente, a função $f(\mathbf{k})$ anula-se nos pontos $\mathbf{K} = 4\pi/(3\sqrt{3}a)\hat{x}$ e $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$. A função também se anula nos outros 4 vértices do hexágono que representa a primeira zona de Brillouin, como pode ser mais claramente percebido

na Figura 2.7. Nas proximidades de cada um desses pontos, as bandas formam um duplo cone (um voltado para cima e outro para baixo, tocando-se no ponto de energia nula, representando as duas soluções de energia possíveis), mas somente $1/3$ de cada duplo cone está dentro da primeira zona de Brillouin. Como são 6 vértices, pode-se observar que existem $6 \times 1/3 = 2$ duplos cones, que são inequivalentes e podem ser montados de forma completa a partir de translações dos vértices com vetores da rede recíproca. Isso explica porque somente dois pontos de Dirac são inequivalentes.

Agora, expandindo-se a função $f(\mathbf{k})$ em séries de Taylor torno do ponto $\mathbf{K} = 4\pi/(3\sqrt{3}a)\hat{x}$, e lembrando que $f(\mathbf{K}) = 0$, encontra-se:

$$f(\mathbf{q}) = f(\mathbf{k} - \mathbf{K}) = \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} = \frac{3at}{2} [q_x - iq_y], \quad (2.25)$$

onde o vetor $\mathbf{q} = (q_x, q_y) = \mathbf{k} - \mathbf{K}$ é correspondente a um pequeno deslocamento no vetor de onda \mathbf{k} em torno do ponto \mathbf{K} e $\nabla_{\mathbf{k}} = (\partial/\partial k_x, \partial/\partial k_y)$ é o operador gradiente em relação às variáveis \mathbf{k} .

A constante $3at/2$ tem unidades da constante de Planck vezes velocidade e pode ser expressa na forma $\hbar v_F$, onde v_F é a velocidade de Fermi para esse caso, porque o nível de Fermi passa exatamente pelo ponto \mathbf{K} , onde se faz a expansão. A velocidade de Fermi aqui tem o mesmo papel da velocidade da luz no vácuo, para partículas relativísticas. Utilizando os valores das constantes para o grafeno, $t = 2,8\text{eV}$, $a = 1,42\text{Å}$ e para a constante de Planck $\hbar = 6,59 \times 10^{-16} \text{ eV.s}$, pode-se obter facilmente $v_F = 9 \times 10^5 \approx 10^6 \text{m/s}$. Esse valor corresponde a aproximadamente $1/300$ da velocidade da luz no vácuo.

Considerando a função $f(\mathbf{q}) = \hbar v_F (q_x - iq_y)$ na definição de \hat{H}_0 em (2.17) pode-se escrever o hamiltoniano expresso na equação (2.16) expandido em torno do ponto \mathbf{K} , conforme segue:

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \psi_{\mathbf{q}\sigma}, \quad (2.26)$$

onde $\psi_{\mathbf{q}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{q}\sigma} \\ b_{\mathbf{q}\sigma} \end{pmatrix}$ é um pseudo-spinor de Nambu [49], e as componentes $a_{\mathbf{q}\sigma}(b_{\mathbf{q}\sigma})$ correspondem à amplitude de probabilidade de um elétron ocupar um átomo na sub-rede A (B) com spin verdadeiro σ e momento \mathbf{q} em relação ao vetor \mathbf{K} , ou seja, o vetor de onda total seria dado por $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$.

Para mostrar que o hamiltoniano acima corresponde à descrição de um férmion de Dirac sem massa, pode-se considerar as matrizes de Pauli $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ para um pseudo-spin (ou espaço de isospin), na forma das matrizes $\vec{\tau}$ mencionadas abaixo:

$$\tau_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

$$\tau_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

$$\tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

que permite escrever (2.26) na forma abaixo:

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\tau} \cdot \mathbf{q}) \psi_{\mathbf{q}\sigma}, \quad (2.30)$$

sendo $\vec{\tau} = (\tau_x, \tau_y)$ e $(\vec{\tau} \cdot \mathbf{q}) = \tau_x q_x + \tau_y q_y$. Na sequência, pode-se usar a propriedade da função delta de Kronecker, a saber: veja que $\sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{q}'} F_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \sum_{\mathbf{q}} F_{\mathbf{q}} G_{\mathbf{q}}$ para quaisquer funções $F_{\mathbf{q}}$ e $G_{\mathbf{q}}$ e além disso pode-se utilizar a definição da função delta de Kronecker na forma em (2.9). Fazendo isso, (2.30) toma a forma abaixo:

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\tau} \cdot \mathbf{q}') \psi_{\mathbf{q}'\sigma} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} = \hbar v_F \frac{1}{N} \sum_j \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\tau} \cdot \mathbf{q}') \psi_{\mathbf{q}'\sigma} e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_j}. \quad (2.31)$$

O próximo passo é levar o somatório sobre j ao limite do contínuo, lembrando que $\psi_\sigma(\mathbf{r}_j) = \sum_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$ e que o termo $(\vec{\tau} \cdot \mathbf{q}')$ pode ser obtido fazendo a substituição $\mathbf{q}' = -i\nabla$, onde ∇ opera sobre as variáveis \mathbf{r} no espaço real. O resultado final é dado abaixo:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \sum_{\sigma} \int d^2\mathbf{r} \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) (\vec{\tau} \cdot \nabla) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}), \quad (2.32)$$

no qual $d^2\mathbf{r} = dx dy$ corresponde à integração das variáveis espaciais, depois que o limite para o contínuo foi tomado. Pode-se lembrar que $-i\hbar\nabla$ é o operador momentum \mathbf{p} na mecânica quântica e as matrizes τ_x, τ_y fazem o papel das matrizes α de Dirac, dando origem a uma teoria de Dirac para partículas sem massa.

Retrocedendo nos cálculos, pode-se diagonalizar a matriz que aparece em (2.26) e obter os seguintes autovalores de energia:

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}| = \pm \hbar v_F \sqrt{q_x^2 + q_y^2}. \quad (2.33)$$

Esse tipo de relação de dispersão linear entre momento e energia, que em duas dimensões resulta em um duplo cone, corresponde ao caso de partículas relativísticas sem massa. Portanto, no grafeno os elétrons próximos dos pontos de Dirac, comportam-se efetivamente como férmions de Dirac sem massa, ao passo que mas a velocidade da luz é assumida pela velocidade de Fermi v_F , conforme mencionado anteriormente.

Para obter as equações de movimento da função de onda ψ , observe que (2.32) tem a forma de um valor médio, assumamos que ψ é uma função de onda clássica, porque a média de um operador $\hat{\mathcal{O}}$ com relação a uma função dada é definida como $\langle \psi_\sigma | \hat{\mathcal{O}} | \psi_\sigma \rangle =$

$\int d^2\mathbf{r}\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})\hat{O}\psi_\sigma(\mathbf{r})$. O operador em questão na equação (2.32) é o hamiltoniano de Dirac em duas dimensões espaciais, para uma partícula relativística sem massa, ou seja, $\hat{H}_D = -i\hbar v_F(\vec{\tau}\cdot\nabla) = v_F(\vec{\tau}\cdot\mathbf{p})$. A função de onda $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ deve satisfazer a equação de Schrödinger dependente do tempo com esse hamiltoniano, ou seja:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\sigma}{\partial t} = \hat{H}_D\psi_\sigma = -i\hbar v_F(\vec{\tau}\cdot\nabla)\psi_\sigma . \quad (2.34)$$

Agora é conveniente adotar a notação relativística para o espaço-tempo, fazendo as seguintes definições:

$$x^\mu = (v_F t, x, y) , \quad (2.35)$$

$$g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1) , \quad (2.36)$$

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{1}{v_F} \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right) , \quad (2.37)$$

$$\gamma^\mu = (\tau_z, i\tau_y, -i\tau_x) = (\gamma^0, \vec{\gamma}) , \quad (2.38)$$

nas quais o índice μ vai de 0 até 2, sendo a componente 0 sempre associada ao tempo e 1, 2 às coordenadas espaciais, x^μ é a μ -ésima componente do o vetor de coordenadas no espaço-tempo em 1 + 2 dimensões, $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu}$ é o tensor métrico no espaço de Minkowski, *diag* denota uma matriz diagonal com elementos da diagonal dados entre parênteses, ∂_μ é o operador diferencial e $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2)$ são as matrizes de Dirac, que devem satisfazer a seguinte álgebra:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\mathbf{1} , \quad (2.39)$$

sendo $\mathbf{1}$ a matriz identidade com a dimensionalidade das matrizes de Dirac. No caso de considerar apenas os férmions de Dirac em 1 + 2 dimensões sem spin e sem levar em conta o outro ponto \mathbf{K}' , elas são matrizes 2×2 , como é claro pela sua representação em termos de matrizes de Pauli. É conveniente utilizar a convenção de Einstein, para soma de índices repetidos, ou seja, $\sum_{\mu=0}^2 A_\mu B^\mu \equiv A_\mu B^\mu$ e para subir ou descer um índice de um vetor qualquer utiliza-se o tensor métrico, como é usual no cálculo tensorial tão comumente utilizado na teoria da relatividade, na forma $A_\mu = g_{\mu\nu}A^\nu$ e $A^\mu = g^{\mu\nu}A_\nu$. Pode-se facilmente demonstrar, por exemplo, que $x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = (v_F t, -x, -y)$ e portanto $x^\mu x_\mu = v_F^2 t^2 - x^2 - y^2$, enquanto $kx \equiv k_\mu x^\mu = \omega t - k_x x - k_y y = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$.

Utilizando a convenção de Einstein, pode-se mostrar sem muito esforço, que a equação de Dirac (2.34), após multiplicá-la por $\tau_z = \gamma^0$ e dividí-la por $1/(\hbar v_F)$, pode ser reescrita na forma compacta abaixo:

$$i\gamma^\mu\partial_\mu\psi_\sigma = 0 . \quad (2.40)$$

Definindo ainda um spinor adjunto na forma $\bar{\psi}_\sigma = \psi_\sigma^\dagger \gamma^0$, pode-se escrever uma função densidade de lagrangiana:

$$\mathcal{L} = iv_F \hbar \sum_\sigma \bar{\psi}_\sigma \gamma^\mu \partial_\mu \psi_\sigma, \quad (2.41)$$

de onde deriva-se a equação (2.40) a partir das equações de Euler-Lagrange, que são mostradas abaixo para um campo ϕ qualquer:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} \right] = 0. \quad (2.42)$$

Fazendo $\phi = \bar{\psi}_\sigma$ na equação acima leva-nos diretamente à equação de Dirac.

Da formulação lagrangiana, pode-se definir uma densidade de momento canonicamente conjugado ao campo ϕ , denotado por π , através da equação $\pi = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{\phi}$, onde $\dot{\phi} = \partial \phi / \partial t$. Dessa forma se obtém para o campo ψ a densidade de momento abaixo:

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i \hbar \bar{\psi} \gamma^0, \quad (2.43)$$

enquanto que a densidade de momento canônico $\bar{\pi}$, associada à $\bar{\psi}$ é exatamente zero.

Uma transformação de Legendre permite encontrar a densidade hamiltoniana $\mathcal{H}(\phi, \pi, \nabla \phi)$ a partir da densidade lagrangiana $\mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi)$, na forma abaixo:

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\phi} - \mathcal{L}, \quad (2.44)$$

o que nesse caso, lembrando que $\gamma^0 \vec{\gamma} = \vec{\tau}$ resulta em:

$$\mathcal{H} = -i \hbar v_F \sum_\sigma \bar{\psi}_\sigma \vec{\gamma} \cdot \nabla \psi_\sigma = -i \hbar v_F \sum_\sigma \psi_\sigma^\dagger \vec{\tau} \cdot \nabla \psi_\sigma, \quad (2.45)$$

cujas integrações no espaço real dá novamente a equação (2.32), e assim percorre-se todo o caminho até voltar ao ponto original.

Convém discutir um ponto muito importante, associado à quiralidade no grafeno, antes que possa-se passar para a quantização do campo de Dirac. Na literatura corrente é comum mencionar que há um termo de quiralidade no grafeno. Rigorosamente falando não há operador de quiralidade em dimensões ímpares, porque não existe nesses casos uma matriz γ^5 análoga à matriz que aparece no espaço-tempo de (1+3) dimensões. A quiralidade é definida como a propriedade de dois objetos que podem ser convertidos entre si por combinações de translações, rotações e reflexões em planos especiais combinadas, mas não por rotações combinadas a translações somente.

Matematicamente, busca-se uma matriz γ^5 que é solução para o problema $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = \gamma^5 \gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^5 = 0$, ou seja, dado um espaço com n dimensões há n matrizes γ^μ distintas e busca-se uma matriz adicional γ^5 que anti-comuta com todas as outras. Em (1+3)

dimensões essa matriz é dada pelo produto das outras quatro matrizes de Dirac na forma $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$ [54]. Todavia, através da teoria de grupos e do lema de Schur pode-se mostrar que tal solução em dimensões ímpares não existe [55]. Isso significa que dois objetos inicialmente distintos podem ser colocados em uma forma equivalente utilizando apenas rotações e translações em dimensões ímpares. Veja-se que no espaço-tempo de (1+2) dimensões teríamos $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2 = \mathbf{1}$, ou seja, não há nenhuma matriz adicional que possa ser associada à quiralidade.

Na teoria relativística no espaço-tempo de (1+3) dimensões, o operador denominado quiralidade é exatamente a matriz γ^5 , e existe um operador de helicidade representada por $\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}$, sendo $\vec{\sigma}$ as matrizes de Pauli associadas ao spin verdadeiro das partículas. Para partículas sem massa, os operadores de quiralidade e helicidade tem os mesmos autovalores e podem ser simultaneamente diagonalizados, no caso em que exista operador de quiralidade. Costuma-se de forma equívoca chamar o operador helicidade de quiralidade, em alguns casos, sobretudo em altas energias, quando a massa torna-se irrelevante e esses dois operadores se confundem. No grafeno, costuma-se denominar o operador $\vec{\tau} \cdot \mathbf{p}$ de operador de quiralidade, sendo as soluções de energia autoestados desse operador. Essa nomenclatura, rigorosamente falando, não é a mais correta e deveria ser substituída por operador de pseudo-helicidade, uma vez que $\vec{\tau}$ não está associado ao spin verdadeiro, e sim ao pseudo-spin. Assim teríamos no grafeno um operador de helicidade verdadeira e um de pseudo-helicidade, mas nenhum operador verdadeiramente de quiralidade. Note ainda que para férmions de Dirac em (1+1) dimensões, ou seja, dimensionalidade total par, novamente recuperaríamos o operador de quiralidade verdadeiro, porque poderíamos fazer $\gamma^0 = \tau_z$ e $\gamma^1 = i\tau_y$ permitindo definir uma matriz de quiralidade diferente da identidade, $\gamma^5 = -\gamma^0\gamma^1 = \tau_x$, possuindo autovalores ± 1 .

2.5 A quantização canônica do campo de Dirac

Antes de apresentar a quantização canônica convém lembrar que os elétrons no grafeno possuem, além do pseudo-spin, spin-verdadeiro $\sigma = \uparrow, \downarrow$, e além disso, a expansão da função $f(\mathbf{k})$ dada em (2.22) em torno do ponto $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$ leva a uma outra cópia idêntica da teoria de Dirac para férmions sem massa, com uma única modificação de sinal na matriz τ_x e γ^1 , conseqüentemente, porque é como se produzíssemos uma inversão de coordenada $x \rightarrow -x$, o que faz inverter o sinal de k_x para manter a teoria invariante. Nesse caso, é possível escrever matrizes γ^μ estendidas, bem como spinores de Dirac ψ contendo as 4 cópias idênticas de férmions de Dirac, proveniente de 2 spins verdadeiros \times 2 pontos de Dirac distintos.

Uma representação explícita das matrizes de Dirac levando em conta o spin verdadeiro

e os dois pontos de Dirac são dadas abaixo:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \tau_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tau_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tau_z \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

$$\gamma^1 = \begin{pmatrix} i\tau_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i\tau_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\tau_y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\tau_y \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} -i\tau_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i\tau_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\tau_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\tau_x \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

sendo o spinor de Dirac ψ expresso na forma de um vetor coluna com 8 números complexos:

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi_{\uparrow} \\ \xi_{\downarrow} \\ \zeta_{\uparrow} \\ \zeta_{\downarrow} \end{pmatrix}, \bar{\psi} = \psi^{\dagger} \gamma^0 \text{ o spinor adjunto, os spinores } \xi_{\sigma} (\zeta_{\sigma}) \text{ tem duas componentes com-}$$

plexas, descrevendo um elétron no ponto de Dirac $\mathbf{K}(\mathbf{K}')$ com spin verdadeiro $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$. Usualmente define-se um número quântico conhecido como pseudo-spin de vale α , mencionado previamente, correspondendo aos pontos de Dirac $\mathbf{K}(\alpha = +1)$ e $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}(\alpha = -1)$, isto é, os spinores ξ e ζ correspondem aos autovalores $+1$ and -1 , respectivamente, para o pseudo-spin de vale. Finalmente, quanto ao pseudo-spin de sub-rede, associado às matrizes $\vec{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$, para um elétron no ponto \mathbf{K} com spin σ os autovalores de τ_z correspondem a elétrons na sub-rede A ou B .

Utilizando as matrizes γ^{μ} dadas em (2.46)-(2.48) e a função ψ na forma (2.5) pode-se escrever a lagrangiana de Dirac numa forma compacta:

$$\mathcal{L} = iv_F \hbar \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\alpha=\pm 1,-1} \bar{\psi}_{\sigma\alpha} \gamma^{\mu}_{\sigma\alpha} \partial_{\mu} \psi_{\sigma\alpha} = iv_F \hbar \bar{\psi} \gamma^{\mu} \partial_{\mu} \psi. \quad (2.49)$$

Para utilizar a quantização canônica, precisa-se determinar a densidade de momento canônico ao campo, bem como as soluções de ondas planas uniformes para o campo livre de Dirac. Vamos obter essas soluções considerando a equação de Dirac [54, 56, 57]:

$$i\gamma^{\mu} \partial_{\mu} \psi = 0, \quad (2.50)$$

que pode ainda ser escrita de forma mais explícita:

$$i\gamma^0 \frac{1}{v_F} \frac{\partial}{\partial t} + i\vec{\gamma} \cdot \nabla \psi = 0 .$$

Sabendo que as matrizes de Dirac são matrizes 8×8 existem 8 soluções distintas para a equação acima, porém podemos utilizar o fato de haver 4 cópias idênticas de férmions de Dirac, para escrever as soluções de ondas planas na forma abaixo:

$$\psi_{\mathbf{k}\uparrow,+} = \begin{pmatrix} \phi_{\mathbf{k},+} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} e^{-ikx} , \quad \psi_{\mathbf{k}\downarrow,+} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \phi_{\mathbf{k},+} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} e^{-ikx} , \quad (2.51)$$

$$\psi_{\mathbf{k}\uparrow,-} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \phi_{\mathbf{k},-} \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikx} , \quad \psi_{\mathbf{k}\downarrow,-} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \phi_{\mathbf{k},-} \end{pmatrix} e^{-ikx} , \quad (2.52)$$

nas quais $\phi_{\mathbf{k},\alpha} = \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k},\alpha} \\ B_{\mathbf{k},\alpha} \end{pmatrix}$ é um pseudo-spinor de sub-rede no ponto de Dirac correspondendo a $\alpha = +1, -1$, $\mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $kx = \omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$. Nesse caso, conforme a equação de Dirac para $\phi_{\mathbf{k},\alpha}$ toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} [k_0\tau_z - i\alpha\tau_y k_x + i\tau_x k_y] \phi_{\mathbf{k},\alpha} &= 0 \Rightarrow \\ \begin{pmatrix} k_0 & -\alpha k_x + ik_y \\ \alpha k_x + ik_y & -k_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k},\alpha} \\ B_{\mathbf{k},\alpha} \end{pmatrix} &= 0 , \end{aligned} \quad (2.53)$$

na qual $k_0 = \omega/v_F$ está associado à energia na forma $E = \hbar v_F k_0$. O trabalho restante é meramente encontrar os autovalores k_0 e autovetores da equação acima, que só possui solução se $\det(k_0\tau_z - i\alpha\tau_y k_x + i\tau_x k_y) = 0$, o que nos fornece:

$$k_0^2 - k_x^2 - k_y^2 = 0 \Rightarrow k_0 = \pm |\mathbf{k}| , \quad (2.54)$$

havendo, como em todo sistema relativístico, uma solução de energia positiva ($k_0 > 0$) e uma solução de energia negativa ($k_0 < 0$). Os autovetores correspondentes, já normalizados são os seguintes:

$$u_{\mathbf{k},\alpha}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\alpha\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

$$u_{\mathbf{k},\alpha}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\alpha e^{i\alpha\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

nos quais $u_{\mathbf{k},\alpha}^+$ e $u_{\mathbf{k},\alpha}^-$ são os pseudo-spinores correspondentes às soluções de energia positivas e negativas, respectivamente e o ângulo $\varphi_{\mathbf{k}}$ é definido através da relação $\tan \varphi_{\mathbf{k}} = k_y/k_x$.

Agora, o campo de Dirac $\psi(x)$ pode ser expandido em componentes de Fourier, utilizando os spinores determinados acima, e por uma questão de completeza matemática, teria-se que levar em conta tanto as soluções de energia positiva e quanto negativa, na forma abaixo:

$$\psi(x) = \sum_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \left[C_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,+} u_{\mathbf{k},\alpha}^+ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-k_0t)} + C_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,-} u_{\mathbf{k},\alpha}^- e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+|k_0|t)} \right], \quad (2.57)$$

onde $k_0 = \pm|\mathbf{k}|$, $C_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,+}$ é o coeficiente de Fourier da onda plana de energia positiva ($\hbar v_F k_0 > 0$) e momento \mathbf{k} no ponto de Dirac α com spin verdadeiro $\sigma = \uparrow, \downarrow$, enquanto $C_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,-}$ é o coeficiente de Fourier da onda plana de energia negativa ($-\hbar v_F |k_0| < 0$) e momento \mathbf{k} .

Para proceder com a quantização canônica primeiro determina-se o momento canônico $\pi(x)$, a partir da lagrangiana (2.49), que nos dá:

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial\psi/\partial t)} = i\hbar\bar{\psi}\gamma^0 = i\hbar\psi^\dagger, \quad (2.58)$$

e então, para quantizar um campo fermiônico, converte-se ψ e π em operadores $\hat{\psi}$, $\hat{\pi}$ de forma que satisfaçam as relações de anti-comutação a tempos iguais, na forma abaixo [58]:

$$\{\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}(\mathbf{r}', t)\} = 0, \quad (2.59)$$

$$\{\hat{\pi}(\mathbf{r}, t), \hat{\pi}(\mathbf{r}', t)\} = 0, \quad (2.60)$$

$$\{\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\pi}(\mathbf{r}', t)\} = i\hbar\delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.61)$$

onde $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$, para quaisquer operadores \hat{A} e \hat{B} e $\delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ é a função delta de Dirac nas duas dimensões espaciais. Para que $\hat{\psi}$, $\hat{\pi}$ sejam transformados em operadores é necessário que os coeficientes de Fourier $C_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,+}$ e $C_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,-}$ sejam convertidos em operadores de aniquilação fermiônicos $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,+}$ e $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,-}$ satisfazendo relações fermiônicas na forma:

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j\} = \{\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger\} = 0, \quad (2.62)$$

$$\{\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad (2.63)$$

nas quais \hat{c}_i aniquila um elétron com números quânticos $i = (\mathbf{k}, \sigma, \alpha, \pm)$ e \hat{c}_j^\dagger cria um elétron com números quânticos dados pelo índice i , δ_{ij} é a função delta de Kronecker.

Como último passo na quantização cabe reinterpretar as soluções de elétrons com carga negativa e energia negativa como buracos de carga positiva e energia positiva. Por tanto se faz a troca dos operadores de aniquilação $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,-}$ de elétrons com energia negativa por um operador de criação de buraco $\hat{d}_{-\mathbf{k},\sigma,\alpha,+}^\dagger$ com energia positiva e vetor de onda $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$, ou seja, movendo-se no sentido contrário ao do elétron [54, 56, 57]. Desse modo os operadores $\hat{\psi}$ e $\hat{\bar{\psi}}$ tomam a forma abaixo:

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \left[\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} u_{\mathbf{k},\alpha}^+ e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-v_F k_0 t)} + \hat{d}_{-\mathbf{k},\sigma,\alpha}^\dagger u_{\mathbf{k},\alpha}^- e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+v_F |k_0|t)} \right], \quad (2.64)$$

$$\hat{\bar{\psi}}(x) = \sum_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \left[\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}^\dagger \bar{u}_{\mathbf{k},\alpha}^+ e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-v_F k_0 t)} + \hat{d}_{-\mathbf{k},\sigma,\alpha} \bar{u}_{\mathbf{k},\alpha}^- e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+v_F |k_0|t)} \right], \quad (2.65)$$

onde $\bar{u} = u^\dagger \gamma^0$. Observe que no termo de energia positiva elimina-se o sinal + que indicava energia positiva no operador de aniquilação de elétrons, ou seja, $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,+} \equiv \hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}$, porque não há nenhum risco de confusão com os operadores de energia negativa, que são reinterpretados como buracos, $\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha,-} \equiv \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}^\dagger$. Uma vez que o somatório sobre o vetor de onda \mathbf{k} percorre todos os valores, no sentido positivo e negativo em relação a um dado eixo orientado qualquer, podemos trocar \mathbf{k} por $-\mathbf{k}$ no segundo termo, e utilizar a notação relativística $kx = v_F k_0 t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ para escrever:

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \left[\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} u_{\mathbf{k},\alpha} e^{-ikx} + \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}^\dagger v_{\mathbf{k},\alpha} e^{ikx} \right], \quad (2.66)$$

$$\hat{\bar{\psi}}(x) = \sum_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \left[\hat{c}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha}^\dagger \bar{u}_{\mathbf{k},\alpha} e^{ikx} + \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma,\alpha} \bar{v}_{\mathbf{k},\alpha} e^{-ikx} \right], \quad (2.67)$$

nas quais simplifica-se a notação para $u_{\mathbf{k},\alpha} = u_{\mathbf{k},\alpha}^+$ e $v_{\mathbf{k},\alpha} = u_{-\mathbf{k},\alpha}^- = u_{\mathbf{k},\alpha}^+$. A inversão do momento de \mathbf{k} para $-\mathbf{k}$ corresponde a uma rotação de 180° dos vetores em relação ao eixo z perpendicular ao plano. Nesse caso o ângulo $\varphi_{\mathbf{k}}$ definido por $\tan(\varphi_{\mathbf{k}}/k_x)$ transforma-se na forma $\varphi_{-\mathbf{k}} \rightarrow \varphi_{\mathbf{k}} + 180^\circ$, levando diretamente à relação $v_{\mathbf{k},\alpha} = u_{-\mathbf{k},\alpha}^- = u_{\mathbf{k},\alpha}^+$.

Pode-se ainda demonstrar os seguintes resultados de traço das matrizes de Dirac na representação 8×8 aqui mostradas, no caso de 4 réplicas idênticas dos férmions de Dirac sem massa em $(1+2)$ dimensões espaço-temporais, bem como dos produtos de pseudo-

spinore:

$$\sum_{\sigma\alpha} u_{\alpha\mathbf{k}} \bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} = \sum_{\alpha s} v_{\alpha\mathbf{k}} \bar{v}_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{1}{2k_0} \gamma^\mu k_\mu, \quad (2.68)$$

$$\text{tr}(\gamma^\mu) = 0, \quad (2.69)$$

$$\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu) = 8g^{\mu\nu}, \quad (2.70)$$

$$\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\alpha \gamma^\beta) = 8(g^{\mu\nu} g^{\alpha\beta} - g^{\mu\alpha} g^{\nu\beta} + g^{\mu\beta} g^{\nu\alpha}), \quad (2.71)$$

e além disso $\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \dots \gamma^\alpha) = 0$ para um produto de n matrizes sendo n um número ímpar, $\text{tr}(\dots)$ denota o traço.

Para introduzir o acoplamento ao campo eletromagnético, pode-se adotar o princípio de gauge, que requer a invariância da lagrangiana da teoria, a menos de uma divergência total, por transformações de fase do grupo $U(1)$ aplicada à função $\psi(x)$ na forma abaixo:

$$\psi'(x) = e^{i\Lambda(x)} \psi(x), \quad \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x) e^{-i\Lambda(x)}, \quad (2.72)$$

na qual $\Lambda(x)$ é uma função escalar dependente do espaço-tempo. Aqui seguiu-se mais de perto a notação e os métodos apresentados em [56]. É fácil perceber que a lagrangiana de Dirac do campo livre dada em (2.49) não é invariante porque $\partial_\mu \psi' = e^{i\Lambda(x)} \partial_\mu \psi + i(\partial_\mu \Lambda) \psi$, fazendo com que $\mathcal{L}' \neq \mathcal{L}$. Isso deve-se ao fato de que as derivadas ordinárias $\partial_\mu \psi$ não tem a mesma lei de transformação da própria função ψ . Para resolver o problema, se introduz um potencial A_μ e substituí-se a derivada ordinária ∂_μ na lagrangiana do campo livre, por uma versão denominada derivada covariante

$$D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu, \quad (2.73)$$

na qual $g = e/(\hbar v_F)$ e a carga elétrica $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{C}$ é a constante de acoplamento no caso eletromagnético. Observe que redefinindo o operador de derivada se obtêm, para a aplicação $D'_\mu \psi'$ o seguinte resultado:

$$D'_\mu \psi' = (\partial_\mu - igA'_\mu)(e^{i\Lambda} \psi) = e^{i\Lambda} (\partial_\mu - igA'_\mu + i\partial_\mu \Lambda) \psi, \quad (2.74)$$

permitindo definir a transformação de gauge sobre o campo:

$$A'_\mu = A_\mu + \frac{1}{g} \partial_\mu \Lambda, \quad (2.75)$$

e então

$$D'_\mu \psi' = e^{i\Lambda} D_\mu \psi, \quad (2.76)$$

seguindo a mesma regra de transformação que a própria função ψ , dada em (2.72) e tornando a lagrangiana invariante, conforme requer o princípio de gauge. Um termo

invariante de gauge para os potenciais leva a definição do campo $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ e à introdução de uma lagrangiana do campo $F_{\mu\nu}$ livre [54]. O resultado final da teoria é mostrado abaixo:

$$\mathcal{L} = iv_F \hbar \bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi - \frac{e}{\hbar v_F} \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} . \quad (2.77)$$

Pode-se ainda aplicar o teorema de Noether [58] para encontrar a densidade de corrente elétrica no grafeno. Tal teorema diz que para uma transformação infinitesimal de gauge, ou seja, fazendo $\Lambda \rightarrow 0$ em (2.72), se tem uma densidade de corrente conservada $\partial_\mu J^\mu$, em que a densidade de corrente J^μ tem a forma abaixo [58, 59]:

$$J^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} \delta \psi + \delta \bar{\psi} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{\psi})} , \quad (2.78)$$

na qual $\delta \psi = \psi' - \psi = i\Lambda \psi$, $\delta \bar{\psi} = \bar{\psi}' - \bar{\psi} = -i\Lambda \bar{\psi}$ e além disso $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \psi)} = iv_F \hbar \bar{\psi} \gamma^\mu$ e $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{\psi})} = 0$. Uma vez que Λ é arbitrário, deve-se dividir J^μ por Λ e multiplicar pela carga do elétron para obter a densidade de corrente elétrica nas unidades apropriadas:

$$J^\mu = -e \bar{\psi} \gamma^\mu \psi . \quad (2.79)$$

É importante ressaltar que no grafeno o acoplamento dos elétrons com o potencial eletromagnético A_μ deve possuir alguns termos adicionais, do tipo Chern-Simmons, porque de fato o grafeno é um material de duas dimensões espaciais embutido em um espaço de três dimensões, diferentemente de um problema onde o espaço é puramente bidimensional [60].

CAPÍTULO 3

JUNÇÃO DE TUNELAMENTO BASEADA NO GRAFENO

Este capítulo apresenta o desenvolvimento da proposta principal desta tese e contém os seguintes desenvolvimentos: i) após a revisão do Lagrangeana de Dirac em $(1 + 2)$ dimensões, o qual nos permite reforçar os conceitos abordados no capítulo 2 de fundamentos da tese, ii) obtenção das expressões de corrente referentes ao transporte de carga e iii) correntes de spin nas junções de tunelamento de grafeno, utilizando o método do hamiltoniano de transferência em segunda quantização. O transporte de spin será considerado apenas em situações de baixo campo magnético externo aplicado, na configuração perpendicular ao plano (x, y) que contém junção de tunelamento.

3.1 Lagrangeano de Dirac em duas dimensões espaço - tempo $(1 + 2)D$

A presente seção esta baseada na notação usada na referência [61]. A densidade Lagrangiana de Dirac descreve os elétrons livres no grafeno perto dos cones de Dirac na zona de Brillouin em duas dimensões espaço-tempo $(1 + 2)D$ dada por:

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi, \quad (3.1)$$

no qual $\psi = (\xi_\uparrow, \xi_\downarrow, \zeta_\uparrow, \zeta_\downarrow)^T$ são as 8 componentes do espinor de Dirac, $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$ é o espinor adjunto, $\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2)$ são as matrizes de Dirac, $\partial_\mu = \partial/\partial x^\mu$ é o operador da derivada, $x^\mu = (x^0 = v_F t, x^1, x^2)$ são as coordenadas no espaço-tempo em $(1 + 2)$ dimensões, a velocidade de Fermi v_F na teoria relativística de Dirac desempenha o papel da velocidade da luz c e o índice μ vai de 0 até 2. Tendo em conta a convenção de Einstein de soma sobre índices repetidos. As duas componentes do espinor $\xi_\sigma(\zeta_\sigma)$ descrevem um elétron no ponto de Dirac $\vec{K}(\vec{K}')$ com spin verdadeiro $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$. Normalmente se define o pseudospin de vale dado pelo índice α , correspondendo aos pontos de Dirac $\vec{K}(\alpha = +1)$ e $\vec{K}' = -\vec{K}(\alpha = -1)$, e então, os espinores ξ e ζ correspondem ao valor do pseudospin de vale $+1$ e -1 , respectivamente. Além do spin verdadeiro σ e do pseudospin de vale α há o pseudospin de sub-rede direta, associados com as matrizes $\vec{\tau} = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$, tal que, para um elétron no ponto de Dirac \vec{K} com spin σ temos $\tau_z\xi_\sigma = \pm 1\xi_\sigma$, onde os autovalores da matriz τ_z , $+1$ e -1 , correspondem a um elétron localizado nas sub-redes A e B da rede de favo de mel no espaço real, respectivamente. Como foi mencionado no capítulo anterior, as matrizes de Dirac satisfazem a regra de anticomutação, $\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}$, onde $g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1)$ é o tensor métrico de Minkowski.

Como antes, fazendo a decomposição de Fourier para o campo de Dirac $\psi(x)$ tem-se:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_{\alpha\mathbf{k}s} (u_{\alpha\mathbf{k}}c_{\alpha\mathbf{k}s}e^{-ikx} + v_{\alpha\mathbf{k}}d_{\alpha\mathbf{k}s}^\dagger e^{ikx}) \\ \bar{\psi}(x) &= \sum_{\alpha\mathbf{k}s} (\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}}c_{\alpha\mathbf{k}s}^\dagger e^{ikx} + \bar{v}_{\alpha\mathbf{k}}d_{\alpha\mathbf{k}s}e^{-ikx})\end{aligned}\quad (3.2)$$

no qual utiliza-se aqui a notação $kx = k_0t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{x}$, $c_{\alpha\mathbf{k}s}$ e $d_{\alpha\mathbf{k}s}^\dagger$ são os operadores de destruição e criação fermiônicos para elétrons e buracos, com pseudospin de vale α , momento linear $\hbar\mathbf{k}$ e spin s , $u_{\alpha\mathbf{k}}$ e $v_{\alpha\mathbf{k}}$ são os espinores de Dirac no espaço de momento, dados por:

$$\begin{aligned}u_{\alpha\mathbf{k}} &= v_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\alpha\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \\ \bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} &= \bar{v}_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{-i\alpha\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (3.3)$$

e seus respectivos conjugados adjuntos: $\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}}$ e $\bar{v}_{\alpha\mathbf{k}}$, com $\tan\varphi_{\mathbf{k}} = k_y/k_x$. Lembrando que os férmions de Dirac sem massa obedecem à relação de dispersão da forma $k_0^2 - \mathbf{k}^2 = 0$.

A inclusão de um campo elétrico no plano perpendicular ao plano do campo magnético na teoria é prontamente obtida por meio de princípio do calibre, que requer a substituição das derivadas ordinárias ∂_μ pelas derivadas covariantes $D_\mu = \partial_\mu - ieA_\mu$, na equação (3.1), produzindo a seguinte densidade Lagrangeana:

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi + e\bar{\psi}\gamma^\mu A_\mu\psi.\quad (3.4)$$

Aqui, $A_\mu = (A_0, -A_x, -A_y)$ representa o potencial eletromagnético em um espaço-tempo de $(1 + 2)$ dimensões e $e = 1,6 \times 10^{-19}\text{C}$ é a carga do elétron em módulo. A energia da barreira potencial é diretamente descrita através do potencial escalar A_0 , tal que $U(x) = -eA_0(x)$. O acoplamento entre o eletromagnetismo e os campos de Dirac são da forma $\bar{\psi}\gamma^0U(x)\psi$. É importante ressaltar que, se o potencial $A_0(x)$ é repulsivo para os elétrons, que possuem carga negativa, será atrativo para os buracos, cuja carga é positiva, e vice-versa [62].

3.2 Hamiltoniano de transferência na junção de tunelamento.

Nesta seção será apresentado um modelo simples para a descrição do transporte quântico de carga através de uma junção túnel no grafeno, mostrada esquematicamente na figura 3.1. Há três regiões distintas nessa nanoestrutura de grafeno: o lado esquerdo (L) é separado do lado direito (R) por uma região de barreira potencial estendendo-se a

partir de $x = 0$ até $x = d$, assumindo que cada lado da região da barreira pode ser convenientemente e independentemente dopada. A barreira de potencial na rede do grafeno pode ser gerada pelo efeito do gate potencial quando aplicamos um potencial externo na rede ou também pela distribuição das bandas na região de transição 1 e 3 (com diferentes dopagens) criando uma barreira do tipo Schottky na camada de depleção, ver figura 3.2. Para fins de análise em nosso modelo teórico, considerou-se que a barreira de potencial foi gerada pelo efeito de um potencial de gate aplicado externamente.

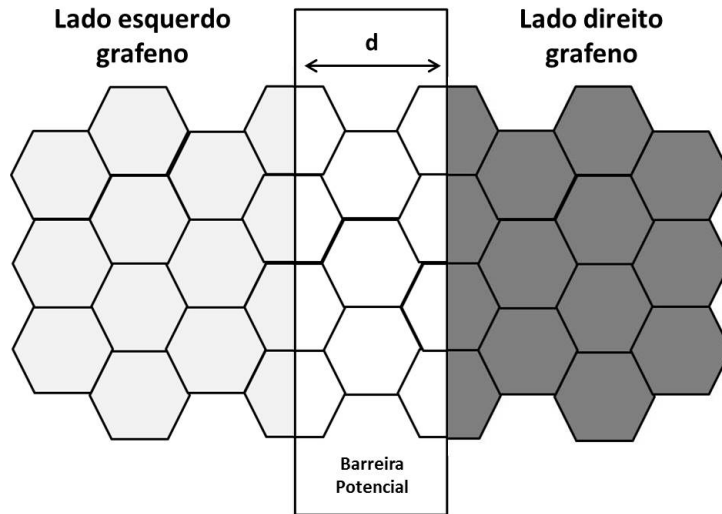


Figura 3.1: Esquema de uma junção túnel no grafeno: Uma barreira de potencial de altura U_0 e espessura d é formada ao longo do eixo x , por meio de um potencial de gate aplicado. Os lados esquerdo e direito da barreira podem ser distintamente dopados de forma a tornarem-se semicondutores tipo-p ou tipo-n.

Para a formação da barreira de potencial experimentalmente, geralmente se coloca acima de um substrato de óxido de silício (SiO_2) uma lâmina de grafeno e os contatos metálicos são depositados nas bordas da lâmina de grafeno para formar os eletrodos. Adicionalmente, em uma região separada por óxido é realizada a colocação de um contato do tipo gate, que permite a aplicação do potencial de gate, como mostrado na figura 3.3. Nesse ponto fazem-se necessários alguns comentários: i) a formação de uma barreira de potencial em certa região de uma lâmina de grafeno depositada sobre algum substrato, como o óxido de silício acima mencionado, é possível porque a presença do campo elétrico gerado pelo gate, terá certamente componentes perpendiculares ao plano do grafeno e irá afetar a energia dos orbitais p_z dos átomos de carbono naquela região onde o potencial do gate é aplicado, produzindo assim maior ou menor probabilidade de ocupação dos orbitais naquela região; ii) tem sido demonstrado que no caso de barreiras de potencial para partículas relativísticas sem massa o parâmetro relevante de barreira é o produto da altura pela largura, sendo a barreira mais transparente quanto maior a sua altura, dado o efeito de tunelamento de Klein [19]; iii) o grafeno é de fato um material bidimensional

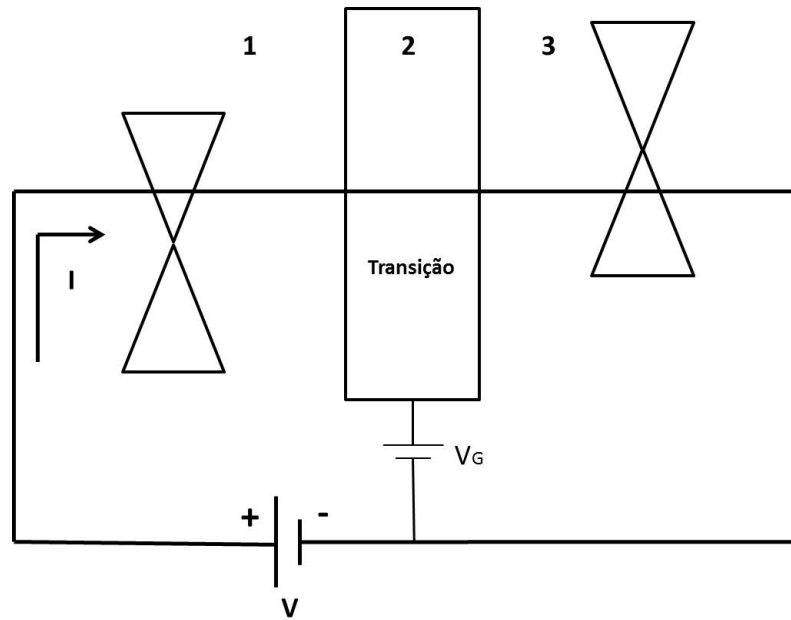


Figura 3.2: Criação da barreira de potencial na rede do grafeno quando aplica-se um potencial externo V e representação esquemática da distribuição das bandas de energia nas regiões 1 e 3, longe da região de barreira.

embutido em um espaço verdadeiramente tridimensional, e mostra-se que qualquer estrutura bidimensional é instável, e no caso do grafeno, tenderia a enrolar, para formar um nanotubo de carbono, numa configuração que é energeticamente mais estável. Para que a lâmina de grafeno possa existir como tal é necessário o efeito de equilíbrio produzido pelo próprio substrato utilizado para suportá-lo. A adesão ao substrato se dá através de forças de van der Waals, que são relativamente fracas, mas afetam ligeiramente a estrutura de bandas do grafeno, produzindo assimetrias entre os elétrons e buracos, abrindo um pequeno gap no espectro de energias disponíveis, ou ainda produzindo efeitos similares a uma dopagem.

Dadas condições de fabricação que tem sido conseguidas em laboratório, é possível negligenciar em primeira aproximação os efeitos de substrato, haja vista que desde os primórdios da produção experimental do grafeno por Geim e Novoselov, tem-se verificado a relação de dispersão linear no espectro de energias do grafeno, que caracteriza os férmions de Dirac sem massa [8]. No entanto, observa-se grande variabilidade nas propriedades de condutividade elétrica de lâminas de grafeno produzidas com diferentes técnicas experimentais e depositadas em diferentes substratos. Notou-se também que a forma das bordas de uma lâmina de grafeno afetam ligeiramente sua estrutura de bandas, sendo que as bordas mais frequentemente encontradas apresentam terminação em zig-zag ou arm-chair, que colocam condições de contorno adicionais aos espinores de Dirac aqui utilizados. Em toda a nossa análise se está negligenciando os efeitos de substrato, efeitos de bordas, bem como admitindo que é possível obter a região de barreira apenas aplicando

um potencial de gate através de um contato metálico depositado no substrato, considerado isolante. Sabe-se ainda que a aplicação de um potencial de gate afeta os números de ocupação de elétrons e buracos no grafeno, podendo assim fazer o papel de um elemento dopante. De acordo com a Ref. [63], o efeito de dopagem pode ser induzido por um potencial de gate V_g e levando em conta a capacitância C entre os eletrodos no gate e a lâmina de grafeno, tem-se a seguinte relação para o número de portadores n induzidos no grafeno:

$$n = \frac{CV_g}{e} + n_Q \left[1 - \sqrt{1 + \frac{CV_g}{en_Q}} \right],$$

no qual $n_Q = \frac{\pi(C\hbar v_F)^2}{2e^4}$. O segundo termo do lado direito da expressão acima é a chamada capacitância quântica, que aparece tipicamente em 2DEGs.

Assume-se aqui ainda que a largura da região de barreira pode variar entre $d = 1\text{nm}$ e $d = 50\text{nm}$, que corresponde a vários parâmetros de rede, condição necessária para a validade da aproximação da teoria de Dirac para o grafeno, o que equivale a uma teoria de comprimentos de onda longos em comparação ao parâmetro de rede do grafeno. Os potenciais de gate que tem sido aplicados em experimentos excedem 30V sem aparentemente danificar as lâminas de grafeno, e adicionalmente, as lâminas podem ter áreas na escala de $1\mu\text{m}^2$ [3, 4].

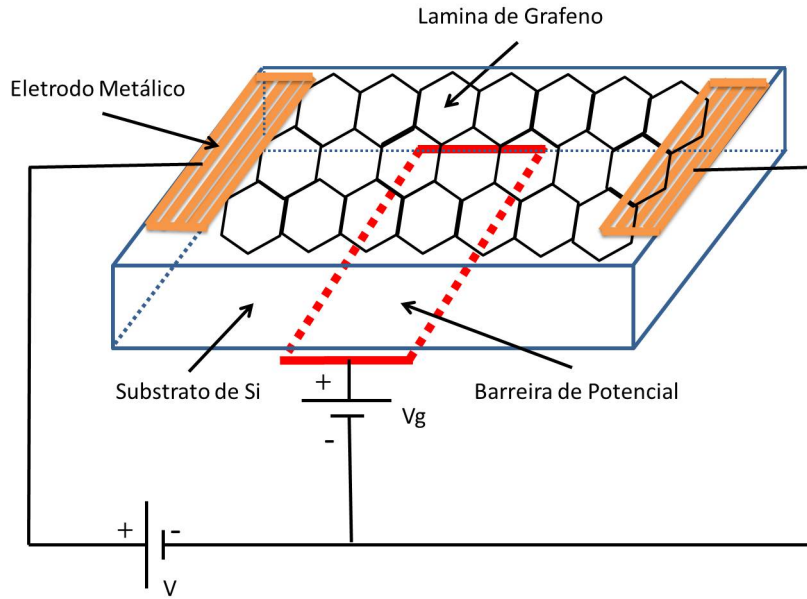


Figura 3.3: Formação da barreira de potencial experimentalmente no grafeno.

Indo adiante, apresentamos o hamiltoniano completo de Dirac:

$$\hat{H} = \int d^2x [\pi\dot{\psi} - \mathcal{L}] = \int d^2x \bar{\psi}(\mathbf{x}) [-i\vec{\gamma} \cdot \nabla + \gamma^0 U(\mathbf{x})] \psi(\mathbf{x}), \quad (3.5)$$

sendo $\pi = \partial\mathcal{L}/\partial\dot{\psi} = i\bar{\psi}\gamma^0$ a densidade de momento canônico. Na ausência de campos

magnéticos colocamos $A_x = A_y = 0$, por uma questão de conveniência. Considerando-se a física de uma junção túnel, sabemos que os elétrons e/ou buracos tem suas funções de onda afetadas pela barreira, de tal forma que existem funções com amplitude não negligenciável do lado esquerdo da barreira, sendo desprezível do lado direito, e vice-versa. No entanto há a possibilidade de que as partículas atravessem a região de barreira devido à superposição das funções de ondas esquerdas e direitas dentro da barreira. Portanto, torna-se intuitivo dividir o operador de campo $\psi(\mathbf{x})$ da seguinte forma:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_L(\mathbf{x}) + \psi_R(\mathbf{x}) , \quad (3.6)$$

nos quais ψ_L e ψ_R são os operadores de campos de Dirac ao lado esquerdo e direito da barreira de potencial, respectivamente. Conforme foi apresentado no capítulo anterior, podemos expressá-los na forma de segunda quantização, mas agora separando os termos da direita e da esquerda, na forma que segue:

$$\psi_L = \sum_{\alpha k' s} \left(u_{\alpha k'}^L e^{-i(\varepsilon t - k'_x x - k'_y y)} c_{\alpha k' s}^L + v_{\alpha k'}^L e^{i(\varepsilon t - k'_x x - k'_y y)} d_{\alpha k' s}^{+L} \right) \quad (3.7)$$

$$\bar{\psi}_L = \sum_{\alpha k s} \left(\bar{u}_{\alpha k}^L e^{i(\varepsilon t - k_x x - k_y y)} c_{\alpha k s}^{+L} + \bar{v}_{\alpha k}^L e^{-i(\varepsilon t - k_x x - k_y y)} d_{\alpha k s}^L \right) \quad (3.8)$$

$$\psi_R = \sum_{\alpha k' s} \left(u_{\alpha k'}^R e^{-i(\varepsilon t - k'_x x - k'_y y)} c_{\alpha k' s}^R + v_{\alpha k'}^R e^{i(\varepsilon t - k'_x x - k'_y y)} d_{\alpha k' s}^{+R} \right) \quad (3.9)$$

$$\bar{\psi}_R = \sum_{\alpha k s} \left(\bar{u}_{\alpha k}^R e^{i(\varepsilon t - k_x x - k_y y)} c_{\alpha k s}^{+R} + \bar{v}_{\alpha k}^R e^{-i(\varepsilon t - k_x x - k_y y)} d_{\alpha k s}^R \right) \quad (3.10)$$

Observa-se que os campos ψ_L , $\bar{\psi}_L$, ψ_R e $\bar{\psi}_R$ acima mostrados estão representados através de expansão em ondas planas uniformes, que são os modos normais do campo de Dirac livre. Esta é uma boa aproximação para elétrons e buracos propagando-se em regiões distantes da barreira potencial. De fato, para $x \ll 0$ ou $x \gg d$ temos que $U(x) = 0$ e portanto os elétrons e buracos se movimentam livremente como férmions de Dirac sem massa. Na região próxima da barreira, no entanto ocorre a reflexão ou a transferência de elétrons e/ou de um lado para outro da barreira. A física de transporte quântico de carga através da junção está totalmente contabilizada pelo hamiltoniano de transferência \hat{H}_T descrevendo a sobreposição entre os operadores de campo ψ_L e ψ_R dentro da barreira de potencial, da seguinte forma:

$$\hat{H}_T = \int d^2 x [\bar{\psi}_L(\mathbf{x}) \hat{H}_B \psi_R(\mathbf{x}) + \bar{\psi}_R(\mathbf{x}) \hat{H}_B \psi_L(\mathbf{x})] , \quad (3.11)$$

no qual $\hat{H}_B = \gamma^0 U(x)$ é o Hamiltoniano da barreira para uma partícula. Em baixas

energias os termos cinéticos são negligenciados dentro da barreira, já que a energia cinética das partículas próximas aos pontos de Dirac é praticamente zero como consequência da relação de dispersão linear. Veja que para a validade da aproximação de uma teoria de Dirac próximo dos chamados pontos de Dirac, o vetor de onda \mathbf{q} de um elétron ou buraco deve ser muito menor do que o vetor que define o ponto de Dirac $\vec{K} = (4\pi/3\sqrt{3}a, 0)$ em módulo. Para $|\mathbf{q}| = |\mathbf{K}|/10$ a energia cinética correspondente vale aproximadamente 1,14eV. Se adotara valores de potencial de gate maiores que esse valor, pelo menos 4 a 5 vezes maior. Caso se deseje estudar situações com potencial de gate menores faz-se necessário levar em conta o termo cinético no interior da barreira.

Feita essa ressalva, o hamiltoniano de transferência \hat{H}_T é dado por:

$$\bar{H}_T = H_{L \rightarrow R} + H_{R \rightarrow L} \quad (3.12)$$

no qual o primeiro termo representa o transporte da esquerda para a direita da barreira e o segundo o caminho inverso no transporte quântico de carga e spin dos elétrons e buracos, através da barreira de potencial no sistema físico. Agora, detalhando um pouco mais os cálculos, se encontrara o primeiro termo do hamiltoniano de transferência substituindo os operadores de campo na representação de segunda quantização dados por (3.8) e (3.9) em $\int dx^2 \bar{\psi}_L \hat{H}_B \psi_R$, obtendo assim a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} H_{L \rightarrow R} = & \int dx^2 \sum_{\alpha k k' s} (\bar{u}_{\alpha k}^L e^{i(\varepsilon t - k_x x - k_y y)} c_{\alpha k s}^{L+} + \bar{v}_{\alpha k}^L e^{-i(\varepsilon t - k_x x - k_y y)} d_{\alpha k s}^L) \\ & \hat{H}_B (u_{\alpha k'}^R e^{-i(\varepsilon t - k'_x x - k'_y y)} c_{\alpha k' s}^R + v_{\alpha k'}^R e^{i(\varepsilon t - k'_x x - k'_y y)} d_{\alpha k' s}^{R+}) . \end{aligned} \quad (3.13)$$

Multiplicando os fatores que aparecem acima, obtemos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} H_{L \rightarrow R} = & \int dx^2 \sum_{\alpha k k' s} (\bar{u}_{\alpha k}^L \hat{H}_B u_{\alpha k'}^R e^{-i(k_x x + k_y y)} e^{i(k'_x x + k'_y y)} c_{\alpha k s}^{L+} c_{\alpha k' s}^R \\ & + \bar{u}_{\alpha k}^L \hat{H}_B v_{\alpha k'}^R e^{-i(k_x x + k_y y)} e^{-i(k'_x x + k'_y y)} c_{\alpha k s}^{L+} d_{\alpha k' s}^{R+} \\ & + \bar{v}_{\alpha k}^L \hat{H}_B u_{\alpha k'}^R e^{i(k_x x + k_y y)} e^{i(k'_x x + k'_y y)} d_{\alpha k s}^L c_{\alpha k' s}^R \\ & + \bar{v}_{\alpha k}^L \hat{H}_B v_{\alpha k'}^R e^{i(k_x x + k_y y)} e^{-i(k'_x x + k'_y y)} d_{\alpha k s}^L d_{\alpha k' s}^{R+}) \\ H_{L \rightarrow R} = & \int dx^2 \sum_{\alpha k k' s} (\bar{u}_{\alpha k}^L \hat{H}_B u_{\alpha k'}^R e^{-i(k_x - k'_x)x} c_{\alpha k s}^{L+} c_{\alpha k' s}^R \sum_{k_y k'_y} e^{-i(k_y - k'_y)y} \\ & + \bar{u}_{\alpha k}^L \hat{H}_B v_{\alpha k'}^R e^{-i(k_x + k'_x)x} c_{\alpha k s}^{L+} d_{\alpha k' s}^{R+} \sum_{k_y k'_y} e^{-i(k_y + k'_y)y} \\ & + \bar{v}_{\alpha k}^L \hat{H}_B u_{\alpha k'}^R e^{i(k_x + k'_x)x} d_{\alpha k s}^L c_{\alpha k' s}^R \sum_{k_y k'_y} e^{i(k_y + k'_y)y} \end{aligned}$$

$$+\bar{v}_{\alpha k}^L \hat{H}_B v_{\alpha k'}^R e^{i(k_x - k'_x)x} d_{\alpha k s}^L d_{\alpha k' s}^{R+} \sum_{k_y k'_y} e^{i(k_y - k'_y)y}. \quad (3.14)$$

Utilizando a definição da delta de Dirac $\sum_{k_y k'_y} e^{\pm i(k_y \mp k'_y)y} = \delta(k_y \mp k'_y)$ na equação (3.14) quando o valor de $k_y = k'_y$ a função delta de Dirac é $\delta = 1$. Portanto o hamiltoniano de transferência de ida (esquerda para a direita) fica dado da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H_{L \rightarrow R} = & \int dx^2 \sum_{\alpha k k' s} (\bar{u}_{\alpha k}^L \hat{H}_B u_{\alpha k'}^R e^{-i(k_x - k'_x)x} c_{\alpha k s}^{L+} c_{\alpha k' s}^R + \bar{u}_{\alpha k}^L \hat{H}_B v_{\alpha k'}^R e^{-i(k_x + k'_x)x} c_{\alpha k s}^{L+} d_{\alpha k' s}^{R+} \\ & + \bar{v}_{\alpha k}^L \hat{H}_B u_{\alpha k'}^R e^{i(k_x + k'_x)x} d_{\alpha k s}^L c_{\alpha k' s}^R + \bar{v}_{\alpha k}^L \hat{H}_B v_{\alpha k'}^R e^{i(k_x - k'_x)x} d_{\alpha k s}^L d_{\alpha k' s}^{R+}). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Fazendo o mesmo procedimento descrito anteriormente, se obtêm o hamiltoniano de transferência de retorno:

$$\begin{aligned} H_{R \rightarrow L} = & \int dx^2 \sum_{\alpha k k' s} (\bar{u}_{\alpha k}^R \hat{H}_B u_{\alpha k'}^L e^{-i(k_x - k'_x)x} c_{\alpha k s}^{R+} c_{\alpha k' s}^L + \bar{u}_{\alpha k}^R \hat{H}_B v_{\alpha k'}^L e^{-i(k_x + k'_x)x} c_{\alpha k s}^{R+} d_{\alpha k' s}^{L+} \\ & + \bar{v}_{\alpha k}^R \hat{H}_B u_{\alpha k'}^L e^{i(k_x + k'_x)x} d_{\alpha k s}^R c_{\alpha k' s}^L + \bar{v}_{\alpha k}^R \hat{H}_B v_{\alpha k'}^L e^{i(k_x - k'_x)x} d_{\alpha k s}^R d_{\alpha k' s}^{L+}). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Agora podemos efetuar a soma dos hamiltonianos de transferência de ida e retorno dados nas equações (3.15) e (3.16), para obter o resultado desejado, explicitamente escrito na forma de segunda quantização, conforme a expressão abaixo:

$$\begin{aligned} \hat{H}_T = & \sum_{\alpha k k' s} [(t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee} c_{\alpha k s}^{L\uparrow} c_{\alpha k' s}^R + \bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee} c_{\alpha k s}^{R\uparrow} c_{\alpha k' s}^L) + (t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh} c_{\alpha k s}^{L\uparrow} d_{\alpha k' s}^{R\uparrow} + \bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh} c_{\alpha k s}^{R\uparrow} d_{\alpha k' s}^{L\uparrow}) \\ & + (t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he} d_{\alpha k s}^L c_{\alpha k' s}^R + \bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he} d_{\alpha k s}^R c_{\alpha k' s}^L) - (t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh} d_{\alpha k' s}^{R\uparrow} d_{\alpha k s}^L + \bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh} d_{\alpha k' s}^{L\uparrow} d_{\alpha k s}^R)] \end{aligned} \quad (3.17)$$

no qual o operador fermiônico $c_{\alpha k s}^{L\uparrow} (c_{\alpha k s}^{R\uparrow})$ cria um elétron no lado esquerdo(direito) da barreira de potencial com momento linear $\hbar \mathbf{k}$, spin verdadeiro $s = \uparrow, \downarrow$ e pseudospin de vale $\alpha = \pm 1$, enquanto $d_{\alpha k s}^{L\uparrow} (d_{\alpha k s}^{R\uparrow})$ cria um buraco transportando os números quânticos \mathbf{k}, s, α no lado esquerdo(direito) da barreira de potencial. Na expressão acima, as energias de tunelamento $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}, t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh}$ e seus respectivos conjugados complexos $\bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}, \bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh}$ representam o transporte quântico de elétrons e buracos, da esquerda para a direita e da direita para a esquerda da barreira, respectivamente, enquanto $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh}, \bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh}, t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he}$ e $\bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he}$ descrevem a criação de um par elétron-buraco ou o processo de aniquilação, respectivamente. Eles são explicitamente dados por:

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee} = \int d^2 x [\bar{u}_{\alpha k} \hat{H}_B u_{\alpha k'} e^{i(k - k')x}], \quad (3.18)$$

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh} = \int d^2x \left[\bar{v}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B v_{\alpha\mathbf{k}'} e^{-i(k-k')x} \right], \quad (3.19)$$

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh} = \int d^2x \left[\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B v_{\alpha\mathbf{k}'} e^{i(k+k')x} \right], \quad (3.20)$$

$$t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he} = \int d^2x \left[\bar{v}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B u_{\alpha\mathbf{k}'} e^{-i(k+k')x} \right]. \quad (3.21)$$

Vamos explorar um pouco mais os termos que aparecem no hamiltoniano de transferência. Começemos pelo o termo $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee} c_{\alpha\mathbf{k}s}^{L\dagger} c_{\alpha\mathbf{k}'s}^R$ que representa o transporte de um elétron da direita para a esquerda da barreira, pois $c_{\alpha\mathbf{k}'s}^R$ aniquila um elétron com números quânticos $\alpha\mathbf{k}'s$ no lado direito da barreira e $c_{\alpha\mathbf{k}s}^{L\dagger}$ cria um elétron com números quânticos $\alpha\mathbf{k}s$ no lado esquerdo da barreira. Isso corresponde ao transporte de carga da esquerda para a direita, uma vez que o elétron se desloca no sentido contrário ao da convenção da corrente elétrica. A probabilidade de transição, conforme veremos adiante, será proporcional a $|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}|^2$. Note que os números quânticos de pseudospin de vale α e spin verdadeiro s são conservados no modelo proposto. Não havendo interações magnéticas e negligenciando efeitos de colisões sobre o spin é natural aceitar a conservação do número quântico de spin no processo de tunelamento. Usualmente, mesmo na presença de canais para spin-flipping, a probabilidade associada ao processo de não conservação do spin, ou seja, para o spin mudar de orientação, acaba sendo pelo menos uma ordem de grandeza menor, e portanto, negligenciar interações que não conservam o spin não é uma aproximação ruim. Por outro lado a conservação do número quântico α está associado à incapacidade do elétron migrar o ponto de Dirac \mathbf{K} para o ponto $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$ e vice-versa. Isso exigiria uma variação de momento muito grande, que seria somente possível com presença de espalhamento com fônons de comprimento de onda muito curtos e isso demandaria um processo de segunda ordem no tunelamento assistido por fônons, tipicamente pelo menos uma ou duas ordens de grandeza menor do que o processo de tunelamento direto. *Mutatis mutandis*, a explicação dos demais termos quanto ao significado e propriedades de conservação de números quânticos de pseudospin de vale e spin verdadeiro é bastante similar. Há ainda processos que levam em conta a interação elétron buraco no interior da barreira, como por exemplo $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he} d_{\alpha\mathbf{k}s}^L c_{\alpha\mathbf{k}'s}^R$, que corresponde à migração de um elétron da direita e um buraco da esquerda, que se aniquilam na região da barreira. Note que a remoção de um elétron do eletrôdo direito corresponde à corrente gerada por uma carga positiva que migra da esquerda para a direita.

Por uma questão de simplicidade, assume-se que a função da barreira potencial torna-se da forma seguinte:

$$\begin{aligned} U(x, y) &= 0, & x < 0, \forall y, \\ U(x, y) &= U_0, & 0 \leq x \leq d, \forall y, \\ U(x, y) &= 0, & x > d, \forall y, \end{aligned} \quad (3.22)$$

no qual U_0 é a altura da barreira, d a espessura da região de barreira e y é a coordenada transversal em relação à interface da barreira com os eletrodos de grafeno à direita e à esquerda da barreira. Nesse sentido considera-se que a barreira é constante ao longo do eixo y .

Para poder encontrar a densidade de corrente de tunelamento vamos utilizar a Regra de Ouro de Fermi, que descreve a taxa de transição (probabilidade de transição por unidade de tempo) de um dado sistema inicialmente no estado quântico $|i\rangle$ migre para um estado final $|f\rangle$. Essa taxa é dada pela seguinte expressão:

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_T | i \rangle|^2 f(E_i) [1 - f(E_f)] \delta(E_i - E_f), \quad (3.23)$$

no qual $w_{i \rightarrow f}$ é a taxa de transição do estado inicial até o estado final do sistema, $f(E_i)$ é a probabilidade de que o estado inicial esteja ocupado, dada pela distribuição de Fermi-Dirac para férmions, e $1 - f(E_f)$ é a probabilidade de não ocupação do estado final. A presença do produto $f(E_i)[1 - f(E_f)]$ reforça a necessidade de que o estado final para onde o férmion inicial irá migrar esteja desocupado, uma vez que um dado estado quântico não pode estar ocupado por mais de uma partícula quando tratamos de férmions. Já a função delta de Dirac $\delta(E_i - E_f)$ apenas reforça a conservação de energia na transição entre os estados inicial e final. Então, podemos obter a densidade de corrente total na junção e para isso precisamos encontrar a densidade de corrente para cada um dos processos presentes no hamiltoniano de transferência (3.17), que leva em conta o transporte de elétrons, buracos e termos de criação e aniquilação de pares elétron-buraco.

A densidade de corrente de elétrons no sentido da esquerda (L) para a direita (R) da junção será calculada aplicando a Regra de Ouro de Fermi discutida acima, tendo em conta que as energias vão ter que ficar em função dos momentos \mathbf{k} e \mathbf{k}' . Essa parte da corrente de tunelamento deve-se à parcela do hamiltoniano de transferência $H_T^{ee} = \sum_{\alpha \mathbf{k} \mathbf{k}' s} t_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee} c_{\alpha \mathbf{k} s}^{L\dagger} c_{\alpha \mathbf{k}' s}^R$. O resultado é mostrado abaixo:

$$\begin{aligned} I_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee} &= \frac{2\pi e}{\hbar} | \langle \mathbf{k}', s | H_T^{ee} | \mathbf{k}, s \rangle |^2 f_R(E_{\mathbf{k}'}) [1 - f_L(E_{\mathbf{k}})] \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \\ I_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee} &= \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\alpha \mathbf{k} \mathbf{k}' s} |t_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee}|^2 f_R(E_{\mathbf{k}'}) [1 - f_L(E_{\mathbf{k}})] \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Considera-se o mesmo procedimento no sentido da direita (R) para a esquerda (L) na junção e usando o Hamiltoniano de transferência conjugado para as interações que transportam o elétron, $\bar{H}_T^{ee} = \sum_{\alpha \mathbf{k} \mathbf{k}' s} \bar{t}_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee} c_{\alpha \mathbf{k} s}^{R\dagger} c_{\alpha \mathbf{k}' s}^L$ para obter a corrente $\bar{I}_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee}$:

$$\bar{I}_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee} = \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\alpha \mathbf{k} \mathbf{k}' s} |\bar{t}_{\mathbf{k} \mathbf{k}'}^{ee}|^2 f_L(E_{\mathbf{k}'}) [1 - f_R(E_{\mathbf{k}})] \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}). \quad (3.25)$$

Subtraindo as densidades de correntes de ida e retorno na junção, encontramos a densidade de corrente total de elétrons e sabendo-se que as probabilidades de transmissão de ida e retorno na junção são iguais, ou seja $|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}|^2 = |\bar{t}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}|^2$, temos:

$$I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee} = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}|^2 [f_R(E_{\mathbf{k}'}) - f_L(E_{\mathbf{k}})] \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}). \quad (3.26)$$

As funções de distribuição de Fermi-Dirac $f_a(E)$, tanto para elétrons quanto para os buracos, são dadas aqui por

$$f_a(E) = \frac{1}{e^{\beta E} + 1}, \quad (3.27)$$

onde o índice $a = L, R$ é denotado para o lado esquerdo e direito da barreira, $\bar{f}_a(E) = 1 - f_a(E)$ é o complemento de $f_a(E)$, $\beta = 1/(k_B T)$ é o inverso da temperatura e k_B é a constante de Boltzmann. Esta função de distribuição de Fermi - Dirac nos fornece a probabilidade de um estado eletrônico de energia E estar ocupado no equilíbrio térmico a certa temperatura T .

Cálculos similares nos permitem encontrar as densidades de corrente associadas ao transporte de buracos e aos processos de criação/aniquiação de pares elétron-buraco. Desse modo, a corrente elétrica total que flui através da junção túnel dada uma tensão V externamente aplicada, será dada pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} I(V) = & \frac{2\pi e}{\hbar} \sum_{\alpha s \mathbf{k}\mathbf{k}'} \{ I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee} \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} + eV) + I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh} \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}} - eV) \\ & + I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh} \delta(E_{\mathbf{k}'} + E_{\mathbf{k}} + eV) + \bar{I}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh} \delta(E_{\mathbf{k}'} + E_{\mathbf{k}} - eV) \}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde as funções delta de Dirac $\delta(E_{\mathbf{k}'} \pm E_{\mathbf{k}} \pm eV)$ garantam a conservação de energia e as correntes parciais $I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}$, $I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh}$, $I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh}$ e $\bar{I}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh}$ são definidas como:

$$I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee} = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}|^2 [f_R(E_{\mathbf{k}'}) - f_L(E_{\mathbf{k}})], \quad (3.29)$$

$$I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh} = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh}|^2 [f_L(E_{\mathbf{k}}) - f_R(E_{\mathbf{k}'})], \quad (3.30)$$

$$I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh} = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he}|^2 [f_L(E_{\mathbf{k}}) f_R(E_{\mathbf{k}'}) - \bar{f}_L(E_{\mathbf{k}}) \bar{f}_R(E_{\mathbf{k}'})], \quad (3.31)$$

$$\bar{I}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh} = |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh}|^2 [\bar{f}_L(E_{\mathbf{k}}) \bar{f}_R(E_{\mathbf{k}'}) - f_L(E_{\mathbf{k}}) f_R(E_{\mathbf{k}'})]. \quad (3.32)$$

Para prosseguir com o cálculo na equação (3.28) devemos seguir a metodologia usual nesses casos e substituir o somatório $\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ pela sua versão integral, ou seja, $\frac{1}{(2\pi)^4} \int d^2\mathbf{k} \int d^2\mathbf{k}'$. A integração sobre variáveis dos vetores de onda, $dk_x dk_y dk'_x dk'_y$, podem ser convertidas para as coordenadas cilíndricas, ou seja:

$$dk_x dk_y dk'_x dk'_y = k k' dk d\phi dk' d\phi',$$

na qual a mudança de variáveis é feita na forma $|\mathbf{k}| = k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ e $\phi = \arctan(k_y/k_x)$ e expressões similares para k' e ϕ' . A parcela de integração kdk (e similarmente $k'dk'$) pode ser convertida em uma integral sobre o espectro de energias, fazendo surgir a densidade de estados, lembrando que a relação entre energia e número de onda é dada na forma $E_{\mathbf{k}} = \hbar v_F k$, ou seja:

$$kdk = k \frac{dk}{dE_{\mathbf{k}}} dE_{\mathbf{k}} = D_L(E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}}.$$

Agora pode-se determinar facilmente que:

$$D_L(E_{\mathbf{k}}) = k \frac{dk}{dE_{\mathbf{k}}} = \frac{|E_{\mathbf{k}}|}{v_F^2 \hbar^2},$$

ou seja, a densidade de estados por célula (tanto para elétrons quanto para buracos na ausência de dopagem) varia linearmente com a energia no caso das partículas relativísticas sem massa. Aliás, a determinação experimental da densidade de estados perto dos pontos de Dirac no grafeno é uma evidência da presença dos férmions de Dirac sem massa. Da mesma forma procedemos para o termo $k'dk'$ que resulta em $D_R(E_{\mathbf{k}'})dE_{\mathbf{k}'}$. Desse modo no lugar de $kk'dkdk'$ temos $D_L(E_{\mathbf{k}})D_R(E_{\mathbf{k}'})dE_{\mathbf{k}}dE_{\mathbf{k}'}d\phi d\phi'$, e a integração pode ser mais facilmente realizada aproveitando as condições de conservação de energia, que é imposta pela função delta de Dirac. Observe-se que as energias cinéticas são sempre positivas para os elétrons e buracos, e então, $E_{\mathbf{k}} \geq 0$.

É somente através da dopagem que as bandas de energia de elétrons e buracos sofrem modificações. Podemos considerar o efeito da dopagem nas funções de distribuição de Fermi-Dirac, onde dada a alteração do potencial químico μ_q por efeito de dopagem, este afeta a distribuição de Fermi-Dirac para elétrons com um sinal $(E - \mu_q)$, e com o sinal oposto para os buracos $(E + \mu_q)$. Alternativamente, e aqui será feito desse modo, o efeito do potencial químico pode ser levado em conta através do deslocamento das bandas de energia dos elétrons e dos buracos. O efeito da dopagem para as densidades de estados do lado $a = L, R$ da barreira é dado através da relação abaixo:

$$D_a^\pm(E) = \frac{|E \pm \mu_{q-a}|}{v_F^2 \hbar^2}, \quad (3.33)$$

na qual o potencial químico μ_{q-a} explica o efeito do deslocamento da banda devido a dopagem e os sinais $+$ e $-$ aplicam-se aos elétrons e aos buracos, respectivamente. O ponto de neutralidade de carga é o ponto de Dirac, onde a banda de energia de condução (elétrons) toca a de valência (buracos), está localizada em $E = 0$ e nesse caso a densidade de estado $D_a(E) = 0$ para o grafeno não dopado. Primeiramente, considere a relação de dispersão dos férmions de Dirac no grafeno intrínseco (não dopado), conforme ilustrado na figura 3.4. No caso ideal (se as interações com o substrato forem negligenciáveis, por exemplo), o ponto de Dirac, onde $D(E_{\mathbf{k}}) = 0$ é conhecido como ponto de neutralidade

de cargas porque o potencial químico do grafeno intrínseco passa exatamente sobre esse ponto, ou seja, o potencial químico do grafeno intrínseco μ_i é nulo, não havendo elétrons na banda de condução nem buracos na banda de valência em $T = 0$. Obviamente o efeito térmico poderá levar alguns elétrons para a banda de condução deixando igual número de buracos na banda de valência, similarmente ao que ocorre em qualquer material semiconductor.

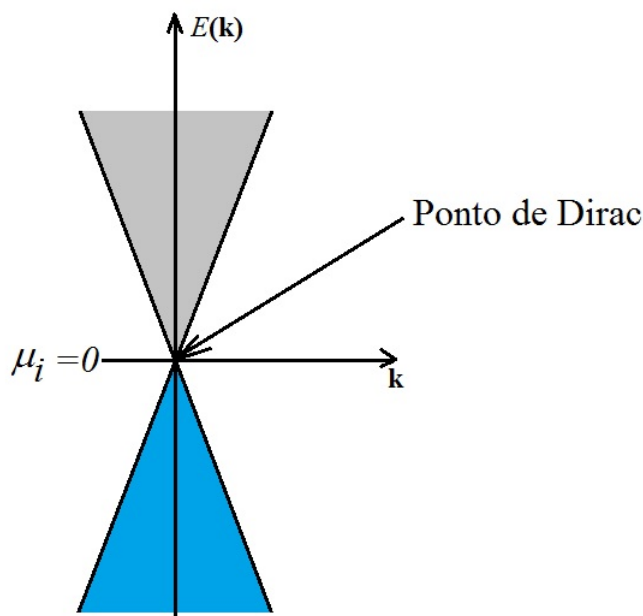


Figura 3.4: Relação de dispersão e potencial químico no grafeno intrínseco.

O efeito da dopagem, como em qualquer semiconductor, é introduzir portadores de carga, sejam elétrons na banda de condução ou buracos na banda de valência do grafeno, o que pode ser representado como o deslocamento do ponto de Dirac, para cima ou para baixo, de acordo com o tipo de dopagem, conforme está ilustrado nas figuras 3.5 e 3.6.

Na figura 3.5 é ilustrada a situação em que um dopante tipo n é acrescentado ao grafeno, deixando a sua banda de condução efetivamente preenchida, não havendo buracos na banda de valência. Isso corresponde a elevar o potencial químico de $\mu_i = 0$ para um valor $\mu_a > 0$, como mostrado na figura 3.5-(a), ou alternativamente, deslocar o ponto de Dirac, onde a densidade de estados tanto de elétrons quanto de buracos é nula, para baixo em relação ao valor de potencial químico intrínseco, $\mu_i = 0$, conforme mostra-se na figura 3.5-(b). Na figura 3.6 é ilustrado o efeito da dopagem tipo p é ao grafeno, deixando a sua banda de condução vazia mas buracos na banda de valência. Essa situação produz o contrário ao caso da dopagem tipo n, ou seja, o potencial químico vai de $\mu_i = 0$ para um valor $\mu_a < 0$, ou seja, abaixo do potencial químico intrínseco, como mostra a figura 3.6-(a). Alternativamente o ponto de Dirac desloca-se para cima em relação ao potencial químico intrínseco, $\mu_i = 0$, conforme podemos ver na figura 3.6-(b). Adotaremos a descrição em que o potencial químico permanece no valor intrínseco $\mu_i = 0$, ao passo que o efeito de

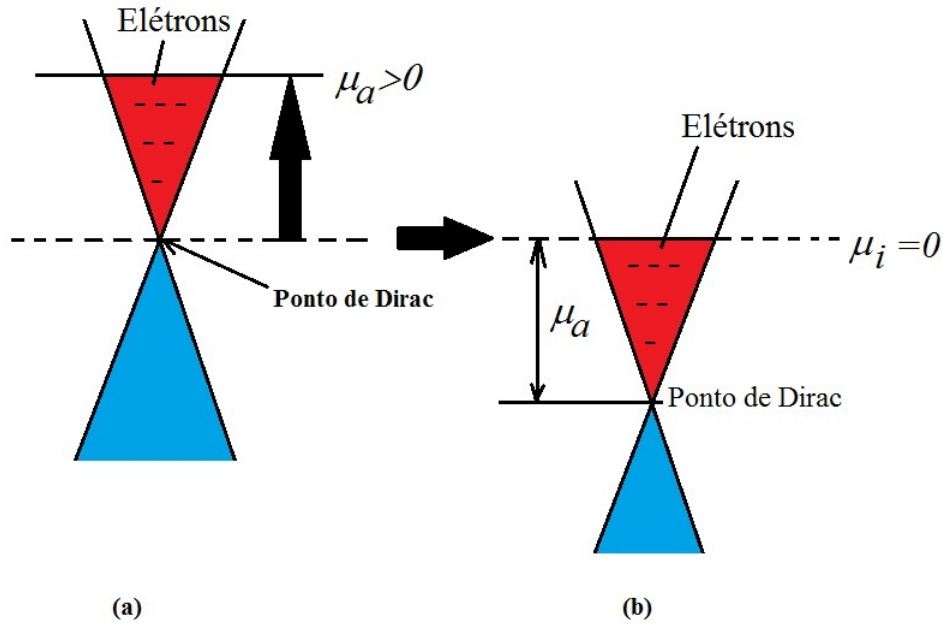


Figura 3.5: (a) Deslocamento do potencial químico no grafeno para cima por efeito de dopagem tipo n, ou alternativamente (b) o deslocamento do ponto de Dirac no sentido contrário.

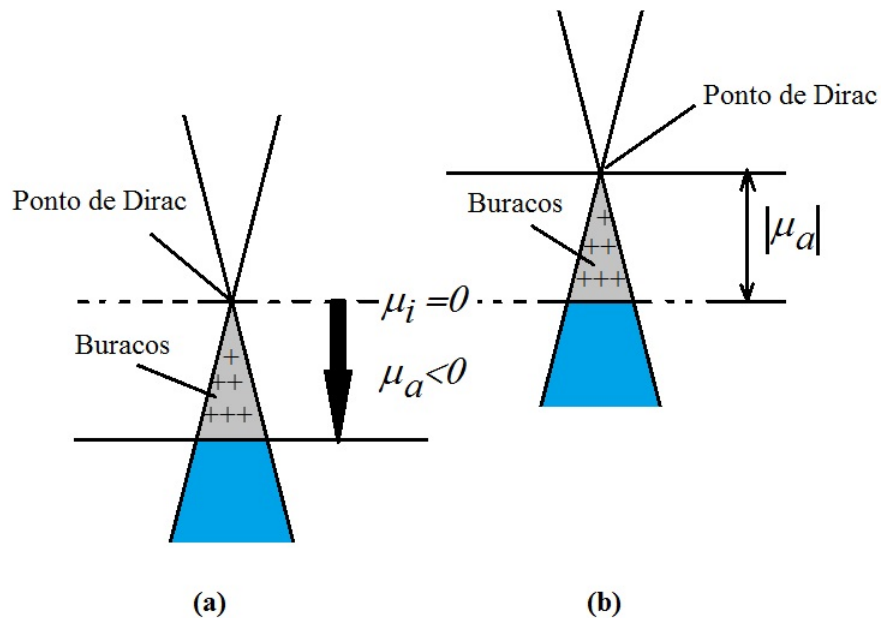


Figura 3.6: (a) Deslocamento do potencial químico no grafeno para baixo por efeito de dopagem tipo p, ou alternativamente (b) o deslocamento do ponto de Dirac no sentido contrário.

dopagem desloca para cima (dopagem tipo p) ou para baixo (dopagem tipo n) o ponto de Dirac, em relação a $\mu_i = 0$.

Na formação de uma barreira de tunelamento entre duas regiões distintas de grafeno, são possíveis quatro situações diferentes, de acordo com as dopagens que são aplicadas a cada lado da barreira de potencial (esta criada por efeito de um potencial de gate,

conforme discutido anteriormente). Na primeira situação, os dois lados da barreira não são dopados e temos apenas o efeito da barreira de potencial, conforme ilustrado na figura 3.7. No equilíbrio o potencial químico está equalizado dos dois lados da barreira, e quando aplica-se uma diferença de potencial externamente entre os lados L e R da barreira, haverá passagem de corrente de tunelamento. Elétrons e buracos contribuem igualmente no transporte.

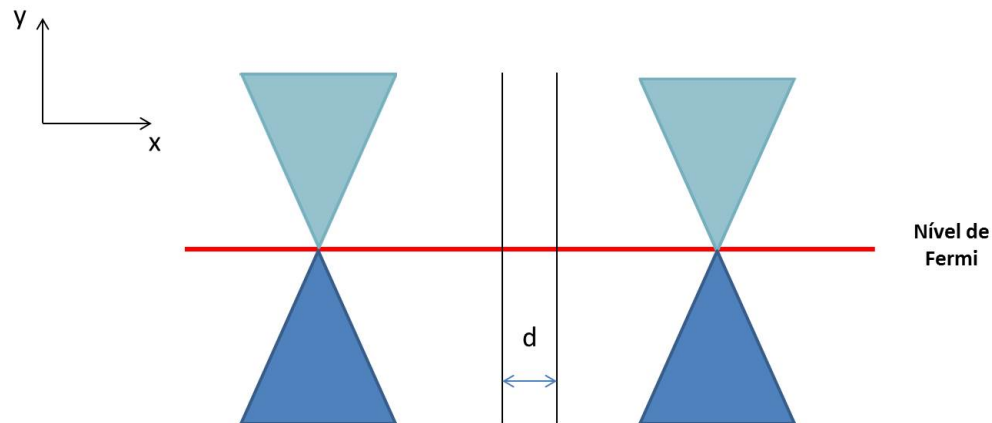


Figura 3.7: A estrutura das bandas de ambos os lados da barreira de tunelamento, quando não há dopagem.

Outras duas situações, ilustradas nas figuras 3.8 e 3.9, ocorrem quando ambos os lados da barreira são dopados com o dopantes tipo p ou tipo n. Nesses casos, os portadores majoritários de ambos os lados da barreira serão do mesmo tipo, sejam elétrons (na dopagem tipo n) ou buracos (na dopagem tipo p). Uma vez que a relação de dispersão é linear e numa primeira aproximação elétrons e buracos não tem massa, não espera-se nenhuma diferença nas curvas de $I - V$ nessas duas situações, desde que o nível de dopagem seja idêntico.

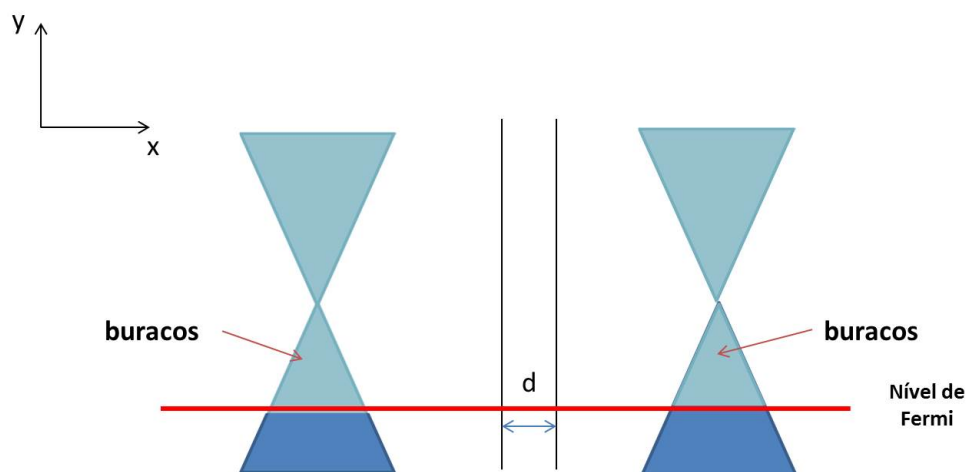


Figura 3.8: Estrutura das bandas para dopagem tipo p em ambos os lados da barreira de potencial.

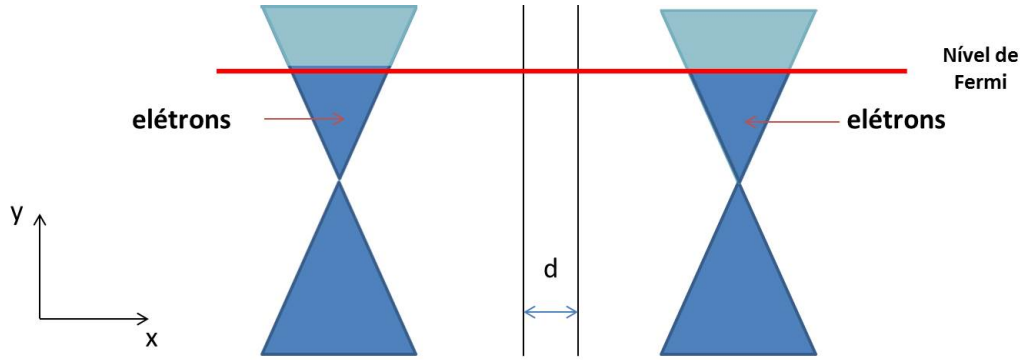


Figura 3.9: Estrutura das bandas para dopagem tipo n em ambos os lados da barreira de potencial.

Vale mencionar que para o grafeno a realização de dopagem p tem sido feita experimentalmente com $N0_2$ e $F4 - TCNQ$, segundo as referências dadas [31] e [32, 33], respectivamente, enquanto que a dopagem tipo n pode ser obtida experimentalmente usando K [29] e NH_3 [30].

Finalmente, podemos realizar a dopagem de um dos lados da junção com material do tipo n e do outro lado com material do tipo p , para formar uma junção do tipo $p-n$, que tipicamente produz o efeito de um diodo simples o qual consiste na junção de dois materiais, um semiconductor tipo p em contacto com um semiconductor tipo n . No caso ilustrado na figura 3.10, é considerada a dopagem tipo n do lado esquerdo da barreira e do tipo p no lado direito, ou seja, $\mu_L > 0$ e $\mu_R < 0$ inicialmente. Quanto, os potenciais químicos entram em equilíbrio, o ponto de Dirac no lado esquerdo move-se para baixo, enquanto que do lado direito da junção ele move-se para cima em relação a $\mu_i = 0$.

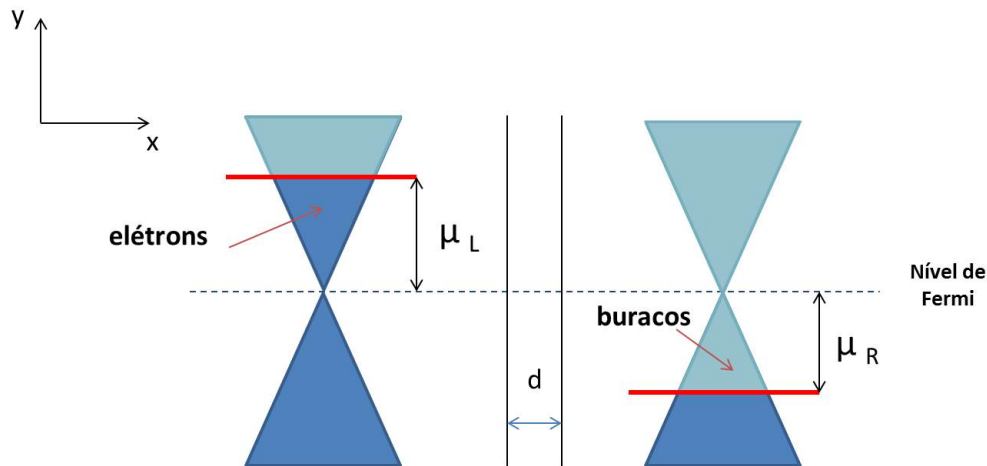


Figura 3.10: Estrutura da banda de energia $E_{\mathbf{k}}$ versus $|\mathbf{k}|$, para uma dopagem n do lado esquerdo e p do lado direito da barreira.

Indo adiante, uma vez que tenhamos discutido a importância da densidade de estado e do efeito de dopagem para o nosso problema, podemos expressar a equação da densidade

de corrente (3.28) em função das densidades de estados e realizar a integração das variáveis de energia $E_{\mathbf{k}'}$, tendo como resultado a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
I(V) = & \frac{eL_y}{2\pi^2\hbar} \int_0^\infty dE \\
& \times \{T_{ee}(E)D_R^+(E - eV)D_L^+(E) \\
& \times [f_R(E - eV) - f_L(E)]\Theta(E - eV) \\
& + T_{hh}(E)D_R^-(E + eV)D_L^-(E) \\
& \times [f_L(E) - f_R(E + eV)]\Theta(E + eV) \\
& + T_{eh}(E)D_R^+(-E - eV)D_L^-(E)\Theta(-E - eV) \\
& \times [f_L(E)f_R(-E - eV) - \bar{f}_L(E)\bar{f}_R(-E - eV)] \\
& + \bar{T}_{eh}(E)D_R^-(eV - E)D_L^+(E)\Theta(eV - E) \\
& \times [\bar{f}_L(E)\bar{f}_R(eV - E) - f_L(E)f_R(eV - E)]\}, \tag{3.34}
\end{aligned}$$

onde $\Theta(\dots)$ é a função de Heaviside, também conhecida como função degrau unitário, sendo uma função descontínua cujo valor é 0 para qualquer argumento negativo ($-$) e é 1 para qualquer argumento positivo ($+$). Os coeficientes de transmissão que aparecem na expressão acima são dados por:

$$T_{ab}(E) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi' |t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ab}|^2. \tag{3.35}$$

Podemos calcular os valores das probabilidades de transição de tunelamento, conhecidas também, como o parâmetro de hopping ao quadrado, $|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}|^2$, $|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh}|^2$, $|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh}|^2$ e $|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he}|^2$, a partir das integrais mostradas nas equações (3.18)-(3.21). O resultado, depois de integrar a variável y , é dado abaixo:

$$|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ee}|^2 = 4\pi L_y \delta(k_y - k'_y) |\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B u_{\alpha\mathbf{k}'}|^2 F_-^{ee}, \tag{3.36}$$

$$|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{hh}|^2 = 4\pi L_y \delta(k_y - k'_y) |\bar{v}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B v_{\alpha\mathbf{k}'}|^2 F_-^{hh}, \tag{3.37}$$

$$|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{eh}|^2 = 4\pi L_y \delta(k_y + k'_y) |\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B v_{\alpha\mathbf{k}'}|^2 F_+^{eh}, \tag{3.38}$$

$$|t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{he}|^2 = 4\pi L_y \delta(k_y + k'_y) |\bar{v}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B u_{\alpha\mathbf{k}'}|^2 F_+^{he}, \tag{3.39}$$

no qual L_y é o comprimento da barreira ao longo do eixo y , que é na pratica finito, mas considerado longo o suficiente para permitir negligenciar os efeitos de borda. A integração em relação ao eixo y é que produz as funções delta de Dirac $\delta(k_y \pm k'_y)$. Quando elevamos ao quadrado os fatores $t_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ para obter os coeficientes de transmissão teríamos a delta de Dirac ao quadrado, o que levaria à divergência das integrais, mas essa condição é relaxada

fazendo o comprimento total ao longo de y finito, o que coloca o fator L_y no lugar de uma das funções delta de Dirac. Podemos notar ainda que os vetores de onda \mathbf{k} e \mathbf{k}' devem satisfazer necessariamente a condição $k_y = \pm k'_y$, onde o sinal $+$ aplica-se ao tunelamento de elétrons ou buracos e o sinal $-$ aplica-se aos processos de criação/aniquilação de pares elétron-buraco. Isso é equivalente à lei de Snell da refração para a óptica geométrica e é ilustrado na figura 3.11, implicando que $|\mathbf{k}| \sin \phi = \pm |\mathbf{k}'| \sin \phi'$, uma vez que $k_y = k_0 \sin \phi$ e $k'_y = k'_0 \sin \phi'$ e portanto $k_0 \sin \phi = k'_0 \sin \phi'$ na interface com a barreira de potencial.

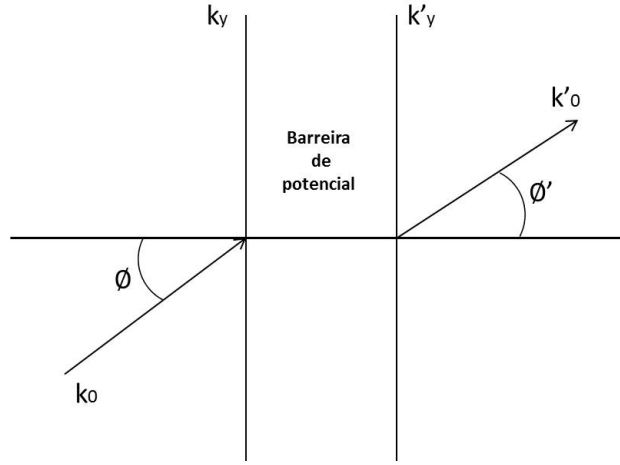


Figura 3.11: A Lei de Snell através da barreira de potencial.

As funções F_{\pm}^{ab} referem-se à integração em (3.18)-(3.21) em relação ao eixo x , na região definida pela barreira, de espessura d . Assume-se que as ondas dos férmions de Dirac à direita e à esquerda da barreira somente se superpõe na região interna da barreira. Dessa forma, obtemos o seguinte resultado:

$$F_{\pm}^{ab}(E, \phi) = \left| \int_0^d dx \exp [i(k_{xa} \pm k'_{xb})x] \right|^2, \quad (3.40)$$

$$= \frac{\sin^2[(k_{xa} \pm k'_{xb})d/2]}{[(k_{xa} \pm k'_{xb})d/2]^2} d^2, \quad (3.41)$$

onde k_{xa} e k'_{xb} são as componentes do vetor de onda \mathbf{k} paralelo ao eixo x para partículas a e b .

Finalmente, falta avaliar os produtos dos espinores da forma $|\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B u_{\alpha\mathbf{k}'}|^2$, $|\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B v_{\alpha\mathbf{k}'}|^2$, etc. Tendo em consideração as seguintes identidades para os espinores e matrizes de Dirac:

$$\sum_{\alpha s} u_{\alpha\mathbf{k}} \bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} = \sum_{\alpha s} v_{\alpha\mathbf{k}} \bar{v}_{\alpha\mathbf{k}} = \frac{1}{2k_0} \gamma^{\mu} k_{\mu} = \frac{\not{k}}{2k_0}, \quad (3.42)$$

$$\sum_{\alpha s} |\bar{u}_{\alpha\mathbf{k}} \hat{H}_B u_{\alpha\mathbf{k}'}|^2 = \text{tr} \left(\hat{H}_B \frac{\not{k}'}{2k'_0} \hat{H}_B \frac{\not{k}}{2k_0} \right), \quad (3.43)$$

$$\text{tr}(\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\alpha \gamma^\beta) = 8(g^{\mu\nu} g^{\alpha\beta} - g^{\mu\alpha} g^{\nu\beta} + g^{\mu\beta} g^{\nu\alpha}), \quad (3.44)$$

onde $\text{tr}(\dots)$ denota traço de matriz e as matrizes gama de Dirac tem dimensão 8×8 para a representação completa dos férmions de Dirac no grafeno, conforme discutido no capítulo 2. Depois desse tedioso procedimento de cálculo, juntando as partes acima descritas, obtemos os resultados desejados para os coeficientes de transmissão em sua forma final:

$$T_{ee}(E) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \frac{4U_0^2 \cos^2\left(\frac{\phi-\phi'}{2}\right)}{\sqrt{|\mathbf{k}'|^2 - |\mathbf{k}|^2 \sin^2 \phi}} F_-^{ee}, \quad (3.45)$$

$$T_{hh}(E) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \frac{4U_0^2 \cos^2\left(\frac{\phi-\phi'}{2}\right)}{\sqrt{|\mathbf{k}'|^2 - |\mathbf{k}|^2 \sin^2 \phi}} F_-^{hh}, \quad (3.46)$$

$$T_{eh}(E) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \frac{4U_0^2 \cos^2\left(\frac{\phi+\phi'}{2}\right)}{\sqrt{|\mathbf{k}'|^2 - |\mathbf{k}|^2 \sin^2 \phi}} F_+^{eh}, \quad (3.47)$$

$$T_{he}(E) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \frac{4U_0^2 \cos^2\left(\frac{\phi+\phi'}{2}\right)}{\sqrt{|\mathbf{k}'|^2 - |\mathbf{k}|^2 \sin^2 \phi}} F_+^{he}. \quad (3.48)$$

Vale a pena mencionar que nas expressões acima o ângulo ϕ' é calculado através da lei de Snell, ou seja, $\phi' = \arcsin[(|\mathbf{k}|/|\mathbf{k}'|) \sin \phi]$, onde os números de onda são funções de energia dadas explicitamente por $|\mathbf{k}| = |E \pm \mu_{q-L}|/(v_F \hbar)$ e $|\mathbf{k}'| = |E \pm \mu_{q-R}|/(v_F \hbar)$, o sinal $+$ e $-$ é aplicado para elétrons e buracos, respectivamente.

Outros cálculos analíticos nas expressões acima não são mais possíveis ou levariam a expansões em séries que não seria mais úteis, além de extremamente complicadas. Nesse caso optou-se por calcular as expressões acima, para obtenção dos resultados a serem apresentados no capítulo seguinte, de forma numérica, o que permitiu determinar as características $I - V$ no grafeno.

3.3 Efeito de Tunelamento aplicando um campo magnético considerando a densidade de corrente de spin

Antes de apresentar as expressões para a densidade de corrente de spin (ou corrente polarizada em spin) vamos fazer algumas definições a respeito da spintrônica. A maior parte da tecnologia atual está solidamente amparada pela eletrônica, incluindo aí a computação convencional. Após essa introdução vamos apresentar as expressões que serão utilizadas posteriormente para o cálculo de corrente spin-polarizada no grafeno, com base em generalizações dos resultados anteriores para a corrente de carga elétrica.

3.3.1 A spintrônica e correntes spin-polarizadas

A eletrônica é a ciência que ocupa-se do transporte de carga via elétrons e buracos nos diversos sistemas da matéria condensada, bem como da manipulação do transporte de carga através da aplicação de campos elétricos e magnéticos. Adicionalmente à carga elétrica os elétrons (e buracos) possuem um número quântico adicional, denominado spin. Todavia ao contrário da carga elétrica, que para um elétron sempre tem mesmo valor $q = -e$ (para um buraco é sempre $+e$), o spin pode ter duas possibilidades para um elétron, em relação a um dado eixo de quantização, $\sigma = \uparrow$ ou $\sigma = \downarrow$. O momento magnético associado, tendo como referência o eixo z é $m_\sigma^e = -\mu_B\sigma$ para elétrons e $m_\sigma^e = \mu_B\sigma$ para buracos, onde $\mu_B = 9.274008 \times 10^{-24} \text{J/T}$ é o magneton de Bohr. Em claro contraste com a situação da carga elétrica, que sempre se conserva nas colisões, o spin do elétron pode girar (precessão) ou eventualmente flipar nas colisões e o livre caminho médio associado à coerência do spin é tipicamente ordens de grandeza menor do que as dimensões de dispositivos utilizados na microeletrônica. A vantagem do spin em relação à carga elétrica é que custa menos energia manipular o spin e, dada a sua natureza quântica, pode permitir a computação quântica, que é intrinsecamente paralela, onde estados de superposição poderão ser utilizados. Assim como a carga elétrica precisa ser transportada, a eletrônica baseada em spin, ou *spintrônica* requer uma quantidade denominada corrente de spin, ou corrente spin-polarizada.

A densidade de corrente de carga elétrica é definida como $\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$ onde $\rho = \rho_\uparrow + \rho_\downarrow$ é a densidade total de carga elétrica e \mathbf{v} a velocidade com que as cargas se deslocam. Uma vez que para o transporte de carga de uma região para outra o spin é irrelevante, devemos somar sobre as densidades de cargas ρ_\uparrow e ρ_\downarrow associadas às projeções de spin possíveis, e que produz uma corrente de carga elétrica total I_Q na forma

$$I_Q = I_\uparrow + I_\downarrow.$$

Analogamente, a densidade de corrente de spin seria dada pelo produto da densidade de momento magnético de spin ρ_s com a velocidade com que os spins se deslocam $\mathbf{J}^S = \rho_s \mathbf{v}$. Considerando um único tipo de portador de carga, por simplicidade, a densidade de momento magnético associado seria simplesmente a diferença entre a densidade do portador de carga com spins para cima e para baixo, multiplicado pelo correto fator de proporcionalidade, ou seja $\rho_s = (\mu_B/q)(\rho_\uparrow - \rho_\downarrow)$. Desse modo, podemos propor que a corrente spin-polarizada total, em unidades de densidade de corrente de momento magnético, seria dada por:

$$I_S = \frac{\mu_B}{q} [I_\uparrow - I_\downarrow]. \quad (3.49)$$

Note que a corrente de carga total é dada pela soma das correntes com spins contrários para um dado tipo de portador de carga, e a corrente spin-polarizada é dada pela diferença

entre as correntes com spins contrários.

A *spintrônica* se ocupa de controlar o transporte de portadores de carga não somente através da carga mas sobretudo do spin. O termo surgiu do inglês: spin-based electronics. Somente é realizável em escala nanométrica devido ao relativamente curto livre caminho médio de coerência do spin e acredita-se que no grafeno o livre caminho de spin é entre $1.4\mu m$ e $2\mu m$, segundo Ref. [64]. A vantagem da manipulação do spin sobre a carga é que custa menos energia mudar o spin, o que possibilitaria fazer dispositivos mais rápidos e com menor consumo de energia. O grafeno aparece pelo menos como um promissor condutor de spin.

A título de ilustração a figura 3.12 mostra duas situações distintas para o regime de transporte em um material condutor de carga e/ou spin. No transporte convencional, tipicamente onde a estrutura tem dimensões bem maiores que o livre caminho médio do spin, não somos capazes de observar a polarização da corrente em spin, e nesse caso $I_Q \neq 0$ mas $I_S = 0$, onde pode-se observar na figura 3.12 que temos a mesma quantidade de spin up (cor azul) que spin down (cor vermelho) no transporte convencional da corrente.

No transporte spin polarizado, o livre caminho médio do spin é maior que o tamanho da estrutura física observada, e nesse caso, se injeta-se uma corrente polarizada em spin no material, por exemplo, a partir do contato de um ferromagneto com um semiconductor, tanto a corrente de carga quanto a corrente de spin são observáveis e não nulas, ou seja, $I_Q \neq 0$ e $I_S \neq 0$.

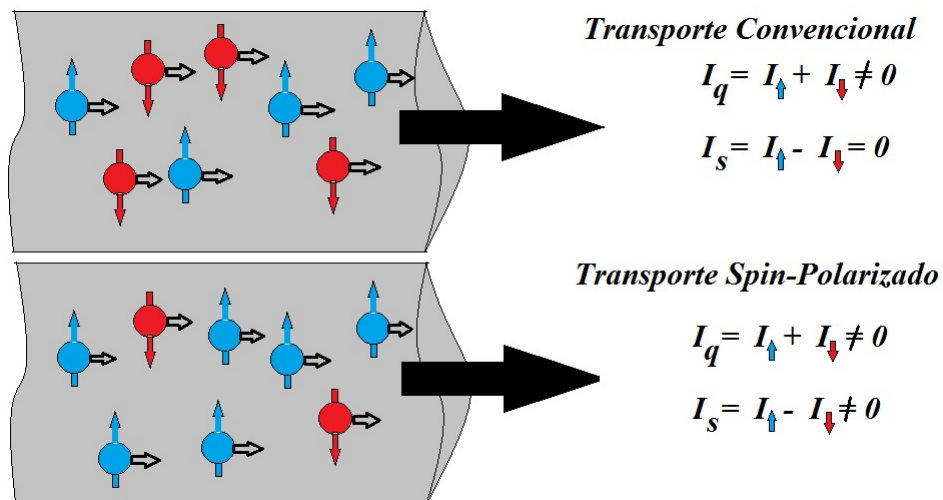
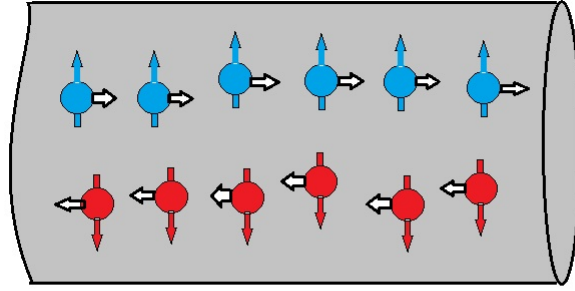


Figura 3.12: Transporte de portadores convencional, onde $I_Q \neq 0$ e $I_S = 0$ versus transporte spin-polarizado, onde $I_Q \neq 0$ e $I_S \neq 0$.

Hipoteticamente, a situação ideal para a realização da *spintrônica* pura é aquela em que $I_Q = 0$ e $I_S \neq 0$, ou seja, somente há transporte de spin, mas não de carga, como ilustrado na figura 3.13. Nesse caso os portadores de carga de mesmo sinal mas spins contrário poderiam se deslocar com a mesma velocidade em sentidos contrários, ou seja,

$I_{\uparrow} = -I_{\downarrow}$, produzindo $I_Q = 0$ e $I_S = 2I_{\uparrow}$.



$$I_q = I_{\uparrow} + I_{\downarrow} = 0 \quad \text{Corrente Elétrica Nula!}$$

$$I_s = I_{\uparrow} - I_{\downarrow} \neq 0 \quad \text{Corrente de Spin Não Nula!}$$

Figura 3.13: Transporte de portadores ideal na spintrônica onde onde $I_Q = 0$ e $I_S \neq 0$.

Uma forma de avaliar a polarização da corrente seria dada pela seguinte expressão:

$$P = \frac{I_{\uparrow} - I_{\downarrow}}{I_{\uparrow} + I_{\downarrow}}. \quad (3.50)$$

Um pequeno desbalanço do número de elétrons (ou buracos) com spins \uparrow e \downarrow pode ser provocado através da aplicação de um campo magnético externo, como será estudado a seguir na junção de tunelamento do grafeno. Note que a energia magnética associada a uma partícula de spin $1/2$, carga q e momento magnético $\vec{\mu} = \pm\mu_B\vec{\sigma}$, onde $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli associadas ao spin verdadeiro e $+$ refere-se aos buracos, $-$ aos elétrons, imersa em um campo magnético \mathbf{B} é dada por:

$$E_m = -\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}.$$

Assumindo um campo magnético perpendicular ao plano da lâmina de grafeno, $\mathbf{B} = (0, 0, B)$, temos

$$E_m = \mp\mu_B\sigma B, \quad (3.51)$$

no qual $-$ vale para buracos e $+$ para elétrons, $\sigma = +, -$ corresponde aos spins \uparrow e \downarrow relativo ao eixo z e B é a magnitude do campo magnético aplicado. Efetivamente, essa energia magnética associada pode ser levada em conta como uma mudança nos potenciais químicos para partículas de spin para cima e para baixo, ou alternativamente, uma correção no sentido contrário para as densidades de estados, em analogia com o que fizemos para o efeito de dopagem.

É importante considerar campos magnéticos baixos para não afetar as densidades de estados através da manifestação clara de níveis de Landau, mas simultaneamente altos o suficiente para permitir a separação das bandas em relação ao spin. Uma condição útil para uma polarização das bandas é que $\mu_B B \gg k_B T$ mas $k_B T \gg \Delta_n = E_n - E_{n-1}$ onde Δ_n é a separação dos níveis de Landau no grafeno e $E_n = \text{sign}(n)v_F\sqrt{2e\hbar B|n|}/c$, sendo v_F a velocidade de Fermi, c a velocidade da luz no vácuo e $n = 0, \pm 1, \pm 3, \dots$ um número inteiro. Na prática devemos trabalhar com valores de campo menores do que $B = 5T$ no grafeno. A dedução dos níveis de Landau no grafeno é apresentada no Apêndice B.

3.3.2 A corrente spin-polarizada através da junção de tunelamento no grafeno

Combinando os efeitos de dopagem para a densidade de estados com o deslocamento produzido pelo campo magnético nos níveis de energia associados a cada spin, considerando um campo magnético externo perpendicular ao plano (x,y) na monocamada de grafeno, podemos definir densidades de estados dependentes do spin σ . Para fazer os cálculos mais adiante precisamos apenas das definições que seguem

$$D_a^\pm(E) = \frac{|E \pm (\mu_{q-a} + \mu_B B)|}{v_F^2 \hbar^2}, \quad (3.52)$$

na qual $\mu_B = 9.274008 \times 10^{-24} \text{ J/T}$ é o magneton de Bohr e B é a magnitude do campo magnético em unidades de tesla, + aplica-se aos elétrons e - aos buracos.

Dessa forma, podemos utilizar as expressões para corrente de cargas descritas na Seção anterior, separando-as por spin. As únicas modificações que se fazem necessárias são dividir por um fator 2 a equação (3.34), devido à remoção da degenerescência de spin, e a troca das densidades de estados independentes do spin, por expressões dependentes da energia associada ao spin, conforme a equação (3.52). Temos duas novas expressões, para a corrente com spin para cima e spin para baixo:

$$\begin{aligned} I_\uparrow(V) = & \frac{eL_y}{4\pi^2\hbar} \int_0^\infty dE \\ & \times \{T_{ee}(E)D_{\uparrow R}^+(E - eV)D_{\uparrow L}^+(E) \\ & \times [f_R(E - eV) - f_L(E)]\Theta(E - eV) \\ & + T_{hh}(E)D_{\uparrow R}^-(E + eV)D_{\uparrow L}^-(E) \\ & \times [f_L(E) - f_R(E + eV)]\Theta(E + eV) \\ & + T_{eh}(E)D_{\uparrow R}^+(-E - eV)D_{\uparrow L}^-(E)\Theta(-E - eV) \\ & \times [f_L(E)f_R(-E - eV) - \bar{f}_L(E)\bar{f}_R(-E - eV)] \\ & + \bar{T}_{eh}(E)D_{\uparrow R}^-(eV - E)D_{\uparrow L}^+(E)\Theta(eV - E) \end{aligned}$$

$$\times [\bar{f}_L(E)\bar{f}_R(eV - E) - f_L(E)f_R(eV - E)], \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} I_{\downarrow}(V) = & \frac{eL_y}{4\pi^2\hbar} \int_0^{\infty} dE \\ & \times \{T_{ee}(E)D_{\downarrow R}^+(E - eV)D_{\downarrow L}^+(E) \\ & \times [f_R(E - eV) - f_L(E)]\Theta(E - eV) \\ & + T_{hh}(E)D_{\downarrow R}^-(E + eV)D_{\downarrow L}^-(E) \\ & \times [f_L(E) - f_R(E + eV)]\Theta(E + eV) \\ & + T_{eh}(E)D_{\downarrow R}^+(-E - eV)D_{\downarrow L}^-(E)\Theta(-E - eV) \\ & \times [f_L(E)f_R(-E - eV) - \bar{f}_L(E)\bar{f}_R(-E - eV)] \\ & + \bar{T}_{eh}(E)D_{\downarrow R}^-(eV - E)D_{\downarrow L}^+(E)\Theta(eV - E) \\ & \times [\bar{f}_L(E)\bar{f}_R(eV - E) - f_L(E)f_R(eV - E)]\}, \quad (3.54) \end{aligned}$$

Desse modo, podemos calcular a corrente total de carga pela soma, $I_Q = I_{\uparrow} + I_{\downarrow}$, e a corrente spin-polarizada total através da junção de tunelamento através das diferença entre as corrente de spin para cima e spin para baixo, $I_S = I_{\uparrow} - I_{\downarrow}$, a menos de uma constante de proporcionalidade. Então quando não há campo magnético externamente aplicado a densidade de corrente de spin total se anula, já que teríamos uma mesma quantidade de spin up e down no sistema. O propósito de incluir um campo magnético é ver o que acontece com esta densidade de corrente de spin total e sua condutividade diferencial, as quais serão explicadas e mostradas nos gráficos respectivos no capítulo seguinte, de resultados e discussão.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

No presente capítulo serão apresentados os resultados obtidos aplicando a teoria desenvolvida anteriormente nesta tese para alguns casos relevantes de junções de tunelamento no grafeno. Em aplicações práticas, muitas configurações distintas de junção túnel no grafeno podem ser obtidas por meio da dopagem adequada em regiões separadas de uma monocamada de grafeno, conforme já discutimos, incluindo a formação de junções p-p, n-n e p-n, além do grafeno intrínseco. Dentre todas essas possibilidades, duas situações mais relevantes serão aqui consideradas, a saber:

- i) Junção de tunelamento no grafeno quando ele não está dopado (intrínseco), ou seja o potencial químico $\mu_q = 0$ é zero em ambos lados da junção esquerdo (L) e direito (R), antes da aplicação de uma diferença de potencial externa;
- ii) Junção de tunelamento numa estrutura do tipo diodo túnel, onde um lado da barreira é dopado com um tipo de dopante p e o outro com um dopante tipo n formando a junção p-n, assumindo que a região da barreira de potencial pode ser induzida por meios externos, como potencial de porta.

Em problemas de tunelamento, geralmente não é necessário conhecer detalhadamente a estrutura da barreira de potencial, mas os parâmetros mais relevantes da barreira são a espessura da barreira de potencial d , que será da ordem de poucos nanômetros e a altura da barreira de potencial U_0 , que pode ser controlada por meios do potencial de gate (ou porta). Já que qualitativamente o comportamento não depende criticamente dos parâmetros da barreira no caso relativístico, a espessura da barreira de potencial $d = 5$ nm, citada na Ref. [65, 66] é fixada em todos os cálculos numéricos apresentados nos resultados.

Mas serão apresentadas duas figuras variando a espessura da barreira de potencial d e fixando a altura da barreira de potencial U_0 , para observar o comportamento da curva característica I - V na junção de tunelamento no grafeno intrínseco e dopado, respectivamente.

O efeito da dopagem na região do grafeno não dopado provoca o deslocamento do potencial químico para cima ou para baixo (ou alternativamente do ponto de Dirac, para baixo ou para cima, respectivamente). O valor experimentalmente factível para esse deslocamento, em módulo, é menor do que 0,5eV para os dopantes previamente mencionados para o grafeno[31]. Por esta razão, os seguintes valores para o potencial químico do lado esquerdo e do lado direito da barreira de potencial assumirão os valores $\mu_{q-LR}(0) = \pm 0.4eV$ e

$\pm 0.5eV$, respectivamente. Outros valores foram simulados, sem modificações substanciais nos resultados aqui discutidos, e por uma questão de comodidade e para não sobrecarregar o leitor, somente as situações que trazem consigo informações relevantes serão mostradas.

4.1 A junção túnel de grafeno intrínseco

A primeira situação de interesse é o estudo de uma junção túnel de grafeno intrínseco, onde para essa situação os potenciais químicos μ_L e μ_R são zero. Na prática a interação com o substrato onde a lâmina de grafeno está depositada pode produzir um pequeno efeito de dopagem em ambos os lados da junção e por esse motivo a situação que está sendo considerada é altamente idealizada e difícil de realizar de forma exata na prática. Comparações com estudos experimentais serão apresentadas e discutidas para essa situação.

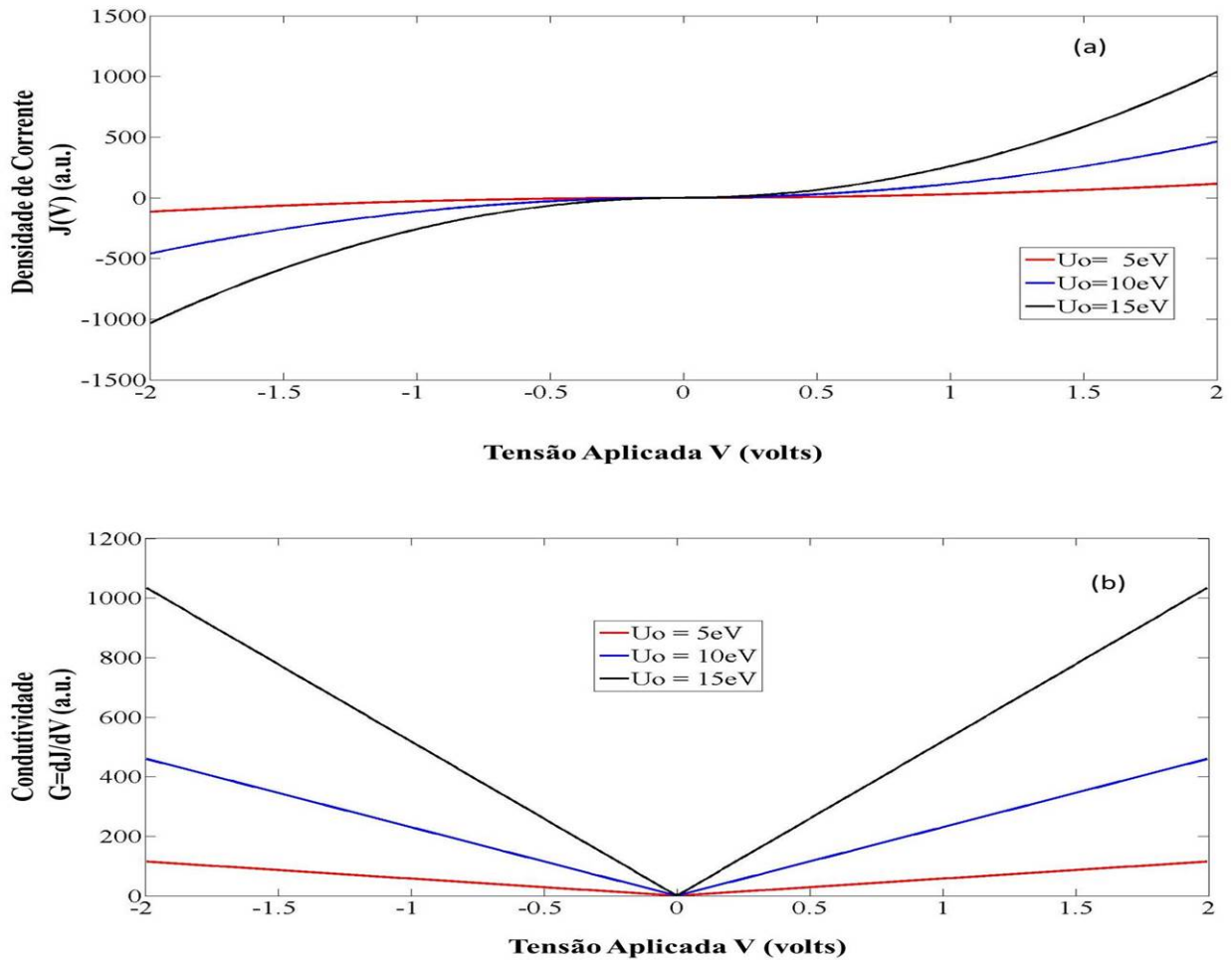


Figura 4.1: Característica $I - V$ para uma junção de tunelamento no grafeno intrínseco (não dopado) para barreiras de altura $U_0 = 5, 10$ e $15eV$: (a) Densidade de corrente $J(V)$ e (b) Condutividade diferencial $G(V) = dJ/dV$, em unidades arbitrárias apresentadas na Ref. [67].

Na figura 4.1 o comportamento na junção túnel no grafeno intrínseco é ilustrado, variando a altura da barreira U_0 . A primeira parte é mostrada na figura 4.1(a), onde densidade de corrente elétrica $J(V) = I(V)/Ly$, em unidades arbitrárias (a.u), é plotada *versus* a diferença de potencial V aplicada aos terminais da junção. Já a figura 4.1(b) apresenta a condutividade diferencial $G = dJ/dV$ *versus* a diferença de potencial V aplicada aos terminais da junção para os valores da largura da barreira de $U_0 = 5, 10$ e $15eV$. A curva para valores negativos na altura da barreira U_0 não estão mostrados, de forma deliberada, uma vez que em nosso modelo o sinal de U_0 não afeta as características $I - V$.

Esse é um fato esperado porque, observando as equações (3.45) até (3.48), apresentadas anteriormente, vemos que o coeficiente de transmissão depende quadraticamente da altura da barreira, ou seja, $T_{ab}(E, U_0) \propto U_0^2$, e para férmions relativísticos sem massa quanto maior a altura da barreira, mais transparente ela se tornará, em contraste ao tunelamento não relativístico. Além disso, dada a presença de elétrons e buracos contribuindo igualmente para o transporte, pelo fato de terem cargas opostas, um potencial de gate aplicado na região de barreira que forma uma barreira para os elétrons será um poço de potencial atrativo para buracos e vice-versa, daí não haver dependência das curvas características com o sinal da energia da barreira.

Um resultado experimental para uma situação que poderia ser aproximada pela teoria proposta aqui nesta tese é mostrado na figura 4.2 e foram obtidos pela referência [25]. Esse gráfico apresenta o comportamento experimental da densidade de corrente elétrica *versus* tensão aplicada (linha cor vermelha no gráfico), com bastante semelhança aos resultados dessa tese. Todavia, há uma clara assimetria nas curvas experimentais, o que não se compatibiliza totalmente com o modelo aqui apresentado para uma junção simétrica e não dopada de grafeno. Claramente, o modelo teórico deixa de levar em conta alguns efeitos do substrato e também de bordas na própria lâmina do grafeno, além da questão da formação dos contatos de medida, que nosso modelo considera ideais.

O comportamento não linear da curva característica da densidade de corrente elétrica *versus* tensão aplicada $I - V$ também é encontrada experimentalmente em outros trabalhos, como aquele ilustrado na figura 4.3 [68]. Em 4.3-(a) estão ilustradas as curvas características de $I - V$ para vários valores do potencial de gate aplicado para formar uma barreira em certa região da lâmina, enquanto em 4.3-(b) ilustra-se a condutância diferencial. Aqui a concordância do resultado teórico com o experimental é menos pronunciada. As curvas experimentais apresentadas para a condutância nesse caso são mais simétricas em relação à tensão aplicada, e no entanto não estão de acordo com o esperado teoricamente.

Ou seja, que a condutância tivesse mínimo próximo de zero para $V = 0$ e além disso que os valores de condutância fossem independentes do sinal do potencial de gate, o que claramente não acontece no experimento. Além disso, em nosso modelo, dobrando o valor

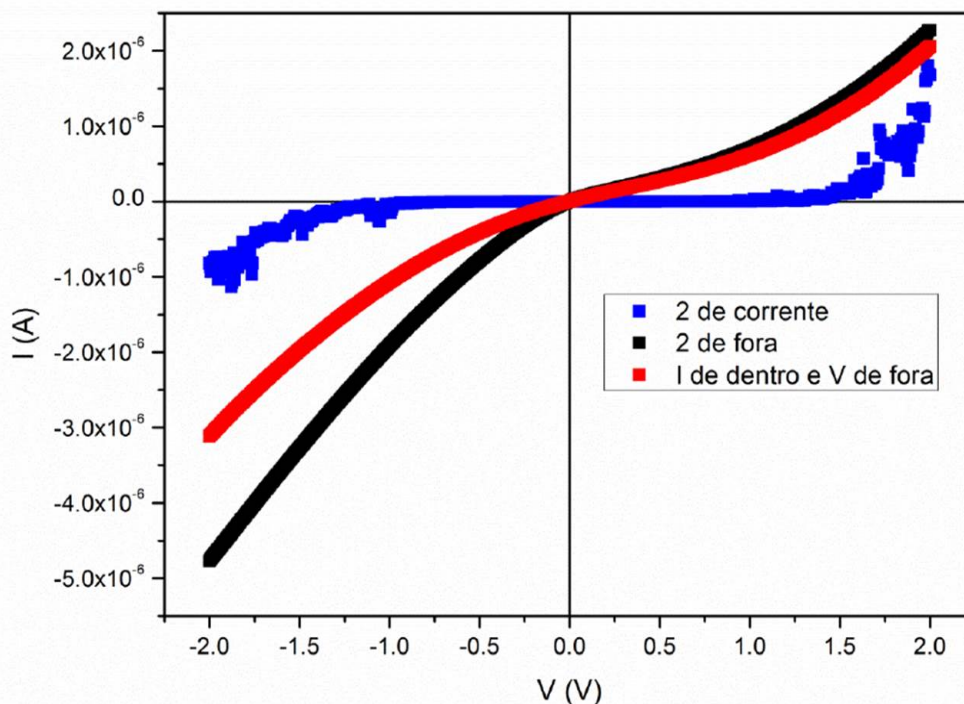


Figura 4.2: Estudo experimental das características $I - V$ numa junção de tunelamento no grafeno, apresentado na Ref. [25].

do potencial esperaríamos que a condutância ficasse multiplicada por um fator 4, mas isso também não ocorre nas curvas experimentais. A concordância entre teoria e experimento é apenas limitada, devido ao fato de o modelo teórico não levar em conta vários aspectos experimentais, como já mencionamos.

Sobretudo efeitos de bordas e contatos nas lâminas de grafeno, bem como um efeito de dopagem induzido pelo substrato. Todavia, o aumento da condutividade com o aumento do potencial de gate (barreira) está previsto na teoria e é observado no experimento, o que nos encorajou a prosseguir, mesmo que de forma bastante aproximada, a estudar sistemas dopados.

Na figura 4.4-(a) apresenta-se a curva da densidade de corrente elétrica versus tensão aplicada de $V=-2$ até $V=2$ volts. a uma temperatura de 220K e variando a altura da barreira de potencial $U_0 = 0, 20, 50$ e $100eV$. Chegando-se a verificar o resultado da referência [68] que a curva característica de I-V não tem comportamento linear a estas condições dadas. E a curva da condutância elétrica versus tensão aplicada mostrada na figura 4.4-(b) com as mesmas considerações que em 4.4-(a) observar-se a influencia da temperatura a medida do aumento da barreira de potencial, encontrando-se um acríssimo no comportamento da condutância elétrica para cada um dos valores positivos da altura da barreira de potencial U_0 . Verificando-se assim aproximadamente, os resultados experimentais encontrados na figura 4.3(b) para valores positivos de U_0 , segundo referência [68].

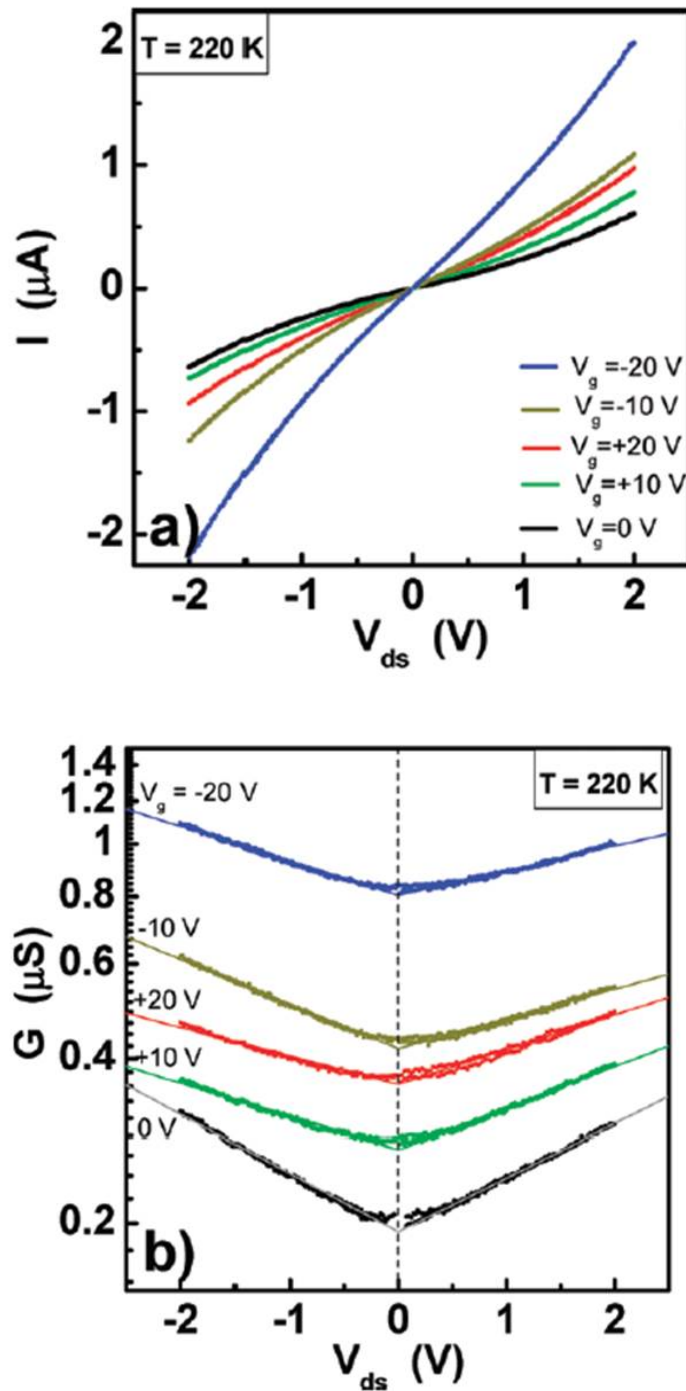


Figura 4.3: a) Estudo das características não lineares na relação $I - V$ e b) Condutância através de uma barreira de potencial em uma monocamada de grafeno, de acordo com medidas efetuadas e apresentadas pela Ref. [68].

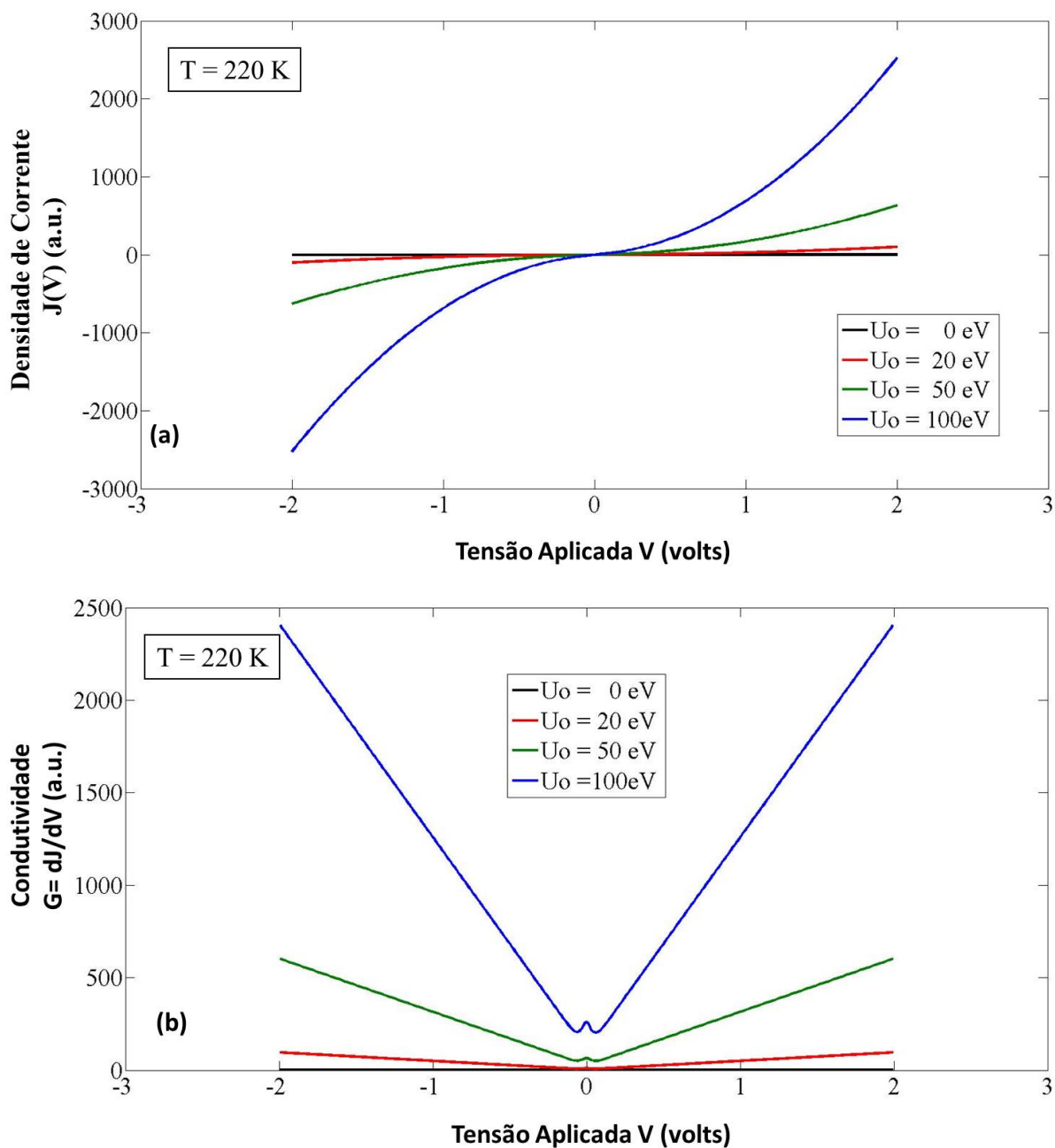


Figura 4.4: a) Estudo das características não lineares na relação $I - V$ e b) Condutância através de uma barreira de potencial em uma monocamada de grafeno, de acordo com medidas efetuadas e apresentadas pela Ref. [68].

Lembrando que para o caso da junção de grafeno sem a presença de campo magnético, foram usadas as equações mais relevantes (3.33), (3.34) e (3.45) até (3.48) do modelo teórico. E para o caso da presença do campo magnético serão usadas as equações (3.52), (3.53) e (3.54) dadas na seção 3.3.2 da tese.

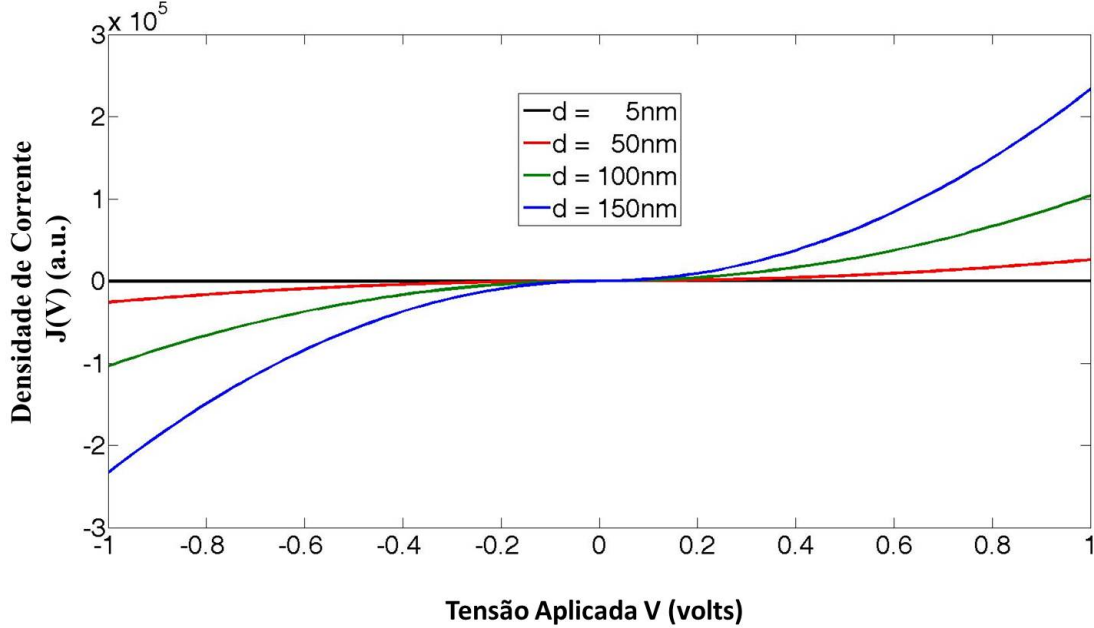


Figura 4.5: Características $I - V$ para uma junção de tunelamento no grafeno intrínseco (não dopado) para barreiras de espessura $d=5, 50, 100$ e 150 nm, fixando a altura da barreira para $U_0 = 15eV$.

Na figura 4.5 apresenta-se o comportamento da curva característica $I - V$ na junção de tunelamento na lamina do grafeno não dopado ou intrínseco, quando varia a espessura da barreira de potencial $d = 5, 50, 100$ até 150 nm e fixando a altura da barreira de potencial $U_0 = 15eV$, observando-se que a medida que a espessura da barreira de potencial aumenta também acrece a densidade de corrente elétrica apresentando valores bem mais altos a diferença da figura 4.1-a, mantendo sempre a forma de uma curva característica I-V.

4.2 Junção de grafeno do tipo p-n

Nesta Seção serão apresentadas as características $I - V$ do grafeno dopado tipo diodo túnel, onde o lado esquerdo da barreira é dopado com dopante tipo p e o lado direito é dopado com dopante tipo n . Para produzir o efeito de deslocamento das bandas de energia através de dopagem, deixando buracos livres no lado esquerdo e elétrons livres no lado direito da barreira de tunelamento, adotamos os valores $\mu_{q-L} = -0.4eV$ e $\mu_{q-R} = 0.5eV$. O comportamento da densidade de corrente de carga bem como da densidade de corrente de spin-polarizada *versus* tensão através da junção foi estudado em função da temperatura

e do campo magnético aplicado, bem como da altura da barreira de potencial devido ao gate.

Na figura 4.6 são ilustradas as características da junção para valores de altura da barreira de potencial $U_0 = 5, 10$ e $15eV$, com campo magnético ausente, ou seja, $B = 0$ e temperatura $T = 4, 2K$. Novamente o sinal de U_0 é irrelevante, pelos mesmos motivos discutidos no caso da junção com o grafeno intrínseco. Pode-se observar nas curvas ilustradas nas figuras 4.6-(a) e 4.6-(b) que a função de corrente $I(V)$ e a condutividade diferencial $G(V)$ tem três regiões distintas, a saber:

- i) Para valores de tensão menores do que aproximadamente $0,24$ V a condutividade é positiva e a corrente é uma função aproximadamente linear de V para valores negativos de tensão aplicada;
- ii) Na segunda região, entre $V = 0,24V$ e $V = 0,56V$ a densidade de corrente elétrica diminui com o aumento da tensão aplicada, o que é caracterizado por uma região de condutância diferencial (ou equivalentemente resistência diferencial) negativa, típica de processos ressonantes ou em diodos túnel com semicondutores altamente dopados, já que em estes processos de tunelamento ressonante devido às altas tensões aplicadas aumenta o deslocamento dos portadores de carga a altas velocidades e é muito vantajoso pôr estes poços quânticos, os quais permitiram uma redução na capacitância, segundo a referência [26];
- iii) A região em que $V > 0,56$ V e novamente a corrente aumenta com o aumento da tensão produzindo uma região de condutividade positiva, voltando para a região dita de operação normal de um diodo. É a região de condutância negativa aquela de maior interesse porque é aí que se podem fabricar osciladores, por exemplo, uma vez que uma condutância negativa permite efetivamente cancelar perdas resistivas de circuitos tanque LC.

Um fato adicional é que no grafeno, conforme propomos aqui, a altura da barreira de tunelamento pode ser controlada através do potencial de gate, fazendo aumentar ou diminuir o valor absoluto da condutância diferencial em cada região, que pode ter similaridade a um transistor de efeito de campo (FET). Em um diodo túnel semicondutor convencional de Si ou GaAs os parâmetros da barreira de potencial interna não podem ser alterados usualmente por um gate, não permitindo controlar o valor mínimo da condutância, por exemplo.

Conforme já foi comentado acima, enfatizamos que a função $J(V)$ não depende do sinal de U_0 , mas é relativamente assimétrico para o sinal da voltagem aplicada V . É importante notar também que o efeito de retificação de um diodo comum para o qual $J(V) \gg J(-V)$ está ausente aqui, mas há uma clara região onde a condutividade diferencial $G = dJ/dV$

torna-se negativa para uma faixa de tensões aplicadas, como esperado para um diodo túnel [69].

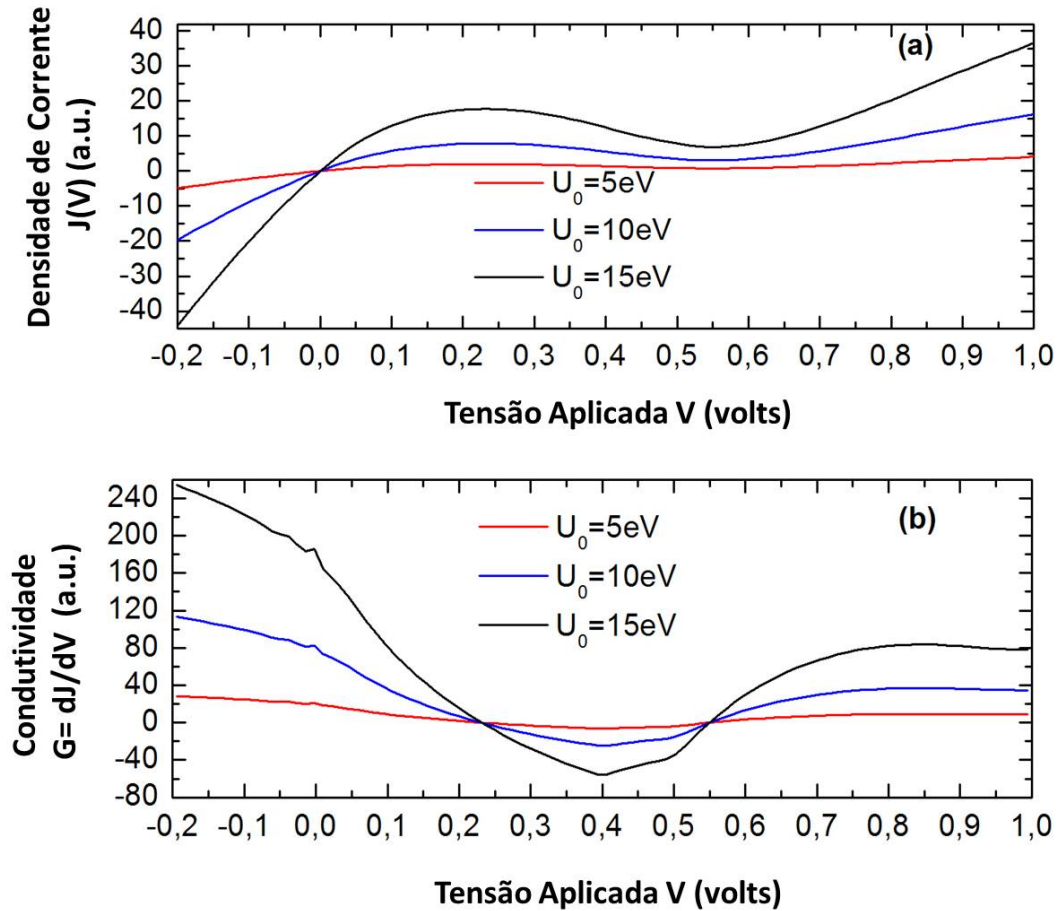


Figura 4.6: Características $I - V$ numa junção de tunelamento para o grafeno p-n para $\mu_{q-L} = -0.4\text{eV}$ e $\mu_{q-R} = 0.5\text{eV}$ considerando altura da barreira de potencial nos valores $U_0 = 5, 10$ e 15eV : (a) Densidade de corrente $J(V)$ e (b) Condutividade diferencial $G(V) = dJ/dV$, em unidades arbitrárias [67].

Na figura 4.7 apresenta-se a curva característica $I - V$ na junção de tunelamento no grafeno p-n (dopado), com as mesmas considerações da figura 4.5, encontrando-se que os valores da densidade de corrente elétrica aumenta a medida que a espessura da barreira de potencial acrece, mas o interessante aqui é que a curva característica $I - V$ apresenta uma pequena oscilação na parte que temos a presença da resistividade negativa. lembrando-se que os valores altos colocados para a espessura da barreira de potencial d (no modelo), foram somente para poder observar a dependência da corrente de tunelamento com a espessura da barreira de potencial, já que o valor de d está entre 5nm até 50nm aproximadamente.

Na figura 4.8 apresenta-se a curva de densidade de corrente de spin total *versus* tensão aplicada, sem a presença de campo magnético externo para três valores diferentes de temperaturas. Conforme o esperado, encontramos que a densidade de corrente de spin total

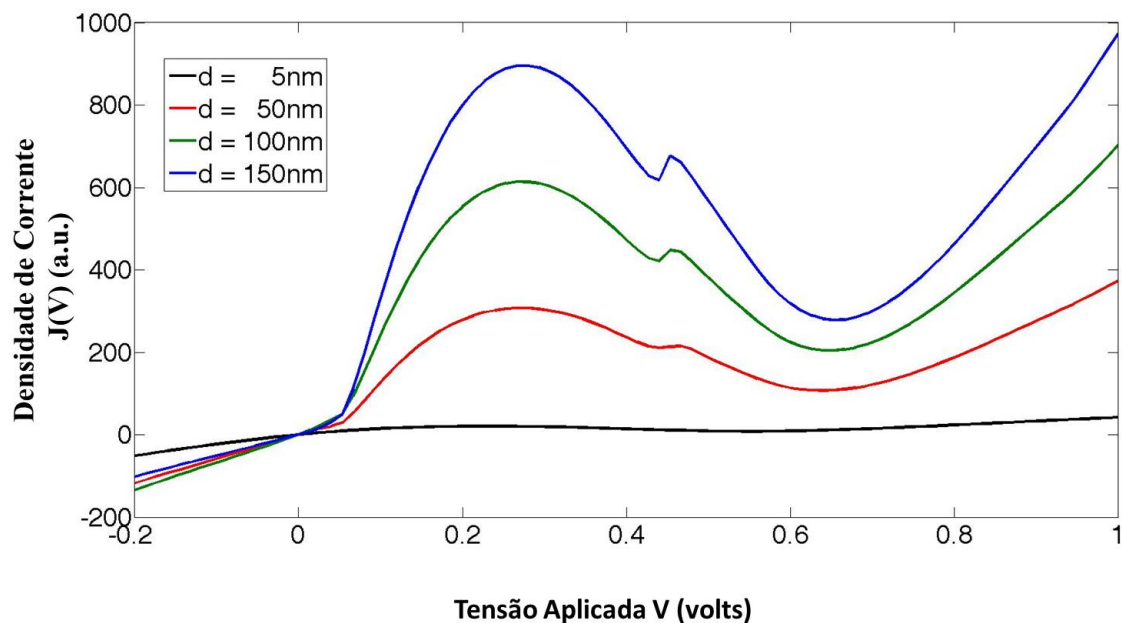


Figura 4.7: Características $I - V$ numa junção de tunelamento no grafeno p-n (dopado) para $\mu_{q-L} = -0.4eV$ e $\mu_{q-R} = 0.5eV$ considerando a espessura da barreira de potencial nos valores $d = 5, 50, 100$ e 150 nm, fixando a altura da barreira de potencial $U_0 = 15eV$.

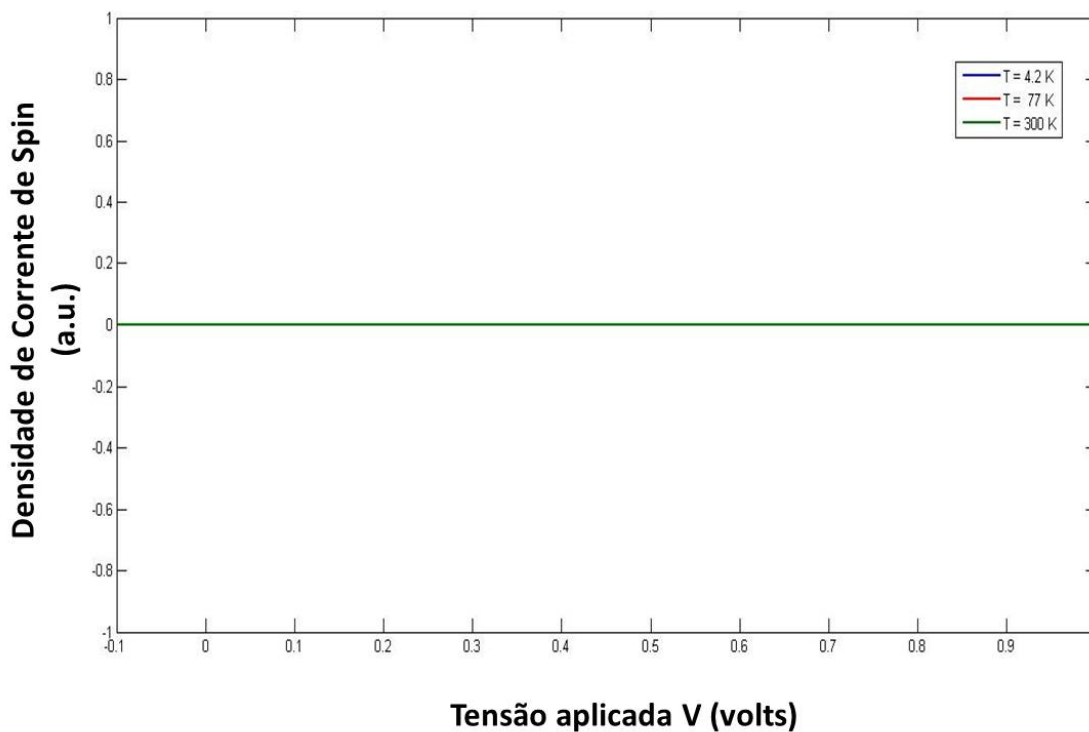


Figura 4.8: Densidade de corrente de spin, em unidades arbitrárias, na ausência de campo magnético, ou seja, $B = 0T$.

é igual a zero, e isso permite validar a expressão proposta para a densidade de corrente spin-polarizada, uma vez que na ausência do campo magnético aplicado as densidades de corrente com spin para cima e spin para baixo tem valor idêntico, independentemente do valor da temperatura ou da tensão aplicada.

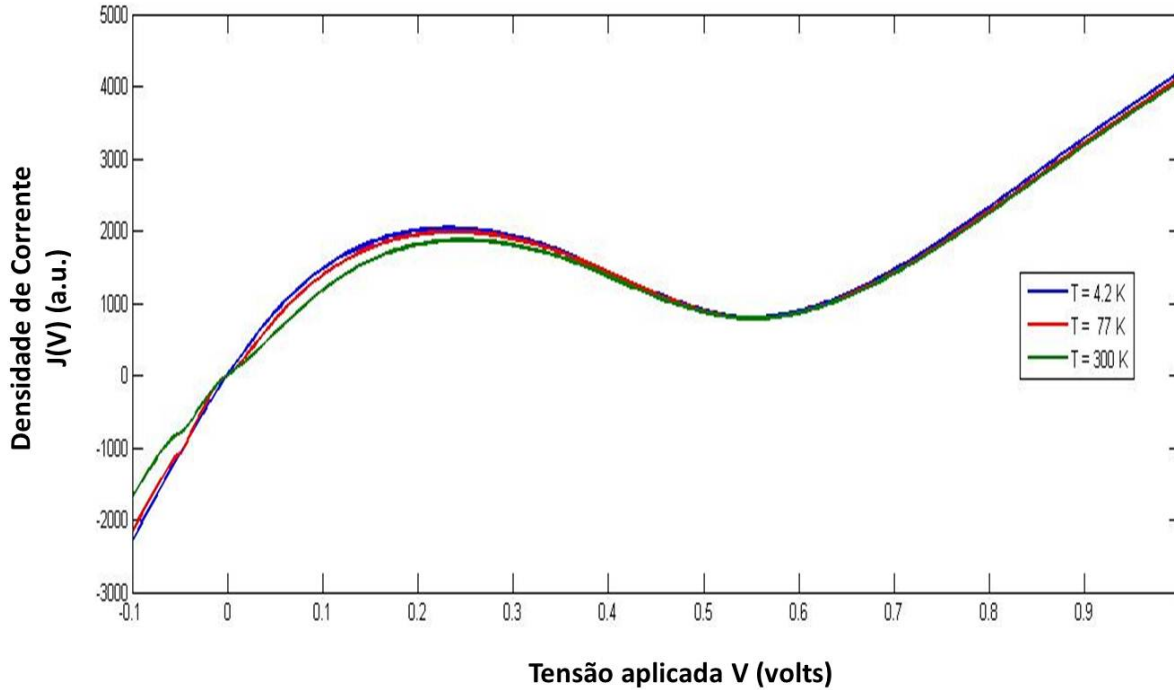


Figura 4.9: Comportamento da densidade de corrente elétrica $J(V)$ em unidades arbitrárias, para 3 temperaturas diferentes, $T = 4, 2K, 77K$ e $300K$ com campo magnético $B = 1T$.

Na figura 4.9, utilizando os mesmos valores dos potenciais químicos $\mu_L = -0.4eV$, $\mu_R = 0.5eV$ mas fixando a altura da barreira de potencial em $U_0 = 15eV$, vamos considerar a presença de um campo magnético externo de magnitude $B = 1T$ e observar o comportamento da densidade de corrente elétrica total para vários valores de temperatura, tomados como $4, 2K, 77K$ e $300K$. Pode-se observar um leve decréscimo da densidade de corrente elétrica total na região de resistividade negativa, quando a temperatura é aumentada de $4, 2K$ até $300K$. Todavia, a característica $I - V$ é bastante robusta, e preserva-se de forma geral a curva característica $I - V$ de um diodo túnel.

Na figura 4.10 pode ser observado que quando adiciona-se um campo magnético externo, nesse caso $B = 1T$, aplicado perpendicularmente ao plano da lâmina de grafeno, conforme discutido no capítulo anterior, na junção de tunelamento, surge uma densidade de corrente de spin, que embora pequena comparada à densidade de corrente elétrica total, quando ambas são medidas em mesmas unidades, persiste para os valores de temperatura de $4, 2K, 77K$ e $300K$. Conforme é esperado a densidade de corrente de spin total (em módulo) diminui à medida que a temperatura aumenta de $4, 2K$ até $300K$. Percebe-se também que há uma faixa de valores positivos de tensão aplicada em que a corrente de

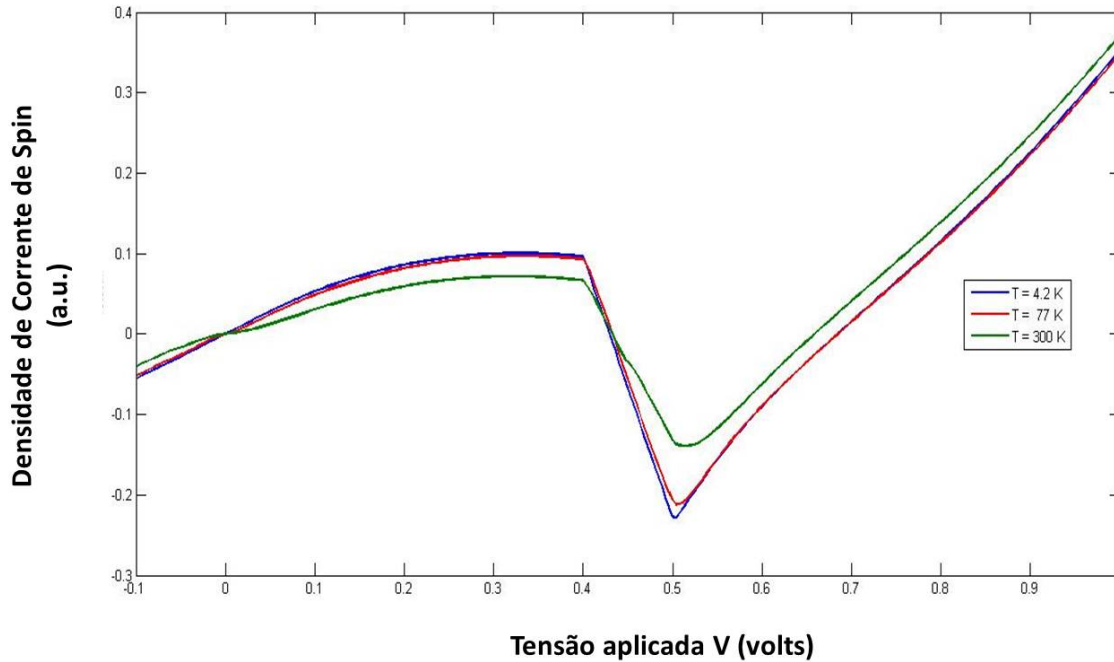


Figura 4.10: Densidade de corrente de spin em unidades arbitrárias, com campo magnético $B = 1T$.

spin assume valores negativos, indicando que a corrente de spins para cima está em sentido contrário ao da corrente elétrica total, de maneira efetiva, ou alternativamente que a corrente está polarizada em spin, e nessa região há predomínio de spins para baixo no transporte. Fato similar ocorre nas regiões de tensão negativa.

Outro fato interessante que pode-se mencionar na figura 4.10 é o seguinte nos pontos onde a densidade de corrente de spin vai para zero é por que vamos ter a mesma quantidade de spin up e spin down, levando em conta a equação (3.49) que define a relação entre as densidades de corrente de spin up e spin down.

O efeito da magnitude do campo magnético também foi avaliado sobre as propriedades de transporte da junção. Nesse caso fixamos a temperatura e a altura da barreira e variamos o valor do campo magnético, sempre preservando aquele limite de baixo campo, que para o grafeno significa campos que não façam evidenciar os níveis de Landau e tipicamente situam-se abaixo de $5T$.

Na figura 4.11 o gráfico da densidade de corrente spin-polarizada em função da tensão aplicada é apresentado, quando se fixa o valor da altura da barreira de potencial em $U_0 = 15eV$ a uma temperatura de $77K$ e o campo magnético externo tomou os valores $B=0, 0,5$ e 1 tesla. Como é esperado para essa situação, pode-se observar que à medida que o valor do campo magnético externo aumenta, o valor do módulo da densidade de corrente de spin aumenta para qualquer valor de tensão aplicada.

Pode-se mencionar algo muito interessante que acontece na curva da densidade de corrente de spin versus tensão aplicada na figura 4.11 apresenta duas regiões de máximo

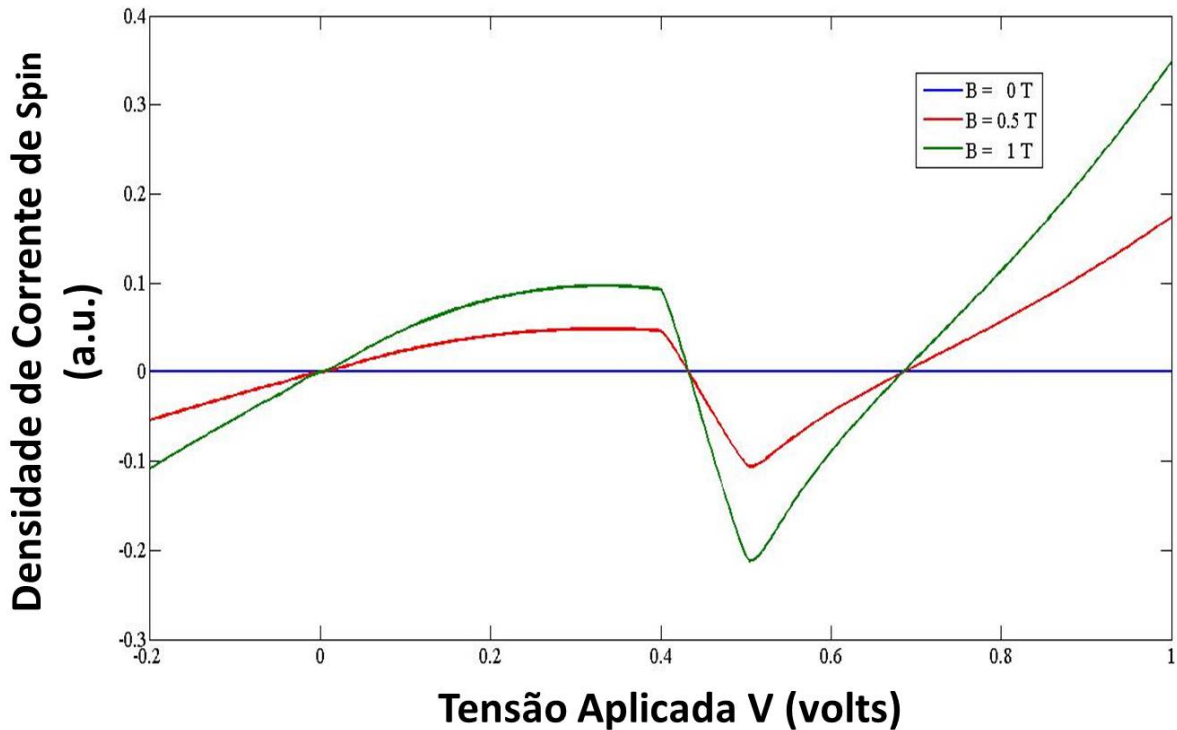


Figura 4.11: A densidade de corrente de spin em função da tensão aplicada, em unidades arbitrárias, para valores de campo magnético $B = 0, 0.5$ e $1T$.

e mínimo da densidade de corrente de spin entre os pontos $V=0.4eV$ e $V=0.5eV$, onde para valores da densidade de corrente de spin $I_s > 0$ encontra-se uma maior parte de portadores de carga de spin up e quando $I_s < 0$ predominam os portadores de carga de spin down, tendo em consideração a equação (3.49).

Na figura 4.12 pode-se observar o comportamento da condutividade diferencial elétrica em função da tensão aplicada, para um campo magnético externo de $B=1$ tesla, em três temperaturas distintas, de 4,2K, 77K e 300K. Observa-se que no intervalo de valores de tensões entre -0.1 V até 0.1 V a curva da condutividade diferencial apresenta oscilações inesperadas, observando-se um pico mais pronunciado para $T=77K$. Todavia a região de condutância negativa, persiste para todos os valores de temperatura, demonstrando que o fenômeno é robusto.

Finalmente, podemos observar na figura 4.13 a curva da condutividade diferencial de spin em função da tensão aplicada V , com as mesmas condições da figura 4.12. Observa-se um decréscimo da condutividade para maiores temperaturas, conforme esperado, uma vez que a separação das bandas em relação ao spin fica suavizada pelo efeito térmico nas funções de Fermi-Dirac.

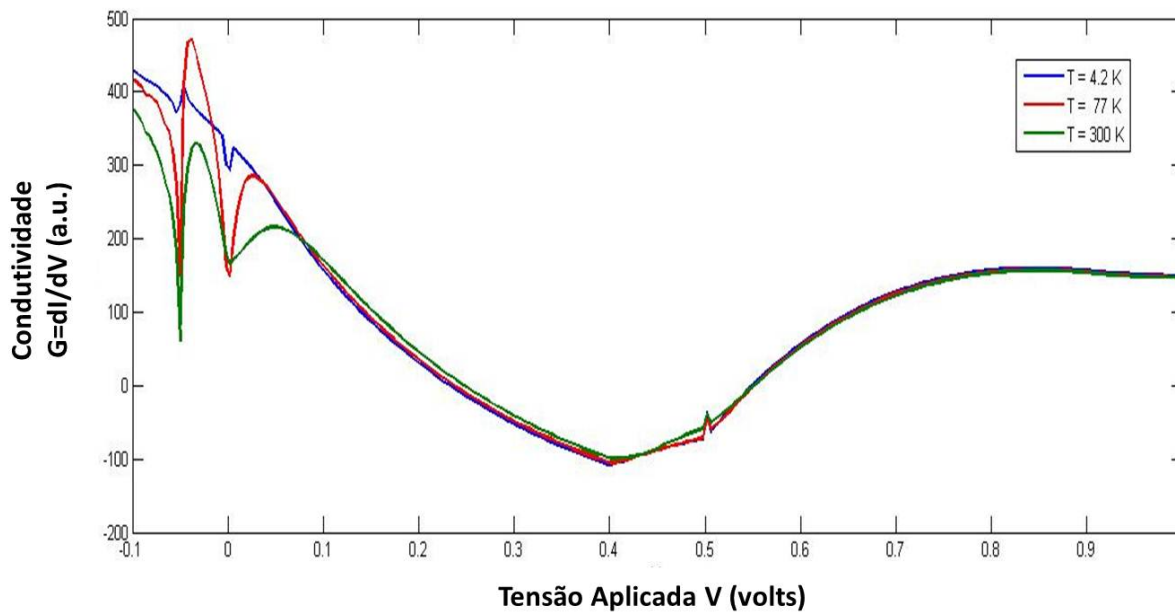


Figura 4.12: Condutividade diferencial $G(V) = dJ/dV$, em unidades arbitrárias, com campo magnético $B = 1T$.

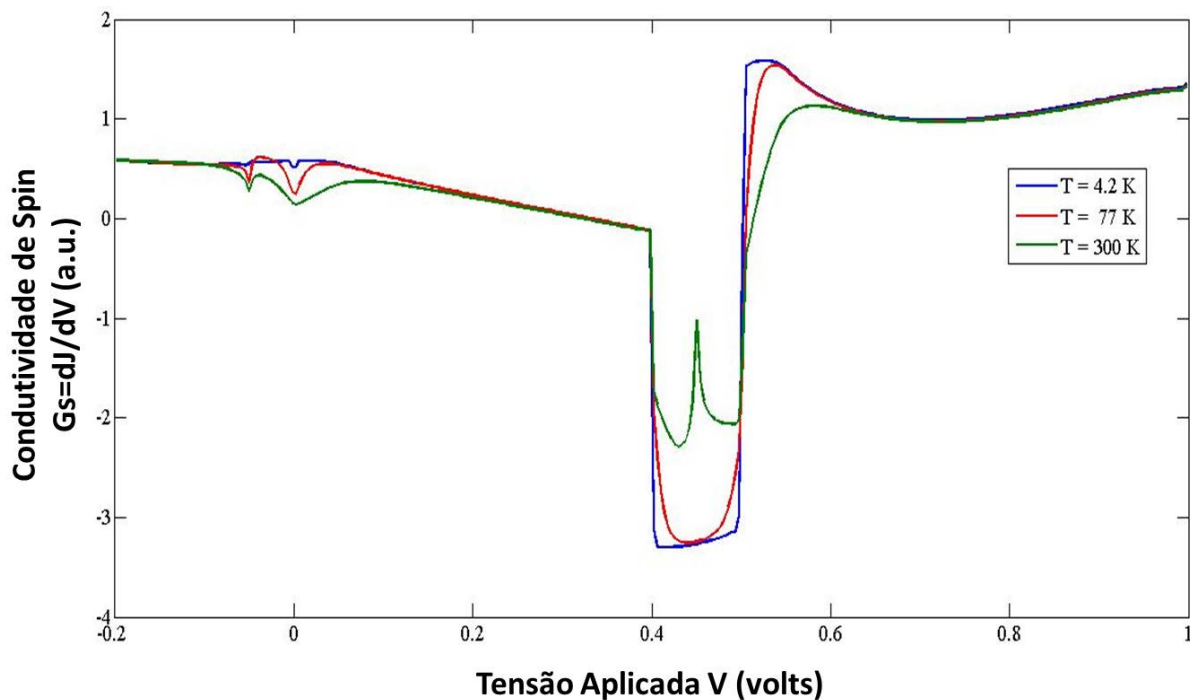


Figura 4.13: Condutividade diferencial de spin $G_s(V) = dJ_s/dV$, em unidades arbitrárias, com campo magnético $B = 1T$.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Em resumo, foi estabelecido um modelo teórico capaz de descrever as características $I - V$ do tunelamento tipo diodo em junções túnel no grafeno. O modelo é baseado no método do hamiltoniano de transferência derivado da densidade Lagrangeana de Dirac em duas dimensões espaço-tempo $(1 + 2)D$. A densidade Lagrangeana responde o comportamento efetivo dos elétrons livres perto dos cones de Dirac da zona de Brillouin no grafeno. É relevante neste trabalho os parâmetros da barreira como potencial e o efeito da dopagem que é incorporada. As características principais do tunelamento relativístico estão presente no modelo teórico.

Por exemplo, as curvas $I - V$ são independentes do sinal da altura da barreira de potencial, como esperado. Além disso, quanto maior a barreira, maior será a condutividade. Como consequência disso, a barreira torna-se mais transparente para valores mais elevados de U_0 , como esperado no tunelamento relativístico de partículas sem massa.

Pode-se também mencionar que mediante nosso modelo teórico conseguiu-se plotar no Matlab (ver figura 4.4-(a)) as curvas características $I - V$ não linear de uma junção de tunelamento no grafeno experimentalmente, segundo referência [68] (figura 4.3-(a)). Encontrando-se uma grande diferença que experimentalmente o grafeno foi dopado com óxido de grafeno e nas bordas da junção foram colocados contatos metálicos e nosso caso a monocamada de grafeno não foi dopada e os contatos metálicos são do mesmo material o grafeno (caso ideal de nosso modelo teórico). Pode-se também dizer, que na referência [25] conseguiram provar experimentalmente um tunelamento através da barreira de potencial no grafeno, onde o gráfico de corrente versus tensão mostrado corresponde ao comportamento de um diodo normal (ver curva cor vermelha, segundo Figura 4.2).

Na atualidade, estão sendo realizados trabalhos científicos com o efeito diodo túnel (presença de resistividade negativa), como por exemplo, o estudo de transporte quântico em sistemas fora do equilíbrio, utilizando as funções de Green para os efeitos de ressonância [70].

Uma característica muito interessante, que pode-se observar na Figura 4.7 da densidade de corrente de spin versus tensão aplicada na presença de um campo magnético externo $B=1$ tesla, acontece que no intervalo de tensões entre 0.4 e 0.5 V forma-se uma porta, onde esta curva da densidade de spin aumenta e decai. Então, esta porta funcionaria como uma chave para ligar e desligar o dispositivo (transistor) e permitiria impedir ou liberar a passagem da corrente de spin e acontece que algum dispositivo que funcionasse por meio dessa corrente consumiria pouquíssima energia. Já que a densidade de corrente

de spin não dissipa calor no grafeno e a perda de energia num sistema assim seria mínima.

Neste trabalho de pesquisa, pode-se mencionar também a grande importância da densidade de estados para os elétrons e buracos na junção de tunelamento em função dos potenciais químicos na presença do campo magnético externo, permitindo-nos verificar e obter nos resultados simulados as características $I - V$ de um diodo túnel e o chaveamento encontrado na curva da densidade de corrente de spin.

Logrando-se as publicações de dois artigos em Revistas Especializadas, *Physica E* **59** (2014) 1-5 na área de Ciência de Materiais [67] e *Revista Brasileira de Ensino de Física* **37** (2015) 3 na área de Física [71], respectivamente. No segundo artigo aborda-se a teoria e os conceitos fundamentais sobre o grafeno, com a finalidade de fomentar ciência nos alunos da graduação e escolas no Brasil.

Perspectivas futuras a fazer, temos:

- (i) Estudar os efeitos de proximidade do grafeno em junção com outro material.
- (ii) Comparar as curvas características de densidade de corrente elétrica versus tensão aplicada $I - V$ encontradas em nosso modelo teórico, quando adiciona-se os potenciais químicos de cada lado da junção de tunelamento na lamina do grafeno, no início dos cálculos do hamiltoniano de transferência. Com a finalidade de observar se prevalece o efeito de diodo túnel através da barreira de potencial.
- (iii) Observar a física do efeito Hall quântico no grafeno, quando se aplique um campo magnético perpendicular externo e a condutividade esteja em função dos potenciais químicos, em nosso modelo teórico.
- (iv) Seria muito interessante fazer uma junção túnel no grafeno experimentalmente para poder comparar com nosso resultado encontrado teoricamente, já que este efeito achado no grafeno não foi encontrado na literatura até hoje, com a finalidade de aportar ciência na área da física, eletrônica e outros cursos.

APÊNDICE A

FORMULISMO TENSORES E FERRAMENTAS RELATIVÍSTICAS

A.1 Definição de um tensor

Defina-se um tensor como um conjunto de componentes cujas leis de transformação sob rotações expressam as componentes transformadas como combinações lineares das componentes originais. A continuação damos um exmplo de um tensor:

$$T'_{ij} = \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^2 R_{ik} R_{jl} T_{kl}, \quad (\text{A.1})$$

onde o tensor de acima, é caracterizado por ter 2 índices, o qual define um tensor de rango 2. Em extensão ao conceito de escalares, vetores e matrizes, sendo estes tensores de rango 0, 1 e 2 respectivamente. Pode-se dizer que:

- T nos representa um tensor de ordem 0 ou um escalar, caracterizado por não ter componentes.
- T_i nos representa um tensor de ordem 1 ou um vetor, caracterizado por ter uma componente, onde o índice $i = 1, \dots, D$ indica-me a dimensionalidade do espaço, como exemplo pode-se mencionar o seguinte vetor $\vec{v}_i = (v_1, v_2, v_3, \dots, v_D)$.
- T_{ij} nos representa um tensor de ordem 2 ou uma matriz, onde os índices $ij = 1 \dots D$ estes tensores possuem D^2 componentes, T_{ijk} tensor de ordem 3, etc.

A.2 Convenção do Somatório de Einstein e o tensor métrico g

Convenciona que índices repetidos representam somatórios, onde os índices variam de acordo com a dimensão do espaço. Dizemos que os índices envolvidos nos somatórios foram contraídos ou que sofreram uma contração.

$$\begin{aligned} a_i x_i &= \sum_{i=1}^D a_i x_i \\ a_i x_i &= a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_D x_D \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Em um mesmo termo de uma expressão, não pode haver mais de dois índices iguais, exemplos: $a_{ii} x_i$, $a_j^i x_i x_i$ poderia ser escrito como $a_j^i (x_i)^2$.

Com os tensores métricos g_{ij} e g^{ij} , podemos definir os vetores covariantes e contravariantes:

- v_i : componentes covariantes do vetor \mathbf{v} .
- v^i : componentes contravariantes do vetor \mathbf{v} .

No espaço R^n o tensor métrico é a identidade: $g_{ij} = \delta_{ij}$ ou $g^{ij} = \delta^{ij}$ expressos de forma covariante e contravariante, respectivamente. Em espaços onde o tensor métrico não seja a matriz identidade, então o produto escalar entre vetores deve ser realizado com o auxílio da métrica. Temos os vetores covariantes u_i e v_i definidos assim:

$$u_i = g_{ij}u^j \quad (\text{A.3})$$

$$v_i = g_{ij}v^j \quad (\text{A.4})$$

Fazendo o produto escalar de u_i e v_i e substituindo (A.4), obtemos

$$\begin{aligned} u_i.v_i &= g_{ij}u^i v^j \\ u_i.v_i &= u^i g_{ij}v^j \\ u_i.v_i &= u^i \delta_{ii}v_i \\ u_i.v_i &= u^i v_i \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

pode-se observar que quando uma métrica covariante atua sobre um vetor contravariante dá como resultado um vetor covariante.

Se substituirmos (A.3) no produto escalar, temos que $u_i.v_i = g_{ij}u^i v^j = u_i v^j$, [72].

A.3 Quadrivetores covariantes e contravariantes

Uma vez que conhecemos a definição de vetores covariantes e contravariantes, podemos falar de quadrivetores os quais são representados no espaço quadridimensional espaço-tempo. Podemos mencionar o quadrivetor contravariante A^α , onde o índice $\alpha = 0, 1, 2, 3$, então A^α tem as componentes A^0, A^1, A^2, A^3 e seu correspondente quadrivetor covariante B_β , onde $\beta = 0, 1, 2, 3$. e suas componentes B_0, B_1, B_2, B_3 . Então pela definição de tensor pode-se mencionar uma regra de transformação para estes quadrivetores contracovariante e covariante da seguinte maneira

$$A'^\alpha = \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^\beta} A^\beta \quad (\text{A.6})$$

$$B'_\alpha = \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} B_\beta \quad (\text{A.7})$$

os quais podem ser expressos explicitamente, assim:

$$A'^\alpha = \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^0} A^0 + \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^1} A^1 + \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^2} A^2 + \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^3} A^3 \quad (\text{A.8})$$

$$B'_\alpha = \frac{\partial x^0}{\partial x'^\alpha} B_0 + \frac{\partial x^1}{\partial x'^\alpha} B_1 + \frac{\partial x^2}{\partial x'^\alpha} B_2 + \frac{\partial x^3}{\partial x'^\alpha} B_3. \quad (\text{A.9})$$

Estes quadrivetores como já vimos são chamados também de tensores de primeiro ordem.

A continuação mencionamos os tensores contravariantes e covariantes de segundo ordem, já que mediante a regra de transformação nós permitem poder relacionar-lhes com as grandezas físicas em geral.

$$F'^{\alpha\beta} = \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^\nu} \frac{\partial x'^\beta}{\partial x^\delta} F^{\nu\delta} \quad (\text{A.10})$$

$$G'_{\alpha\beta} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\alpha} \frac{\partial x^\delta}{\partial x'^\beta} G_{\nu\delta} \quad (\text{A.11})$$

No caso de um tensor misto de ordem dois, H^α_β , temos a seguinte regra de transformação

$$H'^\alpha_\beta = \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^\nu} \frac{\partial x^\delta}{\partial x'^\beta} H^\nu_\delta \quad (\text{A.12})$$

A generalização dos tensores contravariantes, covariante e mistos, de ordem arbitrária, é evidente a partir dos exemplos anteriores. O produto interno, ou escalar, de dois vetores é definido como o produto das componentes de um vetor covariante por um outro contravariante,

$$B.A = B_\alpha A^\alpha \quad (\text{A.13})$$

Pela regra de transformação (A.6) e (A.7), temos

$$B'.A' = \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} \frac{\partial x'^\alpha}{\partial x^\nu} B_\beta A^\nu = \frac{\partial x^\beta}{\partial x^\nu} B_\beta A^\nu = \delta^\beta_\nu B_\beta A^\nu = \delta^\beta_\beta B_\beta A^\beta = B.A \quad (\text{A.14})$$

onde $\delta^\beta_\nu = \frac{\partial x^\beta}{\partial x^\nu}$, quando $\beta = \nu$ delta é 1.

A geometria específica do espaço-tempo da relatividade restrita é definida pelo intervalo invariante s^2 . Na forma diferencial, o intervalo infinitesimal ds que define a norma do nosso espaço é

$$(ds)^2 = (dx^0)^2 - (dx^1)^2 - (dx^2)^2 - (dx^3)^2 \quad (\text{A.15})$$

Esta norma, ou métrica, é um caso especial do elemento diferencial geral de comprimento definido por

$$(ds)^2 = g_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta \quad (\text{A.16})$$

Onde o tensor métrico $g_{\alpha\beta} = g_{\beta\alpha}$ é diagonal, com os elementos

$$g_{00} = 1, \quad g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1 \quad (\text{A.17})$$

Como já sabemos que este tensor métrico é de segundo ordem, então pode ser representado como uma matriz 4x4.

$$g = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.18})$$

Observa-se que a contração dos tensores métricos contravariante e covariante dá a delta de Kronecker em quatro dimensões:

$$g_{\alpha\nu} g^{\nu\beta} = \delta_\alpha^\beta \quad (\text{A.19})$$

Onde $\delta_\alpha^\beta = 0$ para $\alpha \neq \beta$ e $\delta_\alpha^\alpha = 1$ para $\alpha = 0, 1, 2, 3$.

Os quadrivetores contravariante A^α e covariante A_α podem ser representados de forma vetorial, já que deste jeito poderíamos relacionar-lhes com as grandezas físicas conhecidas.

$$A^\alpha = (A^0, \vec{A}), \quad A_\alpha = (A^0, -\vec{A}) \quad (\text{A.20})$$

Consideremos agora os operadores derivadas parciais em relação a x^α e x_α . As propriedades transformacionais destes operadores podem ser determinadas de forma imediata mediante as regras da derivação implícita. Por exemplo,

$$\frac{\partial}{\partial x'^\alpha} = \frac{\partial x^\beta}{\partial x'^\alpha} \frac{\partial}{\partial x^\beta} \quad (\text{A.21})$$

Das relações $x_\alpha = g_{\alpha\beta} x^\beta$ e $x^\alpha = g^{\alpha\beta} x_\beta$, segue-se que a derivação em relação a uma componente covariante leva a um operador vetorial contravariante. Por isso, adotamos a notação

$$\begin{aligned} \partial^\alpha &\equiv \frac{\partial}{\partial x_\alpha} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, -\vec{\nabla} \right) \\ \partial_\alpha &\equiv \frac{\partial}{\partial x^\alpha} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \vec{\nabla} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

A quadridivergencia de um quadrivetor A é o invariante

$$\begin{aligned}
 \partial^\alpha A_\alpha &= \partial_\alpha A^\alpha \\
 &= \frac{\partial A^0}{\partial x^0} + \vec{\nabla} \cdot \vec{A} \\
 &= \frac{\partial A^0}{\partial x^0} + \frac{\partial A^1}{\partial x^1} + \frac{\partial A^2}{\partial x^2} + \frac{\partial A^3}{\partial x^3}
 \end{aligned} \tag{A.23}$$

Esta equação tem a forma familiar da equação da continuidade da densidade de carga e de corrente, da condição de Lorentz sobre os potenciais escalar e vetorial, etc. Estes exemplos possibilitam uma primeira percepção sobre a emergência da covariância de uma lei física, desde que se atribuam propriedades transformacionais de Lorentz apropriadas às grandezas que participam da equação.

Podemos mencionar também no caso tivessemos equações diferenciais de segundo ordem, temos como exemplo o operador laplaciano quadridimensional é definido como a contração invariante

$$\equiv \partial_\alpha \partial^\alpha = \frac{\partial^2}{\partial x^{02}} - \nabla^2 \tag{A.24}$$

Este é, naturalmente, o operador da equação de onda no vácuo [73].

APÊNDICE B

FERMIONS DE DIRAC SEM MASSA (1+2)D NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO \perp AO PLANO

Nesta seção veremos como é o comportamento das bandas de energia num sistema bidimensional no grafeno, quando aplicasse um campo magnético perpendicular ao plano da rede do grafeno. Fazendo-se uso de algumas equações da física quântica e electromagnetismo.

Regra de acoplamento mínimo para o momento quando aplicamos um potencial

$$\vec{p} \rightarrow -i\vec{\nabla} - q\vec{A} \quad (\text{B.1})$$

onde $\vec{A} = (A_x, A_y)$ é o potencial vetor magnético.

Aplicando um campo magnético perpendicular ao plano na direção z temos $\vec{B} = B_0\hat{a}_z$ e usando a propriedade de campo magnético $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ o qual vai dar duas soluções para o potencial vetor magnético na direção x e y respectivamente

$$A_x = -B_0y \quad (\text{B.2})$$

$$A_y = B_0x \quad (\text{B.3})$$

Procedendo-se a encontrar o valor da energia quando aplicasse um campo magnético perpendicular ao plano no grafeno, precisa-se da equação diferencial:

$$\begin{aligned} i\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t} &= (\alpha\tau_x p_x + \tau_y p_y) \psi_\alpha \\ i\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t} &= \begin{pmatrix} 0 & \alpha p_x - ip_y \\ \alpha p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \psi_\alpha \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

onde as matrizes de Pauli τ já foram definidas em (2.27) e (2.28), e a variável α usualmente é definida relativisticamente como pseudo-spin tomando valores de +1 e -1 correspondente a cada ponto de Dirac, respectivamente. E usando a segunda solução para o potencial vetor $A_y = B_0x$ na direção y , tendo em conta também a definição da regra de acoplamento mínimo em (B.1), temos

$$i\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t} = -i\alpha\tau_x \frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x} - i\tau_y \frac{\partial\psi_\alpha}{\partial y} - qB_0x\tau_y\psi_\alpha \quad (\text{B.5})$$

Derivando a função $\psi_{(x,y,t)} = \Phi_{(x)}e^{i(k_y y - \epsilon t)}$ em y e t , obtemos as derivadas respectivas:

$\frac{\partial}{\partial y} = ik_y$ e $\frac{\partial}{\partial t} = -i\epsilon$, e substituindo em (B.5)

$$\epsilon\Phi_\alpha = -i\alpha\tau_x \frac{\partial\Phi_\alpha}{\partial x} - i\tau_y ik_y\Phi_\alpha - qB_0x\tau_y\Phi_\alpha \quad (\text{B.6})$$

passando na forma matricial a equação diferencial para obter um sistema de duas equações lineares

$$\epsilon \begin{pmatrix} A(x) \\ B(x) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -i\alpha\frac{\partial}{\partial x} - ik_y + iqB_0x \\ -i\alpha\frac{\partial}{\partial x} + ik_y - iqB_0x & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A(x) \\ B(x) \end{pmatrix} \quad (\text{B.7})$$

$$\epsilon A(x) = -i\alpha \frac{\partial B(x)}{\partial x} - ik_y B(x) + iqB_0x B(x) \quad (\text{B.8})$$

$$\epsilon B(x) = -i\alpha \frac{\partial A(x)}{\partial x} + ik_y A(x) - iqB_0x A(x) \quad (\text{B.9})$$

substituindo (B.9) em (B.8)

$$(\epsilon^2 + \alpha q B_0) A(x) = -\frac{\partial^2 A(x)}{\partial x^2} + q^2 B_0^2 \left(x - \frac{k_y}{qB_0}\right)^2 A(x) \quad (\text{B.10})$$

redefinindo: $\xi = x - \frac{k_y}{qB_0}$ e fazendo $qB_0 = \omega_0$ em (B.10), temos

$$\frac{(\epsilon^2 + \alpha\omega_0)}{2} A(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 A(x)}{\partial \xi^2} + \frac{\alpha^2 \omega_0^2}{2} \xi^2 A(x) \quad (\text{B.11})$$

mudando de variáveis $E = \frac{(\epsilon^2 + \alpha\omega_0)}{2}$ e $\xi^2 = \frac{t^2}{\alpha\omega_0}$, temos

$$\frac{2}{\alpha\omega_0} \frac{\partial^2 A(x)}{\partial t^2} = (t^2 - k) A(x) \quad (\text{B.12})$$

onde $k = \frac{2E}{\alpha\omega_0}$.

Podendo-se observar na equação (B.12) que tem a forma da equação diferencial do oscilador armônico, fazendo a analogia das constantes $k = \frac{2E}{\alpha\omega_0}$ e $k = (2n + 1)$, onde n é o nível da energia ($n = 0, 1, 2, \dots$), então:

$$\epsilon_n = \pm \sqrt{2|qB_0|n} \quad (\text{B.13})$$

Agora fazendo os mesmos passos de (B.5) até (B.12) para obter o valor da energia quando usamos a primeira solução para o potencial vetor $A_x = B_0 y$ na direção x , encontrando-se que

$$\epsilon_n = \pm \sqrt{2|qB_0|(n+1)} \quad (\text{B.14})$$

Com os resultados obtidos da dispersão de energia nas equações (B.13) e (B.14), pode-

se observar que no caso da monocamada de grafeno o nível de Landau quando $n = 0$ acomoda os elétrons e buracos a diferença de outros semicondutores tradicionais onde a dispersão de energia se desdobra em níveis de Landau com energias dadas.

Das equações da dispersão de energia encontradas pode-se obter uma equação geral

$$\epsilon_n = \pm \sqrt{2|qB_0| (n + 1/2 \pm 1/2)} \quad (\text{B.15})$$

onde o sinal \pm está relacionando a quiralidade dos portadores de carga, sendo estes os níveis de Landau para os portadores de carga (elétrons e buracos) [46, 74].

Uma vez encontrados estes níveis de Landau, vamos a explicar o efeito Hall quântico que acontece quando se aplica um campo magnético na monocamada do grafeno ou outro material semicondutor. A diferença do efeito Hall ordinário a resistividade Hall não varia linearmente com a aplicação do campo magnético. Mas que aparecem uma série de planaltos nas quais a resistividade é constante e a condutividade longitudinal na direção do fluxo de corrente se anula precisamente nos intervalos correspondentes a estes planaltos, sendo a resistividade e condutividade do material, quantidades constantes e quantizadas.

BIBLIOGRAFIA

- [1] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, and F. Petroff, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 21.
- [2] Abhishek Gautam, International Journal of Scientific and Research Publications, **2** (2012) 8.
- [3] K. S. Novoselov, A. K. Geim, Morozov, D. Jiang, Science **306** (2004) 666.
- [4] A. K. Geim, K. S. Novoselov, Nature Materials **6** (2007) 183-191.
- [5] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71** (1947) 622.
- [6] K. S. Novoselov, e tal., Proc. Natl. Acad. Sci. **102** (2005) 10451.
- [7] P. E. Allain and J. N. Fuchs, Eur. Phys. J. B. **83** (2011) 301-317.
- [8] K. S. Novoselov, e tal., Nature **438** (2005) 197.
- [9] Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer, P. Kim, Nature **438** (2005) 201.
- [10] K. M. McCreary, et al., Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 186604.
- [11] M. Mecklenburg, B. C. Regan, Phys. Rev. Lett. **106** (2011) 116803.
- [12] D. A. Abanin, et al., Phys. Rev. Lett. **107** (2011) 096601.
- [13] P. S. Cornaglia, G. Usaj, C. A. Balseiro, Phys. Rev. Lett. **102** (2009) 046801.
- [14] M. Wimmer, et al., Phys. Rev. Lett. **100** (2008) 177207.
- [15] C. A. Dartora, G. G. Cabrera, Phys. Rev. B **87** (2013) 165416.
- [16] M. R. Setare, D. Jahani, Phys. B **405** (2010) 1433.
- [17] M. I. Kastnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim, Nature Phys. **2** (2006) 620.
- [18] M. I. Kastnelson, K. S. Novoselov, Solid State Commun. **143** (2007) 3.
- [19] J. D. Lejarreta, C. H. Fuentevilla, E. Diez and José M. Cerveró, J. Phys. A: Math. Theor. **46** (2013) 155304.
- [20] B. Huard, N. Stander, J. A. Sulpizio, and D. Goldhaber-gordon, Phys. Rev. B **78** (2008) 121402(R).
- [21] C. E. Malec and D. Davidovic, arxiv:10115067V1[con-mat.mes-hall]23Nov2010.

- [22] G. I. Luiz, E. Vernek, L. Deng, K. Ingersent, and E. V. Anda, *Phys. Rev. B* **87** (2013) 075408.
- [23] Tunnel Diodes, *Encyclopedia of Appl. Phys.* **22** (1998) 335-359.
- [24] M. Patrashin, N. Sekine, A. Kasamatsu. Paper Mo-C1-5-26th Int. Conf. on Indium Phosphide and Related Materials (Montpellier, France, May 11-15, 2014).
- [25] B. Canto, C. P. Gouvea, B. S. Archanjo, J. E. Schmidt, and D. L. Baptista, *Scientific Reports* (2015) 14332.
- [26] Mark Sweneny and Jingmin Xu, *Appl. Phys. Lett.* **54** (1989) 6.
- [27] K. Pi, K. McCreary, W. Bao, W. Han, Y. F. Chiang, Y. Li, S. Tsai, C. Lau, R. Kawakami, arXiv:0903.2837v2.
- [28] N. Ooi, A. Rairkar, J. B. Adams, *Carbon* **44** (2006) 231-242.
- [29] J. H. Chen, C. Jang, S. Adam, M. S. Fuhrer, E. D. Willams, *Nature Materials* **4** (2008) 377.
- [30] X. Wang, X. Li, L. Zhang, Y. Yoon, P. Weber, H. Wang, J. Guo, H. Dai, *Science* **324** (2009) 768.
- [31] S. Y. Zhou, D. A. Siegel, A. V. Fedorov, A. Lanzara, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008) 086402.
- [32] W. Chen, S. Chen, D. Qi, X. Gao, A. Wee, *J. Am. Chem. Soc.* **129** (2007) 10418.
- [33] H. Pinto, R. Jones, *J. Phys.: Condens.Matter.* **21** (2009) 402001.
- [34] H. P. Boehm, R. Setton and E. Stumpp, *Pure Appl. Chem.* **66** 9 (1994) 1893-1901.
- [35] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81** (2009) 1.
- [36] B. Partoens and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 075404.
- [37] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (non-relativistic theory)*. Pergamon, Oxford (1958).
- [38] S. Reich, J. Maultzsch, and C. Thomsen, *Phys. Rev. B* **66** (2002) 035412.
- [39] R. Saito. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press 203 Electrical Engineering Building. London.

- [40] R. S. Deacon, K. C. Chuang, R. J. Nicholas, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 081406(R).
- [41] A. C. Fernández. Propiedades físicas de grafeno con desorden topológico, Tesis, Universidad Carlos III de Madrid, Leganés, Madrid (2007).
- [42] N. M. Peres, A. H. Castro Neto, and F. Guinea, *Phys. Rev. B* **73** (2006) 195411.
- [43] C. Bena, and G. Montambaux, arxiv:0712.0765v1[cond-mat.mes-hall]5Dec2007.
- [44] Alan Berzi, Relativistic Fermions in Graphene, Masteroppgave Institutt for fysikk, NTNU (2012).
- [45] C. Monte do Nascimento, Transporte eletrônico em nanofitas de grafeno sob a influência de fatores externos, via primeiros princípios. Dissertação. Universidade Federal do Pará (2012).
- [46] J. M. Fonseca. Algumas contribuições ao estudo do grafeno e dos isolantes topológicos. Tese, Universidade Federal de Viçosa - Minas Gerais (2012).
- [47] M. Milnera, J. Kürti, M. Hulman, and H. Kuzmany, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 6.
- [48] S. Y. Medina. Efeitos da modulação de interferência quântica nas propriedades de transporte eletrônico em nanofitas armchair de Grafeno: Pseudo-spintrônica e análogo relativístico de Klein. Dissertação, Universidade Federal do ABC - Santo André (2009).
- [49] H. Guo, Ch. Chien, Y. He, arXiv:1211.3673v3[cond-mat.supr-con] 22Feb2013.
- [50] M. I. Katsnelson. K. S. Novoselov, *Solid State Communications* **143** (2007) 3-13.
- [51] S. R. Juárez Wysozka, *Revista Mexicana de Física E* **56(2)** (2010) 197-206.
- [52] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, arXiv:cond-mat 10703374v2. 6Jun2007.
- [53] L. A. Falkovsky and Pershoguba, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 153410.
- [54] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields, Vol I.* Cambridge University (1996).
- [55] M. Tinkham. *Group Theory and Quantum Mechanics*, Dover Publications 2003, under permission of McGraw-Hill, New York.
- [56] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory*, 2nd. ed., Cambridge University Press (1996).
- [57] W. Greiner, J. Reinhardt, *Field Quantization*, 1st. ed., Springer-Verlag Berlin (1996).

- [58] Hendrik van Hees, Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Fakultät für Physik Universität Bielefeld Universitätsstr. 25 D-33615 Bielefeld, 25th June 2003.
- [59] Irina V. Lebedeva, Andrey A. Knizhnik, Andrey M. Popov, Olga V. Ershova, Yurii E. Lozovik, and Boris V. Potapkin, Phys. Rev. B **82** (2010) 155460.
- [60] J. W. McLure, Phys. Rev. **108** (1957) 612.
- [61] C. A. Dartora. G. G. Cabrera, Phys. Rev. B **87** (2013) 165416.
- [62] F. J. L. Rodríguez, Transporte de carga en grafeno bajo radiación electromagnética. Tesis, Universidad Nacional Autónoma de México (2010).
- [63] D. S. L. Abergel, E. H. Hwang, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **83** (2011) 085429.
- [64] N. Tombros, S. Tanabe, A. Veligura, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, and B. J. Van Wees, Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 046601.
- [65] Y. Song, H.-Chun Wu, and Y. Guo, Appl. Phys. Lett. **102** (2013) 093118.
- [66] V. H. Nguyen, A. Bournel, and P. Dollfus, J. Appl. Phys. **109** (2011) 093706.
- [67] M. S. Jimenez. C. A. Dartora, Physica E **59** (2014) 1-5.
- [68] A. B. Kaiser, C. G. Navarro, R. S. Sundaram, M. Burghard, and K. Kern, Nano Lett. **9** 5 (2009) 1787-1792.
- [69] P. G. O'regan, The Application of Diodes to Switching and Logical Circuits, Tesis by Doctor of Philosophy, California institute of Technology, Pasadena California (1964).
- [70] Hong-Hyun Park, Z. Jiang, A. G. Akkala, S. Steiger, M. Povolotskyi, T. C. Kubis, J. M. D Sellier, Y. Tan, S. Kim, M. Luisier, S. Agarwal, M. McLennan, G. Klimeck. "Resonant Tunneling Diode Simulation with NEGF," <https://nanohub.org/resources/rtdnegf>. (DOI: 10.4231/D3DZ03144).
- [71] C. A Dartora, M. J. Saldaña e F. Zanella, Rev. Bras. Ensino Fís. **37** (2015) 3.
- [72] L. M. G. Furtado, P. M. Jorge, R. A. Campos e V. M. Braconi, Introdução à Álgebra Tensorial. Curso Ciência da Computação , Universidade Católica de Petrópolis (UCP) (1998).
- [73] J. D. Jackson, Classical Electrodynamics. Wiley, N.Y. (1975).
- [74] J. C. Brant. Transporte elétrico em nanoestruturas de grafeno: influência da funcionalização, da geometria e da dopagem do substrato. Tese, Universidade Federal de Minas Gerais (2011).