



Universidade Federal Rural de Pernambuco

Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação

Departamento de Física

Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada

Estudo do transporte eletrônico de uma super-rede de grafeno
segundo o modelo de Aubry-André-Harper

Fernando Wesley Pinheiro Brito

Dissertação de Mestrado

Recife-PE
2022

Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Departamento de Física

Fernando Wesley Pinheiro Brito

**Estudo do transporte eletrônico de uma super-rede de grafeno
segundo o modelo de Aubry-André-Harper**

Trabalho apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada do Departamento de Física da Universidade Federal Rural de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física Aplicada.

Orientador: Prof^o Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima

**Recife - PE
25 de Agosto de 2022**

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA APLICADA

**Estudo do transporte eletrônico de uma super-rede
de grafeno seguindo o modelo de
Aubry-André-Harper**

Fernando Wesley Pinheiro Brito

Dissertação julgada adequada para obtenção
do título de mestre em Física, defendida e
aprovada por unanimidade em 25/08/2022
pela Comissão Examinadora.

Orientador:

Prof. Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima
SEDE-UFRPE

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Jonas Romero Fonseca de Lima
SEDE-UFRPE

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra
SEDE-UFAL

Prof. Dr. Anderson Luiz da Rocha Barbosa
SEDE-UFRPE

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus pelo discernimento de realizar este trabalho.

Aos meus familiares, especialmente minha mãe Márcia, meu pai Celso, meu sobrinho João Guilherme, meu primo Felipe e minha avó Maria Lúcia.

Agradecimento especial para minha noiva Andressa Rocha, por toda consideração e incentivo.

Agradeço também aos meus amigos que me ajudaram direta e indiretamente: Mateus Rêgo, Higor Bezerra, Ricardo Gomes, Gabriel Fontinele, Nadson Trindad e Edilson Henos.

Agradeço aos meus colegas de turma: Yuri Tavares, Wilma Lima, Edivan Amâncio, Marcos Coelho, Willams dos Santos e Maylson Marckesan.

Agradecimento especial para meu orientador que teve muita paciência, Professor Jonas e também ao professor Anderson.

Agradeço também a todos os professores que ministraram disciplinas nestes 2 anos atípicos. Agradeço a Fapema pelo apoio financeiro.

”A maravilhosa disposição e harmonia do universo só pode ter tido origem segundo o plano de um Ser que tudo sabe e tudo pode. Isso fica sendo a minha última e mais elevada descoberta.”

(Isaac Newton)

Resumo

O grafeno é um dos alótropos do carbono e foi descoberto em 2004. Com as suas propriedades eletrônicas distintas em relação a outros materiais, a comunidade científica voltou os olhos para o grafeno, onde, diversos estudos foram realizados até os dias atuais. Neste material, as quasipartículas (elétrons e buracos) se comportam como férmions relativísticos sem massa. Um sistema que têm despertado grande atenção são as super-redes de grafeno, pois é possível controlar as propriedades eletrônicas do grafeno neste sistema, levando à possibilidade de mais variadas aplicações. As super-redes podem ser finitas e infinitas, sendo classificadas em periódicas, aleatórias ou quase periódicas. A estrutura da super-rede de grafeno pode ser modulada por barreiras magnéticas, potenciais eletrostáticos, por barreiras de velocidade de Fermi, etc. Neste trabalho, a super-rede de grafeno é modulada através de barreiras de potencial quase-periódicas, mais especificamente as larguras destas barreiras, e segue o modelo de Aubry-André. Consideramos aqui o modelo contínuo, usando o Hamiltoniano de Dirac efetivo que descreve as excitações eletrônicas de baixas energias no grafeno. Utilizando o método da matriz de transferência, obtemos os coeficientes de transmissão, sendo primordial para a análise do transporte eletrônico no sistema juntamente com os potenciais quasi-periodicos de Aubry-André.

Palavras-chave: Super-rede de Grafeno; Modelo de Aubry-André; Transporte Eletrônico.

Abstract

Graphene is one of the allotropes of carbon and was discovered in 2004. With its different electronic properties compared to other materials, the scientific community turned its eyes to graphene, where several studies have been carried out until the present day. In this material, the quasiparticles (electrons and holes) behave like massless relativistic fermions. A system that has attracted great attention is the graphene superlattice, as it is possible to control the electronic properties of graphene in this system, leading to the possibility of more varied applications. Superlattice can be finite and infinite, being classified as periodic, random or quasi-periodic. The graphene superlattice structure can be modulated by magnetic barriers, electrostatic potentials, Fermi velocity barriers, etc. In this work, the graphene superlattice is modulated through quasi-periodic potential barriers, more specifically the widths of these barriers, and follows the Aubry-André model. We consider here the continuous model, using the effective Dirac Hamiltonian that describes the low-energy electronic excitations in graphene. Using the transfer matrix method, we obtain the transmission coefficients, being essential for the analysis of the electronic transport in the system together with the quasi-periodic potentials of Aubry-André.

Keywords: Graphene Superlattice; Aubry-Harper Model; Electronic Transport

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Grafeno: Propriedades, estrutura eletrônica e suas aplicações	4
2.1	Carbono	4
2.2	Grafeno: Propriedades e aplicações	5
2.2.1	Grafeno	5
2.2.2	Propriedades	6
2.2.3	Aplicações	7
2.3	Hibridização e as ligações químicas	7
2.3.1	Hibridização	7
2.3.2	Ligações Químicas	11
2.4	Estrutura Favo de Mel do grafeno	12
2.5	Modelo de ligação forte para os primeiros vizinhos	15
2.6	Bandas de Energia no Grafeno	22
3	Super-redes de Grafeno	30
3.1	Super-redes	30
3.2	Modelo de Anderson	33
3.3	Modelo de Aubry-André-Harper	37
3.4	Modelo contínuo para uma super-rede de grafeno	38
3.5	Super-redes de grafeno finita	41
3.6	Potencial de Aubry-André no Hamiltoniano de Dirac	53
4	Resultados	54
5	Conclusão	62

Lista de Figuras

2.1	Configuração eletônica do carbono.a) Estado fundamental e b) excitado do carbono.	4
2.2	Estrutura hexagonal do grafeno em 2 dimensões.	6
2.3	Alótropos do Carbono.a)Diamante; b)Grafite; c) Lonsdaleíta; d)C ₆₀ ; e)C ₅₄₀ ; f)C ₇₀ ; g)Carbono Amorfo; h)Nanotubo de Carbono.	8
2.4	Diagramas das hibridizações sp , sp^2 , sp^3 com os orbitais representados em cada um dos eixos cartesianos. Modificado de [76].	10
2.5	Ligação π e σ esquematizadas.	11
2.6	Em azul são átomos de carbono da sub-rede A e em vermelho são átomos de carbono da sub-rede B. Os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são da rede direta.	12
2.7	Orbitais hibridizados sp^2 no plano cartesiano (x, y) e orbital $2p_z$ perpendicular ao plano. Modificado de [82].	14
2.8	Vetores da rede recíproca na estrutura hexagonal.	15
2.9	Os primeiros e segundos vizinhos no espaço real da rede hexagonal do grafeno.	17
2.10	Representação dos 3 primeiros vizinhos da sub-rede A: $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$	19
2.11	Primeira zona de Brillouin na rede hexagonal no espaço recíproco do grafeno.	20
2.12	Bandas de energia do grafeno com ampliação em um dos pontos de Dirac. Modificado da referência [96].	21
2.13	Primeira Zona de Brillouin mostrando os pontos de Dirac \vec{k} e \vec{k}' no espaço recíproco.	22
2.14	Bandas de energia de valência (inferior) e condução (superior) da monocamada de grafeno na primeira zona de Brillouin. Entre as duas bandas temos a superfície de Fermi.	26
2.15	Banda de Condução em 2D na primeira zona de Brillouin	26
2.16	Banda de Valência em 2D na primeira zona de Brillouin.	27

3.1	Super-rede de grafeno na sequência de Fibonacci. Em a) segue na terceira geração de Fibonacci. b) Disposição dos potenciais.	31
3.2	Super-rede de grafeno na sequência de Thue-Morse em S_4 . Em a) segue na quarta sequência Thue-Morse. b) Disposição dos potenciais.	31
3.3	Super-rede de grafeno na sequência de Cantor. Em a) e b) são as gerações. c) Disposição dos potenciais em S_2	32
3.4	Em a) disposição dos potenciais em S_3 e em b) geração de S_1 até S_3	33
3.5	Alguns defeitos que podem ser encontrados na rede. (a) Íons estranhos ou falta de alguns na rede. (b) Presença de irregularidades espaciais. (c) Combinação de (a) e (b).	33
3.6	Representação da função de onda estendida (a) e localizadas (b).	34
3.7	Esquema de um sistema unidimensional de sítios i.	36
3.8	Ilustração do modelo bidimensional de Aubry-André. (a) Rede com distância d entre os átomos e (b) com a presença do potencial do modelo.	38
4.1	Gráfico de contorno da transmissão em função da energia e w_0 que está associada a desordem que aplicamos ao sistema.	54
4.2	Gráficos de Transmissão por Número de Barreiras para $w_0 = 10$ nm. (a) $\nu = 0,2$. (b) $\nu = 0,4$. (c) $\nu = 0,6$. (d) $\nu = 0,8$	57
4.3	Gráficos da transmissão em relação ao número de barreiras, com energia fixada em 0,06 eV e w_0 alternando em 10 nm, 29 nm e 30 nm. Das letras (a) - (c) $\nu = 0,2$ e de (d) - f) $\nu = 0,4$	58
4.4	Gráficos da transmissão em relação ao número de barreiras, com energia fixada em 0,06 eV e w_0 alternando em 10 nm, 29 nm e 30 nm. Das letras (a) - (c) $\nu = 0,6$ e de (d) - f) $\nu = 0,8$	59
4.5	Gráfico de contorno para valores de ν acima de 1. a) $\nu = 1,2$. b) $\nu = 1,4$. c) $\nu = 1,6$. d) $\nu = 1,8$	60
4.6	Gráficos da transmissão em relação ao número de barreiras, com energia fixada em 0,01 eV e $w_0 = 10$ nm. Das letras (a) $\nu = 1,2$. (b) $\nu = 1,4$. (c) $\nu = 1,6$. (d) $\nu = 1,8$	61

4.7	Gráfico de contorno e gráfico da transmissão em relação ao número de barreiras para $\nu = 2$	61
-----	---------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Capítulo 1

1 Introdução

Nos campos de atuação da Física encontramos a Física da Matéria Condensada, que trata das propriedades físicas da matéria na fase densa, onde o número de elementos constituintes de um sistema é elevado, podendo ser elétrons ou átomos, e a força das interações que podem ocorrer entre eles[1,2]. Dentre esses compostos condensados, podemos citar alguns exemplos como sólidos e líquidos, além de alguns superfluidos e supercondutores[3,4]. Dentro da Física da Matéria Condensada ocorre ainda a associação da mecânica quântica com a física estatística que permitiu o surgimento e desenvolvimento da chamada Física do Estado Sólido, que estuda especialmente os materiais sólidos, bem como os sólidos amorfos e os líquidos[5,6]. Hoje em dia a Física da Matéria condensada é o maior campo da física contemporânea e o que possui maior impacto no desenvolvimento tecnológico com suas inúmeras aplicações [7,8].

Como um dos principais focos da Física do Estado sólido é estudar as propriedades de um material sólido, os cristais ganharam bastante destaque neste campo [9,10]. Nos últimos anos surgiram os materiais denominados como cristalinos bidimensionais e um dos primeiros materiais classificados nesta nova classe foi o grafeno [11,12]. O grafeno é um dos alótropos do carbono, composto por uma monocamada de átomos de carbono que formam uma estrutura cristalina análoga ao favo de mel[13,14,15]. Somente em 2004, uma equipe liderada por Andre K. Geim e Konstantin S. Novoselov conseguiu produzir o material utilizando uma técnica simples de clivagem mecânica, extraindo finas camadas do cristal de grafite, e neste momento foi possível observar o grafeno experimentalmente pela primeira vez [16,17]. Com este feito os professores ganharam o Prêmio Nobel de 2010 [18].

O grafeno deu origem a um novo paradigma de física “relativística” da matéria condensada por conta das suas propriedades eletrônicas incomuns, uma vez que seus portadores de carga (elétrons e buracos) se comportam como férmions relativísticos sem massa nos

chamados pontos de Dirac, onde as bandas de valência e de condução se tocam, sustentando o fato do grafeno ter um gap nulo [19,20,21]. Isso quer dizer que os elétrons no grafeno podem ser descritos pela equação de Dirac e que em baixas energias apresentam o fenômeno relativístico denominado como tunelamento de Klein, que resulta na transmissão total dos elétrons em barreira independente de seu tamanho ou largura [22,23,24]. Com a ampla possibilidade de aplicação do grafeno, os estudos sobre o material continuam, e nos últimos anos a atenção tem sido voltada para as super-redes de grafeno. Nesses sistemas é possível controlar as propriedades eletrônicas do grafeno, possibilitando o aumento das diversas aplicações já existentes [25]. Existem três modelos de super-redes distintas, divididas em: periódicas (ordenado) [26,27], aleatórias (desordenado) [28] e quasi-periódicas, sendo que as quasi-periódicas são classificadas como um sistema intermediário entre o ordenado e o desordenado [29,30]. Conseqüentemente, cada um dos casos apresentados possui propriedades eletrônicas distintas. A formação das super-redes quasi-periódicas pode seguir fórmulas de recorrência que se configuram como sequências de Fibonacci [31,32], periódica dupla [33], Cantor [34] ou Thue-Morse [35,36,37]. As estruturas das super-redes podem ser formadas por potenciais eletrostáticos [38,39], por barreiras magnéticas [40,41,42], combinação de ambos [43] por deformações [44] ou por barreiras na velocidade de Fermi [45].

Além das sequências mencionadas anteriormente em que as super-redes se arranjam, existe mais uma maneira de se obter quasi-periodicidade que é com barreiras seguindo o modelo de Aubry-André [46,47]. Embora as propriedades eletrônicas e de transporte no grafeno com diferentes tipos de super-redes já tenham sido bastante estudadas, não se têm registros de estudos de uma super-rede de grafeno com barreiras seguindo o modelo de Aubry-André [48,49]. Esse modelo é utilizado para estudar a dinâmica de partículas em uma dimensão em sistemas quasi-periódicos e vem sendo bastante estudado nas últimas décadas, principalmente para auxiliar no entendimento teórico das propriedades de transporte e da localização de Anderson em muitos sistemas, demonstrando a diversidade de transições entre fases metálicas, críticas e isolantes [50]. Contudo, é nosso objetivo estudar as propriedades de transporte em uma super-rede de grafeno com barreiras seguindo uma

distribuição dada pelo modelo de Aubry-André, especialmente modulando as larguras dessas barreiras.

Neste trabalho, consideramos uma super-rede de grafeno com potenciais, seguindo o modelo de Aubry-André, onde as larguras das barreiras obedecem a quasi-periodicidade e os elétrons são descritos pela equação de Dirac. As barreiras são moduladas por um cosseno que será o responsável pela quasi-periodicidade, e w_0 e ν que apresentarão mais influências nas barreiras, e conseqüentemente, na formação dos estados metálicos e isolantes. Este trabalho está estruturado em 5 capítulos: no capítulo 1 temos a introdução, o capítulo 2 apresenta as propriedades, a estrutura eletrônica e as aplicações do grafeno. Nele, partimos de sua formação através do carbono, compreendendo-a em estrutura e propriedades, com o modelo de ligação-forte (*tight – binding*). Posteriormente, usamos a equação de Dirac para mostrar que em baixas energias a equação governa os portadores de carga tratando-as como partículas relativísticas sem massa. O capítulo 3 é voltado para super-redes, bem como sua formação e arranjo quasi-periódico seguindo os modelos de Fibonacci, Thue-Morse, Cantor e Double-Periodic. Descrevemos alguns modelos que foram importantes para o desenvolvimento do entendimento do transporte eletrônico no material, como no caso do Modelo de Anderson, um pouco do modelo de Bloch, e por fim o modelo usado neste estudo que é do Aubry-André. Por fim, ainda no capítulo 3, usando o método de matriz transferência, mostramos a equação do coeficiente de transmissão em super-rede de grafeno. No Capítulo 4 seguimos com os resultados acerca da transmissão em determinadas regiões da super-rede, definindo-as em metálicas e isolantes, e as influências de w_0 e ν para a ocorrência dessas fases. Finalizando no capítulo 5 com conclusões deste trabalho.

Capítulo 2

2 Grafeno: Propriedades, estrutura eletrônica e suas aplicações

2.1 Carbono

Carbono é um dos elementos químicos fundamentais para os organismos naturais[51]. Não-metálico e não-magnético, o carbono pertence ao grupo IV da tabela periódica e é bastante comum na produção de diversos sólidos cristalinos[52]. Embora muito distribuído pela natureza, o carbono não é abundante, pois cerca de 0,025% compõe a crosta terrestre. Como diferencial, o carbono é o elemento que mais forma compostos do que todos os outros elementos químicos combinados[53]. Conforme a figura 2.1¹, o número atômico do carbono é 6 com 4 elétrons na camada de valência. O estado mais estável (estado fundamental) dele apresenta a configuração $1s^2, 2s^2, 2p^2$ e o estado excitado apresenta a configuração $1s^2, 2s^1, 2p^3$.

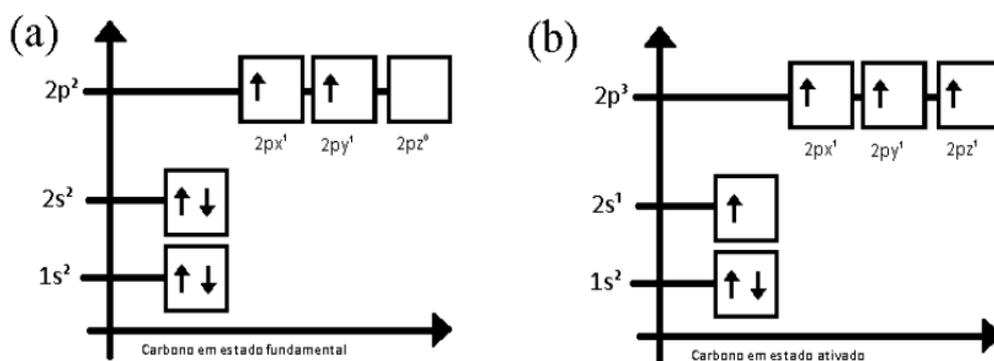


Figura 2.1: Configuração eletrônica do carbono. a) Estado fundamental e b) excitado do carbono.

Os elétrons na camada de valência estão distribuídos pelos orbitais $2s$ e $2p$ sendo eles os participantes das ligações com outros átomos para formação de compostos orgânicos. Os elétrons dos orbitais $1s$ são chamados elétrons de caroço e estão fortemente ligados

¹Disponível na referência [96]

ao núcleo, logo, não participam das ligações químicas. Para formação de cristais há uma hibridização dos orbitais $2s$ e $2p$. Isso significa que um dos dois elétrons do orbital $2s$ é excitado para o orbital $2p$ que no caso seria o $2p_z$ ² que não está ocupado[54].

2.2 Grafeno: Propriedades e aplicações

2.2.1 Grafeno

O grafeno é uma das formas alotrópicas do carbono, formado por monocamadas de átomos de carbono que se organizam hexagonalmente, logo, podemos inferir que o grafeno é uma das muitas camadas que constituem o grafite [55,56]. O grafeno é um material de estrutura bidimensional configurado em uma rede hexagonal plana, com átomos de carbono hibridizados em sp^2 , isto é, orbital- s e orbital- p sobrepostos. Este fenômeno ocasiona 3 ligações fortes do tipo σ e uma ligação do tipo π mais fraca, sendo a última, responsável pelas propriedades eletrônicas [57].

Desde a década de 1940, o empilhamento ordenado de grafeno vem sendo alvo dos estudos teóricos e experimentais. Mas somente em 2010, o grafeno, com estrutura sendo representado pela figura 2.2³, redeu um prêmio Nobel de Física para dois cientistas russos, Andre Geim e Konstantin Nuvoselov pela produção, caracterização, identificação e isolamento do material. Eles utilizaram fita adesiva para remover camadas de grafeno de cristais de grafite [58,59].

Muitas técnicas surgiram para obter o grafeno. Dentre elas, esfoliação química onde moléculas eram introduzidas quimicamente entre camadas de grafite que se entremeiam com as folhas de grafeno. Retirando as moléculas, as folhas de grafeno sobravam, mas por ser um método difícil de se realizar, as folhas de grafeno acabavam enrolando [60]. Outra técnica era por crescimento epitaxial por Deposição Química na Fase de Vapor de hidrocarbonetos em metais e a decomposição de carbonetos em silício sob tratamento térmico [61]. E chegamos ao método usado pelos russos de clivagem mecânica. Um pedaço de grafite é esfoliado mecanicamente diversas vezes sobre uma fita adesiva provocando uma

²O orbital $2p$ é o conjunto de orbitais $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$.

³Disponível em <https://e-fisica.fc.up.pt/fisica_n_a_p/conteudos/grafeno.html>

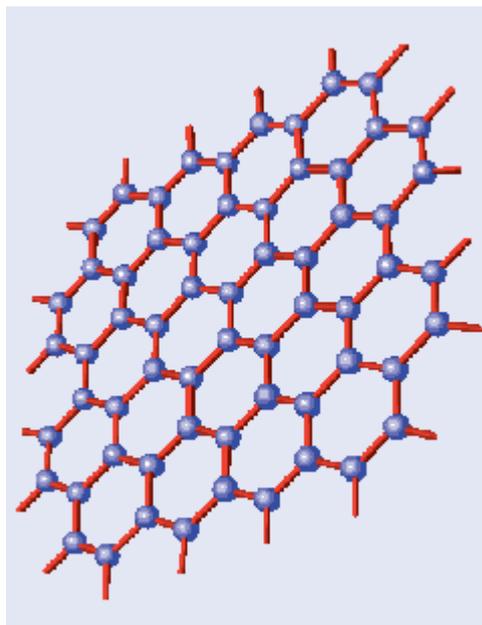


Figura 2.2: Estrutura hexagonal do grafeno em 2 dimensões.

separação da ruptura mecânica das camadas vizinhas. Depois, a fita adesiva com grafeno é fixada sobre um substrato, que normalmente é um substrato de silício com óxido de silício acrescido termicamente sobre ele [62]. A partir da espessura do óxido, é possível observar no microscópio o grafeno no substrato de óxido de silício quando a fita adesiva é retirada.

2.2.2 Propriedades

As evidências experimentais do grafeno são recentes embora existam muitos estudos computacionais. O grafeno é um material que permite passagem de aproximadamente 97,7% da luz visível, é mais resistente do que uma amostra de aço em que ambos possuam as mesmas dimensões e pode ser alongado em cerca de 20% sem sofrer rompimento. Já em suas propriedades térmicas e elétricas, a condução de calor e eletricidade do grafeno é melhor que a do cobre porque os elétrons se encontram deslocalizado [63].

Em estudos sobre a estrutura de bandas do grafeno em baixas energias, notou-se que estas bandas apresentavam uma dispersão da energia que era linear no vetor de onda, diferente do que era encontrado normalmente nos demais semicondutores. Esta relação de dispersão da energia do grafeno indica que para baixas energias, os tipos de excitações en-

contradas são idênticos para férmions de Dirac encontrados na Eletrodinâmica Quântica, com diferença apenas na velocidade das quasipartículas, onde no grafeno é igual a velocidade de Fermi, ou seja, $v_f = \frac{c}{300}$ com c sendo a velocidade da luz [64].

A propriedade óptica do grafeno de maior notoriedade é da absorção de luz. Estudos apontam que essa absorção é proporcional a quantidade de camadas do material, o que se evidencia no uso do grafeno em aplicações optoeletrônicas [65].

2.2.3 Aplicações

De um material praticamente impossível de existir a um material altamente aplicável, o grafeno se tornou, para a ciência, como um dos mais promissores nanomateriais por causa das suas propriedades térmicas, ópticas e elétricas [66]. A condução do grafeno é tão boa quanto de um metal, e essa condutividade pode ser controlada como acontece com semicondutores[67]. As aplicações e possíveis aplicações do grafeno surgem e avançam surpreendentemente. Por exemplo, na Indústria Energética, o grafeno pode ser aplicado em células solares, pois o material tem boa condutividade, é flexível e leve, três propriedades unidas que facilitam a aplicação das células em qualquer superfície. Na Medicina, pode ser usado no transporte de medicamentos quimioterápicos para tumores de pacientes com câncer. Observou-se que com grafeno, os medicamentos transportados conseguiam atingir melhor as células cancerígenas e diminuir a toxicidade nas células saudáveis [68]. Na Construção Civil, a aplicação do grafeno se dá no concreto, aumentando a sua resistência e impermeabilidade [69]. Na área de Eletrônicos, o grafeno pode ser utilizado em revestimentos para melhoramento das telas de toque em smartphones e tablets; em transistores, reduzindo e melhorando a utilização em circuitos e em baterias, aumentando drasticamente a vida útil ao torná-las leves, flexíveis e eficientes [70].

2.3 Hibridização e as ligações químicas

2.3.1 Hibridização

A hibridização acontece porque dois ou mais orbitais atômicos se sobrepõem. Para molécula de H_2 por exemplo, essa sobreposição tem início com a atração mútua entre

os elétrons e os núcleos dos átomos, causando uma distorção da nuvem eletrônica e da energia potencial, atingindo um valor mínimo. Desta forma os dois elétrons da molécula se emparelham, um *up* e um *down*, e formam uma ligação. Um orbital hibridizado pode ser criado através da sobreposição (no caso, uma combinação linear) de orbitais *s*, *p* e *d*, sendo que para o carbono ela acontece para *s* e *p*. Em outras palavras, podemos associar que essa sobreposição dos orbitais é como uma combinação linear das funções de ondas associadas aos elétrons que estão quase no mesmo nível de energia, o que é semelhante aos orbitais que os elétrons ocupam. A hibridização dos átomos de carbono levam à diferentes tipos de materiais com densidade, condutividade elétrica, específicas[71,72].

Na figura 2.3⁴ temos algumas formas alotrópicas do carbono como o diamante, grafite e o nanotubos de carbono. A formação dos alótropos do carbono se dá através das hibridizações do tipo *sp*, *sp*² e *sp*³ [73,74]:

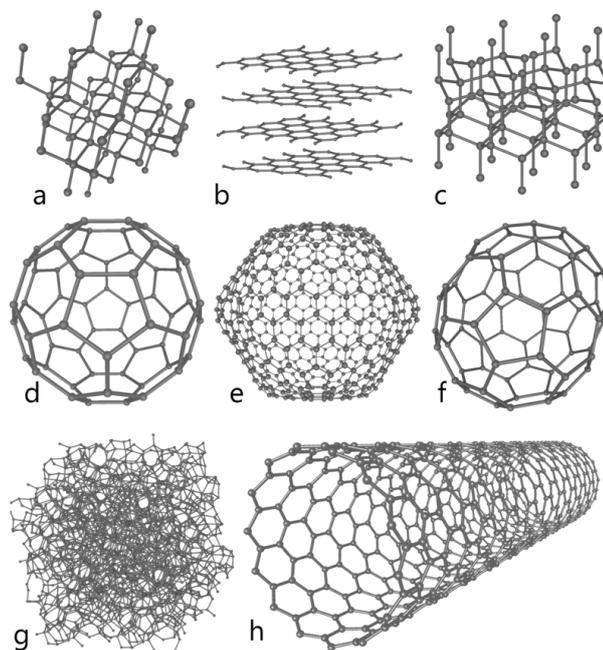


Figura 2.3: Alótropos do Carbono. a)Diamante; b)Grafite; c) Lonsdaleíta; d)C₆₀; e)C₅₄₀; f)C₇₀; g)Carbono Amorfo; h)Nanotubo de Carbono.

- Na hibridização *sp* temos a combinação linear de um orbital *2s* com um orbital *2p*, gerando assim dois orbitais híbridos *sp* com um ângulo de 180° entre eles, ou seja, é linear. As ligações entre os átomos de carbono são duas σ e duas π totalizando

⁴Disponível em < https://pt.wikipedia.org/wiki/Al%C3%B3tropos_do_carbono >

quatro ligações. Os outros dois orbitais $2p$ que não participam da hibridização se encontram perpendicular aos orbitais sp . Podemos representar matematicamente os orbitais hibridizados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} |2sp_a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle + |2p_x\rangle) \\ |2sp_b\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle - |2p_x\rangle) \end{aligned} \quad (2.1)$$

- Na hibridização sp^2 temos a combinação linear de um orbital $2s$ com dois orbitais $2p$, formando três orbitais híbridos sp^2 com um ângulo de 120° entre eles. Assim, um triângulo equilátero é gerado onde todos os orbitais hibridizados se encontram no mesmo plano (x,y). As ligações que ocorrem entre dois átomos de carbono no sp^2 é uma ligação dupla, uma do tipo σ e uma do tipo π , e duas ligações σ . Representando matematicamente os orbitais hibridizados, temos:

$$\begin{aligned} |2sp_a^2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|2s\rangle + \sqrt{2}|2p_x\rangle) \\ |2sp_b^2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|2s\rangle - \frac{|2p_x\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{\sqrt{3}|2p_y\rangle}{\sqrt{2}} \right) \\ |2sp_c^2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|2s\rangle - \frac{|2p_x\rangle}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{3}|2p_y\rangle}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned} \quad (2.2)$$

- Por último, a hibridização sp^3 acontece com a combinação linear de um orbital $2s$ com três orbitais $2p$ formando assim quatro orbitais hibridizados com um ângulo de $109,47^\circ$ entre eles. Os orbitais já se formam em três dimensões (x, y, z) e tem como uma figura um tetraedro. As quatro ligações que acontecem entre os átomos de carbono no sp^3 é somente do tipo σ . Matematicamente, os orbitais podem ser escritos como:

$$\begin{aligned}
 |2sp_a^3\rangle &= \frac{1}{2}(|2s\rangle + |2p_x\rangle + |2p_y\rangle + |2p_z\rangle) \\
 |2sp_b^3\rangle &= \frac{1}{2}(|2s\rangle + |2p_x\rangle - |2p_y\rangle - |2p_z\rangle) \\
 |2sp_c^3\rangle &= \frac{1}{2}(|2s\rangle - |2p_x\rangle + |2p_y\rangle - |2p_z\rangle) \\
 |2sp_d^3\rangle &= \frac{1}{2}(|2s\rangle - |2p_x\rangle - |2p_y\rangle - |2p_z\rangle)
 \end{aligned}
 \tag{2.3}$$

A figura 2.4⁵ apresenta os diagramas das três hibridizações possíveis para o carbono e como cada orbital se acomoda nos eixos de um plano cartesiano, podendo assim, ter uma melhor noção de como este fenômeno pode ser representado além da matematização.

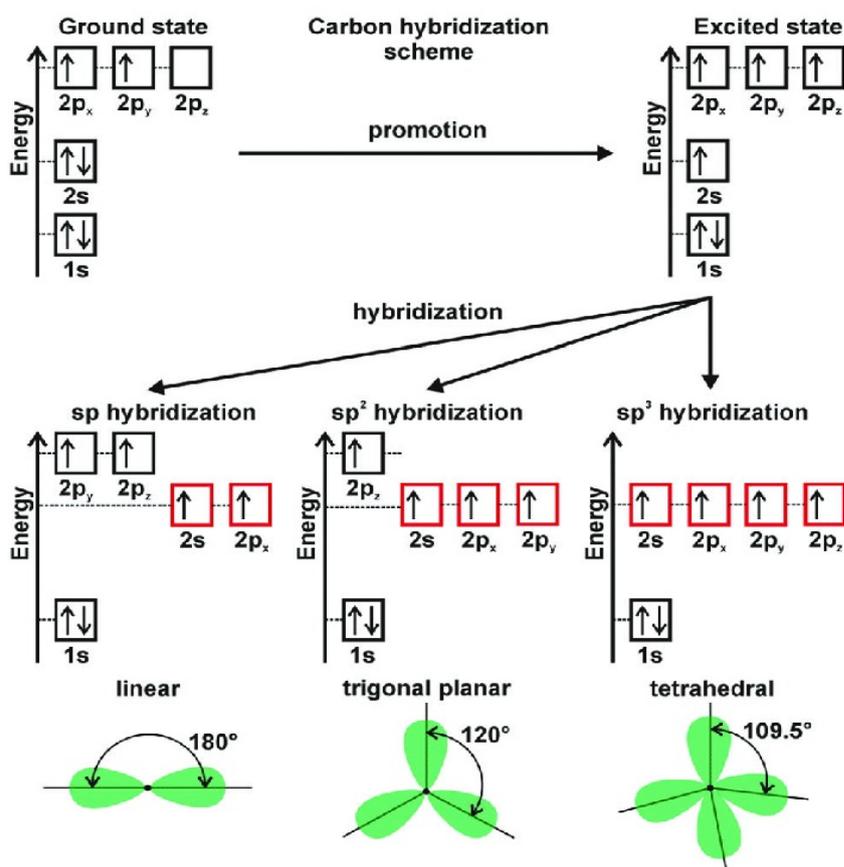


Figura 2.4: Diagramas das hibridizações sp , sp^2 , sp^3 com os orbitais representados em cada um dos eixos cartesianos. Modificado de [76].

⁵Disponível na referência [76].

2.3.2 Ligações Químicas

Existem três categorias de ligações estudadas em química orgânica sendo elas a metálica, iônica e covalente. Para nossos estudos apenas é necessária a ligação do tipo covalente. A ligação covalente é quando os átomos compartilham pares de elétrons, de modo a alcançar oito elétrons na camada de valência seguindo a regra do octeto. No caso do carbono onde possui quatro elétrons na camada de valência, ele deve realizar quatro ligações covalentes [71].

Como já foi mencionado, em todas as hibridizações do carbono temos exatamente quatro ligações acontecendo. No sp e sp^2 são as únicas hibridizações que podem acontecer as ligações do tipo π . Isso é motivado porque temos sempre algum orbital $2p$ (chamado orbital puro) que não foi hibridizado como no sp que têm dois orbitais $2p$ não hibridizados e no sp^2 com um orbital $2p$ não hibridizado [73].

As ligações σ são sempre mais fortes do que as ligações π , e o que diferem as duas é exatamente como elas acontecem. As ligações π ocorrem entre os orbitais $2p$ com uma sobreposição lateral entre eles, conforme a figura 2.5⁶. Já a ligação σ ocorre com uma sobreposição frontal (figura 2.6) entre os orbitais fazendo assim ela ser uma ligação mais forte [75,77].

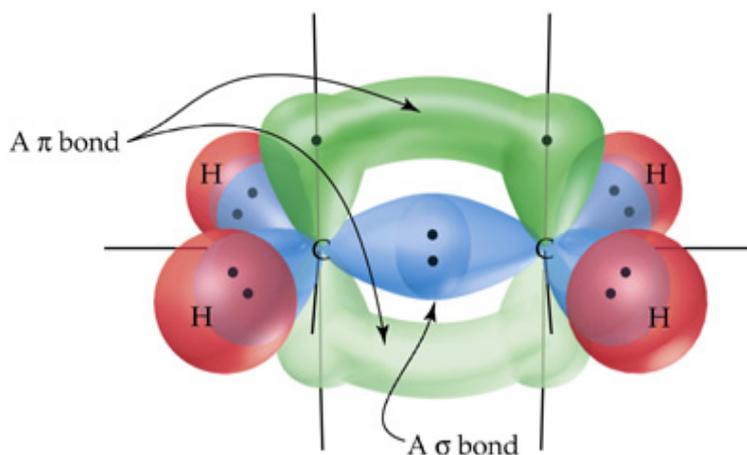


Figura 2.5: Ligação π e σ esquematizadas.

⁶Disponível em: <<https://socratic.org/questions/when-hybrid-orbitals-overlap-what-type-of-bonds-form407545>>

2.4 Estrutura Favo de Mel do grafeno

O grafite é formado por pilhas de camadas de grafeno que são mantidas através das forças de atração Van der Waals [78]. O termo Grafeno é a combinação do termo “grafite” com o sufixo “eno”, que foi denominado pelo químico alemão Hanns Peter Boehm. Mas somente em 2004 ele foi sintetizado por dois professores russos da Universidade de Manchester, Andre Geim e Konstantin Novoselov, que conseguiram isolar a monocamada de átomos de carbono e estudar suas propriedades físicas. Estes átomos de carbono formam uma estrutura hexagonal de duas sub-redes triangulares A e B[79,80,81].

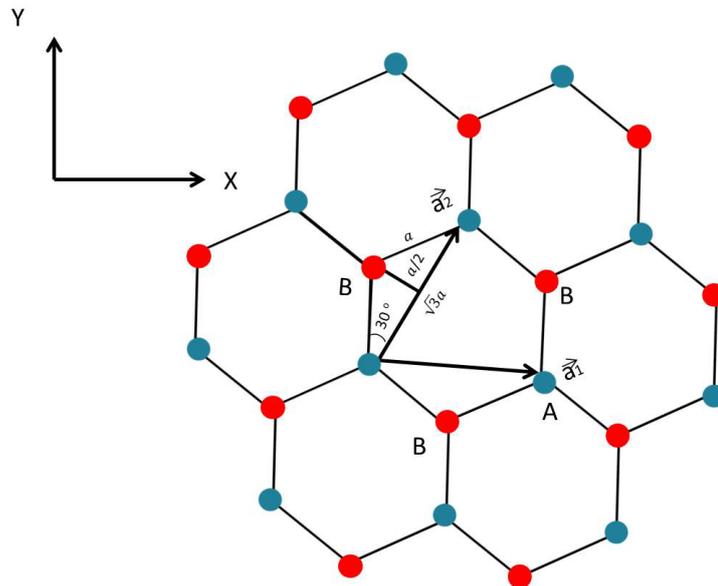


Figura 2.6: Em azul são átomos de carbono da sub-rede A e em vermelho são átomos de carbono da sub-rede B. Os vetores \vec{a}_1 e \vec{a}_2 são da rede direta.

Na figura 2.6⁷ temos pontos de cor azul e pontos de cor vermelha que determinam, respectivamente, átomos de carbono da sub-rede triangular A e átomos de carbono da sub-rede triangular B. Para auxiliar os estudos dos próximos tópicos, descreveremos a rede de grafeno em uma rede de Bravais e uma rede recíproca, ambas bidimensionais. Primeiramente, descrevendo como rede de Bravais, necessitamos de dois vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 , e uma base de átomos de carbono, formando assim, uma ligação de um átomo da sub-rede A com um de seus primeiros vizinhos da sub-rede B. Dessa forma, representaremos estes vetores como:

⁷Disponível na fonte [82]

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \sqrt{3}a\hat{x} = (\sqrt{3}a, 0), \\ \vec{a}_2 &= \sqrt{3}a \left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y} \right) = \left(\frac{\sqrt{3}a}{2}, \frac{3a}{2} \right), \end{aligned} \quad (2.4)$$

que estão em coordenadas cartesianas conforme a figura 2.8. O parâmetro de rede é $a = 1,42\text{Å}$ e determina a distância entre os átomos de carbono na rede hexagonal. A rede favo de mel tem um hexágono de lado a em que $1/3$ de átomos de carbono estão presentes em cada um de seus 6 vértices, cujo pode ser deslocado em relação ao seu centro por translações do tipo $\mathbf{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2$, com n_1 e $n_2 = 0, 1, 2, 3\dots$ [82].

Conforme já mencionado, a estrutura cristalina do grafeno se forma através da hibridização sp^2 do carbono, com dois orbitais do tipo $2p$, $2p_x$ e $2p_y$ por exemplo, fazendo uma combinação linear com um orbital $2s$ gerando três orbitais hibridizados sp^2 em um plano cartesiano (x, y) e um ângulo de 120° entre eles. O orbital $2p_z$ é chamado orbital puro, não hibridiza com nenhum outro orbital e é perpendicular ao plano cartesiano conforme a figura 2.7⁸. As funções dos orbitais da equação 2.2 são ortogonais entre si no espaço de Hilbert e no espaço real formam um ângulo de 120° . Esses orbitais de um átomo de carbono, realizam três ligações fortes do tipo σ com outros átomos de carbonos vizinhos, onde estas ligações têm caráter direcional com dois elétrons de spins contrários, um 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. Dessa forma, a estrutura cristalina formada por estas ligações entre os carbonos forma a estrutura favo de mel [83,84].

As ligações π , em uma primeira aproximação, são responsáveis pelos fenômenos de transporte de carga e *spin*. Isso se dá porque em uma estrutura contendo vários átomos de carbono, seus orbitais $2p_z$ se sobrepõem (hibridizam) e formam uma nuvem eletrônica, que nada mais é do que vários orbitais $2p_z$ hibridizados, ou seja, várias ligações π . Essa nuvem eletrônica é conhecida como bandas de energia π (denominada menor energia ou banda de valência) e π^* (denominada maior energia ou banda de condução). Os elétrons

⁸Disponível na referência [82]

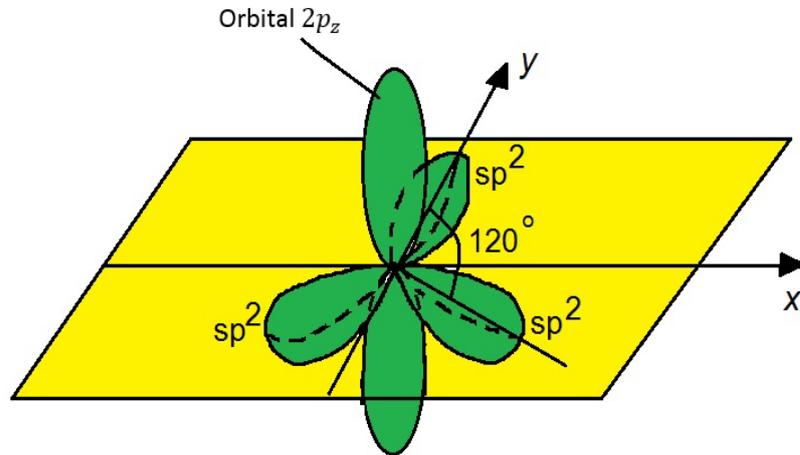


Figura 2.7: Orbitais híbridizados sp^2 no plano cartesiano (x, y) e orbital $2p_z$ perpendicular ao plano. Modificado de [82].

em π e π^* estão fracamente ligados ao átomo de carbono e se encontram muito mais próximo da superfície de Fermi que os elétrons em σ [85,86].

Na figura 2.8⁹ temos uma representação da rede recíproca com seus respectivos vetores. Para descrever a rede recíproca, utilizaremos os vetores da rede direta (de Bravais) para determinar os vetores da rede recíproca da seguinte maneira:

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

no qual \vec{z} é unitário perpendicular ao plano (x, y) da rede direta onde está contido a monocamada de grafeno[84].

⁹Disponível na referência [82].

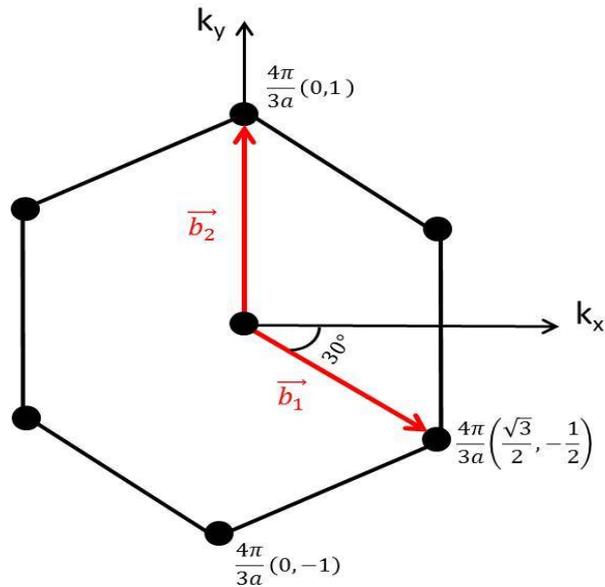


Figura 2.8: Vetores da rede recíproca na estrutura hexagonal.

2.5 Modelo de ligação forte para os primeiros vizinhos

O modelo de ligação forte (*tight-binding*) foi usada por P.R. Wallace, em 1947, como parte de uma solução das bandas de energia de grafite que são camadas de grafeno empilhadas[78,87]. As funções de ondas que descrevem a propagação dos elétrons em um cristal determinam funções de ondas cuja soluções são bem definidas em sítios da rede (orbitais atômicos) e outras soluções espalhadas pelo cristal. Assim a aproximação *tight-binding* considera os elétrons mais próximos de seus núcleos atômicos que estão fortemente ligados a estes elétrons. Os orbitais atômicos dos elétrons em questão, os descrevem com níveis de energia discretos. Devido ao arranjo atômico da estrutura cristalina, os orbitais atômicos se superpõem (principalmente entre os primeiros e segundos vizinhos) fazendo com que eles possam servir de base para montar o hamiltoniano responsável por descrever o transporte (e interações eletrônicas) de um átomo a outro em uma rede. Com a superposição ocasionada, os níveis de energia vão se unindo de tal maneira contínua, criando as bandas de energia[88,89]. Conhecendo a estrutura do grafeno, tanto no espaço real quanto no recíproco, usaremos o *tight-binding* nos elétrons dos orbitais $2p_z$ do material. O hamiltoniano que descreve o modelo de ligação forte considerando a probabilidade do

salto (*hopping*) do elétron entre os primeiros e segundos vizinhos é dado por[90,91]:

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

com a expressão 2.6 em termos de operadores criação e aniquilação de elétrons formulados em segunda quantização. Assim $\hat{a}_{i\sigma}$ e $(\hat{a}_{i\sigma}^\dagger)$ é um operador fermiônico que aniquila e cria, respectivamente, elétrons de spin verdadeiro $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no i -ésimo átomo da sub-rede A, analogamente $\hat{b}_{j\sigma}$ e $\hat{b}_{j\sigma}^\dagger$ é um operador fermiônico que aniquila e cria, respectivamente, elétrons na sub-rede B. A soma sobre primeiros e segundos vizinhos é denotado por $\langle ij \rangle$ e $\langle\langle ij \rangle\rangle$ respectivamente. O valor de t é de 2,8 eV e corresponde ao parâmetro de *hopping* (salto) entre os primeiros vizinhos, sendo maior, em aproximadamente uma ordem de magnitude que t' cujo valor é menor que 0,2 eV e corresponde ao *hopping* entre os segundos vizinhos. Desprezando o termo t' do hamiltoniano, simplificamos e temos uma boa aproximação do modelo, entretanto, é importante salientar que ao considerar t' as bandas de energia no grafeno apresentam um pequeno *gap* próximo aos pontos de Dirac. Para entender o arranjo atômico das sub-redes do grafeno, observamos a figura 2.9¹⁰, com átomos de cor azul são correspondentes a sub-rede A e da cor vermelha são correspondentes a sub-rede B. Se definirmos que o átomo de carbono central, que é da sub-rede A, está na posição A_0 ele tem como primeiros vizinhos 3 átomos de carbono da sub-rede B nas posições B_{11} , B_{12} e B_{13} . Como segundos vizinhos deste mesmo átomo central serão átomos da sub-rede A, que totalizam 6 e estão nas posições A_{21} , A_{22} , A_{23} , A_{24} , A_{25} e A_{26} e assim seria para toda rede de grafeno. Se analisarmos da mesma forma para um átomo da sub-rede B e o definindo como central, teremos o mesmo cenário mudando apenas o fato de que os primeiros vizinhos deste átomo seriam 3 da sub-rede A e os segundos vizinhos seriam os átomos da sub-rede B [84,90,92].

Para diagonalizar o hamiltoniano, escreveremos os operadores em termos de componentes de Fourier, com a transformação discreta de Fourier

¹⁰Disponível na referência [82].

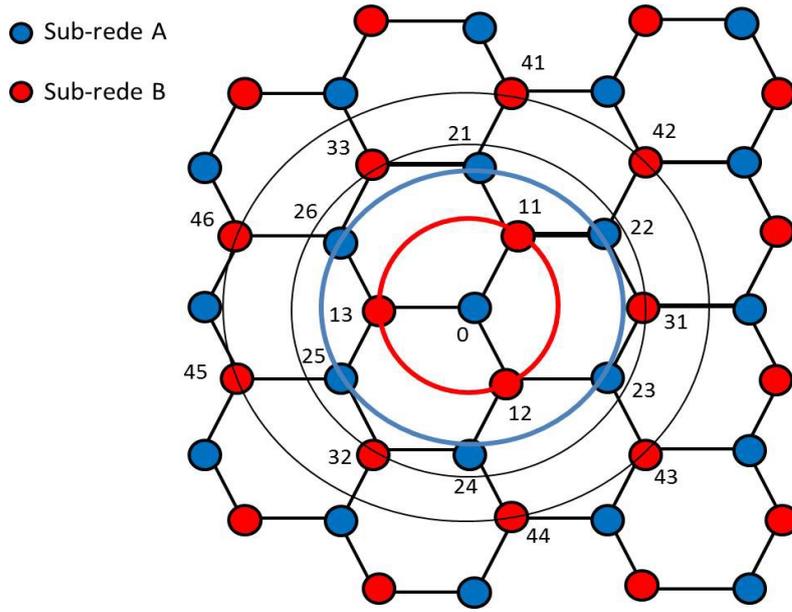


Figura 2.9: Os primeiros e segundos vizinhos no espaço real da rede hexagonal do grafeno.

$$\hat{a}_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (2.7)$$

$$\hat{a}_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (2.8)$$

$$\hat{b}_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \quad (2.9)$$

$$\hat{b}_{j\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j}. \quad (2.10)$$

O vetor \vec{k} é o chamado vetor de onda do espaço recíproco e corresponde a k_x e k_y . N equivale ao número total de átomos das sub-redes A e B . Substituindo os operadores, criação e aniquilação em termos da transformada de Fourier obtém-se:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}'\sigma} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} + \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \right). \quad (2.11)$$

Reescrevendo a expressão acima em termos das distâncias entres os sítios atômicos, temos que $\vec{r}_j = \vec{r}_j n = \vec{r}_i + \vec{\delta}_n$, com $\vec{\delta}_n$ é o vetor relativo entre um átomo que está na posição \vec{r}_i e seus primeiros vizinhos, assim:

$$\hat{H} = -t \sum_{\sigma} \left(\sum_{\vec{k}\vec{k}'} a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} b_{\vec{k}'\sigma}^{\dagger} \frac{1}{N} \sum_t e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{\delta}_n} + \sum_{\vec{k}\vec{k}'} b_{\vec{k}'\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \right). \quad (2.12)$$

O termo $\frac{1}{N} \sum_i \pm e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i}$ é o $\delta_{\vec{k}\vec{k}'}$, com $\vec{k} = \vec{k}'$ o delta equivale a 1 caso contrário ele é nulo. Destarte,

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \left(a_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} b_{\vec{k}\sigma}(-t) \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} + b_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} a_{\vec{k}\sigma}(-t) \sum_{n=1}^{n=3} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n} \right). \quad (2.13)$$

O termo $-t \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n}$ é o fator de estrutura da rede $g(\vec{k})$ que nos fornece informações sobre o espalhamento do material em relação à uma onda incidente (radiação), ou seja, as informações sobre a estrutura da rede que está sendo tratada, logo $g(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n}$ e $g^*(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^{n=3} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_n}$. O vetor $\vec{\delta}_n$ representa os primeiros vizinhos da sub-rede A ou B sendo definidos conforme a figura 2.10¹¹.

Conforme observado na figura 2.10 o vetor δ_n com $n = 1, 2$ e 3 conecta um átomo da sub-rede A aos átomos da sub-rede B. Matematicamente, esses vetores em coordenadas cartesianas no espaço direto na rede do grafeno são:

$$\vec{\delta}_1 = a\hat{y} \quad (2.14)$$

$$\vec{\delta}_2 = a \cos 30^\circ \hat{x} - a \sin 30^\circ \hat{y} = \frac{a}{2} (\sqrt{3}\hat{x} - \hat{y}) \quad (2.15)$$

$$\vec{\delta}_3 = -a \cos 30^\circ \hat{x} - a \sin 30^\circ \hat{y} = -\frac{a}{2} (\sqrt{3}\hat{x} + \hat{y}) \quad (2.16)$$

Retornando ao hamiltoniano, vamos escrever a equação 2.13 em termos dos fatores de estrutura da rede:

¹¹Disponível na referência [82].

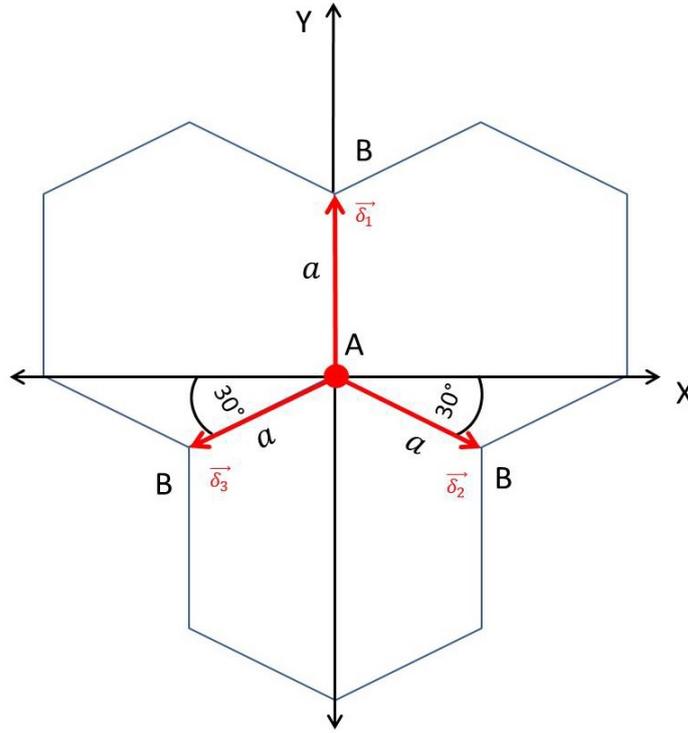


Figura 2.10: Representação dos 3 primeiros vizinhos da sub-rede A: $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$.

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} (g(\vec{k})a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} + g^*(\vec{k})b_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}) \quad (2.17)$$

dessa forma, os valores de δ_n com $n = 1, 2$ e 3 temos o fator de estrutura com:

$$g(\vec{k}) = -t \sum_{n=1}^{n=3} e^{i\vec{k}\cdot\delta_n} = -t \left(e^{i\vec{k}\cdot\delta_1} + e^{i\vec{k}\cdot\delta_2} + e^{i\vec{k}\cdot\delta_3} \right), \quad (2.18)$$

fazendo $\vec{k} = k_x\hat{x} + k_y\hat{y}$ na equação acima e realizando primeiro o produto escalar de \vec{k} com cada vetor δ_n , $n = 1, 2$ e 3 , temos:

$$\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1 = (k_x\hat{x} + k_y\hat{y}) \cdot (a\hat{y}) = k_y a \quad (2.19)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2 = (k_x\hat{x} + k_y\hat{y}) \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} \right) = \frac{\sqrt{3}}{2}ak_x - \frac{a}{2}k_y \quad (2.20)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3 = (k_x\hat{x} + k_y\hat{y}) \cdot \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y} \right) = -\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x - \frac{a}{2}k_y. \quad (2.21)$$

Substituindo as equações acima em $g(\vec{k})$ obtém-se:

$$g(\vec{k}) = -t(e^{ik_y a} + e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x} \cdot e^{-i\frac{a}{2}k_y} + e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x} \cdot e^{-i\frac{a}{2}k_y}). \quad (2.22)$$

Para simplificar, podemos substituir duas exponenciais por um cosseno através da relação $\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x) = \frac{1}{2}(e^{i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x} + e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x})$ multiplicando ambos os lados da equação por 2 chegamos em $2\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x)$, substituindo na equação 2.17 e colocando em evidência $e^{ik_y a}$:

$$g(\vec{k}) = -te^{iak_y} [1 + 2e^{-i\frac{3}{2}ak_y} \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x)]. \quad (2.23)$$

O conjugado de $g(\vec{k})$ o $g^*(\vec{k})$ é encontrado de forma análoga,

$$g^*(\vec{k}) = -te^{-iak_y} [1 + 2e^{i\frac{3}{2}ak_y} \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x)]. \quad (2.24)$$

Portanto, estas funções são as interações que acontecem entre os primeiros vizinhos nos espaços recíprocos k_x e k_y . Agora representaremos e estudaremos as propriedades da rede hexagonal do grafeno na primeira zona de Brillouin, ilustrada na figura 2.11¹², que fica no espaço recíproco \vec{k} .

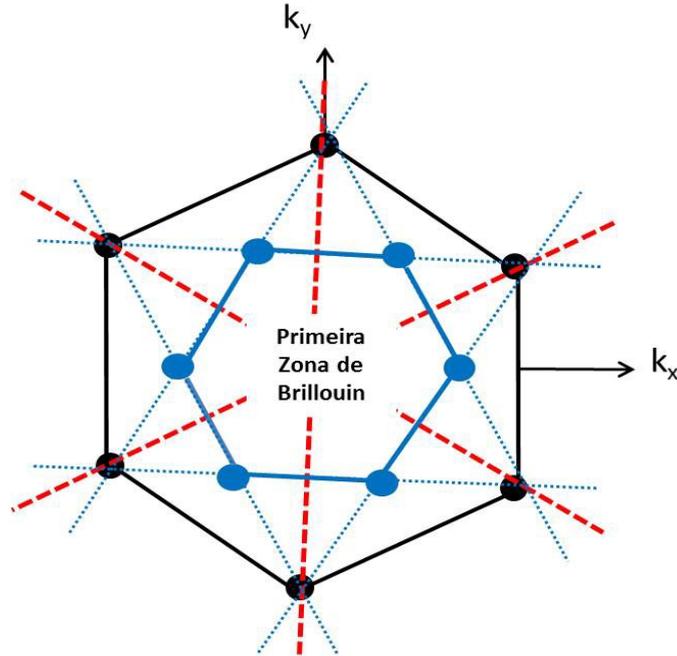


Figura 2.11: Primeira zona de Brillouin na rede hexagonal no espaço recíproco do grafeno.

¹²Disponível na referência [82.]

Como pode-se observar na figura acima, a primeira zona de Brillouin também é uma rede hexagonal que não apresenta uma origem na rede direta e recíproca, sendo obtida através do desenho das retas em vermelho, que são bisseccionadas pelas retas de cor azul[89,90,93,63,84]. Próximo aos vértices da primeira zona (pontos em azul), temos os chamados cones de Dirac (conforme a figura 2.12¹³), onde a dispersão da energia é linear, provocando um comportamento dos elétrons análogos aos de partículas relativísticas sem massa. Isso explica porque estes elétrons, em baixas energias, podem ser descritos pela equação de Dirac, como constataremos no próximo tópico de bandas de energia [94,95].

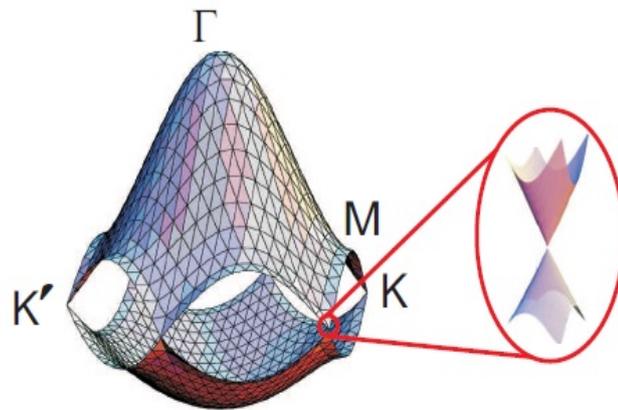


Figura 2.12: Bandas de energia do grafeno com ampliação em um dos pontos de Dirac. Modificado da referência [96].

Como podemos observar na figura 2.12 e na figura 2.13¹⁴, na primeira zona de Brillouin temos dois pontos \vec{K} e \vec{K}' que são chamados pontos de Dirac, com valores de $|\vec{K}| = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$ e $|\vec{K}'| = -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}$. São nestes pontos em que a banda de condução e a banda de valência se tocam formando os cones de Dirac. Devido à alta simetria de rede fornecida pela primeira zona de Brillouin é possível demonstrar as bandas de energia para a rede hexagonal do grafeno e é exatamente o que vai ser tratado no próximo tópico [96,97].

¹³Disponível na referência [96]

¹⁴Disponível na referência [82]

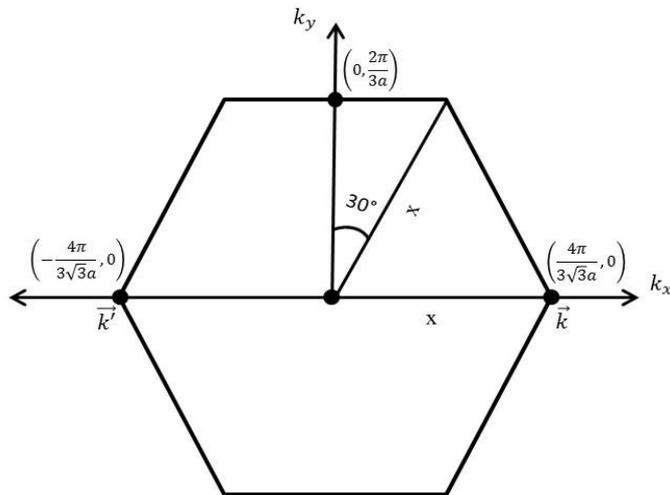


Figura 2.13: Primeira Zona de Brillouin mostrando os pontos de Dirac \vec{k} e \vec{k}' no espaço recíproco.

2.6 Bandas de Energia no Grafeno

Diagonalizando o hamiltoniano do espaço recíproco \vec{k} , vamos obter as bandas de energia do grafeno resolvendo o problema de auto-valores para o grafeno isolado [63]. Para isso, iremos usar a representação dos pseudo-spinores de Nambu, onde é possível escrever os operadores em forma de matrizes, no caso duas matrizes [98].

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} (g(\vec{k}) a_{\vec{k}\sigma}^\dagger b_{\vec{k}\sigma} + g^*(\vec{k}) b_{\vec{k}\sigma}^\dagger a_{\vec{k}\sigma}) = \sum_{\vec{k}\sigma} \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma} \\ b_{\vec{k}\sigma} \end{pmatrix} \cdot \hat{H}_0 \cdot \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger & b_{\vec{k}\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

com os pseudo-spinores $\psi_{\vec{k}\sigma} = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma} \\ b_{\vec{k}\sigma} \end{pmatrix}$ e $\psi_{\vec{k}\sigma}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\sigma}^\dagger & b_{\vec{k}\sigma}^\dagger \end{pmatrix}$, o hamiltoniano é expresso como:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\sigma} \psi_{\vec{k}\sigma}^\dagger \hat{H}_0 \psi_{\vec{k}\sigma}. \quad (2.26)$$

O hamiltoniano do grafeno \hat{H}_0 expresso em forma de matriz é

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & g(\vec{k}) \\ g^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Para determinar as auto-energias do hamiltoniano \hat{H}_0 dado pela matriz anterior, podemos introduzir uma matriz identidade I_ϵ de tal modo que

$$I_\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

onde

$$\begin{pmatrix} \epsilon & g(\vec{k}) \\ g^*(\vec{k}) & \epsilon \end{pmatrix} = 0 \quad (2.29)$$

de modo que

$$\det(\hat{H}_0 - I_\epsilon) = 0 \quad (2.30)$$

logo temos os seguintes auto-valores

$$\epsilon^2(\vec{k}) = |g(\vec{k})|^2. \quad (2.31)$$

Como sabemos os valores de $g(\vec{k})$ obtemos para $\epsilon(\vec{k})$

$$\epsilon_{\pm}(\vec{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_x\right) \cos\left(\frac{3}{2} a k_y\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}}{2} a k_x\right)} \quad (2.32)$$

Na equação 2.32 obtemos duas funções que definem as bandas de energia do grafeno (condução e valência), com $\epsilon_+(\vec{k})$ banda de maior energia e $\epsilon_-(\vec{k})$ banda de menor energia. Também são denominadas bandas π^* e π , respectivamente, possuindo um espectro de energia simétrico, ou seja, possui simetria partícula-buraco. O nível de Fermi do grafeno é neutro, pois o potencial químico dele $\mu(T=0) = E_F$ em $T=0$ passa por zero. Quando acontece excitação do sistema, os elétrons tendem a deixar a banda de valência e ocupar a banda de condução, cujo estados na banda de condução, é bem próximo dos estados definidos pelos pontos \vec{K} e \vec{K}' [99,100].

Primeiramente convém analisar as funções $g(\vec{k})$ exatamente nos pontos de Dirac, para isso, retornamos para a figura 2.14. Relacionando as componentes do vetor $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$

com o ponto de Dirac \vec{K} , como sendo $(k_x, k_y) = \left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$, temos para a equação 2.23:

$$\begin{aligned} g(\vec{k}) &= -te^{ia_0}\left[1 + 2e^{-i\frac{3}{2}a_0}\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\right)\right] \rightarrow \\ g(\vec{k}) &= -t\left[1 + 2\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right)\right] \rightarrow \\ g(\vec{k}) &= -t\left[1 + 2\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)\right] \rightarrow \\ g(\vec{k}) &= 0 \end{aligned} \quad (2.33)$$

Analisando agora a função $g(\vec{k})$ em torno dos pontos de Dirac e por onde passa o nível de Fermi (onde é possível ver que as bandas de energia se tocam e não existe *gap*). Para analisar tal situação, podemos expandir $g(\vec{k})$ em torno de $\vec{K}(\vec{K}')$ fazendo $\vec{k} = \vec{q} + \vec{K}$ com como sendo um vetor relativo.

$$g(\vec{q} + \vec{K}) \approx g(\vec{k}) + \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k})|_{\mathbf{k}=\mathbf{K}} = g(\vec{k}) + q_x \frac{\partial g(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} + q_y \frac{\partial g(\vec{k})}{\partial k_y} \Big|_{\vec{k}} \quad (2.34)$$

O termo $g(\vec{k})$ nos pontos de Dirac é zero, conforme já determinado na equação 2.33. Para os outros dois termos restantes usaremos novamente o fator de estrutura da rede equação 2.23, assim temos,

$$\frac{\partial g(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} = -t \left(2e^{-i\frac{a}{2}k_y} \cdot \left(-\sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_x\right) \right) \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}a \right) \quad (2.35)$$

substituindo k_y e k_x ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= t \left(2 \cdot \left(\sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}a\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}a \right) \right) \rightarrow \\ \frac{\partial g(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= t \left(2 \cdot \sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}a \right) a \rightarrow \\ \frac{\partial g(\vec{k})}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}} &= t\frac{3}{2}a. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Para o segundo termo, realizando os mesmos passos chega à $\frac{\partial g(\vec{k})}{\partial k_y} \Big|_{\vec{k}} = -i\frac{3}{2}at$. Agora

substituindo na equação 2.34,

$$g(\vec{q} + \vec{K}) \approx \frac{3}{2}at[q_x + q_y] = \frac{3}{2}at|\vec{q}|. \quad (2.37)$$

A constante $\frac{3}{2}at$ é a velocidade de Fermi v_F . O termo a corresponde ao parâmetro de rede do grafeno, $a = 1.42 \times 10^{-10}$ m, t é o termo de *hopping* $t = 2,8\text{eV}$ e logo a velocidade de Fermi é aproximadamente 1.0×10^6 m/s. Essa velocidade corresponde à 1/300 da velocidade da luz no vácuo, sendo assim, os elétrons só serão tratados como relativísticos apenas porque temos a teoria dos elétrons de Dirac. A constante $\frac{3}{2}at$ tem a unidade da constante de Planck vezes a velocidade de Fermi, logo podemos definir que,

$$|g(\vec{q} + \vec{K})| = \hbar v_F |\vec{q}|, \quad (2.38)$$

assim, como a energia ao quadrado é correspondente ao quadrado do fator de estrutura da rede podemos concluir que a energia para os pontos mais próximos ao ponto de Dirac \vec{K} é

$$\epsilon = \pm \hbar v_F |\vec{q}|. \quad (2.39)$$

Fazendo um paralelo com a dispersão de energia das partículas relativísticas $E^2 = (cp + m_0c^2)^2$ com $m_0 = 0$ e substituindo a velocidade da luz pela velocidade de Fermi, é possível observar semelhanças com a equação 2.39. Desta forma, confirma o que já foi falado sobre os elétrons se comportarem como partículas relativísticas, especialmente como sendo férmions de Dirac sem massa [97,101]. É possível atribuir uma pseudo-helicidade aos portadores de carga no grafeno. Este é um movimento dado pela projeção do pseudo-spin na direção do movimento dos portadores de carga, sendo negativa para os buracos e positiva para os elétrons [84]. Esta dispersão linear para a energia próxima ao ponto de Dirac é responsável por um grande movimento de elétrons, mesmo que a densidade eletrônica de portadores seja baixa próximo ao nível de Fermi. A figura 2.14¹⁵ apresenta a banda de valência e a banda de condução. A banda de valência se encontra abaixo do

¹⁵Disponível na referência [92].

nível de Fermi e completamente preenchida e a banda de condução se encontra acima do nível de Fermi é totalmente desocupada. Podemos ainda constatar que pela proximidade, apresentam um *gap* nulo [102,103].

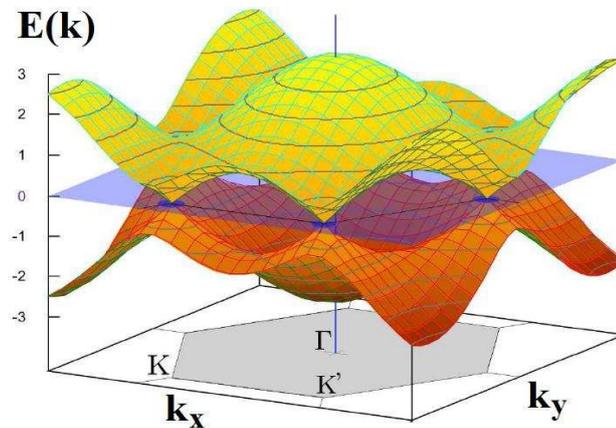


Figura 2.14: Bandas de energia de valência (inferior) e condução (superior) da monocamada de grafeno na primeira zona de Brillouin. Entre as duas bandas temos a superfície de Fermi.

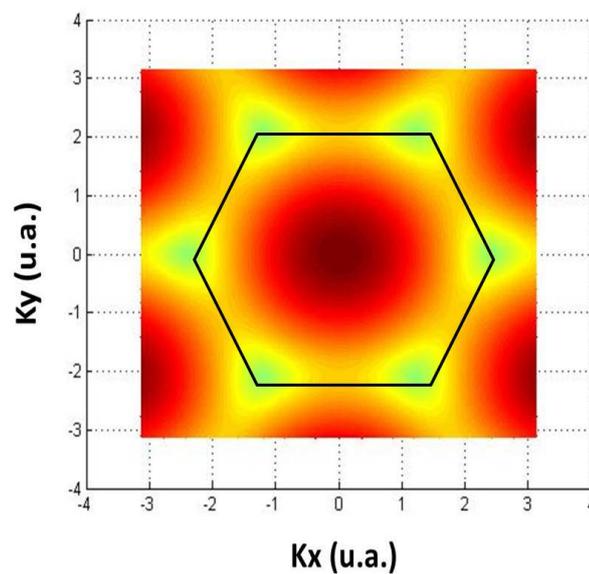


Figura 2.15: Banda de Condução em 2D na primeira zona de Brillouin

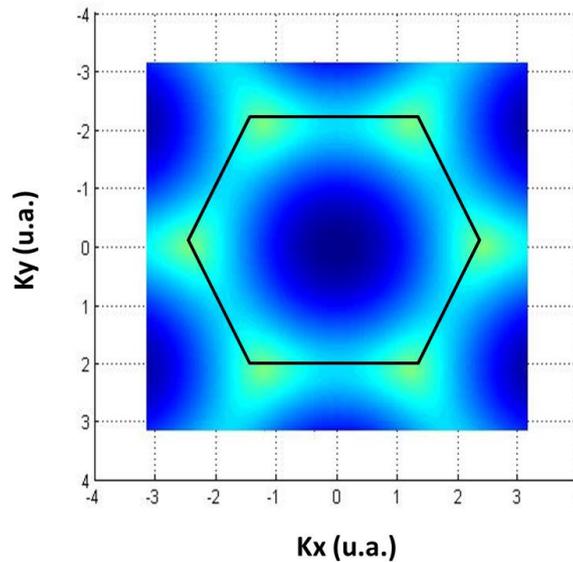


Figura 2.16: Banda de Valência em 2D na primeira zona de Brillouin.

Nas figuras 2.15¹⁶ e 2.16¹⁷ de uma vista superior, a banda de valência e de condução apresentam no centro um ponto. Na banda de valência temos um ponto azul escuro que mostra uma ocupação completa de elétrons e corresponde ao mais baixo nível de energia. Na de condução temos um ponto mais escuro se aproximando da cor preta que corresponde ao ponto de energia máximo totalmente desocupado de elétrons. A função $g(\vec{k})$ é nula nos pontos \vec{K} e \vec{K}' e também será nula nos outros quatro vértices do hexágono na primeira zona de Brillouin. Como já foi mencionado, a formação dos cones duplos de Dirac nas proximidades desses pontos de Dirac, nos dão as duas possíveis soluções da energia. Entretanto, temos apenas 1/3 de cada duplo cone de Dirac dentro da primeira zona de Brillouin, e isso nos dá, em uma conta simples, que apenas $6 \times 1/3 = 2$ cones duplos estão na primeira zona de Brillouin, são inequivalentes sendo formados nos pontos \vec{K} e \vec{K}' [79, 104, 105].

Para mostrar que o hamiltoniano do grafeno descreve um férmion de Dirac sem massa devemos considerar as matrizes de Pauli $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ sendo que:

¹⁶Disponível na referência [82]

¹⁷Disponível na referência [82]

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Substituindo o \hat{H}_0 no hamiltoniano de ligação forte da equação 2.26, com os valores de $g(\vec{k})$ sendo igual à energia para os pontos de Dirac (equação 2.39) temos:

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \psi_{\mathbf{q}\sigma}, \quad (2.41)$$

usando as matrizes de Pauli podemos reescrever o hamiltoniano como,

$$\hat{H} = \hbar v_F \sum_{\mathbf{q}\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}) \psi_{\mathbf{q}\sigma}, \quad (2.42)$$

onde o $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ e $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}) = \sigma_x q_x + \sigma_y q_y$. Se usarmos uma propriedade da função delta de Kronecker que nos diz: $\sum_q F_q G_q = \sum_q \sum_{q'} F_q G_{q'} \delta_{qq'}$. Sendo assim, $F_q = \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger$ $G_{q'} = \psi_{\mathbf{q}\sigma}$ e $\delta_{qq'} = \frac{1}{N} \sum_j e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_j}$. Portanto

$$\hat{H} = \hbar v_F \frac{1}{N} \sum_j \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'\sigma} \psi_{\mathbf{q}\sigma}^\dagger (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}') \psi_{\mathbf{q}'\sigma} e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_j}. \quad (2.43)$$

Fazendo o somatório em j ao limite do contínuo com $\psi_\sigma = \sum_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j}$, e $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{q}) = \sigma \cdot \nabla$, pois $\mathbf{q} = -i\nabla$ sendo que ∇ opera sobre as variáveis do espaço real. Então a equação 2.43 se torna:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \sum_{\sigma} \int d^2\mathbf{r} \psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{r}) (\vec{\sigma} \cdot \nabla) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (2.44)$$

Após o limite do contínuo ser tomado $d^2\mathbf{r}$ é a integração das variáveis espaciais $dxdy$. Também é evidente na equação 2.44, que $i\hbar\nabla$ é o operador momentum \mathbf{p} . A forma da equação 2.44 é igual ao de um valor médio de um operador $\hat{\chi}$ com ψ sendo uma função de onda clássica, assim

$$\langle \psi_\sigma | \hat{\chi} | \psi_\sigma \rangle = \int d^2\mathbf{r} \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\chi} \psi_\sigma(\mathbf{r}), \quad (2.45)$$

substituindo o operador momentum na equação 2.44 e comparando as equações 2.45 e 2.44, concluimos que \hat{H} é o hamiltoniano de Dirac com uma função ψ , desta forma

$$\langle \psi_\sigma | \hat{H} | \psi_\sigma \rangle = -i\hbar v_F \sum_\sigma \int d^2\mathbf{r} \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) (\vec{\sigma} \cdot \nabla) \psi_\sigma(\mathbf{r}), \quad (2.46)$$

com o hamiltoniano de Dirac sendo

$$\hat{H} = -i\hbar v_F (\vec{\sigma} \cdot \nabla) = v_F (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}). \quad (2.47)$$

Este é o hamiltoniano de Dirac em duas dimensões espaciais para uma partícula relativística sem massa [63,84, 106].

Capítulo 3

3 Super-redes de Grafeno

3.1 Super-redes

Uma super-rede é definida como a justaposição de duas ou mais camadas de semicondutores que podem formar múltiplos poços separados por barreiras. Em um cristal a separação entre os poços é causada pela distância interatômica da rede cristalina, já nas super-redes é a espessura das camadas[107]. Ao ter uma estrutura periódica dos potenciais no grafeno, por exemplo, e que esses potenciais podem ser gerados de maneira eletrostática, magnéticas ou combinações de ambas, leva à formação de estados eletrônicos estendidos, conhecidos como minibandas, e onde o estado eletrônico é proibido conhecido como *minigaps* [108,109].

A classificação dessas barreiras pode ser periódicas, quasi-periódicas e aleatórias. O caso periódico é quando as barreiras têm tamanho e largura bem definidos, bem como suas localizações. O caso aleatório é quando as barreiras têm tamanhos e larguras diferentes no decorrer da estrutura, fazendo jus ao nome aleatório. Por fim, o quasi-periódico se encontra no limite entre o periódico e o aleatório, cujos potenciais, podem ser formados seguindo algumas sequências de substituição para serem gerados. Temos, por exemplo, a sequência Fibonacci(Figura 3.1¹⁸), Thue-Morse(Figura 3.2¹⁹), Cantor(Figura 3.3²⁰;) e Double periodic(Figura 3.4²¹)[107,108].

Na sequência de Fibonacci, a formação das barreiras se dá pela relação de recorrência $S_n = S_{n-1} S_{n-2}$ para $n \geq 2$, iniciando com $S_0 = B$ e $S_1 = A$. O n corresponde a geração de Fibonacci. Assim quando for primeira geração $S_1 = A$, segunda geração $S_2 = AB$, terceira geração $S_3 = ABA$, quarta geração $S_4 = ABAAB$, etc[110,111].

¹⁸Disponível na referência [111]

¹⁹Disponível na Referência [112]

²⁰Disponível na referência [113]

²¹Adaptado de [110]

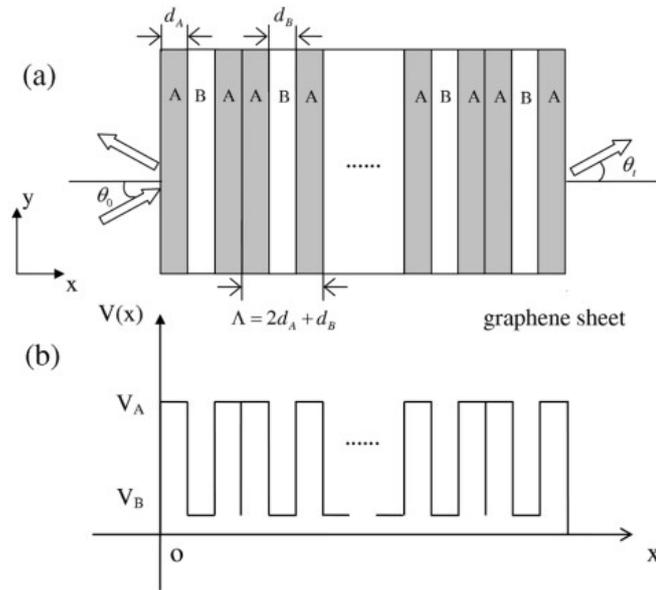


Figura 3.1: Super-rede de grafeno na seqüência de Fibonacci. Em a) segue na terceira geração de Fibonacci. b) Disposição dos potenciais.

Prosseguindo, com a seqüência de Thue-Morse a formação das barreiras em uma super-rede também é usada relações de recorrência, porém, neste caso são duas: $S_n = S_{n-1} S_{n-1}^+$ e $S_n^+ = S_{n-1}^+ S_{n-1}$ para $n \geq 1$ com $S_0 = A$ e $S_0^+ = B$. Assim quando $n = 1$ $S_1 = A$, quando $n = 2$ $S_2 = ABBA$, $n = 3$ $S_3 = ABBABAAB$, etc[110,112].

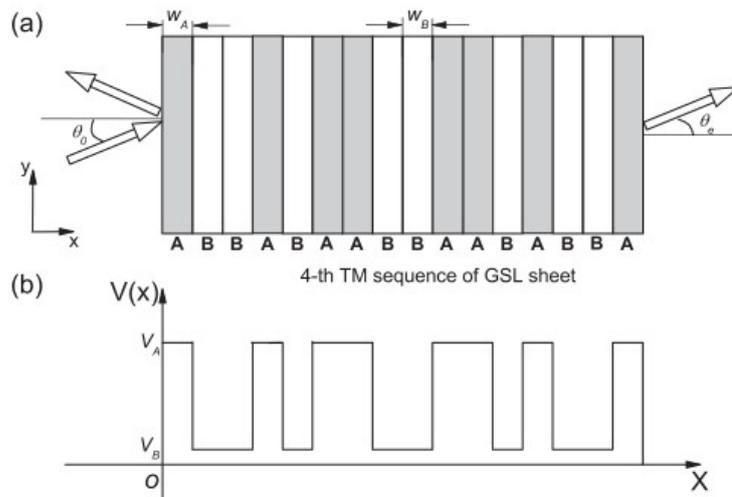


Figura 3.2: Super-rede de grafeno na seqüência de Thue-Morse em S_4 . Em a) segue na quarta seqüência Thue-Morse. b) Disposição dos potenciais.

Pela sequência de Cantor também temos algo semelhante com uma relação de recorrência $S_n = S_{n-1}B_nS_{n-1}$, sendo a condição inicial $S_0 = A$ e $S_1 = AB_1A$, $B_1=B$ para o primeiro estágio e estágios consecutivos regidos por $dB_n = 3^{n-1} dB_1$. Assim a geração de Cantor para $n=0$, $n=1$ e $n=2$ respectivamente são: $S_0=A$, $S_1=ABA$, $S_2=ABABBBABA$, etc[110,113].

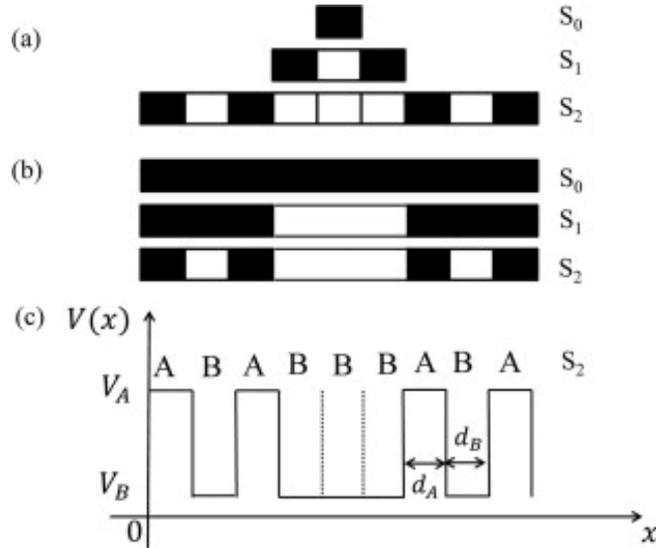


Figura 3.3: Super-rede de grafeno na sequência de Cantor. Em a) e b) são as gerações. c) Disposição dos potenciais em S_2 .

Por fim, temos a sequência Double-periodic, onde sua relação de recorrência é similar ao Thue-Morse, entretanto, a diferença ocorre na segunda relação de recorrência: $S_n = S_{n-1}S_{n-1}^+$ e $S^+ = S_{n-1}S_{n-1}$ com $S_0 = A$ e $S_0^+ = B$. Para $n = 1$ $S_1 = AB$, $n = 2$ $S_2 = ABAA$, $n=3$ $S_3 = ABAAABAB$, etc[110].

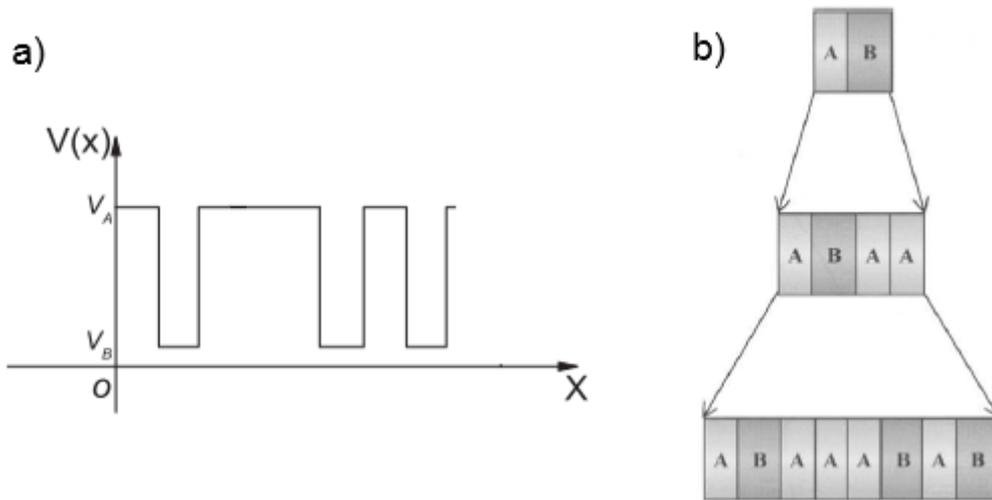


Figura 3.4: Em a) disposição dos potenciais em S_3 e em b) geração de S_1 até S_3 .

3.2 Modelo de Anderson

Os auto-estados em uma rede cristalina perfeita (como um sólido cristalino) são estendidos, ou seja, apresentam as mesmas características em qualquer ponto da rede. Isso é equivalente à função de onda conseguir se espalhar por todo o cristal, e a probabilidade de encontrar o elétron de condução é a mesma em toda a rede. Entretanto, encontrar um sólido perfeito é pouco provável. Mesmo naturais ou até artificiais, sempre apresentarão algum defeito que podem causar alterações na condução. Geralmente esses defeitos são conhecidos como desordem, caracterizados por irregularidades na rede e/ou impurezas da base (ver figura 3.5²²)[114].

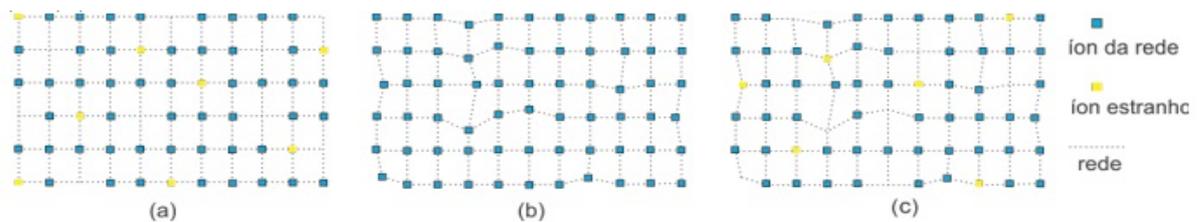


Figura 3.5: Alguns defeitos que podem ser encontrados na rede. (a) Íons estranhos ou

²²Disponível na referência [114]

falta de alguns na rede. (b) Presença de irregularidades espaciais. (c) Combinação de (a) e (b).

Podemos ainda relacionar os valores dos potenciais com o grau de desordem na estrutura. Esses potenciais acabam causando alterações nas barreiras e nas funções de onda, principalmente nas interações que estes realizam. Reflexões das ondas pelas barreiras causam interferência construtivas e destrutivas que alteram a fase, criando um padrão único da função de onda em uma região finita da rede. Esse fenômeno é denominado localização da função de onda[114,115].

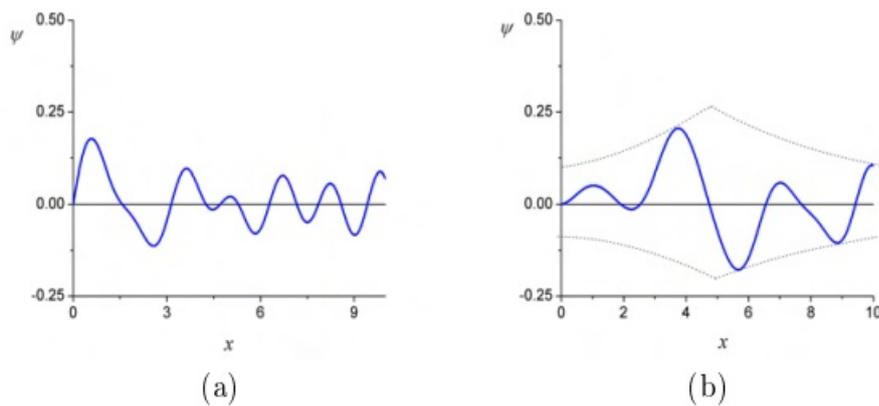


Figura 3.6: Representação da função de onda estendida (a) e localizadas (b).

O que temos neste caso são que os auto-estados se concentram em uma determinada região. Sendo assim, os estados estão localizados, conforme a figura 3.6²³. Felix Bloch com seu modelo, explica o fenômeno da condução em sólidos cristalinos perfeitos, mas ele falha ao não conseguir explicar como se dá os estados localizados em um sistema que apresentam desordens[123,124]. Por volta dos anos de 1950, P. W. Anderson apresenta um modelo, que leva seu nome, e que considera sistemas com imperfeições e impurezas, possibilitando estudar transporte eletrônico em diversos sólidos desordenados[115,118].

O modelo de Anderson considera o movimento de elétrons influenciados por potenciais aleatórios com as interações Coulombianas desprezadas. Conforme já mencionado, os potenciais no sistema são proporcionais à desordem do mesmo, logo, para desordens fracas as

²³Disponível na referência[118]

funções de onda eletrônica são estendidas e o comportamento do material é metálico. Já para desordens fortes os estados eletrônicos são exponencialmente localizados e o material é tipicamente isolante[117,119].

Quantitativamente, o modelo é apresentado com um hamiltoniano *tight – binding* que contém um termo cinético caracterizado como *hopping* do elétron entre os átomos vizinhos e um termo potencial que descreve a energia de ligação do elétron em um dado átomo da rede [120,121,122]. Logo temos:

$$H = \sum_i \epsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (3.1)$$

Representando a cinética dos elétrons entre os sítios (átomos) i e j temos o termo de *hopping* t_{ij} que diminui drasticamente a medida que a distância entre os sítios aumenta $|i - j|$, e representando o potencial aleatório ϵ_i no sítio i . A desordem é distribuída aleatória na rede, portanto esse potencial têm valores aleatórios dentro de um intervalo W . Esse parâmetro W é conhecido como intensidade ou largura do sistema[115].

Expandindo os auto-estados na base dos orbitais atômicos $|i\rangle$ temos:

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle, \quad (3.2)$$

onde c_i é a amplitude da função de onda no sítio i . Os auto-estados e auto-energias podem ser calculados através da equação de Schrödinger:

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (3.3)$$

Das equações 3.2 e 3.3 podemos obter:

$$H|\Psi\rangle = \sum_i c_i H|i\rangle, \quad (3.4)$$

Retornando para a equação 3.1 trocando as variáveis do segundo termo e aplicando um ket $|i\rangle$:

$$H|i\rangle = \sum_i \epsilon_i |i\rangle \langle i|i\rangle + \sum_{i \neq j} t_{ij} |j\rangle \langle i|i\rangle \rightarrow \epsilon_i |i\rangle + \sum_{i \neq j} t_{ij} |j\rangle. \quad (3.5)$$

substituindo a equação 3.5 em 3.4 obtém-se

$$H|\Psi\rangle = \sum_i \epsilon_i c_i |i\rangle + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_j |j\rangle. \quad (3.6)$$

Mudando novamente a variável do segundo termo para ket $|i\rangle$ e colocando em evidência ficamos com

$$H|\Psi\rangle = \sum_i \left(\epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_j \right) |i\rangle. \quad (3.7)$$

Com a equação de Schrödinger, com Ψ escrito na forma da equação 3.2 combinado com a equação 3.7 temos:

$$\sum_i \left(\epsilon_i c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} c_j \right) |i\rangle = E \sum_i c_i |i\rangle \quad (3.8)$$

acarretando

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \sum_j t_{ij} c_j. \quad (3.9)$$

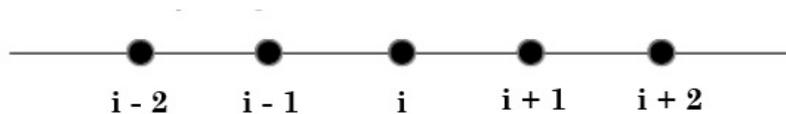


Figura 3.7: Esquema de um sistema unidimensional de sítios i . Modificado da referência [115].

Se considerarmos o caso unidimensional da figura 3.7 para a equação 3.9, os índices do somatório serão de $j = i - 1$ e $j = i + 1$

$$E c_i = \epsilon_i c_i + \sum_{j=i-1}^{j=i+1} t_{ij} c_j \quad (3.10)$$

o que resulta em

$$Ec_i = \epsilon_i c_i + t(c_{i-1} + c_{i+1}). \quad (3.11)$$

Algumas considerações podem ser feitas a respeito da equação 3.11. Para o caso de um sistema cristalino perfeito $W = 0$ (que não existe desordem) todas os ϵ_i são iguais (neste caso faremos ele nulo). A solução da equação pode ser uma exponencial complexa $c_n = c_0 e^{ink}$ e satisfaz 3.11 se $E = 2t \cos k$ representando a banda cristalina da teoria de Bloch. Isso quer dizer que um sólido que não possui desordem os estados eletrônicos são estendidos por todo o sistema igual à onda de Bloch. Para os casos em que W não é nulo, a função de onda pode ou não ser transmitida, pois, isso depende de quanta desordem há no sistema. Entretanto, para baixa dimensionalidade ($d \leq 2$) e uma desordem considerável os estados eletrônicos são exponencialmente localizados, e é o que chamamos Localização de Anderson. Para sistemas desordenados e dimensão elevada ($d > 2$) há possibilidade de estados estendidos [114,115,117].

3.3 Modelo de Aubry-André-Harper

Como observado no tópico 3.2, o modelo de Anderson em uma rede cristalina de baixas dimensões, apresenta um comportamento localizado nos auto-estados para uma desordem aleatória, ocasionando potenciais de característica também aleatória. Portanto, o modelo de Anderson em 1D é trivial, e a ausência de uma verdadeira transição metal-isolante (*delocalization – localization*) com desordem, tornou-o desinteressante ponto de vista da física da matéria condensada[123,124].

No entanto, uma nova classe de potencial foi revelado, sendo identificado entre o potencial aleatório e o potencial periódico. São denominados de potenciais pseudo-aleatórios obtidos em sistemas que detêm uma quasi-periodicidade. Os primeiros e mais conhecidos ingressantes nesses estudos com sistemas quasi-periódicos foram Aubry e André, por volta dos anos de 1980 em 1D[124,125].

Como foi retratado, podemos dizer que o modelo de Aubry-André está entre o modelo de Anderson e o modelo de Bloch. Matematicamente, utilizamos o modelo *tight – binding* em uma dimensão, ou seja, a equação 3.11 e damos uma ênfase maior para os potenciais,

que retrataremos como V_n em vez de ϵ_i por questão de notação[126]. Tal potencial é dado por:

$$V_n = \lambda \cos(\pi a n^\nu). \quad (3.12)$$

Quando $\nu=1$ temos o modelo usual apresentado por S. Aubry e G. André por volta de 1980, onde a localização e delocalização dependerá apenas do valor de λ quando a é irracional. No artigo de Sarma, *et al* [128], $a\pi = 0,2$ com π sendo ângulo de incidência. Quando $\lambda > 2$ todos os estados são localizados, $\lambda < 2$ os estados são delocalizados. Para $\lambda = 2$ temos o ponto crítico onde a transição de fase metal-isolante acontece[127,128].

Para a racional e ν inteiro, obtemos o modelo periódico de Bloch. Quando a é irracional e $\nu \geq 2$, temos o modelo de Anderson. Se $\nu = 1$ e a for irracional, temos o modelo de Aubry-André com estados sendo localizados ou estendidos à medida que λ assume valores menores que 2 e maior que 2 [128,129,130]. A figura 3.8 ²⁴ ilustra uma rede finita em 2D que segue o modelo de Aubry-André. Em *a*) temos a distância entre os átomos é dada por d e em *b*) identifica a formação da rede na presença do potencial conforme a referência [136].

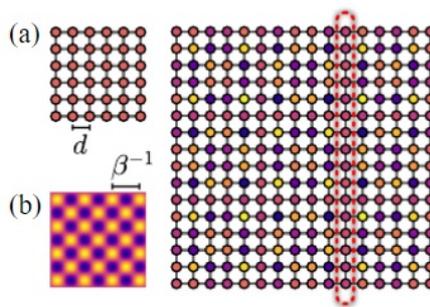


Figura 3.8: Ilustração do modelo bidimensional de Aubry-André. (a) Rede com distância d entre os átomos e (b) com a presença do potencial do modelo. Modificado de [136]

3.4 Modelo contínuo para uma super-rede de grafeno

A equação do hamiltoniano de Dirac de uma partícula relativística sem massa que descreve os estados eletrônicos para baixas energias é dada pela equação 2.47. Para este

²⁴Disponível na referência [136]

tópico usaremos a sua versão escrita como:

$$H = -i\hbar v_F(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + V(x)\hat{1}. \quad (3.13)$$

As matrizes de Pauli são $\sigma_{x,y}$ que agem no *pseudospin* que está relacionado com as duas sub-redes de grafeno. O potencial $V(x)$ é um potencial de Aubry-André-Harper e é multiplicado por $\hat{1}$ que é uma matriz identidade. A velocidade de Fermi que aparece na primeira parcela da soma é $v_F = v_F(x)$, ou seja, ela é dependente da posição. Isso se deve ao fato de que o material pode apresentar diferentes regiões, onde o transporte de carga pode ser alterado e conseqüentemente a velocidade é também alterada. Como a velocidade de Fermi depende agora da posição, o hamiltoniano de Dirac deixa de ser um operador hermitiano. Uma forma de contornar essa situação e o operador ser um hermitiano, é mostrar a equação na forma [131]:

$$H = -i\hbar \sqrt{v_F(x)} \sigma_x \frac{d}{dx} \sqrt{v_F(x)} \quad (3.14)$$

e é fácil ver que pode retornar para a equação 3.13 quando $v_F(x) = v_F$. Com essa condição a equação se torna,

$$H = -i\hbar(\sqrt{v_F(x)}\sigma_x\partial_x\sqrt{v_F(x)} + v_F(x)\sigma_y\partial_y) + V(x)\hat{1}. \quad (3.15)$$

A equação de Dirac atua em um $\psi(x, y)$ de forma que $H\psi(x, y) = E\psi(x, y)$. O $\psi(x, y)$ é dado por $e^{-ik_y y}\psi(x)$ e definimos que $\sqrt{v_F(x)}\psi(x) = \phi(x)$. Substituindo na equação 3.15 obtemos,

$$\begin{aligned} H e^{-ik_y y} \psi(x) &= -i\hbar \left(\sqrt{v_F(x)} \sigma_x \partial_x \sqrt{v_F(x)} e^{-ik_y y} \psi(x) + v_F(x) \sigma_y \partial_y e^{-ik_y y} \psi(x) \right) + V(x) \hat{1} \psi(x) \rightarrow \\ H \psi(x) &= -i\hbar \sqrt{v_F(x)} \sigma_x \partial_x \sqrt{v_F(x)} e^{-ik_y y} \psi(x) - \hbar \sigma_y k_y v_F(x) \psi(x) + V(x) \hat{1} \psi(x) \rightarrow \\ H \frac{\phi(x)}{\sqrt{v_F(x)}} &= -i\hbar \sqrt{v_F(x)} \sigma_x \partial_x \frac{\phi(x)}{\sqrt{v_F(x)}} - \hbar \sigma_y k_y v_F(x) \frac{\phi(x)}{\sqrt{v_F(x)}} + V(x) \hat{1} \frac{\phi(x)}{\sqrt{v_F(x)}} \rightarrow \\ H \phi(x) &= -i\hbar \sqrt{v_F(x)} \sigma_x \partial_x \phi(x) - \hbar \sigma_y k_y v_F(x) \phi(x) - V(x) \hat{1} \phi(x), \quad (3.16) \end{aligned}$$

organizando a equação 3.16 seguindo $H\phi(x)=E\phi(x)$,

$$-i\hbar\sqrt{v_F(x)}\sigma_x\partial_x\phi(x) = -\hbar\sigma_yk_yv_F(x)\phi(x) - V(x)\hat{1}\phi(x) + E\phi(x) \quad (3.17)$$

Substituindo as matrizes de Pauli e tomando $\hat{1}$ sendo a matriz identidade, conforme já mencionado, a equação fica:

$$\begin{aligned} -i\hbar\sqrt{v_F(x)}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\partial_x\phi(x) &= -\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}k_yv_F(x)\phi(x) - \\ &-V(x)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\phi(x) + E\phi(x). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Organizando a equação 3.18 e multiplicando por σ_x^{-1} para facilitação dos cálculos, temos:

$$\begin{aligned} -i\hbar v_F(x)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\partial_x\phi(x) &= -\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}k_yv_F(x)\phi(x) - \\ &-V(x)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\phi(x) + E\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\phi(x). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Multiplicando as matrizes e toda a equação por $1/\hbar v_F(x)$,

$$\begin{aligned} -i\partial_x\phi(x)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} &= -\begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}k_y\phi(x) - \frac{V(x)\phi(x)}{\hbar v_F(x)}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{E\phi(x)}{\hbar v_F(x)}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \\ &-i\partial_x\phi(x) = \begin{pmatrix} ik_y & \frac{E-V(x)}{\hbar v_f(x)} \\ \frac{E-V(x)}{\hbar v_f(x)} & -ik_y \end{pmatrix}\phi(x), \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde

$$P(x) = \begin{pmatrix} ik_y & \frac{E-V(x)}{\hbar v_F(x)} \\ \frac{E-V(x)}{\hbar v_F(x)} & -ik_y \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

portanto podemos escrever a equação 3.20 como sendo

$$-i\frac{d\phi(x)}{dx} = P(x)\phi(x). \quad (3.22)$$

3.5 Super-redes de grafeno finita

Neste t3pico o objetivo 3 3 encontrar o coeficiente de transmiss3o na super-rede de grafeno finita atrav3s do m3todo de matriz transfer3ncia. Para isso, resolveremos a equa3o 3.22 seguindo as refer3ncias [63] e [132]. Reescrevendo a referida equa3o com $\phi(x)$ sendo ϕ_A e ϕ_B , e $\gamma = \frac{E-V(x)}{\hbar v_F(x)}$ temos duas equa33es como resultado:

$$\frac{d\phi_A}{dx} - k_y\phi_A = i\gamma\phi_B, \quad (3.23)$$

$$\frac{d\phi_B}{dx} + k_y\phi_B = i\gamma\phi_A. \quad (3.24)$$

O γ corresponde ao vetor de onda dentro do potencial, E 3 a energia de um el3tron e $k_0 = E/\hbar v_F(x)$ est3 relacionado com o n3mero de ondas eletr3nica incidentes [132,133].

Da equa3o 3.23 temos,

$$\phi_B = \frac{id\phi}{\gamma dx} - \frac{k_y\phi_A}{i\gamma}, \quad (3.25)$$

e a substituindo em 3.24,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{i\gamma} \frac{d\phi_A}{dx} - \frac{k_y\phi_A}{i\gamma} \right) + k_y \left(\frac{1}{i\gamma} \frac{d\phi_A}{dx} - \frac{k_y\phi_A}{i\gamma} \right) &= i\gamma\phi_A \rightarrow \\ \frac{1}{i\gamma} \frac{d^2\phi_A}{dx^2} - \frac{k_y}{i\gamma} \frac{d\phi_A}{dx} + \frac{k_y}{i\gamma} \frac{d\phi_A}{dx} - \frac{k_y^2\phi_A}{i\gamma} &= i\gamma\phi_A \rightarrow \\ \frac{1}{i\gamma} \frac{d^2\phi_A}{dx^2} - \frac{k_y^2\phi_A}{i\gamma} &= i\gamma\phi_A \rightarrow \\ \frac{d^2\phi_A}{dx^2} + (\gamma_j^2 - k_y^2)\phi_A &= 0. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Isolando o ϕ_A na equa3o 3.24, e substituindo na 3.23 e seguindo os mesmos passos da equa3o 3.26, obtemos:

$$\frac{d^2\phi_B}{dx^2} - (\gamma_j^2 - k_y^2)\phi_B = 0 \quad (3.27)$$

Assim isso nos leva a:

$$\frac{d^2\phi_{A,B}}{dx^2} \mp (\gamma_j^2 - k_y^2)\phi_{A,B} = 0 \quad (3.28)$$

onde γ_j vetor de onda que incide no potencial V_j , com o subscrito j que refere-se as regiões da super-rede de grafeno tendo como $j= 1, 2, 3, \dots, e$. Quando $j=0$ a região é incidente e quando $j=e$ região é de saída [63].

O próximo passo é conectar as funções de onda ϕ_x com a matriz transferência, em que ϕ_x estão em x e $x+\Delta x$ no j -ésimo potencial assim como nas referências [132] e [133]. Antes de obter a matriz transferência é necessário resolver as equações 3.26 e 3.27. Para 3.26 vamos supor que as possíveis soluções de $\phi_A = ce^{rx}$ com c sendo constante,

$$\begin{aligned} c \frac{d^2 e^{rx}}{dx^2} + (\gamma_j^2 - k_y^2) ce^{rx} &= 0 \rightarrow \\ ce^{rx} [r^2 + (\gamma_j^2 - k_y^2)] &= 0. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Assim, a equação 3.26 é uma equação diferencial de segunda ordem cuja equação característica é um polinômio de segundo grau, ou seja: $r^2 + (\gamma_j^2 - k_y^2)$. As raízes desse polinômio são $r_1 = i\sqrt{(\gamma_j^2 - k_y^2)}$ e $r_2 = -i\sqrt{(\gamma_j^2 - k_y^2)}$. Denotando $q_j = \sqrt{(\gamma_j^2 - k_y^2)}$ a solução para ϕ_A em 3.26 é

$$\phi_A(x) = ce^{rx} \rightarrow \phi_A(x) = ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x}, \quad (3.30)$$

e para ϕ_B

$$\phi_B(x) = ce^{iq_j x} + de^{-iq_j x}. \quad (3.31)$$

Para determinar as constantes c e d , substituímos as equações 3.30 (ou 3.31) na equação 3.23 (ou na 3.24) e chegamos na seguinte relação:

$$\frac{d}{dx} (ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x}) - k_y (ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x}) = i\gamma_j (ce^{iq_j x} + de^{-iq_j x}). \quad (3.32)$$

Derivando e efetuando a propriedade distributiva da multiplicação, obtemos:

$$\begin{aligned} iaq_j e^{iq_j x} - ibq_j e^{-iq_j x} - ak_y e^{iq_j x} - k_y b e^{-iq_j x} &= ic\gamma_j e^{iq_j x} + id\gamma_j e^{-iq_j x} \rightarrow \\ ae^{iq_j x} (iq_j - k_y) - be^{-iq_j x} (iq_j + k_y) &= ic\gamma_j e^{iq_j x} + id\gamma_j e^{-iq_j x}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

definindo $\alpha = (iq_j - k_y)$ e $\alpha^* = (iq_j + k_y)$

$$\begin{aligned} c &= \frac{ae^{iq_j x} \alpha - be^{-iq_j x} \alpha^* - i\gamma_j e^{-iq_j x}}{i\gamma_j e^{iq_j x}} \rightarrow \\ c &= \frac{a\alpha}{i\gamma_j} - \frac{be^{-2iq_j x} \alpha^*}{i\gamma_j} - de^{-2iq_j x}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Para determinar d vamos substituir ϕ_B na equação 3.24.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} (ce^{iq_j x} + de^{-iq_j x}) + k_y (ce^{iq_j x} + de^{-iq_j x}) &= i\gamma_j (ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x}) \rightarrow \\ ce^{iq_j x} (iq_j + k_y) - de^{-iq_j x} (iq_j - k_y) &= ia\gamma_j e^{iq_j x} + ib\gamma_j e^{-iq_j x} \rightarrow \\ d &= \frac{c\alpha^* e^{2iq_j x}}{\alpha} - \frac{i\gamma_j a e^{2iq_j x}}{\alpha} - \frac{ib\gamma_j}{\alpha}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Finalmente substituindo c e d em ϕ_B ,

$$\begin{aligned} \phi_B &= \left(\frac{a\alpha}{i\gamma_j} - \frac{be^{-2iq_j x} \alpha^*}{i\gamma_j} - de^{-2iq_j x} \right) e^{-iq_j x} + \left(\frac{c\alpha^* e^{2iq_j x}}{\alpha} - \frac{i\gamma_j a e^{2iq_j x}}{\alpha} - \frac{ib\gamma_j}{\alpha} \right) \rightarrow \\ \phi_B &= \frac{a^{iq_j x}}{i\gamma_j} - \frac{be^{-iq_j x} \alpha^*}{i\gamma_j} - \frac{c\alpha^* e^{iq_j x}}{\alpha} + \frac{i\gamma_j a e^{iq_j x}}{\alpha} + \frac{ib\gamma_j e^{-iq_j x}}{\alpha} + \frac{c\alpha^* e^{iq_j x}}{\alpha} - \frac{i\gamma_j a e^{iq_j x}}{\alpha} - \frac{ib\gamma_j e^{-iq_j x}}{\alpha} \rightarrow \\ \phi_B &= \frac{a(iq_j - k_y) e^{iq_j x}}{i\gamma_j} - \frac{b(iq_j + k_y) e^{-iq_j x}}{i\gamma_j} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Próximo passo é conectar $\phi_{A,B}(x)$ entre qualquer x_{j-1} e $x_{j-1} + \Delta x$ no j -ésimo potencial usando a base $\Phi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix}$, com os elementos sendo apresentados por $\varphi_{A,B}(x) = ae^{iq_j x} \pm be^{-iq_j x}$. Em um primeiro momento, usando a base, vamos reescrever as equações $\phi_A(x)$ e $\phi_B(x)$, 3.30 e 3.36 respectivamente, da seguinte forma[134]:

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} = R_j(E, k_y) \begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

onde

$$R_j(E, k_y) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ i \sin(\theta_j) & \cos(\theta_j) \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

Para θ_j temos $\arcsin\left(\frac{k_y}{\gamma_j}\right)$ e $\arccos\left(\frac{q_j}{\gamma_j}\right)$ que são ângulos entre as componentes de q_j , γ_j e k_y no j -ésimo potencial. O k_y é representado por $\gamma_j \sin \theta_j$. Provando a equação 3.37,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ i \sin(\theta_j) & \cos(\theta_j) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x} \\ ae^{iq_j x} - be^{-iq_j x} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x} \\ a(\cos \theta_j + i \sin \theta_j)e^{iq_j x} - b(\cos \theta_j - i \sin \theta_j)e^{-iq_j x} \end{pmatrix}. \quad (3.39)$$

analisando o segundo termo da matriz, especificamente o seno e o cosseno com o valor de θ_j definidos, podemos deduzir que:

$$\begin{aligned} (\cos(\theta_j) + i \sin(\theta_j)) &= \left(\cos \left(\arccos \left(\frac{q_j}{\gamma_j} \right) \right) + i \sin \left(\arcsin \left(\frac{k_y}{\gamma_j} \right) \right) \right) \rightarrow \\ &= \frac{q_j}{\gamma_j} + i \frac{k_y}{\gamma_j} \rightarrow \\ (\cos(\theta_j) + i \sin(\theta_j)) &= \frac{i}{i} \left(\frac{q_j + ik_y}{\gamma_j} \right) \rightarrow \\ (\cos(\theta_j) + i \sin(\theta_j)) &= \frac{iq_j - k_y}{i\gamma_j}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

$$\begin{aligned} (\cos(\theta_j) - i \sin(\theta_j)) &= \left(\cos \left(\arccos \left(\frac{q_j}{\gamma_j} \right) \right) - i \sin \left(\arcsin \left(\frac{k_y}{\gamma_j} \right) \right) \right) \rightarrow \\ &= \frac{q_j}{\gamma_j} - i \frac{k_y}{\gamma_j} \rightarrow \\ (\cos(\theta_j) - i \sin(\theta_j)) &= \frac{i}{i} \left(\frac{q_j - ik_y}{\gamma_j} \right) \rightarrow \\ (\cos(\theta_j) - i \sin(\theta_j)) &= \frac{iq_j + k_y}{i\gamma_j}. \end{aligned} \quad (3.41)$$

Substituindo na matriz 3.40 e 3.41 obtemos,

$$\begin{pmatrix} ae^{iq_j x} + be^{-iq_j x} \\ a\left(\frac{iq_j - k_y}{i\gamma_j}\right)e^{iq_j x} - b\left(\frac{iq_j + k_y}{i\gamma_j}\right)e^{-iq_j x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_B \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

CQD.

Como o objetivo é definir estas funções nas posições x_{j-1} e $x_{j-1} + \Delta x$, o que significa dentro da mesma barreira ou na região do poço, as funções de onda podem ser escritas $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1}) \\ \phi_B(x_{j-1}) \end{pmatrix}$ e sua evolução escrita na forma $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix}$. Essa evolução pode ser representada na base $\Phi(x)$:

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix} = T_j(\Delta x, E, k_y) \begin{pmatrix} \varphi_A(x_{j-1}) \\ \varphi_B(x_{j-1}) \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

onde,

$$T_j(\Delta x, E, k_y) = \begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) & i \sin(q_j \Delta x) \\ i \sin(q_j \Delta x + \theta_j) & \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Matematicamente as funções $\phi_A(x_{j-1} + \Delta x)$ e $\phi_B(x_{j-1} + \Delta x)$ estão em termos das funções $\phi_A(x)$ e $\phi_B(x)$:

$$\begin{aligned} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) &= ae^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} + be^{-iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) &= a\frac{(iq_j - k_y)}{i\gamma_j}e^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} - b\frac{(iq_j + k_y)}{i\gamma_j}e^{-iq_j(x_{j-1} + \Delta x)}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Da mesma forma para as funções $\varphi_A(x_{j-1})$ e $\varphi_B(x_{j-1})$ que estão em termos de φ_A e φ_B :

$$\begin{aligned} \varphi_A(x_{j-1}) &= ae^{iq_j(x_{j-1})} + be^{-iq_j(x_{j-1})} \\ \varphi_B(x_{j-1}) &= ae^{iq_j(x_{j-1})} - be^{-iq_j(x_{j-1})} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Verificando a equação 3.43 assim como conduzimos para a equação 3.37, tomando como

base as referências [63] e [132]:

$$\begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) & i \sin(q_j \Delta x) \\ i \sin(q_j \Delta x + \theta_j) & \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} ae^{iq_j(x_{j-1})} + be^{-iq_j(x_{j-1})} \\ ae^{iq_j(x_{j-1})} - be^{-iq_j(x_{j-1})} \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

Analisando separadamente as multiplicações, vamos multiplicar a primeira linha da primeira matriz com a segunda matriz, assim:

$$\begin{aligned} \cos(q_j \Delta x) (ae^{iq_j(x_{j-1})} + be^{-iq_j(x_{j-1})}) + i \sin(q_j \Delta x) (ae^{iq_j(x_{j-1})} - be^{-iq_j(x_{j-1})}) &\rightarrow \\ ae^{iq_j(x_{j-1})} [\cos(q_j \Delta x) + i \sin(q_j \Delta x)] + be^{-iq_j(x_{j-1})} [\cos(q_j \Delta x) - i \sin(q_j \Delta x)] &\rightarrow \\ ae^{iq_j \Delta x} e^{iq_j(x_{j-1})} + be^{-iq_j \Delta x} e^{-iq_j(x_{j-1})} &\rightarrow \\ ae^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} + be^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)}. &\quad (3.48) \end{aligned}$$

Os mesmos passos para a segunda linha com a segunda matriz, obtemos:

$$\begin{aligned} a[\cos(q_j \Delta x + \theta_j) + i \sin(q_j \Delta x + \theta_j)]e^{iq_j x_{j-1}} + \\ -b[\cos(q_j \Delta x + \theta_j) - i \sin(q_j \Delta x + \theta_j)]e^{-iq_j x_{j-1}} \end{aligned} \quad (3.49)$$

Para o cosseno e seno da equação anterior, vamos levar em consideração as definições do θ_j . Desta forma temos,

$$\cos(q_j \Delta x + \theta_j) = \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{\gamma_j} - \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{\gamma_j}, \quad (3.50)$$

$$\sin(q_j \Delta x + \theta_j) = \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{\gamma_j} + \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{\gamma_j}. \quad (3.51)$$

Substituindo a equação 3.51 e 3.50 na equação 3.49 chegamos a

$$\begin{aligned} a \left\{ \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{\gamma_j} - \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{\gamma_j} + i \left[\sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{\gamma_j} + \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{\gamma_j} \right] \right\} e^{iq_j x_{j-1}} + \\ -b \left\{ \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{\gamma_j} - \sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{\gamma_j} - i \left[\sin(q_j \Delta x) \cdot \frac{q_j}{\gamma_j} + \cos(q_j \Delta x) \cdot \frac{k_y}{\gamma_j} \right] \right\} e^{-iq_j x_{j-1}} \rightarrow \\ a \frac{i}{i} \left[\frac{q_j}{\gamma_j} + \frac{ik_y}{\gamma_j} \right] e^{iq_j x_{j-1} + iq_j \Delta x} - b \frac{i}{i} \left[\frac{q_j}{\gamma_j} - \frac{ik_y}{\gamma_j} \right] e^{-iq_j x_{j-1} - iq_j \Delta x} \rightarrow \end{aligned}$$

$$a \frac{(iq_j - k_y)}{i\gamma_j} e^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} - b \frac{(iq_j + k_y)}{i\gamma_j} e^{-iq_j(x_{j-1} + \Delta x)}. \quad (3.52)$$

Por fim, substituindo a equação 3.48 e 3.52 na matriz 3.43 provamos a mesma:

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ae^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} + be^{-iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} \\ a \frac{(iq_j - k_y)}{i\gamma_j} e^{iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} - b \frac{(iq_j + k_y)}{i\gamma_j} e^{-iq_j(x_{j-1} + \Delta x)} \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

CQD.

Finalmente, com todas as funções definidas podemos escrever a relação entre $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1}) \\ \phi_B(x_{j-1}) \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix}$ como,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1} + \Delta x) \\ \phi_B(x_{j-1} + \Delta x) \end{pmatrix} = M_j(\Delta x, E, k_y) \begin{pmatrix} \phi_A(x_{j-1}) \\ \phi_B(x_{j-1}) \end{pmatrix}, \quad (3.54)$$

com M_j dado por,

$$M_j(\Delta x, E, k_y) = T_j(\Delta x, E, k_y) R_j^{-1}(E, k_y). \quad (3.55)$$

Agora, determinaremos o M_j que representa a matriz transferência para o grafeno [133]. Substituindo os valores de T_j e R_j na equação 3.55 obtemos,

$$\begin{aligned} M_j &= \begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) & i(q_j \Delta x) \\ i(q_j \Delta x + \theta_j) & \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\text{Det} R_j} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\theta_j) & 0 \\ -i \sin(\theta_j) & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \\ &= \begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) & i \sin(q_j \Delta x) \\ i \sin(q_j \Delta x + \theta_j) & \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\cos(\theta_j)} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\theta_j) & 0 \\ -i \sin(\theta_j) & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \\ &= \begin{pmatrix} \cos(q_j \Delta x) + \sin(q_j \Delta x) \tan(\theta_j) & i \frac{\text{sen}(q_j \Delta x)}{\cos(\theta_j)} \\ i \sin(q_j \Delta x + \theta_j) - i \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \tan(\theta_j) & \frac{\cos(q_j \Delta x + \theta_j)}{\cos(\theta_j)} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Aqui resolveremos o primeiro e o segundo elemento da primeira coluna da matriz, em

que temos duas somas. Para o primeiro elemento faremos,

$$\cos(q_j \Delta x) + \sin(q_j \Delta x) \tan(\theta_j) = \frac{\cos(q_j \Delta x - \theta_j)}{\cos(\theta_j)} \quad (3.57)$$

Para o segundo elemento da matriz temos,

$$i \sin(q_j \Delta x + \theta_j) - i \cos(q_j \Delta x + \theta_j) \tan(\theta_j) = \frac{i \sin(q_j \Delta x)}{\cos(\theta_j)} \quad (3.58)$$

Assim M_j é:

$$M_j(\Delta x, E, k_y) = \begin{pmatrix} \frac{\cos(q_j \Delta x - \theta_j)}{\cos(\theta_j)} & i \frac{\sin(q_j \Delta x)}{\cos(\theta_j)} \\ i \frac{\sin(q_j \Delta x)}{\cos(\theta_j)} & \frac{\cos(q_j \Delta x + \theta_j)}{\cos(\theta_j)} \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

Algumas considerações devem ser apontadas a respeito da equação 3.59 que representa a matriz transferência para o grafeno. Ela é responsável por conectar as funções de onda $\phi_{A,B}(x)$ com a sua evolução, ou seja, as funções $\phi_{A,B}(x + \Delta x)$ [63]. O vetor de onda q_j é dado por $\sqrt{(\gamma_j^2 - k_y^2)}$ e corresponde a componente x no potencial V_j . θ_j é o ângulo entre a componente x do vetor de onda q_j e o vetor de onda k_y . Ele equivale à $\arcsin\left(\frac{k_y}{\gamma_j}\right)$. Para o j -ésimo potencial $x_{j-1} < x < x_j$, as funções $\phi_{A,B}(x)$ podem ser escritas em termos de $\phi_{A,B}(x_0)$ através da matriz $Q(\Delta x_j, E, k_y)$, que corresponde com a transformação do transporte de partículas na direção x e $\Delta x_j = x - x_{j-1}$. Vale ressaltar que $\phi_{A,B}(x_0)$ são funções de onda incidente final de toda a estrutura. Assim temos,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x) \\ \phi_B(x) \end{pmatrix} = Q(\Delta x_j, E, k_y) \begin{pmatrix} \phi_A(x_0) \\ \phi_b(x_0) \end{pmatrix}. \quad (3.60)$$

Matematicamente, $Q(\Delta x_j, E, k_y)$ é,

$$Q(\Delta x_j, E, k_y) = M_j(\Delta x_j, E, k_y) \prod_{i=1}^{j-1} M_i(w_i, E, k_y), \quad (3.61)$$

onde w_i é a largura da barreira j -ésima [134,135]. Desta forma podemos conhecer as funções de onda $\phi_{A,B}$ em qualquer posição x dentro do potencial com a matriz trans-

ferência. Para determinar as funções de onda iniciais, $\phi_{A,B}(x_0)$, é necessário utilizar das condições de contorno. Assumindo que um elétron livre de energia E incide na região $x < 0$ com um ângulo de incidência equivalente a θ_0 , a função de onda se comporta como uma superposição de pacotes de ondas incidentes e refletivas que no ponto que incidência ocorre, ou seja $x = 0$, as funções de onda são iniciais $\phi_A(0)$ e $\phi_B(0)$. Para $\phi_A(0)$ segue,

$$\phi_A(0) = \phi_i(E, k_y) + \phi_r(E, k_y) \rightarrow (1 + r)\phi_i(E, k_y), \quad (3.62)$$

sendo que $\phi_i(E, k_y)$ é o pacote de onda do elétron incidente em $x=0$, ϕ_r é o pacote de onda refletido e r é o coeficiente de reflexão. Para determinar $\phi_B(0)$ podemos usar a base $\Phi(x) = \begin{pmatrix} \varphi_A(x) \\ \varphi_B(x) \end{pmatrix}$ onde escrevemos que para $\varphi_{A,B}(0) = \phi_i(E, k_y) \pm \phi_r(E, k_y) \rightarrow (1 \pm r)\phi_i(E, k_y)$. Usando também a equação 3.37 para o $\phi_B(x = 0)$ segue,

$$\begin{aligned} \phi_B(0) &= i \sin(\theta_0)\varphi_A(0) + \cos(\theta_0)\varphi_B(0) \rightarrow \\ \phi_B(0) &= i \sin(\theta_0)[1 + r]\phi_i(E, k_y) + \cos(\theta_0)[1 - r]\phi_i(E, k_y) \rightarrow \\ \phi_B(0) &= \phi_i(E, k_y)[\cos(\theta_0) + ir \sin(\theta_0) - (r \cos(\theta_0) + ir \sin(\theta_0))] \rightarrow \\ \phi_B(0) &= \phi_i(E, k_y)[e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0}], \end{aligned} \quad (3.63)$$

assim podemos escrever para $\phi_{A,B}(0)$:

$$\begin{pmatrix} \phi_A(0) \\ \phi_B(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + r \\ e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y). \quad (3.64)$$

Desta forma, os cálculos realizados para $\phi_{A,B}(0)$ foram para determinar a função de onda inicial com duas componentes que representa um elétron livre com energia E incidindo na região $x < 0$ com um pacote de onda incidente em $x = 0$ e um pacote que reflete. Assim, trataremos também da função de onda de saída, ou seja, em x_e . Similarmente ao que foi conduzido para a função de onda incidente em $x < 0$, temos $\begin{pmatrix} \phi_A(x_e) \\ \phi_B(x_e) \end{pmatrix}$ com

$\phi_A(x_e) = t\phi_i(E, k_y)$. Observem que não há a presença da parte refletida, pois, o que tratamos é da função de onda que atravessou a barreira. t é o coeficiente de transmissão[132]. Para $\phi_B(x_e)$ usamos novamente a base e a equação 3.37, assim:

$$\begin{aligned}\varphi_A(x_e) &= t\phi_i(E, k_y) \\ \varphi_B(x_e) &= -t\phi_i(E, k_y),\end{aligned}\tag{3.65}$$

usando novamente a equação 3.37

$$\begin{aligned}\phi_B(x_e) &= i \sin(\theta_e)\varphi_A(0) + \cos(\theta_e)\varphi_B(0) \rightarrow \\ \phi_B(x_e) &= i \sin(\theta_e)t\phi_i(E, k_y) - \cos(\theta_e)t\phi_i(E, k_y) \rightarrow \\ \phi_B(x_e) &= \phi_i(E, k_y)[i \sin(\theta_e) - \cos(\theta_e)] \rightarrow \\ \phi_B(x_e) &= \phi_i(E, k_y)te^{i\theta_e}.\end{aligned}\tag{3.66}$$

Assim,

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_e) \\ \phi_B(x_e) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t \\ te^{i\theta_e} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y)\tag{3.67}$$

θ_e representa o ângulo de saída da onda. Podemos ainda relacionar as equações 3.64 e 3.67 através de uma matriz \mathbf{X} onde ela conecta a função de onda no final da entrada com a equação 3.64 e na saída ela equivale a equação 3.67[134]. Assim a conexão entre entrada e saída das funções de onda fica:

$$\begin{pmatrix} \phi_A(x_e) \\ \phi_B(x_e) \end{pmatrix} = \mathbf{X} \begin{pmatrix} \phi_A(0) \\ \phi_B(0) \end{pmatrix}\tag{3.68}$$

\mathbf{X} é,

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} = \prod_{j=i}^{2N} M_j(w_j, E, k_y),\tag{3.69}$$

sendo w_j a largura da barreira no j -ésimo. Próximo passo é substituir a equação 3.64 e

3.67 na equação 3.68 e isolar t e $te^{i\theta_e}$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} t \\ te^{i\theta_e} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y) &= \mathbf{X} \begin{pmatrix} 1+r \\ e^{i\theta_0} - re^{i\theta_0} \end{pmatrix} \phi_i(E, k_y) \rightarrow \\ \begin{pmatrix} t \\ te^{i\theta_e} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1+r \\ e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.70)$$

assim para t e $te^{i\theta_e}$:

$$t = (1+r)x_{11} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{12} \quad (3.71)$$

e

$$te^{i\theta_e} = (1+r)x_{21} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{22}. \quad (3.72)$$

Nas duas equações em questão, podemos resolver e encontrar a equação que descreve o coeficiente de reflexão e o coeficiente de transmissão. Substituindo a equação 3.71 na equação 3.72 temos:

$$\begin{aligned} [(1+r)x_{11} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{12}]e^{i\theta_e} &= (1+r)x_{21} + (e^{i\theta_0} - re^{-i\theta_0})x_{22} \rightarrow \\ x_{11}e^{i\theta_e} + rx_{11}e^{i\theta_e} + x_{12}e^{i\theta_0}e^{i\theta_e} - x_{12}re^{-i\theta_0}e^{i\theta_e} &= x_{21} + rx_{21} + e^{i\theta_0}x_{22} - re^{-i\theta_0}x_{22} \rightarrow \\ r(x_{11}e^{i\theta_e} - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21} + x_{22}e^{-i\theta_0}) &= (x_{22}e^{i\theta_0} - x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e+\theta_0)} + x_{21}. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Isolando r no primeiro membro chegamos à:

$$r(E, k_y) = \frac{(x_{22}e^{i\theta_0} - x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e+\theta_0)} + x_{21}}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \quad (3.74)$$

Determinando o coeficiente de transmissão substituindo o $r(E, k_y)$ em 3.71:

$$t = x_{11} + x_{11} \left(\frac{(x_{22}e^{i\theta_0} - x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e+\theta_0)} + x_{21}}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \right) + x_{12}e^{i\theta_0} - x_{12}e^{-i\theta_0} \left(\frac{(x_{22}e^{i\theta_0} - x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e+\theta_0)} + x_{21}}{(x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e}) - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \right), \quad (3.75)$$

realizando a multiplicação e cancelando alguns termos ficamos com,

$$t = \frac{x_{22}x_{11}e^{-i\theta_0} - x_{11}x_{22}e^{i\theta_0} - x_{21}x_{12}e^{i\theta_0} - x_{21}x_{12}e^{-i\theta_0}}{x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e} - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \\ t = \frac{x_{22}x_{11}(e^{i\theta_0} + e^{-i\theta_0}) - x_{21}x_{12}(e^{i\theta_0} + e^{-i\theta_0})}{x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e} - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}}. \quad (3.76)$$

Sabendo que $\cos(\theta_0) = \frac{e^{i\theta_0} + e^{-i\theta_0}}{2}$ obtemos

$$t = \frac{2 \cos(\theta_0)(x_{22}x_{11} - x_{21}x_{12})}{x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e} - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \quad (3.77)$$

usando a propriedade que $\det[\mathbf{X}]=1$ finalmente t é:

$$t(E, k_y) = \frac{2 \cos(\theta_0)}{x_{22}e^{-i\theta_0} + x_{11}e^{i\theta_e} - x_{12}e^{i(\theta_e-\theta_0)} - x_{21}} \quad (3.78)$$

que é o coeficiente de transmissão responsável pelo transporte eletrônico na super-rede de grafeno finita quasi-periódica[133, 135].

Para algumas energias, os elétrons podem tunelar com probabilidade de 100% barreiras de potencial, quando o ângulo de incidência é um ângulo normal. No grafeno essa propriedade também é válida sendo conhecida como paradoxo de Klein. No caso não-relativístico, a transmissão decai exponencialmente com o aumento do potencial. Já no caso relativístico o tunelamento, em especial o de Klein, acontece quando temos a barreira da ordem da massa de repouso mc^2 , se tornando praticamente invisível ao elétron e conseqüentemente sem a existência da parte refletida. Quando a barreira excede duas vezes mc^2 , a independência da transmissão com a altura da barreira é mais nítida e temos a transmissão perfeita [22, 85].

3.6 Potencial de Aubry-André no Hamiltoniano de Dirac

Neste trabalho, o potencial do modelo de Aubry-André foi introduzido no Hamiltoniano de Dirac para o grafeno, onde a quasi-periodicidade acontece nas larguras das barreiras. Já as alturas dos potenciais serão 0,05 V. Assim, para representar a largura das barreiras, conforme mencionado no tópico anterior na equação 3.61, temos a letra w em que:

$$w_n = w_0 |\cos(a\pi n^\nu)|. \quad (3.79)$$

Comparando a equação 3.79 com a equação 3.12, o w_0 tem o papel parecido com o λ , entretanto, ele representa uma espécie de desordem que implementamos ao potencial. Esta desordem vai de 0 até 50 nm como poderemos identificar nos gráficos de contorno no capítulo 4 e sua ordem é de 10^{-9} . O cosseno na equação 3.79 está em módulo, pois, um valor negativo do cosseno levaria a barreira de largura negativa. Vale ressaltar que a região entre as barreiras também são moduladas por w_n , assim, ele é responsável por modular todos os pontos com ou sem barreira.

O valor de a deve ser o número irracional $\frac{\sqrt{5}-1}{2}$ que garante a quasi-periodicidade e n é a quantidade de barreiras que está sendo elevado à ν que varia de 0,2 até 2, alternando em valores de 0,2. O ângulo de incidência usado neste trabalho é $\frac{\pi}{6}$, de forma que após a incidência o ângulo de saída é próximo da normal. O número de barreiras deve ser um valor elevado, para ter uma clareza dos pontos onde temos localização e delocalização. Então usamos para o gráfico de contorno um valor de 10 mil barreiras, e posteriormente para o gráfico de linhas um valor de 50 mil barreiras.

Capítulo 4

4 Resultados

Neste capítulo apresentaremos resultados acerca da equação do coeficiente transmissão, representada por 3.78. Como deduzido no capítulo anterior, partimos do Hamiltoniano de Dirac para obter a matriz transferência e assim, conseguir encontrar a equação da transmissão. Aqui, os resultados dessa equação, serão responsáveis pelo mapeamento do transporte eletrônico na super-rede de grafeno finita.

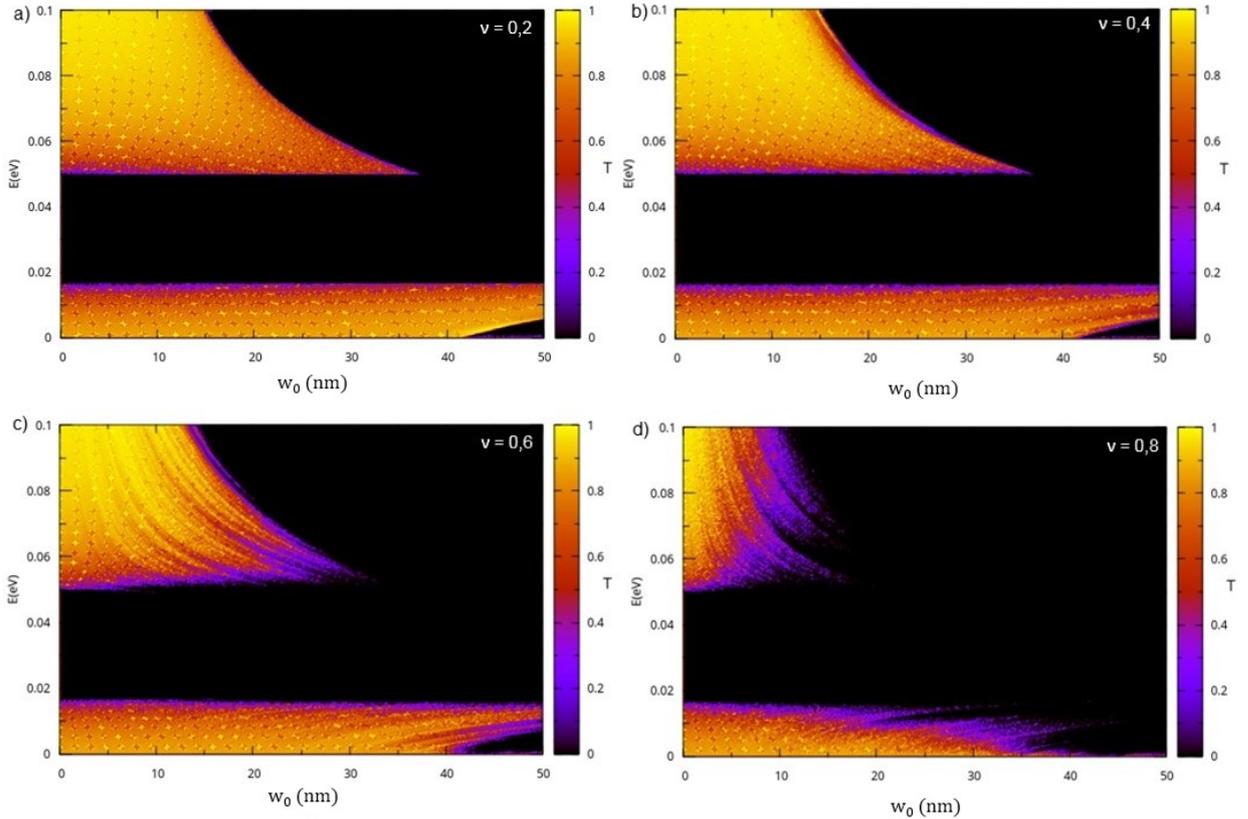


Figura 4.1: Gráfico de contorno da transmissão em função da energia e w_0 que está associada a desordem que aplicamos ao sistema.

Os gráficos da figura 4.1 mostram indícios de estados estendidos e localizados de quatro valores distintos de ν : 0,2; 0,4; 0,6 e 0,8. A barra de transmissão no lado direito de cada figura indica que quanto mais próximo de 1 (cor amarelo) mais alta é condução de

elétrons na super-rede, o que pode significar estados estendidos ou delocalizados. Quando mais próximo de 0 (preto) indica transmissão baixa e que estamos se aproximando do estado localizado, e localizado de fato, quando realmente temos 0 de transmissão. Uma forma análoga de definir o que foi ressaltado é dizer que temos um estado tipicamente metálico para valores de transmissão e estado tipicamente isolante para transmissão em 0. É importante destacar que a transmissão no estado isolante decai exponencialmente logo para as primeiras barreiras e no estado metálico temos a transmissão com valores constantes. Para os eixos x e y temos respectivamente, os valores da energia que varia entre 0 e 0,1 eV, e um fator w_0 variando de 0 até 50nm. A quantidade de barreiras inseridas no gráfico foram de 10 mil barreiras.

Conforme já mencionado, o ângulo de incidência é $\frac{\pi}{6}$ que corresponde a 30° . A escolha deste ângulo se deve ao fato que a transmissão depende de certos fatores, inclusive o ângulo de incidência do elétron. Se a incidência é normal, as barreiras tem sua influência despercebida pelo elétron devido ao tunelamento de Klein. A medida que mudamos este ângulo, é mais perceptível os efeitos destas barreiras[133].

Nos casos onde valores de ν são 0,2 e 0,4 podemos observar indícios de estados localizados e delocalizados bem definidos. Para energias entre 0 e 0.015 eV o estado provável é tipicamente metálico para praticamente todos os valores de w_0 , exceto quando w_0 atinge valor aproximado de 43 nm onde temos uma transição de fases. Neste caso temos o efeito do Tunelamento de Klein, onde basicamente para essa faixa de energia as barreiras são praticamente transparentes para os elétrons e essa propriedade é observada porque o ângulo após a incidência se aproxima da normal. Assim, a transição de fase só ocorrerá para um w_0 muito elevado, conforme mencionado.

Acima de 0.015eV e abaixo de 0.05eV temos indício de estado tipicamente isolante para qualquer valor de w_0 . Nessa faixa de energia, o *gap* é uma consequência das ondas evanescentes, sendo presente em todos os gráficos de contorno independente do valor de ν .

A transição de fase é mais evidente quando atingimos valores de energia acima de 0.05eV, pois é onde a modulação das regiões está seguindo o modelo proposto. A medida

que aumentamos o valor de w_0 percebemos um tom mais escuro do amarelo, o que indica que a transmissão está decaindo quando avançamos com os valores da desordem. O tom fica cada vez mais escuro até atingir o preto onde indica que a fase é isolante. Observamos o mesmo tom de amarelo para alguns valores de energia.

Mesmo com uma diferença pequena entre os valores de ν , começamos a visualizar uma mudança na coloração do gráfico, acusando uma mudança de valores na transmissão em determinados pontos.

Com o aumento de ν é evidente que a fase isolante começa a predominar nos gráficos. Quando ν assume valores de 0,6 e 0,8 a transição de fase acontece mais rapidamente. Em $\nu = 0,6$ o gráfico é semelhante aos valores de 0,2 e 0,4 com diferença mais perceptível em 0,05eV e 0,1eV, sendo a região onde a transmissão sofre uma mudança mais aparente. A mudança na coloração do gráfico nesta região define bem a transição de fase que está acontecendo a medida que w_0 aumenta. A região de energia entre 0 e 0,015eV também sofre alterações, porém menos drástica comparada ao gráfico de $\nu = 0,8$. A região onde indica a fase metálica cada vez é menor quando se eleva ν e a transição acontece mais rápido para aumento de w_0 . Nas faixas de energias entre 0 eV e 0,015eV, especialmente para o último, temos uma indicação de transição de fase que não é observado nos gráficos anteriores.

Próximo passo é analisar pontos específicos nas regiões localizadas e delocalizadas com gráficos de linhas. O intuito é de confirmar que as regiões dos gráficos de contorno são estados metálicos ou isolantes e também onde a transição acontece. Assim, para cada gráfico de contorno tem sua contestação de estados com os gráficos de linhas. Para cada valor de ν da figura 4.1, foram plotados pontos que mostram a transmissão em relação ao número de barreiras.

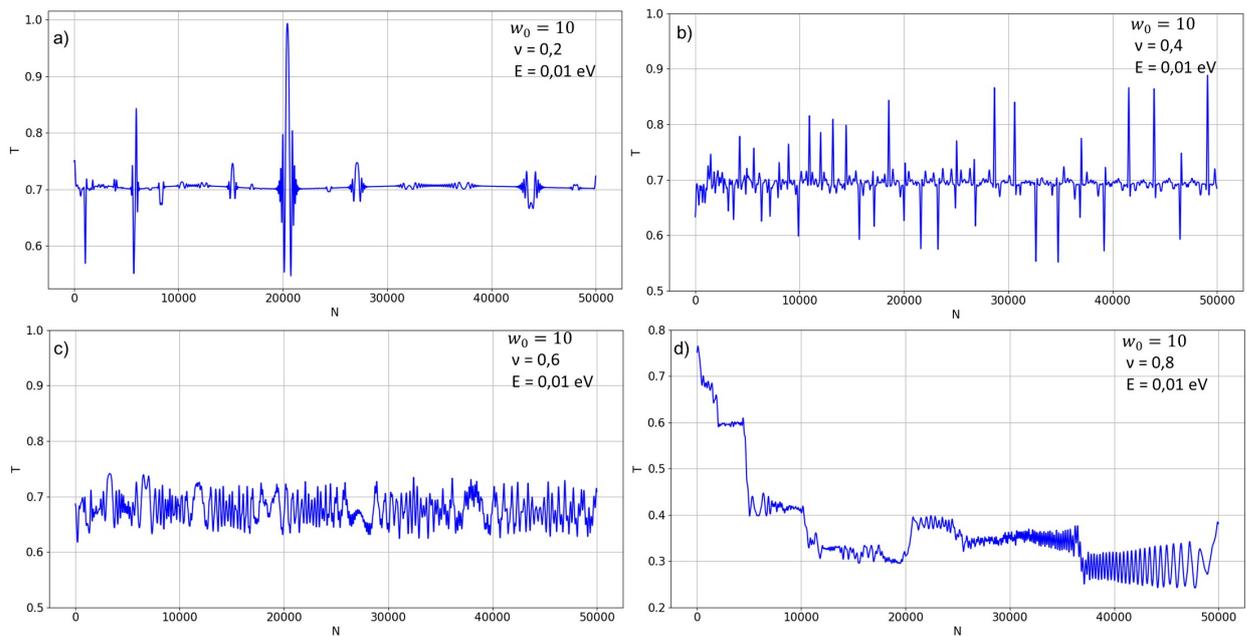


Figura 4.2: Gráficos de Transmissão por Número de Barreiras para $w_0 = 10$. (a) $\nu = 0,2$. (b) $\nu = 0,4$. (c) $\nu = 0,6$. (d) $\nu = 0,8$.

Com total de 50 mil barreiras, o intuito é mostrar que após um alto número de barreiras a transmissão sofre ou não alterações. Os gráficos da figura 4.2 foram gerados em pontos onde a região é supostamente delocalizada com a energia igual à 0,01eV, w_0 igual à 10 para cada valor de ν . Em (a) $\nu=0,2$, temos a transmissão variando entre 0,5 e 1 em até aproximadamente 20 mil barreiras. Após este número de barreiras a transmissão estabiliza por volta de 0,7. Em (b) $\nu=0,4$, a transmissão é mais padronizada seguindo valores semelhantes até as 50 mil barreiras, com os picos mais altos atingindo próximo de 0,9 e os mais baixos próximo de 0,5. Para c) $\nu=0,6$, temos a transmissão variando de 0,5 e um pouco acima de 0,7 mantendo assim por todas as 50 mil barreiras. Com $\nu=0,8$ temos a maior variação da transmissão com pico mais alto atingindo 0,8 e o mais baixo próximo de 0,2. De 0 até 10 mil barreiras a transmissão decai de 0,8 para 0,4; de 10 mil para 20 mil barreiras estabiliza a transmissão em torno de 0,3. Após as 20 mil barreiras podemos notar que a transmissão irá se manter por volta de 0,2 e 0,4.

De uma maneira mais sucinta analisaremos os próximos gráficos nas figuras 4.3 e 4.4. A figura 4.3 mostra três pontos para ν igual à 0,2 e 0,4 onde podemos visualizar a transmissão decaindo para mesma energia, entretanto diferentes valores de w_0 , sendo eles

10 nm, 29 nm e 30 nm. Em ambos os casos, temos a transmissão constante em $w_0=10$ nm, (a) e (d), mas a medida que mudamos este valor para 29 a transmissão decai, (b) e (d), especialmente em $\nu=0,4$ (b), que ela zera por volta de 10 mil barreiras, ou seja, uma transição de fase. E para 30 ela decai logo nas primeiras barreiras nos dois casos.

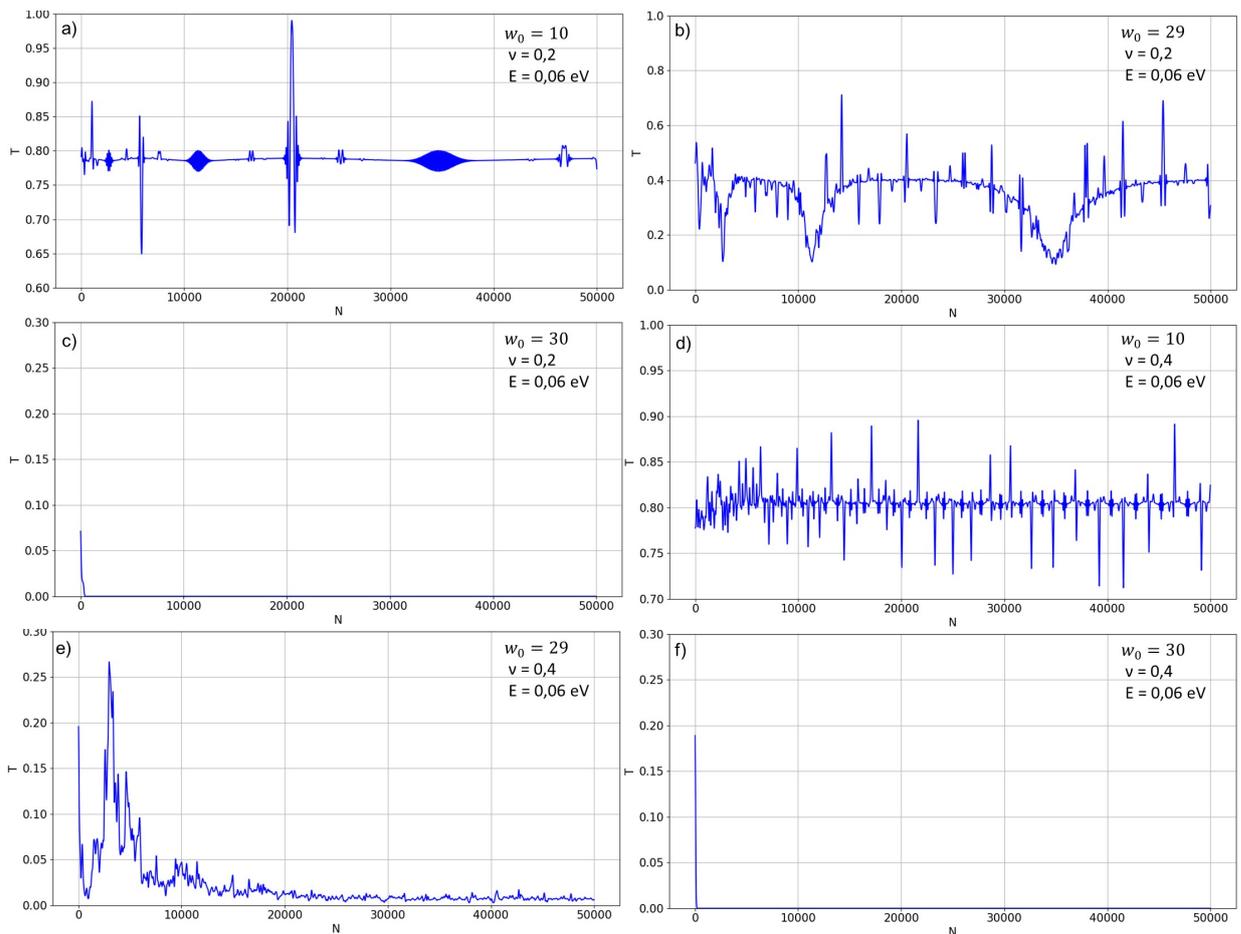


Figura 4.3: Gráficos da transmissão em relação ao número de barreiras, com energia fixada em 0,06 eV e w_0 alternando em 10 nm, 29 nm e 30 nm. Das letras (a) - (c) $\nu = 0,2$ e de (d) - (f) $\nu = 0,4$.

Na figura 4.4 temos gráficos que mostram o mesmo valor de energia e o w_0 que a figura anterior, entretanto, ν é 0,6 e 0,8. De (a)-(c) $\nu = 0,6$ e de (d)-(f) $\nu = 0,8$. Em (a) quando w_0 é 10 nm, a transmissão continua constante como nos casos anteriores. Porém, a transmissão decai mais rapidamente em (b) onde $w_0=29$ nm e também 30 nm em (c). Em (d) quando $w_0 = 10$ nm temos transmissão decaindo para zero em N igual a 30 mil e também para os outros valores de desordem.

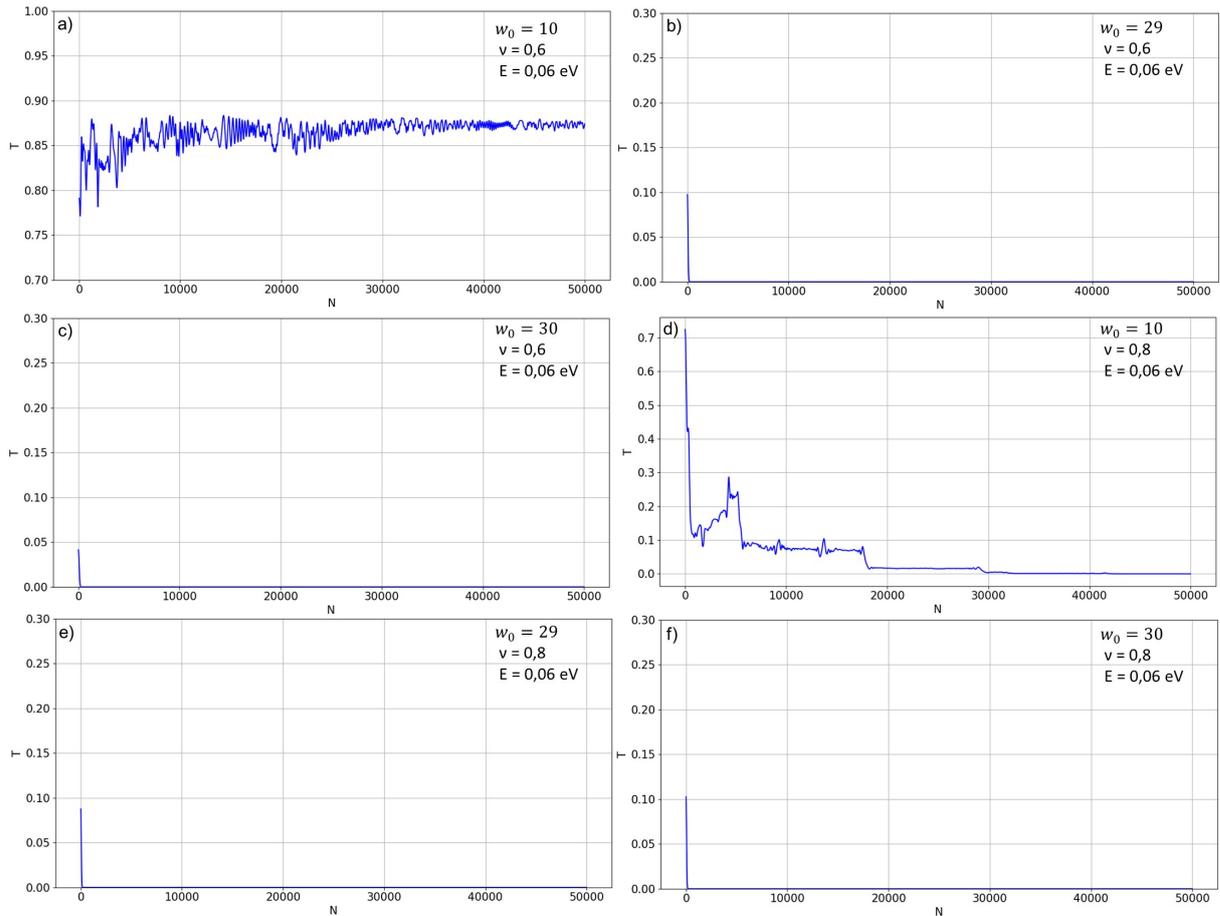


Figura 4.4: Gráficos da transmissão em relação ao número de barreiras, com energia fixada em 0,06 eV e w_0 alternando em 10 nm, 29 nm e 30 nm. Das letras (a) - (c) $\nu = 0,6$ e de (d) - (f) $\nu = 0,8$.

A medida que o valor de ν aumenta, a transmissão em uma região pode diminuir como observado em $w_0 = 29$ nm, sendo uma região metálica em ν igual a 0,2 e 0,4 (neste último acontece uma transição de delocalizado para localizado) e totalmente localizada para os valores 0,6 e 0,8 de ν . Isso comprova dependência da transmissão para ν que foi observado nos gráficos de contorno: a região preta que indica a localização, aumenta a medida que ν aumenta e isso consequentemente diminui a região delocalizada. Isso se deve ao fato de que quando ν têm valores próximos de 0, os w (as barreiras), variam lentamente de forma que localmente apresentam uma característica semelhante à periódica. Quando o valor de ν atinge valores acima ou próximos de 1, a variação das barreiras acontece mais rapidamente, ao ponto de apresentar uma certa aleatoriedade das barreiras, culminando no aparecimento de mais regiões com localização. Vale ressaltar que a variação das barreiras

estão acontecendo em suas larguras.

Quando os valores de ν aumentam para acima de 1, como no caso da figura 4.5, percebemos visualmente um padrão que indica regiões delocalizadas. Entretanto, para algumas energias e valor baixo de w_0 temos supostamente uma região delocalizada para qualquer valor de ν aqui apresentado. O Tunelamento de Klein é observado para valores mais baixos de energias e o *gap* consequente das ondas evanescentes também é observado na mesma faixa de energia.

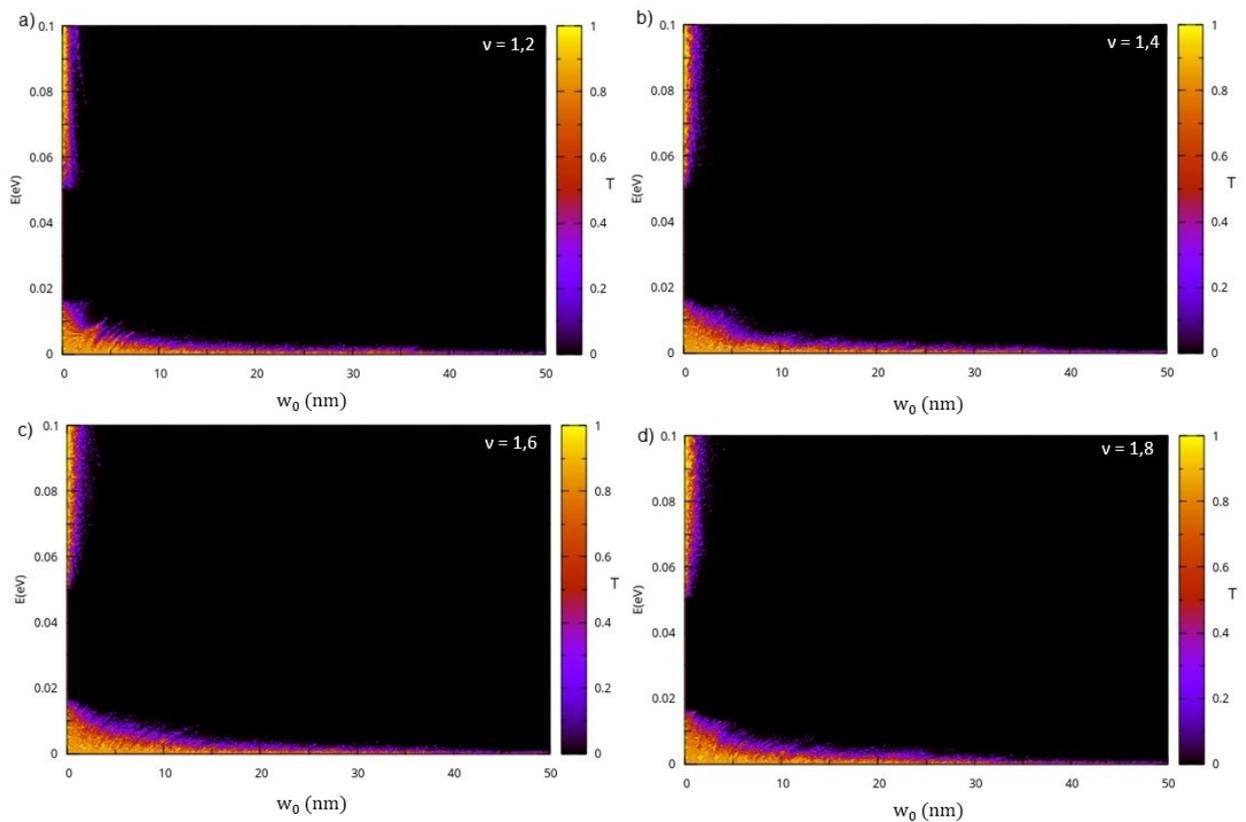


Figura 4.5 : Gráfico de contorno para valores de ν acima de 1. a) $\nu = 1,2$. b) $\nu = 1,4$. c) $\nu = 1,6$. d) $\nu = 1,8$.

Na figura 4.6, alguns pontos foram escolhidos para analisar a transmissão decaindo e a transição de fase surgindo. Estes pontos são de energia 0,01 eV e desordem 10 nm. Por mais que apresentem visualmente um padrão, veremos que alguns valores de w_0 a transição surge mais rapidamente do que outros para determinados valores de ν . Em todos os gráficos a transição ocorrem entre 0 e 10 mil barreiras, entretanto quando ν é

1,4 e 1,8 há picos de transmissão que não acontece para 1,2 e 1,6 em que praticamente não há transmissão. Isso mostra que embora visualmente os gráficos de contorno são bem parecidos a diferença pode ser comprovada analisando detalhadamente ponto a ponto, notando a mudança da transmissão.

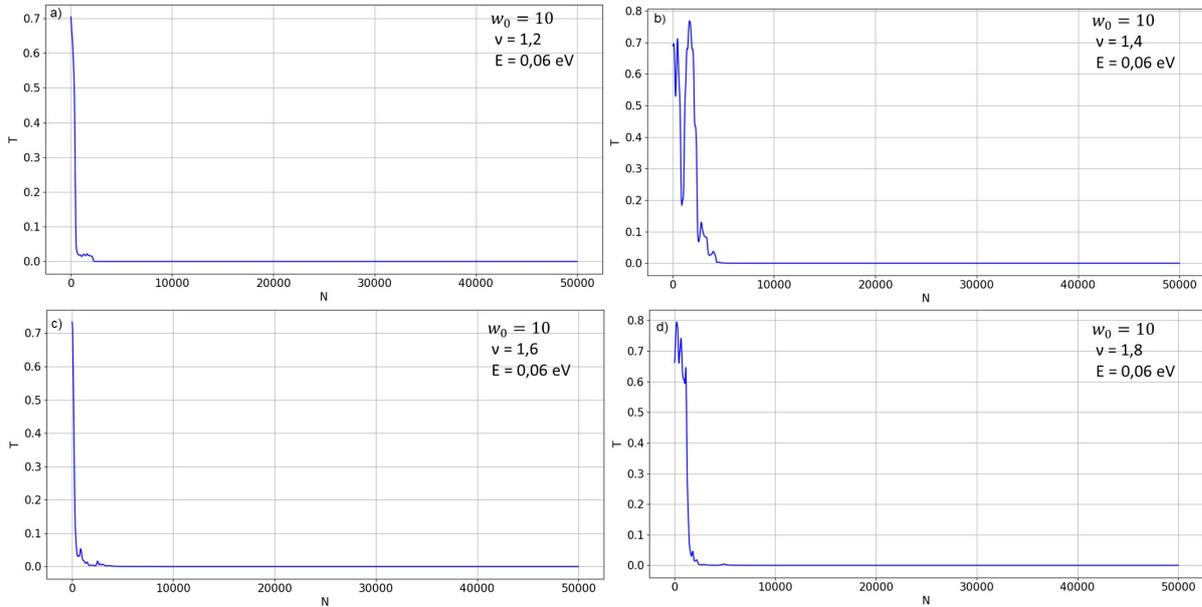


Figura 4.6: Gráficos da transmissão em relação ao número de barreiras, com energia fixada em 0,01 eV e $w_0 = 10$. Das letras (a) $\nu = 1,2$. (b) $\nu = 1,4$. (c) $\nu = 1,6$. (d) $\nu = 1,8$.

Quando ν atinge o valor de 2, temos o mesmo padrão observado nos gráficos de contorno da figura 4.5 e para energia 0,01 e $w_0 = 10$ nm praticamente não há transmissão, confirmando o que foi falado no parágrafo anterior.

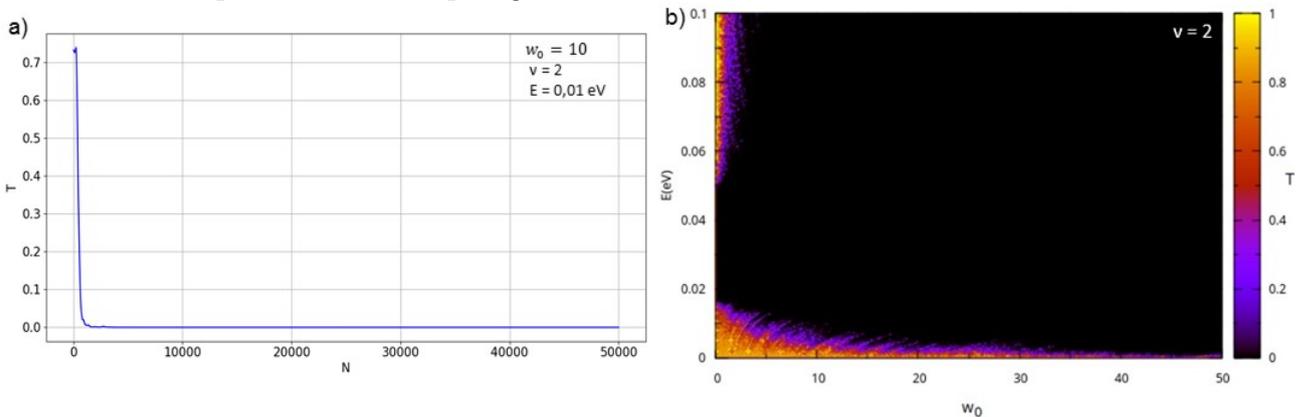


Figura 4.7: Gráfico de contorno e gráfico da transmissão em relação ao número de barreiras para $\nu = 2$.

Capítulo 5

5 Conclusão

Neste trabalho, apresentamos as características de estrutura e eletrônica do grafeno que é um dos vários alótropos do carbono. Dentre suas incríveis propriedades se destaca que para baixas energias, os elétrons no material podem ser descritos como férmions de Dirac sem massa, conforme mostrado nos tópicos 2.5 e 2.6 (conferir). Posteriormente, no capítulo 3, foi relatado o conceito de super-redes periódicas, aleatórias e quase-periódicas, sendo a última teve um foco maior, porque a modulação da super-rede estudada neste trabalho é seguindo o modelo de Aubry-André, que é um modelo quase-periodico. Ainda no capítulo 3, usamos a equação efetiva do hamiltoniano de Dirac e o método de matriz transferência, onde foi possível determinar a equação da transmissão, equação esta fundamental na determinação de regiões localizadas e delocalizadas.

As barreiras quase-periódicas de Aubry-André são descritas matematicamente pela equação 3.79 (conferir), que possui variáveis que influenciam diretamente na transmissão e conseqüentemente nas regiões metálicas e isolantes da super-rede. O cosseno é propositalmente apresentado em módulo pois valores negativos implicam em barreiras com valores negativos; a é um número irracional que garante a quase-periodicidade $\frac{-1+\sqrt{5}}{2}$; n representa quantidade de barreiras elevado por ν que representa um fator de generalização da super-rede.

Como podemos observar na figura 4.1 a região preta corresponde a região localizada, ou seja, isolante e as outra região com cor são delocalizadas (metálicas). A transição de fase que ocorre na figura 4.1, depende de dois fatores: w_0 e ν . Para certas energias temos valores críticos de w_0 onde ocorre a transição de fase e a medida que o valor de ν aumenta, esses valores mudam para essas energias conforme mostrado na figura 4.2. Isso se deve ao fato de que o valor de ν varia a largura das barreiras. Quando de ν é baixo, a variação da largura acontece lentamente e localmente temos uma periodicidade, logo precisamos de um valor muito alto de w_0 para a transição ocorrer. Para um valor muito alto de ν ,

a variação das larguras das barreiras acontecerão mais desordenadas, criando um padrão mais aleatório, ou seja, a próxima barreira será muito diferente da anterior, assim não é necessário um valor de w_0 tão alto para ocorrer a transição de fase. Com valores baixos de energia, próximo de 0, não há transições de fases ou ela ocorre depois de um valor muito elevado de w_0 . Isso é causado pelo tunelamento de Klein. Para energias muito próximo de 0 a transição de fase não ocorre, logo a transmissão é constante e temos uma região sempre metálica, independente do valor de w_0 ou ν . Entre aproximadamente 0,015eV e 0,05 eV temos um *gap* consequente das ondas evanescentes. Quando o valor da energia aumenta, em especial para 0,06 eV, é que conseguimos visualizar o modelo proposto agindo e percebemos que já existe um valor de w_0 e de ν em que acontecem as transições de fase. Assim, com estes resultados obtidos, podemos notar suas utilidades e importância para futuras aplicações do sistema em dispositivos eletrônicos, visando aumentar a capacidade de funcionamento em prol do benefício e da necessidade da humanidade.

Referências

- [1] OLIVEIRA, I. S. JESUS, V.L.B., Revisão de Física Moderna. Em: Introdução a Física do Estado Sólido. 1. ed. São Paulo, SP: Livraria da Física, 2005. cap. 1, p. 1-3.
- [2] SIMON, S.H., About Condensed Matter Physics. Em: The Oxford Solid State Basics. 1. ed. Oxford, UK, 2013. cap 1. p. 1-3.
- [3] GIROTTO, Emerson M.; SANTOS, Ivair A. Medidas de resistividade elétrica DC em sólidos: como efetuá-las corretamente. **Química Nova**, v. 25, n. 4, p. 639-647, 2002.
- [4] UFRJ. Você sabe o que é física da matéria condensada? Conexão UFRJ, 6 Nov. 2007. Disponível em: < <https://conexao.ufrj.br/2007/11/voce-sabe-o-que-e-fisica-da-materia-condensada/> >. Acesso em: 11 de jan. 2022.
- [5] ALTLAND, A., SIMONS, B. Preface. Em: Condensed Matter Field Theory. 2. ed. Cambridge, UK, 2010, p. ix.
- [6] ASHCROFT, N. W., MERMIN, N. D. Solid state physics, ed.1, Cengage Learning. 2010.
- [7] GROSSO, G., PARRAVICINI, G.P. Electrons in one-dimensional Periodic Potentials. Em: Solid States Physics. 2. ed. 2014: Elsevier. cap.1 p. 1-5,
- [8] MARINO, E. C. Independent Electrons and Static Crystals. Em: Quantum Field Theory Approach to Condensed Matter Physics. 1. ed. 2017: Cambridge, cap. 1. p. 1-5.
- [9] KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics. 8 ed. 2005: John Wiley Sons, Inc. cap. 1 p. 1 -10.
- [10] BASSALO, José Maria Filardo. A crônica da Física do Estado Sólido: II. Teoria dos Metais. **Rev. Bras. Ensino Física**, v. 15, p. 1-4, 1993.
- [11] HAN, Sang A.; BHATIA, Ravi; KIM, Sang-Woo. Synthesis, properties and potential applications of two-dimensional transition metal dichalcogenides. **Nano Convergence**, v. 2, n. 1, p. 1-14, 2015.
- [12] SOUZA, L.A.C. **Caracterização tecnológica de minerais lamelares para ob-**

-
- tenção de materiais bidimensionais.** 2017. 117 f. Dissertação (Mestrado em Física). Universidade Presbiteriana Mackenzie, São Paulo, 2019.
- [13] MEDRANO, G. M. ROSU, H. C. GONZÁLEZ, L. T. Grafeno: el alótopo más prometedor del carbono. **Acta Universitaria**, v. 22, n. 3, p. 20-23, 2012.
- [14] ALENCAR, E. SANTANA, D. Processos de obtenção do grafeno, suas aplicações e sua importância para o Brasil. **Oswaldo Cruz paper**, 2017.
- [15] SANTOS, M. C. **Estudo da supercondutividade na bicamada de grafeno rotacionada e intercalada com carbono.** 2022. 60f. Dissertação (Mestrado em Física). Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2022.
- [16] NOVOSELOV, K. S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, v. 306, n. 5696, p. 666-669, 2004.
- [17] BARON, M. El Grafeno. una aventura espacial, hecha a base de preguntas. El Premio Nobel de Física para 2010. 2012.
- [18] BASSALO, José Maria Filardo. O prêmio Nobel de Física de 2010. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 28, n. 1, p. 205-213, 2011
- [19] NOVOSELOV, K. S. et al. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. **nature**, v. 438, n. 7065, p. 197-200, 2005.
- [20] PIMENTA, M. A. **Dispersão de fônons na vizinhança do ponto de Dirac do grafeno por espalhamento Raman.** 2008. 58f. Dissertação (Mestrado em Física). Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2008.
- [21] DE DIOS-LEYVA, M.; CUAN, R. Group velocity in finite graphene superlattices. **Superlattices and Microstructures**, v. 83, p. 488-497, 2015.
- [22] TEXEIRA, J. D. S. **Tunelamento ressonante de férmions massivos de Dirac em sistemas de simples e dupla barreiras em monocamada de grafeno.** 2015. 115P. Tese (Doutorado). Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2015.
- [23] JÚNIOR, N. L. S. **Tunelamento ressonante através de impurezas doadoras em estruturas de dupla barreira;** 1994. 108f. Tese (Doutorado). Instituto de Física

de São Carlos. São Carlos, 1994.

- [24] PEREIRA, J. M. et al. Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene. **Semiconductor science and technology**, v. 25, n. 3, p. 033002, 2010.
- [25] KHOEINI, F. Combined effect of oriented strain and external magnetic field on electrical properties of superlattice-graphene nanoribbons. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 48, n. 40, p. 405501, 2015.
- [26] BAI, C. ZHANG, X.. Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice. **Physical Review B**, v. 76, n. 7, p. 075430, 2007.
- [27] BARBIER, M.; VASILOPOULOS, P.; PEETERS, F. M. Dirac electrons in a Kronig-Penney potential: Dispersion relation and transmission periodic in the strength of the barriers. **Physical Review B**, v. 80, n. 20, p. 205415, 2009.
- [28] BLIOKH, Y. P. et al. Transport and localization in periodic and disordered graphene superlattices. **Physical Review B**, v. 79, n. 7, p. 075123, 2009.
- [29] ZHAO, P.L. CHEN, X. Electronic band gap and transport in Fibonacci quasi-periodic graphene superlattice. **Applied Physics Letters**, v. 99, n. 18, p. 182108, 2011.
- [30] ESMAILPOUR, A; MESHKIN, H; ASGARI, R. Conductance of graphene superlattices with correlated disorder in velocity profiles. **Solid State Communications**, v. 152, n. 20, p. 1896-1901, 2012.
- [31] SENA, S. H. R. et al. Fractal spectrum of charge carriers in quasiperiodic graphene structures. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 22, n. 46, p. 465305, 2010.
- [32] DHARMA-WARDANA, M. W. C. et al. Raman scattering in Fibonacci superlattices. **Physical review letters**, v. 58, n. 17, p. 1761, 1987.
- [33] X. Chen, P.-L. Zhao, Q.-B. Zhu, Double-periodic quasi-periodic graphene superlattice: non-bragg band gap and electronic transport, **Journal of Physics D: Applied Physics**, 46 (1) (2013) 015306.
- [34] JÄRREND AHL, K. et al. An X-ray study of generalized Cantor superlattices. **Thin solid films**, v. 246, n. 1-2, p. 120-125, 1994.

-
- [35] LI, C. et al. Electronic band gaps and transport properties in aperiodic bilayer graphene superlattices of Thue-Morse sequence. **Applied Physics Letters**, v. 103, n. 17, p. 172106, 2013.
- [36] HUANG, H. et al. Electronic transport and shot noise in Thue-Morse sequence graphene superlattice. **Journal of Applied Physics**, v. 113, n. 4, p. 043702, 2013.
- [37] MA, Tianxing et al. Electronic band gaps and transport in aperiodic graphene superlattices of Thue-Morse sequence. **Applied Physics Letters**, v. 100, n. 25, p. 252402, 2012.
- [38] TIWARI, R. P.; STROUD, D. Erratum: Tunable band gap in graphene with a noncentrosymmetric superlattice potential [Phys. Rev. B 79, 205435 (2009)]. **Physical Review B**, v. 80, n. 15, p. 159901, 2009.
- [39] MAKSIMOVA, G. M. et al. Graphene superlattice with periodically modulated Dirac gap. **Physical review B**, v. 86, n. 20, p. 205422, 2012.
- [40] MASIR, M. R. et al. Direction-dependent tunneling through nanostructured magnetic barriers in graphene. **Physical Review B**, v. 77, n. 23, p. 235443, 2008.
- [41] DELL'ANNA, L.; DE MARTINO, A. Multiple magnetic barriers in graphene. **Physical Review B**, v. 79, n. 4, p. 045420, 2009.
- [42] GHOSH, S; SHARMA, M. Electron optics with magnetic vector potential barriers in graphene. **Journal of Physics: condensed matter**, v. 21, n. 29, p. 292204, 2009.
- [43] ZHAI, F; CHANG, K. Valley filtering in graphene with a Dirac gap. **Physical Review B**, v. 85, n. 15, p. 155415, 2012.
- [44] PELLEGRINO, F. M. D.; ANGILELLA, G. G. N.; PUCCI, R. Resonant modes in strain-induced graphene superlattices. **Physical Review B**, v. 85, n. 19, p. 195409, 2012.

-
- [45] KRSTAJIĆ, P. M.; VASILOPOULOS, P. Ballistic transport through graphene nanostructures of velocity and potential barriers. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 23, n. 13, p. 135302, 2011.
- [46] DOGGEN, Elmer VH; MIRLIN, Alexander D. Many-body delocalization dynamics in long Aubry-André quasiperiodic chains. **Physical Review B**, v. 100, n. 10, p. 104203, 2019.
- [47] DIDOV, Alexandr A.; KON'KOV, Leonid E.; MAKAROV, Denis V. Transport through degenerate tori and quantum-to-classical crossover in a driven Aubry-Andre model. **The European Physical Journal B**, v. 93, n. 1, p. 1-8, 2020.
- [48] HARPER, P. G.. Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field. Proceedings of the Physical Society. **Section A**, v. 68, n. 10, p. 874, 1955.
- [49] AUBRY, Serge; ANDRÉ, Gilles. Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices. Ann. **Israel Phys. Soc.**, v. 3, n. 133, p. 18, 1980.
- [50] EVANGELOU, S. N.; PICHARD, J.-L. Critical quantum chaos and the one-dimensional Harper model. **Physical review letters**, v. 84, n. 8, p. 1643, 2000.
- [51] BRASIL. Materiais de Carbono e os Avanços Tecnológicos. 16a Feira Internacional de Máquinas-Ferramenta e Sistemas Integrados de Manufatura, São Paulo, SP, 20 a 24 jun. 2017. Disponível em: < <http://www.cimm.com.br/portal/noticia/exibirnoticia/7892-materiais-de-carbono-e-os-avancos-tecnologicos>>. Acesso em: 12 de mar. 2022.
- [52] BRITANNICA, The Editors of Encyclopaedia. "carbon". Encyclopedia Britannica, 2 Fev. 2021. Disponível em: <<https://www.britannica.com/science/carbon-chemical-element>>. Acesso em: 14 de mar. 2022.
- [53] WHITE, D. P. Ligação Covalente e Superposição de Orbitais. In: Química, a Ciência Central. 9. ed. São Paulo, SP: Pearson Prentice Hall, 2005. cap 9, p. 303-309.
- [54] RAMOS, J. M. IZOLANI, A. O. TÉILEZ, C. A. SANTOS, M. J. G. O Conceito de Hibridização — Revista Química Nova na Escola do Ministério da Educação - Portal do Professor, Rio de Janeiro, n. 28, p.24-27, 2008.
- [55] TAVARES, I. M. **Efeitos de campo magnético dependente da posição em**

-
- monocamadas e bicamadas de grafeno.** 2014. 60 f. Dissertação (Mestrado em Física). Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2014.
- [56] R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres, A. K. Geim, Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene, *Science* (New York, N.Y.) 320, 1308. (2008).
- [57] BRASIL. A Tecnologia do grafeno desembarca no Brasil. *Revista Ciência Hoje*, Rio de Janeiro, RJ, 07 jun. 2013. Disponível em: < <http://www.cienciahoje.org.br/noticia/v/ler/id/2950/n/atecnologiadografenodesembarcanobrasil>>. Acesso em: 14 mar. 2022.
- [58] NETO, Antonio Castro, Francisco Guinea, e Nuno Miguel Peres. Drawing conclusions from graphene. **Physics World** 19.11 (2006): 33.
- [59] GEIM, Andre Konstantin. Graphene: status and prospects. **science** 324.5934 (2009):1530-1534.
- [60] JANUARIO, A. C., B. R. Remédio, and R. A. Sousa. "PRODUÇÃO DE GRAFENO PELO MÉTODO DE ESFOLIAÇÃO QUÍMICA E SUAS POTENCIAIS APLICAÇÕES".
- [61] BARCELOS, Ingrid David. "Crescimento de Grafeno por CVD em folhas de Cobre." (2011).
- [62] CASAN, Anderson, et al. "MICROESFOLIAÇÃO MECÂNICA DO GRAFITE PIROLÍTICO FORTEMENTE ORIENTADO." Congresso de Pesquisa e Extensão da Faculdade da Serra Gaúcha. Vol. 3. No. 3. 2015.
- [63] ARAÚJO, T. Q. **Propriedades eletrônicas de super-redes de grafeno com uma modulação da velocidade de Fermi** 2017, 91f. Dissertação (Mestrado). Departamento de Física, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2017.
- [64] DOS SANTOS, JMB Lopes. O Grafeno. **Revista de Ciência Elementar**, v. 2, n. 2, 2014.
- [65] SOUZA, Eunezio Antonio De. Mackgrafe: centro de pesquisas avançadas em grafeno e nanomateriais (grafeno: fotônica e opto-eletrônica, colaboração upm-nus). 2016.

-
- [66] DE JESUS, Karla Acemano; FREIRE, Estevão; GUIMARÃES, Maria José OC. Grafeno: aplicações e tendências tecnológicas. 2012.
- [67] GUIMARÃES, Maria José OC, and Karla Acemano de Jesus. Estudo da prospecção tecnologia em Grafeno.
- [68] NANOGRAFI. 60 application areas of graphene, 18 jul 2019. Disponível em: <<https://nanografi.com/blog/60-uses-of-graphene/>> Acesso em: 16 de mar 2022.
- [69] INBEC.O que é grafeno e quais suas aplicações na Construção Civil? 20 de fev 2020. Disponível em: < <https://inbec.com.br/blog/o-que-grafeno-quais-suas-aplicacoes-construcao-civil> >. Acesso em: 16 de mar 2022.
- [70]MANCHESTER. Graphene. 3 de jun. 2014. Disponível em: <<https://www.graphene.manchester.ac.uk/learn/applications/>>. Acesso em: 16 de mar 2022.
- [71]KOTZ, J. C., TEICHEL, P. M. Ligações e Estrutura Molecular: Hibridização de Orbitais Moleculares. Em: Química Geral e Reações Químicas. 5 ed. São Paulo, SP: Cengage Learning, 2005. cap 10, p. 345 – 350.
- [72] BROWN, LEMAY BURSTEN, Estrutura eletrônica dos átomos. Em: Química a ciencia central. 9.ed.São Paulo, SP: Pearson Prentice Hall, 2005. cap 6 , p. 195-200.
- [73] BARBOSA, Luiz Claudio de Almeida, Hibridização dos Orbitais e forma tridimensional das moléculas. Em: Introdução a Química Organica. 2. ed. São Paulo, SP: Pearson Prentice Hall, 2011. cap. 1 p. 6-10.
- [74] ALFONSI, Jessica.**Small crystal models for the electronic properties of carbon nanotubes**. 2008. 169 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia dos Materiais, Dipartimento di Scienze Chimiche, University of Padova, Padova, 2008.
- [75]PETER, A., JONES,L. Formas e Estruturas das Moléculas. Em: Princípios de Química.5. ed. São Paulo, SP: Bookman, 2012. cap. 3, p. 93-120
- [76]TUCEK, Jiri et al. Emerging chemical strategies for imprinting magnetism in graphene and related 2D materials for spintronic and biomedical applications. **Chemical Society Reviews**, mar. 2018. Disponível em: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/cs/c7cs00288b>. Acesso em: 18 mar. 2022.

-
- [77] BROWN, Theodore L. et al. *Electronic Structure of Atoms*. Em: CHEMISTRY The Central Science. 12. ed. USA: Prentice Hall, 2011. cap. 6, p. 219-225.
- [78] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. **Physical review**, v. 71, n. 9, p. 622, 1947.
- [79] BUENO, Maria Jainnara. **Propriedades Eletrônicas de Grafeno com Defeito**. 2011. 84 f. Tese (Doutorado) - Curso de Física, Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2011.
- [80] CUNHA, A. M. C.. **Correspondência entre ondas de spin de um ferromagneto em uma rede favo de mel e a banda de energia do grafeno**. 2014. 88 f. Tese (Doutorado) - Curso de Física, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2014.
- [81] LÜ, Tie-Yu et al. Tuning the indirect–direct band gap transition of SiC, GeC and SnC monolayer in a graphene-like honeycomb structure by strain engineering: a quasiparticle GW study. **Journal of Materials Chemistry**, v. 22, n. 19, p. 10062-10068, 2012.
- [82] DARTORA, C. A.; JIMENEZ, Miguel J. Saldaña; ZANELLA, Fernando. Os fundamentos da física dos férmions de Dirac sem massa em (1+ 2)-D e o grafeno. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 37, p. 3301-1-3301-13, 2015.
- [83] LIMA, D. B. D. **Variações do Grafeno: Uma abordagem AB–INIITIO de novas estruturas bidimensionais**. 2012. 155 f. Tese (Doutorado) – Curso de Ciências, Departamento de Engenharia e Sistemas Eletrônicos, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.
- [84] JIMENEZ, M. J. S. **Estudo de transporte e tunelamento quântico em estruturas de grafeno dopadas**. 2015. 82f. Tese (Doutorado) - Curso de Física, Departamento de Engenharia e ciências dos materiais, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2015.
- [85] NOGUEIRA, N.P. **Transporte de cargas em grafenos via tunelamento quântico** 2012. 74f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Ciências dos Materiais, Departamento de Física, Universidade Federal do Vale do São Francisco, Juazeiro, 2012.
- [86] GUAYLLAS, S. J L. **Estudio Teórico computacional de las propiedades es-**

estructurales y electrónicas de Grafeno y Germaneno con el enfoque de la teoría del funcional de la densidad. 2016. Trabalho de Conclusão de Curso. Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

[87] REICH, Stephanie et al. **Tight-binding description of graphene.** *Physical Review B*, v. 66, n. 3, p. 035412, 2002.

[88] NASCIMENTO, C. M. **Trasnporte eletrônico em nanofitas de grafeno sob a influência de fatores externos, via primeiro princípios**2012, 71f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Departamento de Ciências exatas e naturais, Universidade Federal do Pará, Belém, 2012.

[89] CASTRO, L. V. D. **Método Tight-Binding aplicado a nanofita de grafeno com campo elétrico.** 2014. 48 f. TCC (Graduação) - Curso de Física, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2014

[90] LINS, A. R. D. S. **Estudo dos efeitos da modulação da velocidade de Fermi na polarização dos Vales no grafeno.** 2018. 69 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Departamento de Física, Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2018.

[91] NETO, AH Castro et al. The electronic properties of graphene. **Reviews of modern physics**, v. 81, n. 1, p. 109, 2009.

[92] MUÑOZ, W. A. **Efeitos de desordem e localização eletrônica em bicamada de grafeno.** 2010. 63 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2010.

[93] MECKLENBURG, Matthew; REGAN, B. C. Spin and the honeycomb lattice: lessons from graphene. **Physical Review Letters**, v. 106, n. 11, p. 116803, 2011.

[94] PEREIRA, Vitor M.; NETO, AH Castro; PERES, N. M. R. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. **Physical Review B**, v. 80, n. 4, p. 045401, 2009.

[95] GUNLYCKE, Daniel; WHITE, Carter T. Tight-binding energy dispersions of armchair-edge graphene nanostrips. **Physical Review B**, v. 77, n. 11, p. 115116, 2008.

[96] MAFRA, D. L. **Dispersão de fônons na vizinhança do ponto de Dirac do**

-
- grafeno por espalhamento Raman**. 2008. 58 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2008.
- [97] ALVES, R. D. O. **Dinâmica eletrônica em grafeno na presença de um campo magnético externo** . 2015. 65 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Universidade Federal da Campina Grande, Campina Grande, 2015.
- [98] GUO, Hao; CHIEN, Chih-Chun; HE, Yan. Theories of linear response in BCS superfluids and how they meet fundamental constraints. **Journal of Low Temperature Physics**, v. 172, n. 1, p. 5-46, 2013.
- [99] HORNG, Jason et al. Drude conductivity of Dirac fermions in graphene. **Physical Review B**, v. 83, n. 16, p. 165113, 2011.
- [100] NAIR, Rahul Raveendran et al. Fine structure constant defines visual transparency of graphene. **science**, v. 320, n. 5881, p. 1308-1308, 2008.
- [101] DE MARTINO, A.; DELL'ANNA, L.; EGGER, R. Magnetic confinement of massless Dirac fermions in graphene. **Physical review letters**, v. 98, n. 6, p. 066802, 2007.
- [102] KATSNELSON, M. I.; NOVOSELOV, K. S. Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics. **Solid State Communications**, v. 143, n. 1-2, p. 3-13, 2007.
- [103] FALCOVSKY, L. A.; PERSHOGUBA, S. S. Optical far-infrared properties of a graphene monolayer and multilayer. **Physical Review B**, v. 76, n. 15, p. 153410, 2007.
- [104] MALKO, Daniel et al. Competition for graphene: graphynes with direction-dependent Dirac cones. **Physical review letters**, v. 108, n. 8, p. 086804, 2012.
- [105] PLETIKOSIĆ, Ivo et al. Dirac cones and minigaps for graphene on Ir (111). **Physical review letters**, v. 102, n. 5, p. 056808, 2009.
- [106] GRÜNEIS, Alexander et al. Tight-binding description of the quasiparticle dispersion of graphite and few-layer graphene. **Physical Review B**, v. 78, n. 20, p. 205425, 2008.

-
- [107] COLUSSI, M. L. **Investigação teórica sobre possíveis aplicações na eletrônica de nano fios de AlN, GaN e InN: Um estudo de primeiros princípios** . 2012. 113 f. Tese (Doutorado), Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria 2012.
- [108] LIMA, J. R.F. Electronic structure of a graphene superlattice with a modulated Fermi velocity. **Physics Letters A**, v. 379, n. 20-21, p. 1372-1376, 2015.
- [109] PENELLO, G. M. **Investigação teórica e experimental do papel de super-redes em fotodetectores de infravermelho médio baseados em poços quânticos** . 2013. 174 f. Tese (Doutorado), Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.
- [110] ALBUQUERQUE, E. L., COTTAM, M. G. Periodic and Quasiperiodic Structures. Em: *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*. 1. ed. Elsevier, 2004. cap 2, p. 25-38.
- [111] ZHAO, Pei-Liang; CHEN, Xi. Electronic band gap and transport in Fibonacci quasiperiodic graphene superlattice. **Applied Physics Letters**, v. 99, n. 18, p. 182108, 2011.
- [112] MA, Tianxing et al. Electronic band gaps and transport in aperiodic graphene superlattices of Thue-Morse sequence. **Applied Physics Letters**, v. 100, n. 25, p. 252402, 2012.
- [113] XU, Yi et al. Electronic band gaps and transport in Cantor graphene superlattices. **Superlattices and Microstructures**, v. 80, p. 63-71, 2015.
- [114] PEIXOTO, A. S. **Dois elétrons interagentes em cadeias aperiódicas** . 2014. 44 f. Dissertação (Mestrado), Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2014.
- [115] SANTOS, J. L. L **Localização e espectro de absorção em sistemas eletrônicos com correlação tipo exponencial alongada na distribuição da desordem**. 2013. 71 f. Dissertação (Mestrado), Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2013.
- [116] SANTOS, I. F. **Localização e espectro de absorção em sistemas eletrônicos com correlação tipo exponencial alongada na distribuição da desordem**, 2007. 58 f. Dissertação (Mestrado), Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2007.

-
- [117] MOURA, F. A. B. F. **Transição de Anderson em Sistemas de Baixa Dimensionalidade com Desordem Correlacionada**. 2003, 143 f. Tese(Doutorado), Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2003.
- [118] PERES, M. L. **Localização de Anderson e Transição Metal-Isolante em Filmes de $Pb_{1-x}Eu_xTe$ do tipo p** . 2008, 144f. Tese (Doutorado), Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008.
- [119] KRAMER, Bernhard; MACKINNON, Angus. Localization: theory and experiment. **Reports on Progress in Physics**, v. 56, n. 12, p. 1469, 1993.
- [120] ANDERSON, Philip W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical review**, v. 109, n. 5, p. 1492, 1958.
- [121] ABRAHAMAS, Elihu et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. **Physical Review Letters**, v. 42, n. 10, p. 673, 1979.
- [122] LIFSHITZ, I. M.; GREDESKUL, S. A.; PASTUR, L. A. Introduction to the Theory (1988). Introduction to the theory of disordered systems. New York, Wiley.
- [123] GANESHAN, Sriram; SUN, Kai; SARMA, S. Das. Topological zero-energy modes in gapless commensurate Aubry-André-Harper models. **Physical review letters**, v. 110, n. 18, p. 180403, 2013.
- [124] YAHYAVI, Mohammad; HETÉNYI, Balázs; TANATAR, Bilal. Generalized Aubry-André-Harper model with modulated hopping and p-wave pairing. **Physical Review B**, v. 100, n. 6, p. 064202, 2019.
- [125] KRAUS, Yaacov E.; ZILBERBERG, Oded. Topological equivalence between the Fibonacci quasicrystal and the Harper model. **Physical review letters**, v. 109, n. 11, p. 116404, 2012.
- [126] BIDDLE, J. et al. Localization in one-dimensional lattices with non-nearest-neighbor hopping: Generalized Anderson and Aubry-André models. **Physical Review B**, v. 83, n. 7, p. 075105, 2011.
- [127]HIRAMOTO, Hisashi; KOHMOTO, Mahito. Electronic spectral and wavefunction properties of one-dimensional quasiperiodic systems: a scaling approach. **International**

Journal of Modern Physics B, v. 6, n. 03n04, p. 281-320, 1992.

[128] SARMA, S. Das; HE, Song; XIE, X. C. Mobility edge in a model one-dimensional potential. **Physical review letters**, v. 61, n. 18, p. 2144, 1988.

[129] HIRAMOTO, Hisashi; KOHMOTO, Mahito. Scaling analysis of quasiperiodic systems: Generalized Harper model. **Physical Review B**, v. 40, n. 12, p. 8225, 1989.

[130] TIMMEL, Abigail; MELE, E. J. Dirac-Harper theory for one-dimensional moiré superlattices. **Physical Review Letters**, v. 125, n. 16, p. 166803, 2020.

[131] PERES, N. M. R. Scattering in one-dimensional heterostructures described by the Dirac equation. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 21, n. 9, p. 095501, 2009.

[132] WANG, Li-Gang; ZHU, Shi-Yao. Electronic band gaps and transport properties in graphene superlattices with one-dimensional periodic potentials of square barriers. **Physical Review B**, v. 81, n. 20, p. 205444, 2010.

[133] XU, Yi; HE, Ying; YANG, Yanfang. Transmission gaps in graphene superlattices with periodic potential patterns. **Physica B: Condensed Matter**, v. 457, p. 188-193, 2015.

[134] ARAUJO, T. Q.; LIMA, Jonas RF. Periodic to quasi-periodic graphene superlattice transition by Fermi velocity modulation. **Physics Letters A**, v. 381, n. 37, p. 3228-3235, 2017.

[135] LIU, Zheng-Fang; WU, Qing-Ping; LIU, Nian-Hua. Electronic energy band and transport properties in monolayer graphene with periodically modulated magnetic vector potential and electrostatic potential. **Communications in Theoretical Physics**, v. 57, n. 2, p. 315, 2012.

[136] JOHNSTONE, Dean; ÖHBERG, Patrik; DUNCAN, Callum W. The Bose-Glass Phase in Mean-Field Quasicrystalline Systems. **arXiv preprint arXiv:2008.08584**, 2020.