

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**Propriedades de Transporte em Barreiras Magnéticas em  
Grafeno**

**EDVAM DE OLIVEIRA NUNES**

**Orientador: Prof. Dr. ANTÔNIO CARLOS RODRIGUES BITTENCOURT**

**MANAUS – AM**

**EDVAM DE OLIVEIRA NUNES**

**Propriedades de Transporte em Barreiras Magnéticas em  
Grafeno**

**Tese de doutorado apresentada  
ao Departamento de Física da  
Universidade Federal de São  
Carlos, como parte dos requisi-  
tos para a obtenção do título de  
Doutor em Física.**

**Orientador:**

**Prof. Dr. ANTÔNIO CARLOS RODRIGUES BITTENCOURT**

**Manaus, Abril de 2015**

Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da Biblioteca Comunitária UFSCar  
Processamento Técnico  
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

N972p Nunes, Edvam de Oliveira  
Propriedades de transporte em barreiras  
magnéticas em grafeno / Edvam de Oliveira Nunes. --  
São Carlos : UFSCar, 2016.  
99 p.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São  
Carlos, 2015.

1. Grafeno. 2. Barreiras magnéticas. 3.  
Transporte. 4. Condutância. I. Título.

---

**Folha de Aprovação**

---

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Tese de Doutorado do candidato Edvam de Oliveira Nunes, realizada em 30/04/2015:



---

Prof. Dr. Antonio Carlos Rodrigues Bittencourt  
UFSCar/UFAM



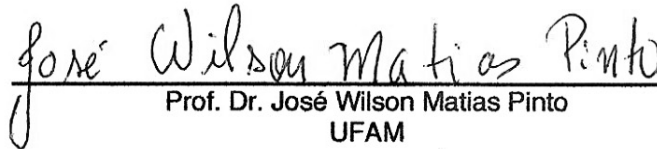
---

Prof. Dr. Gilmar/Eugenio Marques  
UFSCar




---

Prof. Dr. Antonio Carlos Alonge Ramos  
UFCA



---

Prof. Dr. José Wilson Matias Pinto  
UFAM



---

Prof. Dr. Sérgio Michielon de Souza  
UFAM

## AGRADECIMENTOS

A Deus, Autor e Consumador de minha Fé.

Ao Professor Dr. A. C. R. Bittencourt pela orientação, incentivo, sugestões, observações e paciência.

A todos os professores do Departamento de Pós-Graduação em Física que contribuíram para minha formação, em especial aos professores Hidembergue Ordozgoith da Frota e José Wilson Matias Pinto pelas observações.

A minha esposa Amanda Félix, pela compreensão, paciência e amor, símbolo de dedicação.

Aos meus pais, Maria Zilda de Oliveira Nunes e Manoel Florêncio Nunes, que sempre estiveram ao meu lado. Aos meus irmãos que me acompanharam nessa longa jornada: Andréa, Adriana, Edson, Eliane, Silvia, Simone e Erian. Agradeço as orações dos amigos e irmãos da Igreja Batista pelo incentivo e orações. Agradeço à Fátima, Telma, Adalberto e Geyza, Éder e Elielte.

Aos meus sobrinhos por quem tenho tanta estima: Moisés, Thiago, Amanda Gláucia e todos os demais.

Agradecimentos especiais a Lina França, Elane Santos, Jeisy Matos, Cristiane Nascimento, José Paulo, Andrezza Bomfim, Leide da Cantina da Física, Lilnara Oliveira. Aos estimados amigos Marluce Mineiro, Maria de Fátima, Elaine Colles, Placilene, Cristiane Guedes, Katyuce Pinheiro e Adriane Brandão. Aos coordenadores Edimar, Ricardo Barbosa, Alzira, Marlene, Daniel e Karen Prado, meu muito obrigado pela vossa compreensão neste período de estudo e pesquisa.

Aos professores que muito estimo: Marcicley Andrade, Júlio César, Joyce Freitas e tantos outros do Colégio Amazonense Dom Pedro II e da UniNorte Laureate. Aos gestores Antônio Carlos Nogueira de Araújo e Ana Goreth: grato pela cordialidade com este professor e físico que neste momento é bastante grato.

Aos que, antes alunos agora pessoas que considero especiais: Davi Castro, Josélia Pinheiro, Glenda Nayara, Keila Barbosa, Karol Castro, Stephanie Lorena, Augusto Manfredini e tantos outros por quem guardo uma grande consideração.

Aos amigos e colegas da Pós-Graduação: José Dílson, Emanuel, Denise, Wendell, Márcio, Arnaldo, Robson Lourenço e outros como Adalberto Miranda com quem pude compartilhar bons momentos.

À FAPEAM pelo apoio financeiro.

Enfim, a todos que de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho.

“Mas sei que esta noite vai passar,  
Pra sempre, sempre ser um dia lindo,  
Que nunca poderá se acabar...”

Parafaseado da música In Memoriam – Grupo Logos

Este trabalho foi realizado com o apoio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Amazonas – FAPEAM.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>10</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>12</b>
1.1 Motivações para o estudo do Grafeno . . . . .	16
1.2 Grafeno: Estrutura atômica . . . . .	18
1.3 Grafeno: Propriedade estruturais . . . . .	23
1.4 O estudo do Grafeno relacionado aos campos magnéticos . . . . .	25
1.5 Ressonância de Fabry-Pérot . . . . .	30
1.6 Características dos sistemas barreira magnética em monocamada de Grafeno	30
1.7 Tunelamento em Grafeno . . . . .	32
<b>2 Modelo teórico</b>	<b>38</b>
2.1 Cálculo da dispersão em Grafeno . . . . .	38
2.2 Modelo contínuo . . . . .	42
<b>3 Transmissão e Condutância em Simples e Dupla Barreira Magnética</b>	<b>44</b>
3.1 Cálculo da transmissão para barreira magnética simples em monocamada de Grafeno . . . . .	44
3.2 Cálculo da transmissão para dupla barreira magnética de Grafeno . . . . .	50
3.3 Análise da transmissividade . . . . .	55



3.4	Cálculo da condutância para única e dupla barreira magnética em Grafeno e densidade de corrente para dupla barreira magnética . . . . .	59
<b>4</b>	<b>Resultados</b>	<b>61</b>
4.1	Transmissão para barreira magnética simples e dupla em monocamada de Grafeno . . . . .	61
4.2	Condutância para simples e dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno . . . . .	75
4.3	Cálculo da corrente para dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno . . . . .	85
<b>5</b>	<b>Conclusões</b>	<b>89</b>

# Lista de Figuras

1.1	(a) A grafite, formada por folhas de Grafeno empilhadas; (b) o fulereno C60, constituído por uma folha de Grafeno curvada quando pentágonos são introduzidos na rede de hexágonos; (c) o nanotubo, constituído por uma folha de Grafeno enrolada e (d) o Grafeno, uma folha parecida com uma colméia, com um átomo de carbono nos vértices dos hexágonos. . . .	14
1.2	Representação da estrutura planar e hexagonal do Grafeno. . . . .	18
1.3	(a) configuração eletrônica da camada de valência de um átomo de carbono no seu estado fundamental; (b) configuração desse carbono no seu primeiro estado excitado ( ou ativado). . . . .	19
1.4	Representação da configuração eletrônica da camada de valência do carbono e das suas possíveis ligações atômicas para hibridização do tipo: (a) $sp$ ; (b) $sp^2$ ; (c) $sp^3$ . . . . .	20
1.5	Representação dos orbitais e seus respectivos ângulo de ligação e geometria para hibridização do tipo: (a) $sp$ , (b) $sp^2$ e (c) $sp^3$ . . . . .	21
1.6	(a) Representação do orbital $sp^2$ ; (b) Três orbitais híbridos do tipo $sp^2$ de um átomo de carbono ligados entre si e separados por um ângulo de $120^\circ$ ; (c) Representação da localização dos orbitais $sp^2$ no plano e do orbital $2p$ vazio perpendicular ao plano. . . . .	21

1.7	(a) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo $sp^2$ de dois átomos de carbono formando uma ligação sigma; (b) Representação da sobreposição de dois orbitais 2p de dois átomos de carbono perpendiculares ao plano formando uma ligação $\pi$ . . . . .	22
1.8	Representação da estrutura planar e hexagonal do Grafeno. . . . .	23
1.9	Estrutura de rede do Grafeno, constituída de duas redes triangulares interpenetradas ( $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ são os vetores da rede unitários da rede e $\delta_i$ , $i = 1, 2, 3$ são os vetores vizinhos mais próximos. . . . .	25
1.10	(a)Zona de Brillouin correspondente. Os cones de Dirac estão localizados nos pontos $K$ e $K'$ . (b) Três primeiros vizinhos dos átomos A e B. . . . .	26
1.11	Portais de cobalto a superfície de um 2DEG. Experimento para barreiras magnéticas em Grafeno, conforme [58]. . . . .	27
1.12	Rede cristalina do Grafeno mostrando as direções armchair e zigzag. . . . .	28
1.13	Exemplos da estrutura de nanofitas do tipo armchair e zigzag. . . . .	29
1.14	Esquema de uma dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno. A largura da barreira esquerda corresponde a $d_1$ , barreira direita $d_2$ e largura do poço $L_w$ . . . . .	33
1.15	(a)Diagrama esquemático do espectro das quase-partículas em Grafeno. As curvas em vermelho e verde destacam a origem do espectro linear. Em (b), diagrama da partícula com vetor de onda $k$ e energia de $E$ no entorno de uma barreira de potencial $V_0$ e largura $D$ . . . . .	34
1.16	Representação dos dois tunelamentos: em (a), temos o tunelamento em Grafeno e em (b), semicondutores convecionais. A amplitude da função de onda dos elétrons ( em vermelho) permanece constante no Grafeno, enquanto a mesma decai exponencialmente em semicondutores convecionais. O tamanho da esfera indica a amplitude da onda incidentes e transmitida. . . . .	35
2.1	Representação da dispersão de energia das bandas em uma monocamada de Grafeno. . . . .	41

3.1	Barreira magnética em monocamada de Grafeno. Para a cada região delimitada, temos os seguintes coeficientes: $a_1, b_1$ para a região <i>I</i> (onde $a_1 = 1$ e $b_1 = r$ corresponde ao próprio coeficiente de reflexão na região <i>I</i> ); $a_2, b_2$ para a região <i>II</i> e $a_3, b_3$ para a região <i>III</i> , sendo que $b_3$ é nulo pois não há reflexão na região <i>III</i> e $a_3$ corresponde ao próprio coeficiente de transmissão $t$ . . . . .	45
3.2	Representação esquemática de um sistema de dupla barreira, formado pela junção de duas barreiras simples, cujos coeficientes são mostrados em cada região, para os seguintes parâmetros: $d_1$ ( largura da barreira esquerda), $d_2$ (largura da barreira direita) e $L_w$ ( largura do poço ). . . . .	51
3.3	(a) Diagramas esquemáticos da transmissão através de um potencial step para um elétron com $E > V_0$ ou índice de refração positivo. (b) similar a (a), porém para índice de refração negativo ou $E < V_0$ . . . . .	56
3.4	Diagrama esquemático de múltiplas reflexões dentro de uma barreira. . .	57
3.5	(a) Diagrama esquemático da transmissão através de uma barreira de largura $W$ . (b) A função de onda de um estado localizado. . . . .	59
4.1	Probabilidade de transmissão para uma simples barreira magnética em monocamada de Grafeno, para os seguintes parâmetros: $V_0 = 0, d = 1$ e $\phi = 0$ . Caso o campo magnético seja nulo, temos uma transmissão total. . . . .	62
4.2	Transmissão para barreira única de Grafeno para diferentes campos magnéticos com os seguintes parâmetros: $d = 1$ e $V_0 = 10E_0$ . . . . .	63
4.3	Vetor de onda $q_x$ em função da $E_F/E_0$ para os parâmetros: $B = 0.5$ T e $V_0 = 10E_0$ para uma barreira magnética simples em monocamada de Grafeno. . . . .	64
4.4	Probabilidade de transmissão para uma simples barreira magnética com os seguintes parâmetros: $B = 0.2$ T e $V_0 = 0$ ( linhas pretas ) e $B = 0$ . e $V_0 = 15E_0$ ( linhas vermelhas ), para uma energia fixa de $E_F = 15E_0$ . . .	65

4.5	Contorno do plot de transmissão através de simples barreira magnética, para os seguintes campos magnéticos: na parte (a), $B = 0.1$ T, na parte (b), $B = 0.2$ T e na parte (c), $B = 0.5$ T, sendo o potencial $V_0 = 0$ e a largura da barreira $d = 1$ . . . . .	66
4.6	Probabilidade de transmissão para o sistema dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno para os seguintes parâmetros comuns em (a) e (b): $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , correspondendo às larguras da barreira esquerda, direita e largura do poço. e potenciais $V_{01} = V_{02} = 0$ . . . . .	67
4.7	Probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros: $B_1 = B_2 = 0.1$ T, $d_1 = d_2 = L_w = 1$ e os potenciais correspondem a $V_{01} = V_{02} = 0$ . Para (a) e (b) usamos para o mesmo valor para energia de Fermi, $E_F = 5E_0$ . . . . .	68
4.8	Probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética como função da energia de Fermi. Para (a) e (b), são considerados os parâmetros $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , $V_{01} = V_{02} = 0$ e $\phi = 0$ . . . . .	69
4.9	Probabilidade de transmissão para dupla barreira em monocamada de Grafeno com incidência normal Em (a) e (b) considera-se as barreiras simétricas, correspondendo a $B_1 = B_2 = 0.1$ T e potenciais $V_{01} = V_{02} = 0$ . . . . .	70
4.10	Transmissão em função da energia de Fermi para dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros: $B = 0.1$ T, $B = 0.2$ T e $B = 0.5$ T para potencial de $V_{01} = V_{02} = 10E_0$ e $d_1 = d_2 = L_w = 1$ . . . . .	72
4.11	Probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética. Em (a), com dependência na energia de Fermi. Em (b), mostramos a dependência da Transmissão com o ângulo de incidência para os seguintes parâmetros estruturais: Em (a): $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , correspondendo à largura da barreira esquerda, direita e largura do poço e $B_1 = B_2 = 0.2$ T . Em (b): $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , para campos de $B_1 = B_2 = 0.2$ T. Para ambas Figuras, (a) e (b), o potencial das barreiras corresponde a $V_{01} = V_{02} = 0$ . . . . .	73

4.12	Contorno do plot de transmissão para dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros: na parte (a), $B_1 = B_2 = 0.1$ T, na parte (b), $B_1 = B_2 = 0.2$ T e na parte (c) $B_1 = B_2 = 0.5$ T. Em (a), (b) e (c), usamos para largura da barreira direita e esquerda $d_1 = d_2 = 1$ e largura do poço $L_w = 1$ , sendo os potenciais $V_{01} = V_{02} = 0$ , respectivamente. . . .	74
4.13	Condutância em função da Energia de Fermi para uma simples barreira magnética de Grafeno para os seguintes parâmetros: $V_0 = 0$ e largura da barreira $d = 1$ , para os campos magnéticos de 0.1, 0.2 e 0.5 T. . . . .	75
4.14	Condutância em função da Energia de Fermi para uma simples barreira magnética de Grafeno para os seguintes parâmetros: $V_0 = 10E_0$ e largura da barreira $d = 1$ , para os campos magnéticos de 0.1, 0.2 e 0.5 T. . . . .	76
4.15	Condutância como função da energia de Fermi para uma dupla barreira magnética. O potencial para as duas barreiras corresponde a $V_{01} = V_{01} = 0$ . . . . .	77
4.16	Dupla barreira magnética assimétrica mantendo fixo o valor da primeira barreira: $B_1 = 0.1$ T. . . . .	78
4.17	Condutância para dupla barreira mangnética em monocamada de Grafeno para os seguintes valores de energia: $E_F = 6E_0$ ( linha contínua ), $E_F = 4E_0$ ( linha pontilhada) e $E_F = 5E_0$ ( linha traço e ponto), para $V_{01} = V_{02} = 0$ e $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , correspondendo ás larguras da barreira esquerda, direita e largura do poço. . . . .	80
4.18	Condutância em função de $d_2/d_1$ para uma dupla barreira de Grafeno para $B_1 = B_2 = 0.1$ T, largura do poço $L_w = 1$ e $V_{01} = V_{02} = 0$ . . . . .	81
4.19	Condutância para dupla barreira, mantendo fixo a energia ( $E_F = 5E_0$ ) e aumentando as barreiras ( 0.1, 0.2 e 0.5 T ) para largura do poço $L_w = 1$ e $V_{01} = V_{02} = 0$ . . . . .	82

4.20	Condutância em função da voltagem para dupla barreira magnética em Grafeno para: $B_1 = B_2 = 0.1$ T ( linha preta), $B_1 = B_2 = 0.2$ T ( linha vermelha ) e $B_1 = B_2 = 0.5$ T ( linha verde ), com potencial de $V_{01} = V_{02} = 10E_0$ e $d_1 = d_2 = L_w = 1$ correspondendo á largura da barreira esquerda, direita e poço. . . . .	83
4.21	Condutância em função da voltagem para dupla barreira magnética em Grafeno para: $E_F = 4E_0$ ( linha preta), $E_F = 5E_0$ ( linha vermelha ) e $E_F = 6E_0$ ( linha verde ), $B_1 = B_2 = 0.5$ T com potencial de $V_{01} = V_{02} = 10E_0$ e $d_1 = d_2 = L_w = 1$ correspondendo á largura da barreira esquerda, direita e poço. . . . .	84
4.22	Densidade de corrente para um sistema dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros: $E_F = 4E_0$ ( linha preta), $E_F = 6E_0$ ( linha vermelha) e $E_F = 8E_0$ ( linha verde ) e potenciais de $V_{01} = V_{02} = 15E_0$ , campos magnéticos: $B_1 = B_2 = 0.2$ T e $d_1 = d_2 = L_w = 1$ correspondendo ás larguras da barreira esquerda, direita e largura do poço. . . . .	86
4.23	Densidade de corrente em função do potencial para um sistema dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno para os seguintes parâmetros: $E_F = 10E_0$ , campos de 0.1, 0.2 e 0.5 T ( linha preta, vermelha e verde, respectivamente) e potencial de $V_{01} = V_{02} = 15E_0$ . Para a largura da barreira direita, esquerda e largura do poço usamos: $d_1 = d_2 = L_w = 1$ . . . . .	87
4.24	Densidade de corrente para dupla barreira para campos de 0.5, 1.0 e 0 T. A energia de Fermi corresponde a $E_F = 7E_0$ e $d_1 = d_2 = 0.5$ e $L_w = 1$ , correspondendo a largura da barreira direita, largura da barreira esquerda e largura do poço, respectivamente e os potenciais das barreiras $V_{01} = V_{02} = 10E_0$ . . . . .	88

# Lista de Tabelas

1.1	Coordenadas cartesianas dos três pontos especiais da primeira zona de Brillouin do Grafeno. . . . .	26
-----	---	----



# Resumo

Neste trabalho foi estudado as propriedades do Grafeno através de simples e dupla barreira magnética. Utilizou-se o método da matriz de transferência para o cálculo da transmissividade para sistemas simples e dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno. A transmissividade foi calculada como função da energia do elétron para as seguintes condições: mantendo a energia constante, mantendo os campos magnéticos e variando as distâncias das barreiras e largura do poço. Para a transmissividade em função do ângulo  $\phi$ , o mesmo procedimento foi adotado. Foram analisadas situações onde o potencial  $V$  é nulo e diferente de zero. A condutância também foi calculada em função da energia, do campo magnético e em função da distância. A densidade de corrente foi calculada para dupla barreira magnética. Estes cálculos foram comparados usando barreiras com campos magnéticos iguais e diferentes e também para potenciais diferentes.

Assim, verificou-se que a probabilidade de transmissão e a condutância podem ser moduladas pela mudança estrutural dos parâmetros da barreira, como largura e altura, oferecendo a possibilidade para controlar feixes de elétrons em Grafeno.

# Abstract

In this work we studied the properties of Graphene through single and double magnetic barrier. It was used the transfer matrix method for calculating the transmissivity in single and double barriers of monolayer Graphene with magnetic barriers. The transmission was calculated as a function of electron energy for the following conditions: with constant energy, keeping the magnetic fields and varying distances and width of the barriers of the well. For the transmissivity each as function of incidence angle  $\phi$ , the same procedure was adopted. Situations where the potential  $V$  is zero and nonzero were analyzed. Subsequently, we performed calculations of transmissivity for different potentials of zero. The conductance was also calculated as a function of energy, and magnetic field as a function of distance. These calculations were compared using barriers to equal and different magnetic fields.

Thus, the transmission probability and the conductance could be modulated by the structural change of the barrier parameters, such as width and height, providing the ability to control electron beams in graphene.

# Capítulo 1

## Introdução

Nesta tese apresentamos um estudo de bastante interesse para a comunidade científica em recentes anos e cujas pesquisas estão em expansão: o estudo do Grafeno relacionado com estrutura de simples e dupla barreira magnética[1, 2, 3]. Diversas pesquisas tem sido feitas relacionadas ao Grafeno e as descobertas relacionada a este material adicionou um novo ponto de vista sobre as propriedades ópticas e de transporte balístico e vice-versa[4, 5, 6]. O Grafeno é constituído de uma folha de átomos de carbono na hibridização  $sp^2$ . Vale frisar a importância do carbono, pois o mesmo está relacionado à base fundamental que dá origem a diversas moléculas orgânicas essenciais para a vida e está presente em inúmeros compostos usados na fabricação de combustíveis, vestimentas e ferramentas. O carbono é conhecido desde tempos remotos, desde o homem tentando produzir fogo usando carvão mineral até a utilização do lápis que por sua vez foi utilizado para fazer registros em folha de papel e então popularizou o grafite que é composto puramente de carbono. O grafite também é usado como lubrificante em componentes de baterias. Mesmo com sua longa história, a estrutura eletrônica do grafite começou a ser estudada intensivamente nos anos de 1950[7, 8]e os trabalhos experimentais se tornaram expressivos apenas depois da produção de grafite sintético, chamado de Highly Oriented Pyrolytic Graphite (HOPG). Os materiais constituídos apenas de carbono, estudados intensivamente nos últimos anos são: os fulerenos de dimensionalidade zero, os nanotubos

unidimensionais, o Grafeno bidimensional, o grafite e o diamante que são tridimensionais. Até a descoberta dos fulerenos, em 1985, apenas as duas formas alotrópicas cristalinas de carbono puro, o diamante e o grafite, conforme Fig. 1.1(a), eram conhecidas. As novas estruturas foram observadas por Curl, Smalley e Kroto da Universidade de Rice (Estados Unidos), quando tentavam obter longas moléculas lineares de carbono, evaporando um eletrodo de grafite. Os fulerenos, Fig. 1.1(b), consistem em estruturas fechadas, nas quais os átomos de carbono ocupam vértices de hexágonos e pentágonos, como se fossem uma bola de futebol. A descoberta dos fulerenos foi um marco científico, pois inaugurou a era da nanociência e seus descobridores conquistaram o prêmio Nobel de Química em 1996[9].

No ano de 1991, outros alotrópico de carbono, os nanotubos, foram descobertos por S. Iijima[10], quando esse pesquisador tentava otimizar a técnica de obtenção dos fulerenos. Esses passaram então a chamar bastante atenção da comunidade científica devido ‘as suas propriedades mecânicas e eletrônicas. Os nanotubos, conforme Fig.1.1 (c), são formados pelo enrolamento de folhas de grafite, podendo ser metálicos ou semicondutores, dependendo de como o processo é realizado[11]. Apesar de serem muito mais finos que um fio de cabelo (para se ter uma idéia, são necessários milhares de nanotubos colocados lado a lado para se atingir a espessura de um fio de cabelo), possuem alta resistência mecânica, pois não quebram quando dobrados ou submetidos á alta pressão[12]. Devido a isso podem dar a um composto com plástico, por exemplo, as propriedades de dureza e condutividade, importantes quando precisa-se de um material resistente á tração e em situações em que se queira evitar o acúmulo de carga elétrica. Em virtude dessas propriedades, surgiram muitas propostas de dispositivos baseadas em nanotubos e o interesse da comunidade científica em estudar este material cresceu rapidamente.

O Grafeno, um único plano de grafite ( conforme Fig.1(d)), é produzido toda vez que alguém usa um lápis, mas só foi visualizado pela primeira vez em 2004 por Andre Geim da Universidade de Manchester e colaboradores[13, 14]. O Grafeno tem uma estrutura parecida com uma colméia e pode ser considerado a "mãe" de todos os alotrópicos

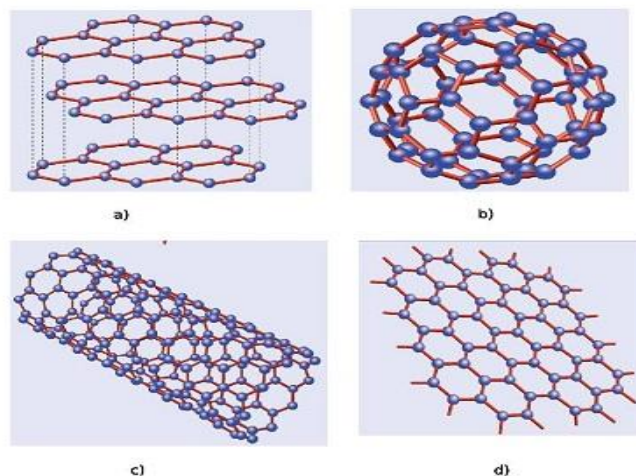


Figura 1.1: (a) A grafite, formada por folhas de Grafeno empilhadas; (b) o fulereno C60, constituído por uma folha de Grafeno curvada quando pentágonos são introduzidos na rede de hexágonos; (c) o nanotubo, constituído por uma folha de Grafeno enrolada e (d) o Grafeno, uma folha parecida com uma colméia, com um átomo de carbono nos vértices dos hexágonos.

citados anteriormente: o grafite, que é formado pelo empilhamento de folhas de grafeno. Os fulerenos, que podem ser obtidos de grafeno com a introdução de pentágonos, que criam defeitos de curvatura positiva, e os nanotubos que são formados quando a folha de grafeno é enrolada. Entre os materiais conhecidos, o Grafeno é o mais fino, possui resistência mecânica aproximadamente 100 vezes maior que a do aço[15], consegue suportar uma densidade de corrente com seis ordens de grandeza maior que a suportada pelo cobre, apresenta um recorde na condutividade térmica e elétrica e é impermeável a gases[16]. Diante dessas qualidades, o Grafeno se tornou a mais importante descoberta, depois dos fulerenos e dos nanotubos de carbono, para as ciências dos materiais e deu origem ao prêmio Nobel de Física em 2010. Foi P. R. Wallace, em 1946, quem primeiro escreveu sobre a estrutura eletrônica do grafeno e mostrou o inusitado comportamento semicondutor deste material[17]. Como naquela época uma estrutura puramente bidimensional não era realidade, Wallace estava estudando teoricamente o Grafeno apenas

como um ponto de partida para estudar o grafite. O Grafeno é um semicondutor de gap nulo, com densidade de estados nula no nível de Fermi e com faixas eletrônicas lineares e isotrópicas em um intervalo de aproximadamente 1,0 eV em torno do nível de Fermi. Essa linearidade e a presença de duas subredes fazem com que os portadores de carga se comportem como partículas quirais, relativísticas e sem massa, sendo descritas pela equação de Dirac[18, 19, 20]. A natureza quiral das excitações eletrônicas, o que leva a ausência de backscattering, provoca um transporte balístico dos portadores de carga, por distâncias da ordem de micrometros, em temperatura ambiente, mesmo com altas concentrações de defeitos e impurezas[21, 22]. Essas características, por sua vez, fazem com que a eletricidade seja conduzida praticamente sem perdas de energia, o que não é usual no silício ou em outros semicondutores. Portanto, o grafeno é um forte candidato a substituir o silício, atualmente usado em dispositivos eletrônicos comercializados em grande escala. A peculiar qualidade eletrônica do grafeno para baixas energias de excitação tem permitido aos pesquisadores, pela primeira vez, experimentar em laboratórios os fenômenos da eletrodinâmica quântica. O controle dessas excepcionais características eletrônicas permitirá a criação e desenvolvimento de sistemas muito pequenos a base de grafeno, com propriedades magnéticas e supercondutoras, com grande eficiência e baixo consumo de energia. Por exemplo, transistores com frequência de 100 GHz (quase três vezes maior que a frequência de atuais transistores de silício) foram recentemente obtidos[23] e o desafio atual é desenvolver métodos eficazes de síntese de grafeno para a fabricação de tais dispositivos em escala industrial.

O Grafeno foi isolado pela primeira vez através do processo de esfoliação mecânica de HOPG[13], usando-se uma fita adesiva. Esse método permite a obtenção de Grafeno de alta qualidade estrutural e eletrônica, da ordem de milímetros, entretanto não é conveniente para a síntese de grafeno para uso comercial, pois é bastante manual e demanda tempo. A esfoliação química de grafite oxidado permite obter grandes quantidades de Grafeno. Nesse método, o grafite oxidado, cujas camadas estão parcialmente separadas pelos grupos óxidos, é colocado em solução aquosa e submetido ao ultrassom. Depois de

algum tempo, folhas de Grafeno oxidado são obtidas e reduzidas a Grafeno por meio de processos químicos[24]. Entretanto, a pequena escala (alguns microns) dificulta a aplicação de grafeno obtido por esta técnica. Outros métodos de síntese são o crescimento epitaxial de grafeno sobre substratos metálicos[25] e de SiC[26] e Chemical Vapor Deposition (CVD), que produz grafeno tendo o níquel ou cobre como catalisadores. Na técnica CVD, uma solução com átomos de carbono e níquel ou cobre é formada sob aquecimento e como a solubilidade destes elementos depende da temperatura, uma camada de Grafeno sobre uma superfície metálica é formada com o resfriamento da amostra[27]. O Grafeno obtido desta forma pode alcançar centímetros de comprimento e, portanto, a técnica CVD pode permitir a fabricação de Grafeno de grande área, tão desejado para aplicação tecnológica. No entanto, esse método ainda necessita de mais experimentação para ser melhor compreendido. O desafio atual dos pesquisadores é desenvolver métodos eficazes para síntese de Grafeno de grande área com alta qualidade estrutural e eletrônica.

## 1.1 Motivações para o estudo do Grafeno

Embora diversos estudos teóricos sobre o grafite tenham sido realizados nos últimos 90 anos [28, 29, 30], a descoberta do Grafeno é bastante recente, um pouco mais de uma década se passou desde a produção da primeira folha de Grafeno. Essa demora deve-se em parte à crença de que tais cristais estritamente bidimensionais fossem termodinamicamente instáveis e portanto não deveriam existir na sua forma livre, mas apenas como parte componente de outras estruturas[31]. Acreditava-se que flutuações térmicas em cristais bidimensionais causariam deslocamentos dos átomos que atingiriam valores comparáveis às distâncias interatômicas, tendendo a deformar o cristal em estruturas curvas[32, 33]. Além de pertencer a uma nova classe inesperada de materiais, o Grafeno possui propriedades singulares que atraíram uma grande parte da comunidade científica.

Uma única folha de Grafeno exhibe propriedades eletrônicas excelentes. Medidas realizadas no grafeno revelaram alta mobilidade, podendo superar  $15000 \text{ cm}^2\text{V/s}$ , mesmo

sob condições ambientes[34]. Além disso, observou-se que praticamente independe da temperatura. Isso revela que o valor de  $\mu$  a 300 K, por exemplo, ainda é limitado por processos de espalhamento devido á impurezas ou defeitos, podendo ser melhorado e alcançar valores próximos a  $100000 \text{ cm}^2\text{V/s}$ . Embora alguns semicondutores, como o Antimoneto de Índio ( InSb), possuam valores de  $77000 \text{ cm}^2\text{V/s}$  á temperatura ambiente, esses valores obtidos são obtidos para semicondutores sem nenhuma dopagem, enquanto no grafeno a mobilidade permanece alta mesmo em amostrars eletricamente ou quimicamente dopadas[31].

Uma das mais notáveis características do Grafeno é o fato de seus portadores de carga serem governados pela equação de Dirac, equação esta responsável pela descrição de partículas de spin  $1/2$  na eletrodinâmica quântica. Elétrons no grafeno, a baixas energias ( $E < 1 \text{ eV}$ )[31] , comportam-se como partículas relativísticas de massa nula e velocidade da luz efetiva da ordem de  $10^6\text{m/s}$ , exibindo um espectro de baixas energias cônicos com gap zero[35]. Devido ás propriedades aqui descritas e muitas outras não citadas, existe atualmente, um grande ânimo em viabilizar aplicações tecnológicas do grafeno, tais como transistores totalmente feitos de átomos de carbono. Isso eliminaria a necessidade de junções metálicas, tornando possível a construção de dispositivos ainda menores que os atuais. Outra possível aplicação é usar o grafeno como um sensor de gás[36]. Quanto uma molécula é adsorvida na superfície de uma folha de Grafeno ocorre uma mudança local da resistividade elétrica, possibilitando assim, sua detecção. Embora esse efeito também ocorra em outros materiais, no Grafeno, devido á sua alta condutividade elétrica, a mudança da resistividade torna-se detectável mesmo quando uma única molécula é adsorvida. Dessa forma, uma gama de dispositivos oriundos do Grafeno podem ser desenvolvidos iniciando assim uma nova era tecnológica.



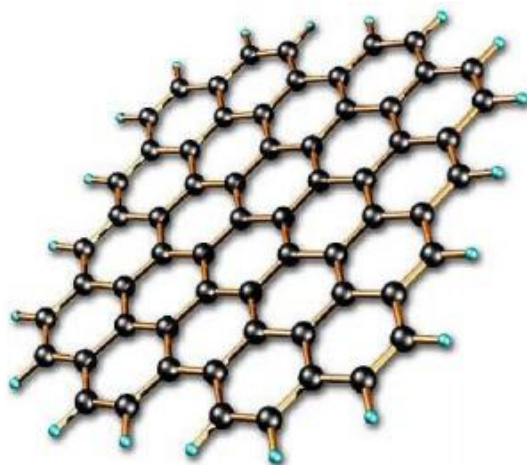


Figura 1.2: Representação da estrutura planar e hexagonal do Grafeno.

## 1.2 Grafeno: Estrutura atômica

O Grafeno é uma forma alotrópica do carbono totalmente bidimensional ( $2D$ ) composto por anéis hexagonais de átomos de carbono ( representado na figura 1.2), formando uma rede do tipo favo de mel ( honeycomb lattice). A grafite por si só, consiste no empilhamento de muitas camadas de Grafeno.

Para compreender a estrutura atômica do Grafeno é importante entender qual o tipo de hibridização eletrônica existente nesse material. Para isso, é necessário saber qual a configuração eletrônica e os tipos de ligações realizadas entre os átomos de carbono. A configuração dos elétrons num átomo isolado, no seu estado fundamental, é  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Entretanto, quando o átomo de carbono está no seu estado excitado, um elétron da camada  $2s^2$  absorve energia sendo promovido para um dos orbitais  $p$  vazios, conforme representado na Fig.(1.3). De acordo com a teoria dos orbitais, as ligações químicas ( ou ligações interatômicas) só são efetuadas através de orbitais atômicos semi-preenchidos ou incompletos, os quais se interpenetram com os orbitais dos átomos vizinhos, resultando em orbitais moleculares do tipo  $\sigma$  e  $\pi$ . Uma ligação química do tipo sigma é formada pela interpenetração frontal de orbitais ( mesmo eixo), é uma ligação forte e difícil de

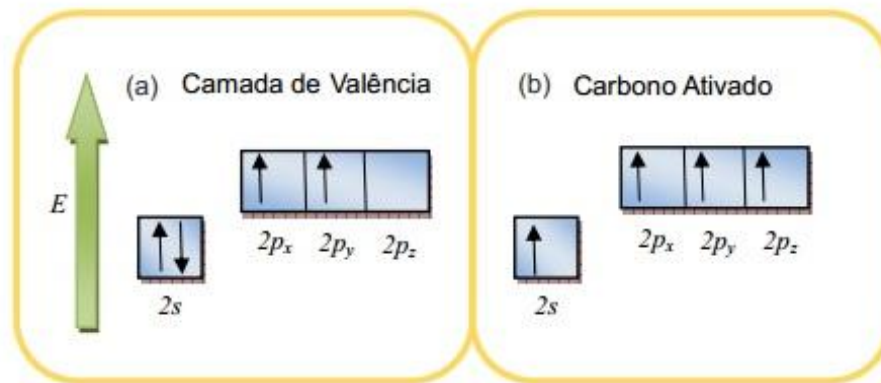


Figura 1.3: (a) configuração eletrônica da camada de valência de um átomo de carbono no seu estado fundamental; (b) configuração desse carbono no seu primeiro estado excitado ( ou ativado).

ser rompida. Por outro lado, a ligação do tipo pi é formada através de uma aproximação lateral entre orbitais ( eixos paralelos ), é uma ligação mais fraca com uma maior facilidade de rompimento, só ocorre entre orbitais do tipo  $p$ .

A hibridização do tipo  $sp$  no carbono quando o orbital  $2s$  se mistura com um orbital do tipo  $2p$ , gerando dois orbitais híbridos do tipo  $sp$ , sobrando dois orbitais  $2p$  não hibridizados. Esta hibridização apresenta uma geometria linear plana. Os tipos de hibridização  $sp$ ,  $sp^2$  e  $sp^3$  podem ser verificados na Fig.(1.4). Os dois orbitais híbridos  $sp$  se localizam no plano linear e os dois orbitais  $2p$  são perpendiculares entre si e ao plano linear. O ângulo entre os orbitais híbridos é de  $180^\circ$ . Um exemplo típico da ocorrência desse tipo de hibridização é a molécula de acetileno que apresenta ligação "tripla" entre dois átomos de carbono, sendo que as duas ligações são do tipo  $\sigma$  e duas do tipo  $\pi$ . Pode também ocorrer com duas duplas ligações entre carbonos. Trata-se do carbono insaturado. Por outro lado, a hibridização do tipo  $sp^2$  no carbono é gerada através da interação entre o orbital  $2s$  com dois orbitais  $2p$ , resultando em três orbitais híbridos do tipo  $sp^2$ , restando assim apenas o orbital  $2p_z$ , não hibridizado, que é perpendicular ao plano que contém as outras três ligações. Esta configuração eletrônica permite a existên-

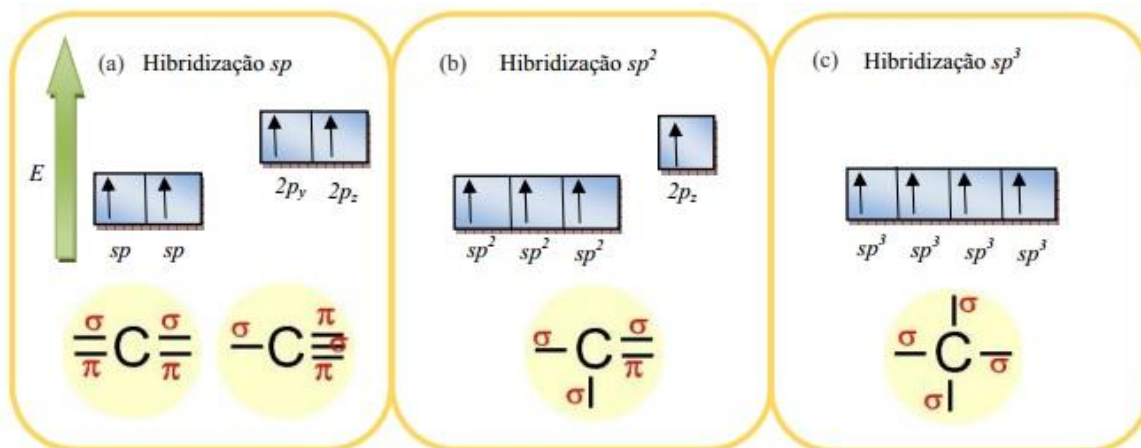


Figura 1.4: Representação da configuração eletrônica da camada de valência do carbono e das suas possíveis ligações atômicas para hibridização do tipo: (a)  $sp$ ; (b)  $sp^2$ ; (c)  $sp^3$ .

cia de três ligações covalentes planares com outros átomos, separados por um ângulo de  $120^\circ$ , tendo um arranjo hexagonal, sendo por esse motivo chamada de geometria trigonal plana. Uma molécula de poliacetileno é um exemplo típico da ocorrência deste tipo de hibridização, que é caracterizado por apresentar uma alternância entre as ligações duplas e simples entre dois átomos de carbono em sua estrutura. Esta configuração apresenta três ligações do tipo  $\sigma$  e uma do tipo  $\pi$ . Por último, há hibridização do tipo  $sp^3$ , o orbital  $2s$  interage com os três orbitais  $2p$ , gerando dessa forma quatro orbitais híbridos do tipo  $sp^3$ . Essa configuração tem uma geometria tetraédrica, com ângulo de separação entre orbitais de aproximadamente  $109,3^\circ$  onde cada orbital híbrido pode formar ligações do tipo  $\sigma$  (quatro ligações simples). Nesse caso, trata-se do carbono saturado, por exemplo, molécula do gás metano ( $CH_4$ ). Os tipos de geometria dos orbitais pode ser verificado na Fig.(1.5). No caso do Grafeno, observa-se a hibridização do tipo  $sp^2$ , na qual ocorre a combinação de um orbital  $2s$  e dois orbitais  $2p$ , formando três orbitais equivalentes, orbitais híbridos do tipo  $sp^2$ . Cada orbital  $sp^2$  é representado por um lobo apontando para uma direção e outro menor apontando para a direção oposta, como mostrado na Fig.(1.6(a)). Os eixos dos três orbitais híbridos  $sp^2$  estão sobre o mesmo plano e estão

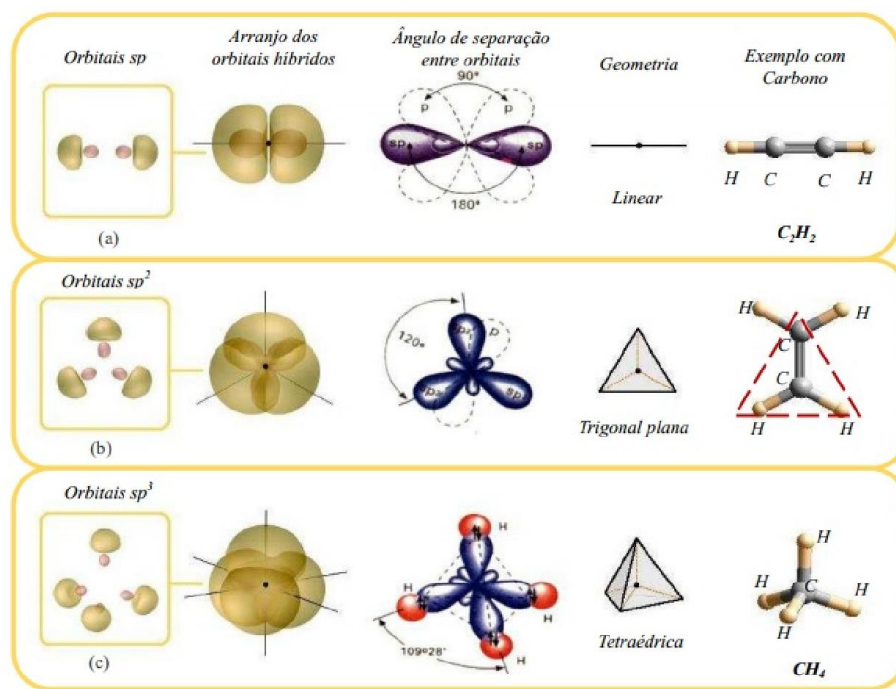


Figura 1.5: Representação dos orbitais e seus respectivos ângulo de ligação e geometria para hibridização do tipo: (a)  $sp$ , (b)  $sp^2$  e (c)  $sp^3$ .

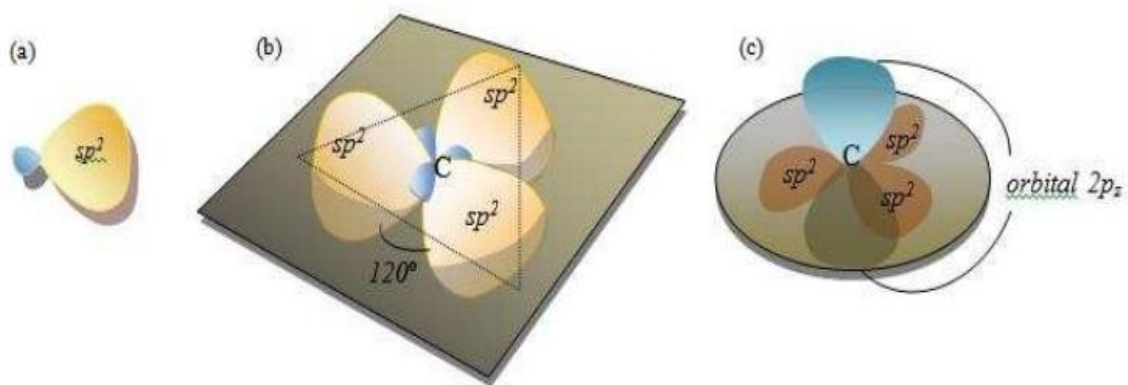


Figura 1.6: (a) Representação do orbital  $sp^2$ ; (b) Três orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  de um átomo de carbono ligados entre si e separados por um ângulo de  $120^\circ$ ; (c) Representação da localização dos orbitais  $sp^2$  no plano e do orbital  $2p_z$  vazio perpendicular ao plano.

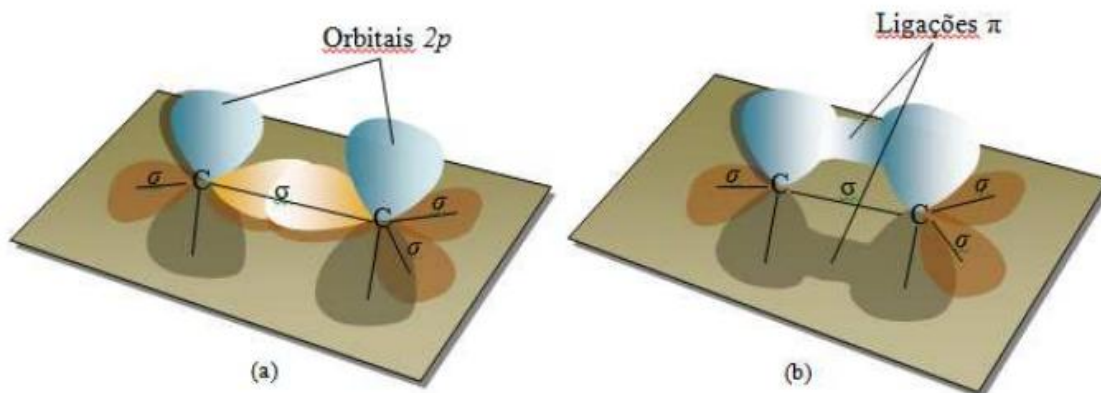


Figura 1.7: (a) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  de dois átomos de carbono formando uma ligação sigma; (b) Representação da sobreposição de dois orbitais 2p de dois átomos de carbono perpendiculares ao plano formando uma ligação  $\pi$ .

apontados em direção aos vértices de um triângulo equilátero, conforme mostrado na Fig.(1.6(b)). Conforme descrito anteriormente, uma ligação tipo sigma é formada pela sobreposição de dois orbitais híbridos  $sp^2$  sobre um eixo comum, conforme mostrado na Fig.(1.7(a)), que é o caso das três ligações simples que o carbono faz no mesmo plano, o que resulta em uma estrutura hexagonal, de forma que os orbitais estão dispostos em uma estrutura planar formando ângulos entre si de aproximadamente  $120^\circ$ , tendo um comprimento de ligação da ordem de 1.42 Angstrom ( no caso do grafeno), conforme descrito na Fig.(1.8). Por outro lado, o orbital 2p, remanescente em cada um dos átomos de carbono no plano de Grafeno, está paralelo aos orbitais 2p remanescentes de todos os outros átomos de carbono. Todos esses orbitais se sobrepõem, formando uma ligação  $\pi$ , conforme mostrado na Fig(1.7(b)).

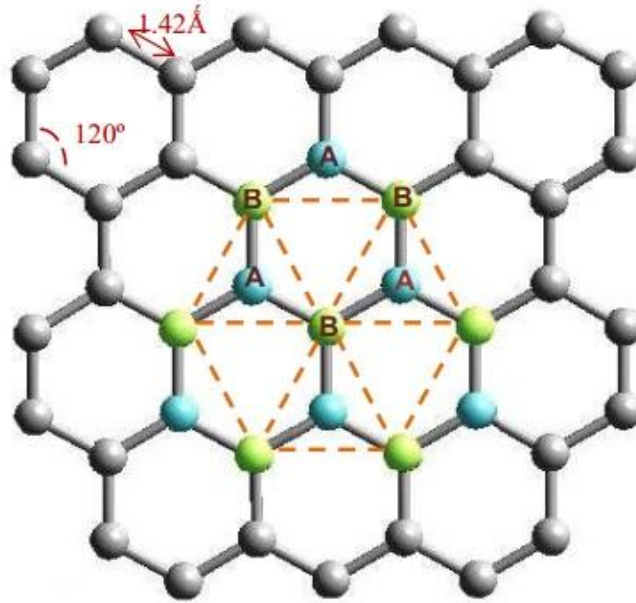


Figura 1.8: Representação da estrutura planar e hexagonal do Grafeno.

### 1.3 Grafeno: Propriedade estruturais

Nesta seção, descrevemos características básicas do Grafeno. O Grafeno, uma forma alotrópica do carbono, é uma folha constituída por átomos de carbono com hibridização do tipo  $sp^2$  em uma estrutura hexagonal planar bidimensional ( $2D$ ). Podemos considerá-lo como o bloco fundamental de construção de todos os outros materiais grafíticos. Os orbitais do tipo  $sp^2$  formam as ligações  $\sigma$  no plano da folha de Grafeno, enquanto que os orbitais  $2p_z$ , formam as ligações do tipo  $\pi$  que são paralelas ao plano atômico do Grafeno gerando sobre a superfície planar do grafeno um "mar" de orbitais  $\pi$ .

Os elétrons que compõem a faixa de valência são originados dos orbitais híbridos  $sp^2$  ( ligações do tipo  $\sigma$ ) e dos orbitais  $p_z$  ( ligações do tipo  $\pi$ ). As ligações  $\sigma$  são do tipo covalente e portanto, consideravelmente fortes e são responsáveis em grande parte pelas propriedades mecânicas e elásticas do Grafeno. Por outro lado, os elétrons dos orbitais  $2p_z$ , que correspondem às ligações do tipo  $\pi$  estão mais fracamente ligados aos

átomos e podem assim se locomover na rede cristalina, ou ainda serem excitados para níveis eletrônicos acessíveis mais energéticos. São elétrons de maior importância para a determinação das propriedades ópticas e elétricas do Grafeno.

A estrutura do Grafeno pode ser descrita como uma rede de Bravais triangular bidimensional com uma base de dois átomos por unidade celular ( um átomo de carbono no sítio A e outro no sítio B), conforme representação na Fig(1.9). Os vetores dos átomos de base, ou vetores de rede  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  podem ser escritos em coordenadas cartesianas como:

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2}\right) \text{ e } \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2}\right) \quad (1.1)$$

onde  $a \approx 1.42 \text{ \AA}$  é a distância entre os átomos de carbono vizinhos e  $|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = 2.46 \text{ \AA}$  é o parâmetro da rede da folha de Grafeno[59]. Sua respectiva zona de Brillouin é definida então, pelos vetores da rede recíproca  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  dados por:

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

onde  $|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = \frac{4\pi}{3a}$  é o parâmetro de rede da folha de Grafeno no espaço recíproco. A primeira zona de Brillouin, ou zona de Brillouin irredutível, está representada na Fig.(1.10) e possui diversos pontos especiais importantes, relacionadas a certas simetrias intrínsecas do sistema. Os pontos  $K$  e  $K'$  nos cantos da zona de Brillouin (ZB) do Grafeno são chamados de "pontos de Dirac". As posições destes pontos no espaço dos momentos são dadas por:

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

A Fig.(1.10) mostra a estrutura da rede do grafeno, a localização dos vetores da rede do espaço real e recíproco, além dos vetores de primeiros vizinhos e também mostra o espaço recíproco do grafeno com a primeira zona de Brillouin, destacando os pontos de alta simetria  $\Gamma$ ,  $K$ ,  $K'$  e  $M$ . Os pontos  $K$  e  $K'$  representam pontos não equivalentes da ZB

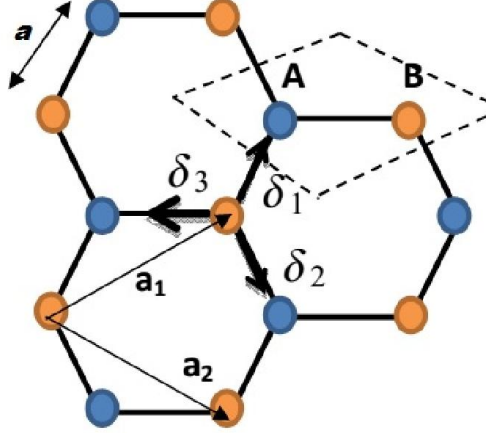


Figura 1.9: Estrutura de rede do Grafeno, constituída de duas redes triangulares interpenetradas ( $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  são os vetores da rede unitários da rede e  $\delta_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  são os vetores vizinhos mais próximos).

e estão associados a propriedades interessantes do grafeno, como a estrutura eletrônica.

## 1.4 O estudo do Grafeno relacionado aos campos magnéticos

O estudo aqui realizado analisa os sistemas monocamada de Grafeno para simples e dupla barreira magnética. Pesquisas realizadas para estes tipos de estruturas e também para bicamadas de Grafeno, mostram que existe uma faixa de valores para a transmissão que pode ser eficientemente controlada, gerando filtros de vetor de onda[37]. O estudo do Grafeno com utilização de barreiras magnéticas também foi utilizado em super redes. Nestas, os resultados indicaram que propriedades de transporte podem ser controladas através do potencial magnético vetor e barreiras eletrostáticas[38]. Em dupla barreiras magnéticas, a probabilidade de transmissão e a condutância podem ser moduladas através da alteração dos parâmetros estruturais da barreira, tais como largura e



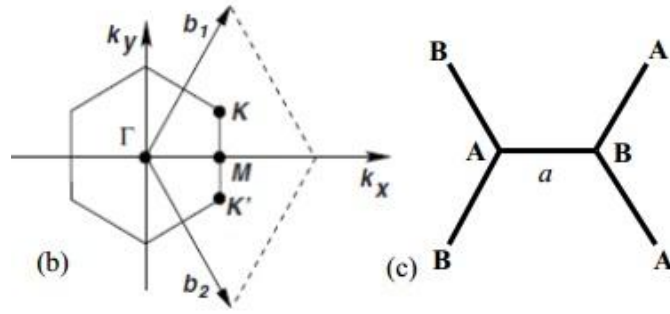


Figura 1.10: (a)Zona de Brillouin correspondente. Os cones de Dirac estão localizados nos pontos  $K$  e  $K'$ . (b) Três primeiros vizinhos dos átomos A e B.

Ponto	Coordenada
$\Gamma$	$(0, 0)$
$K$	$(0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a})$
$M$	$(\frac{2\pi}{3a}, 0)$

Tabela 1.1: Coordenadas cartesianas dos três pontos especiais da primeira zona de Brillouin do Grafeno.

altura, oferecendo a possibilidade para controlar feixe de elétrons em Grafeno [39].

Deve-se destacar o processo de obtenção das estruturas barreiras magnéticas em Grafeno. Na Fig.(1.11) temos um esquema onde portais de cobalto são utilizados para a obtenção de barreiras magnéticas em Grafeno. As barreiras magnéticas em Grafeno podem ser criadas por portadores de carga em Grafeno, neste caso, colocando uma "folha" de Grafeno próxima de "strips" magnéticos que produzem campos magnéticos altamente localizados[40].

Este processo consiste na deposição de strips ferromagnéticos no topo de uma camada de Grafeno. Tais nanoestruturas são usadas em dispositivos de gravação magnética[41]. Materias como CoCrPt produz campos de 1 Tesla próximo a superfície com comprimentos

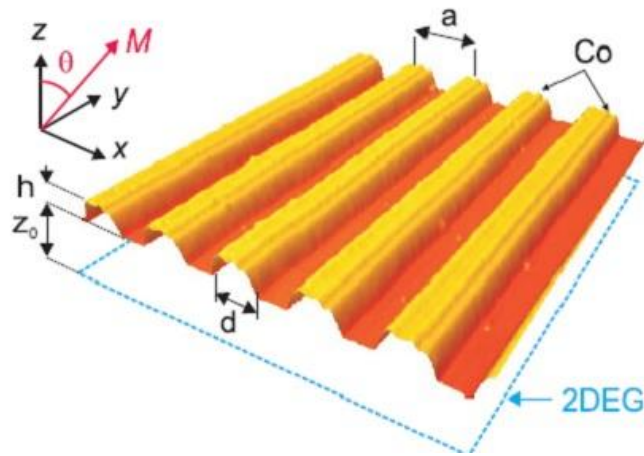


Figura 1.11: Portais de cobalto a superfície de um 2DEG. Experimento para barreiras magnéticas em Grafeno, conforme [58].

que variam de 50 – 100 nm. Em outro trabalho recente[42], elétrons tem sido usados para provar a magnetização da estrutura em análise em alta densidade usando como meio de gravação anisotropia magnética perpendicular. Usando as técnicas discutidas acima, barreiras magnéticas típicas podem ser desenvolvidas para valores de largura abaixo de 50 – 100 nm. Nestes últimos anos, o Grafeno tem sido celebrado como um novo material para o advento de novos dispositivos eletrônicos. No entanto, o grande problema em fazer dispositivos eletrônicos a partir dele é que naturalmente esse material não possui gap de energia, ou seja, não se comporta como um semiconductor - fato essencial para a lógica digital. Trabalhos anteriores[43, 44], mostraram que esse obstáculo pode ser superado "cortando" a folha de Grafeno em fitas nanométricas - as nanofitas.

Quando o Grafeno é cortado em uma nanofita, os portadores ficam confinados a um sistema quase unidimensional, ocasionando um confinamento quântico. Assim, temos uma quantização das funções de onda dos elétrons na nanofita, o que leva ao aparecimento de um gap de energia. Este gap depende da largura e do tipo de borda da nanofita de grafeno ( Graphene nanoribbon - GNR)[45]. As GNRs são cortes em folhas

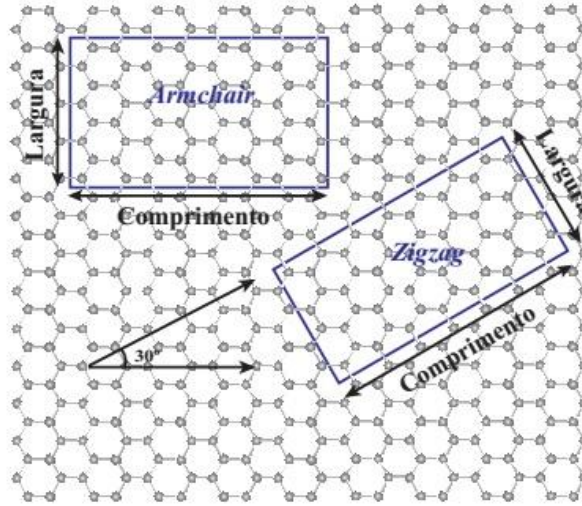


Figura 1.12: Rede cristalina do Grafeno mostrando as direções armchair e zigzag.

de grafeno, privilegiando uma determinada direção, gerando, assim, bordas com formas bem definidas. O tipo de borda é uma característica importante, pois é ela que determina as propriedades eletrônicas da nanofita, uma vez que possuem implicações no comportamento dos elétrons( $\pi$ ).

Existem duas direções principais de corte para o grafeno. Essas direções fazem um ângulo de  $30^\circ$  entre si e cada direção gera um tipo de borda diferente, conforme pode ser verificado nas Fig.(1.12) e Fig.(1.13). Dependendo do formato de suas bordas ao longo do comprimento, as nanofitas podem ser classificadas em armchair ou zigzag, ambas quase unidimensionais. Cada tipo de nanofita possui características próprias e distintas, criando estados eletrônicos confinados muito peculiares. Dependendo do formato de suas bordas ao longo do comprimento, as nanofitas podem ser classificadas em armchair ou zigzag, ambas quase unidimensionais. Do ponto de vista eletrônico, as nanofitas zigzag apresentam um comportamento predominantemente metálico. Por tal motivo, essas nanofitas são o foco quando se está interessado em investigar as propriedades magnéticas do sistema. Com relação as nanofitas armchair, estas se comportam como semicondutoras. Uma discussão detalhada sobre métodos experimentais para obtenção e aplicação de barreiras

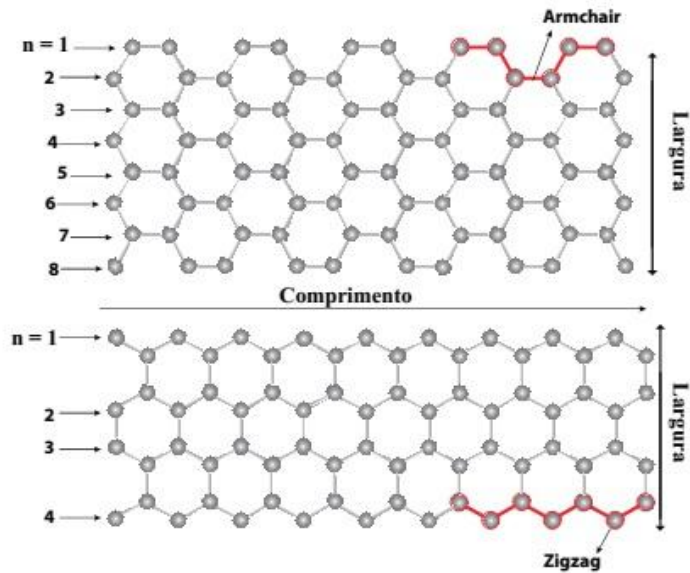


Figura 1.13: Exemplos da estrutura de nanofitas do tipo armchair e zigzag.

magnéticas em grafeno podem ser encontrados na referência[46].

Enfatizando a importância do Grafeno destacamos que recentemente foi encontrado um novo fenômeno em estruturas de Grafeno com barreiras magnéticas[47]. Os níveis de Landau alargam em bandas e a largura dos níveis oscilam com o campo magnético. Os férmions de Dirac podem transmitir perfeitamente através de uma região classicamente proibida a qual estão confinados pela barreira magnética. Para um sistema de monocamada de Grafeno modulada por dois eletrodos ferromagnéticos, a transmissão pode ser bloqueada pela barreira elétrica-magnética, resultado em uma grande magnetoresistência[48]. Neste trabalho analisamos as propriedades resultantes do uso das barreiras magnéticas e das mudanças nos parâmetros estruturais como largura e altura das barreiras.

## 1.5 Ressonância de Fabry-Pérot

Um importante aspecto da transmissão através de estruturas quânticas é a ressonância de Fabry-Pérot (FP) a qual é uma consequência da natureza ondulatória do elétron. Recentemente foi verificado que esta ressonância existe para diferentes estruturas semi-infinitas como barreiras ou dupla barreiras (poços) [49]. Complementando, junções do tipo  $n-p$ ,  $n-p-n$  e  $p-n-p$  tem sido fabricadas nas quais o tunelamento Klein e a ressonância de Fabry-Pérot foram observados. Nestes dispositivos a altura da barreira de potencial e a posição dos níveis de Fermi podem ser sintonizados através de potenciais de porta. Na referência [50] os portais metálicos que induzem as barreiras de potencial foram em torno de 50 – 100 nm separados da camada de grafeno e o comprimento da cavidade de Fabry-Pérot foi em torno de 740 nm. Com estes dispositivos a ressonância FP foi observada nas oscilações da resistência. Nestas junções p-n o topo da camada do portal em uma camada de isolante que pode diminuir a mobilidade do grafeno. Em ordem para evitar este problema, pode-se fabricar estrutura de grafeno p-n-p usando portal de ar-suspensão. Em cada sistema (para  $E > 0$ ) os estados ligados dos elétrons dentro da região de potencial origina a FP ressonância. Nós consideramos uma barreira de potencial para ambos estados: elétrons ( $E > V_0$ ) e buracos ( $E < V_0$ ) para  $E > 0$  e comparamos o efeito de um campo magnético na ressonância de FP dessas duas diferentes situações. Serão consideradas barreiras retangulares simples e dupla e calcularemos transmissão, condutância e densidade de corrente verificando as dependências com os parâmetros estruturais e a influência do campo magnético.

## 1.6 Características dos sistemas barreira magnética em monocamada de Grafeno

Estruturas com simples e duplas barreiras magnéticas em monocamadas de grafeno são elaboradas em certos sistemas onde a barreira magnética do tipo função- $\delta$ . A direção de crescimento é o eixo  $x$  e o campo magnético é aplicado ao longo da direção  $z$  perpendicular a direção do plano do grafeno,  $(x, y)$ . Este modelo pode ser realizado experimentalmente

através da deposição de "strips" ferromagnéticos no topo de uma camada de grafeno ou colocando a camada de grafeno em um substrato periodicamente estruturado[51].

No caso de duas barreiras, as mesmas são separadas por uma região não-magnética. Dentro do gauge de Landau, o potencial vetor  $\mathbf{A}$  é um arranjo de funções step. Uma barreira de potencial de forma quadrada com altura  $V_0$  corresponde ao potencial elétrico criado por outro gate ( portal ). Devido a diferença na energia de Fermi e a estrutura de banda entre as strips da monocamada de grafeno, o perfil de potencial do sistema pode ser simples barreira e dupla barreira obedecendo,

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{l} V_0, \quad \text{na barreira} \\ 0, \text{ no poço} \end{array} \right. \quad (1.4)$$

Nós consideramos a monocamada de grafeno para aproximação de um elétron; as excitações de baixa energia são descritas através da equação de Dirac

$$[v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + V_0 \boldsymbol{\sigma}] \Psi = E \Psi \quad (1.5)$$

onde  $v_F \approx 0.86 \times 10^6$  m/s é a velocidade de Fermi da estrutura,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  é o momento do elétron,  $V_0$  é o potencial e  $\mathbf{A}$  é o potencial vetor com a forma  $\mathbf{A} = [0, A_y, 0]$  e  $\boldsymbol{\sigma}$  é a matriz de Pauli unitária  $2 \times 2$ . A análise destas estruturas será feita com o cálculo da transmissão e da condutância, usando o método da matriz de transferência. Cada região da nossa estrutura (simples e dupla barreira) possui duas componentes de função de onda. Em seguida são aplicadas as seguintes condições de contorno:  $\psi(x = 0)$  e  $\psi(x = d)$  para as regiões de cada interface. Após a montagem das matrizes, obtém-se o coeficiente de transmissão  $t$  que nos fornece  $T = 1/ | t_{22} |^2$ . A condutância balística é calculada usando fórmula de Landauer-Buttiker[52] e calculada como função da energia de Fermi, do campo magnético e em função da distância das barreiras.

Algumas pesquisas tem proposto uma forma alternativa de confinamento de elétrons em grafeno através de barreiras magnéticas ou pontos quânticos magnéticos[53],[54],[55].

As propriedades eletrônicas na presença de campos magnéticos perpendiculares tem atraído também considerável atenção de pesquisadores[56, 57, 37]. Com a idéia do progresso prévio, o estudo da influência das barreiras magnéticas em monocamadas de grafeno neste trabalho foi realizado.

Em termos gerais, podemos afirmar que o problema do grafeno relacionado a campos magnéticos, seja em monocamada ou bi-camada, simples, dupla ou n-barreiras, constitui-se em uma atual linha de pesquisa com interessantes resultados relacionados a produção de novos dispositivos tecnológicos [3],[58].

## 1.7 Tunelamento em Grafeno

Recentemente pesquisas relacionadas ao Grafeno, o qual exibe propriedades incomuns e tem potencial tecnológico para aplicação especialmente como uma alternativa para tecnologia baseada no Silício, tem sido realizado experimentalmente[61, 62, 63]. O confinamento eletrônico tem sido demonstrado em microestruturas de grafeno usando métodos litográficos padrão[64], os quais produzem a fabricação de estruturas de tunelamento ressonante baseadas em grafeno praticável. Alguns estudiosos tem dedicado ao estudo do tunelamento em simples, dupla e múltiplas barreiras de grafeno, poços e dispositivos de junção de grafeno[65, 66]. Os portadores de carga nestas estruturas são descritos como férmions sem massa e relativísticos governados pela equação de Dirac. Esta equação resulta em uma consequência incomum nas propriedades eletrônicas de transporte, que é devido ao Tunelamento Klein[67], o qual prediz que um elétron pode passar através de barreiras de potencial altas com transmissão perfeita, em contraste com o tunelamento não-relativístico convencional, onde a probabilidade de transmissão decai exponencialmente com o aumento da altura da barreira[68, 69, 70]. Entretanto, essa característica é uma fraqueza para o Grafeno para fabricar heteroestruturas considerando que os elétrons de Dirac não podem ser confinados por potenciais eletrostáticos. Inúmeras tentativas tem sido feitas para superar esta lacuna[71]. Na Fig.(1.14), um sistema dupla barreira com

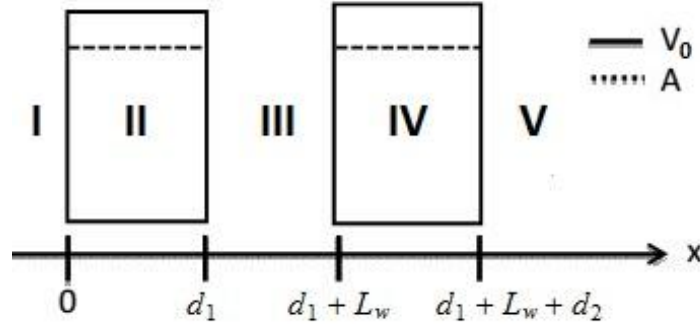


Figura 1.14: Esquema de uma dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno. A largura da barreira esquerda corresponde a  $d_1$ , barreira direita  $d_2$  e largura do poço  $L_w$ .

as respectivas regiões são mostrados bem como o potencial vetor  $A$  e o potencial da estrutura  $V_0$ .

Consideremos a critério de visualização, o esquema geral da Fig.(1.15) e Fig.(1.16), onde nós consideramos a barreira de potencial que tem um formato retangular e é infinita ao longo do eixo  $y$ :

$$V(x) = V_0, 0 < x < d \quad (1.6)$$

$$V(x) = 0, \text{ fora da barreira.} \quad (1.7)$$

O processo mais estudado no contexto do tunelamento Klein, e que vai de encontro com a intuição clássica, em que um elétron de entrada penetra através de uma barreira de potencial, caso a altura de barreira  $V_0$ , exceder a energia de repouso do elétron,  $mc^2$ . Neste caso, a probabilidade de transmissão  $T$  depende pouco da altura da barreira e para obstáculos muito elevados a barreira é praticamente transparente e  $T = 1$  para ângulos de incidência próximos da normal. Isso contrasta com o caso não relativístico onde a transmissão decai com o aumento do potencial  $V_0$ . Este efeito interessante pode ser entendido devido ao fato de que um potencial sendo repulsivo para elétrons é atrativo para pósitrons e como há correspondência entre as funções de onda de elétrons e pósitrons que



são descritos pelo mesmo spinor, sendo que cada uma das componentes é responsável pela descrição de cada um dos portadores de carga. Isso conduz a uma alta probabilidade de transmissão[71].

A característica essencial responsável pelo efeito é o fato de que os estados com energias positivas e negativas ( elétrons e pósitrons, respectivamente) estão intimamente ligados, sendo descritos por diferentes compontes do mesmo spinor. Vale ressaltar que tal fenômenos só é relevante para situações exóticas tais como: produção de pósitrons em torno de núcleos super pesados, com  $Z > 170$ [72] ou a geração de pares de partículas-antipartículas nas proximidades da zona de evento de buracos negros. Em contrastes, o Grafeno abre caminho para investigar o paradoxo de Klein em experimentos relativamente simples, enquanto que anteriormente era relacionado aos fenômenos exóticos citados acima. A diferença entre os tunelamentos entre Grafeno e semicondutores convencionais pode ser verificado na Fig.(1.16).

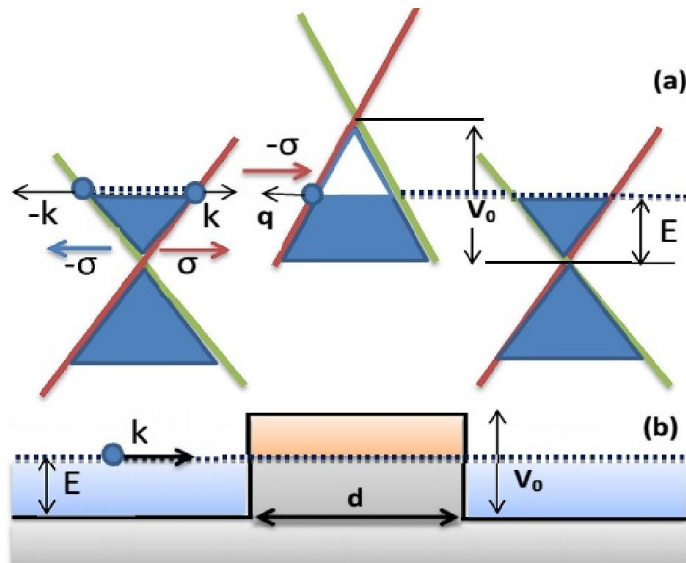


Figura 1.15: (a)Diagrama esquemático do espectro das quase-partículas em Grafeno. As curvas em vermelho e verde destacam a origem do espectro linear. Em (b), diagrama da partícula com vetor de onda  $k$  e energia de  $E$  no entorno de uma barreira de potencial  $V_0$  e largura  $D$ .

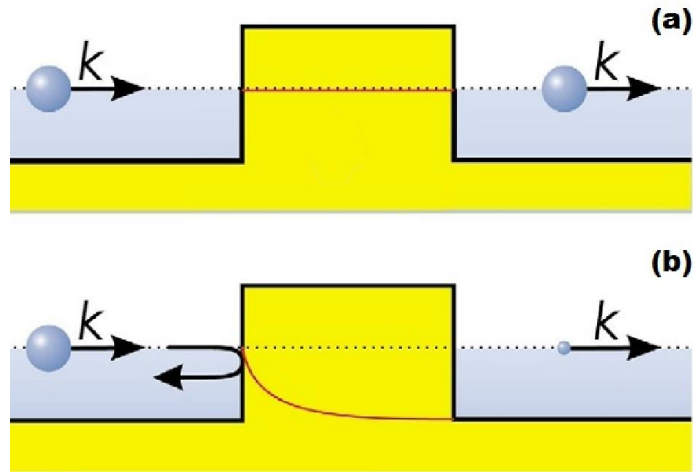


Figura 1.16: Representação dos dois tunelamentos: em (a), temos o tunelamento em Grafeno e em (b), semicondutores convencionais. A amplitude da função de onda dos elétrons ( em vermelho) permanece constante no Grafeno, enquanto a mesma decai exponencialmente em semicondutores convencionais. O tamanho da esfera indica a amplitude da onda incidentes e transmitida.

A barreira pode ser criada por um campo elétrico usando um isolante fino ou uma dopagem química local[9,13,14). É importante frisar que no Grafeno, os férmions de Dirac são sem massa e então, não há uma exigência formal teórica para o campo elétrico mínimo, para os estados do pósitrons sob a barreira. Para criar poços e barreiras em amostras reais de Grafeno com uma desordem, campos de  $\approx 10^5 \text{ Vcm}^{-1}$  utilizados rotineiramente em experimentos [ 9,14] mostram ser suficientes, o qual é da ordem de 11 ordens de magnitude menor que os campos necessários para observação do paradoxo de Klein para partículas elementares.

Para resolver o problema do tunelamento mostrado na Fig.(1.15)(b), nós assumimos que a onda do elétron incidente se propaga com um ângulo  $\phi$  com respeito ao eixo  $x$  e então usamos as componentes para os spinors de Dirac  $\psi_A$  e  $\psi_B$  para o Hamiltoniano

$H = H_0 + V_0$  na seguinte forma:

$$\psi_A(x) = \left\{ \begin{array}{l} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y}, x < 0 \\ (a e^{iq_x x} + b e^{-iq_x x}) e^{ik_y y}, 0 < x < d \\ t e^{ik_x x}, x > d \end{array} \right. \quad (1.8)$$

$$\psi_B(x) = \left\{ \begin{array}{l} s(e^{ik_x x + i\phi} - r e^{-ik_x x - i\phi}) e^{ik_y y}, x < 0 \\ s'(a e^{iq_x x + i\theta} - b e^{-iq_x x - i\theta}) e^{ik_y y}, 0 < x < d \\ s t e^{ik_x x + ik_y y + i\phi}, x > d \end{array} \right. , \quad (1.9)$$

onde  $k_F = 2\pi/\lambda$  é o vetor de onda de Fermi e  $H_0 = -i\hbar v_F \nabla$ . Para os vetores de onda temos  $k_x = k_F \cos\phi, k_y = k_F \sin\phi$  para fora e dentro da barreira,  $q_x = \sqrt{(E - V_0)/\hbar^2 v_F^2 - k_y^2}$ ,  $\theta = \tan^{-1}(k_y/q_x)$  é o ângulo de refração  $s = \text{senal de } E$  e  $s' = \text{senal}(E - V_0)$ . Requerendo a continuidade da função de onda através dos coeficientes apropriados  $a, b, t$  e  $r$  nós encontramos a seguinte expressão para o coeficiente de reflexão  $r$

$$r = 2ie^{i\phi} \text{sen}(q_x d) \times \frac{\text{sen}\phi - ss' \text{sen}\theta ss'}{[e^{-iq_x d} \cos(\phi + \theta) + e^{iq_x d} \cos(\phi - \theta)] - 2i \text{sen}(q_x d)}. \quad (1.10)$$

No limite de altas barreiras,  $|V_0| \gg |E|$ , a expressão para  $T$  pode ser simplificada para

$$T = \frac{\cos^2 \phi}{1 - \cos^2(q_x d) \text{sen}^2 \phi}. \quad (1.11)$$

As equações (1.10) e (1.11) prediz as condições de ressonância  $q_x d = N\pi$ ,  $N = 0, \pm 1, \dots$  e neste caso, é como se a barreira se tornasse transparente ( $T = 1$ ). Mais significativamente, entretanto, a barreira permanece sempre perfeitamente transparente para ângulos de incidência normal ( $\phi = 0$ ). Este último detalhe é uma característica única para os férmions de Dirac sem massa e é diretamente relacionada ao paradoxo de Klein na eletrodinâmica quântica. Este tunelamento perfeito pode ser entendido em termos da conservação do pseudospin. De fato, a ausência de processos de flip-pseudo-spin (

tais processos são raros e requerem um potencial de curto alcance, que agiria de forma diferentes em sítios  $A$  e  $B$  da rede de grafeno), um elétron se movendo para a direita pode ser espalhado somente para um estado de eletron se movendo para direita ou estado de buraco se movendo para a esquerda. Isso é ilustrado na Fig.(1.15), onde os portadores de carga do ramo vermelho do diagrama da banda pode ser espalhados em estados no ramo vermelho mas não pode ser transformado para um estado no ramo verde. O último espalhamento exigiria um pseudospin para ser invertido. A correspondência entre as direções de pseudospin  $\sigma$  para quase-partícula dentro e fora dos resultados da barreira em um tunelamento perfeito. Estritamente no caso unidimensional, a transmissão dos fermions de Dirac tem sido discutidos no contexto do transporte de elétrons em nanotubos de carbono[74]. Nossa análise corresponde ao caso bidimensional de tunelamento em Grafeno. A organização desta tese obedece a seguinte ordem: reservamos o capítulo 2 para uma breve análise dos aspectos principais do Grafeno e sua estrutura eletrônica. No capítulo 3, apresentamos o modelo teórico utilizado, ou seja, dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno e o cálculo dos coeficientes de transmissão através do método da matriz de transferência e barreira única de Grafeno usando matriz de transferência e analiticamente. A condutância em função da energia de Fermi, da largura da barreira  $d$  e do próprio campo  $B$  é também calculada e analisada. No Capítulo 4, apresentamos os resultados numéricos da probabilidade de transmissão e condutância, onde são observados a influência das larguras das  $d$ , da energia de Fermi  $E_F$ , do campo magnético  $B$  e do ângulo de incidência  $\phi$ . Também neste capítulo é apresentado um resultado comparativo dos efeitos para simples e dupla barreira, respectivamente.

No Capítulo 5 , apresentamos nossas conclusões e possíveis aplicações futuras.

# Capítulo 2

## Modelo teórico

Neste capítulo vamos partir de uma descrição microscópica do Grafeno para obtermos um modelo contínuo da dinâmica dos portadores no limite de baixas energias. Nessa descrição, desprezaremos as bordas do cristal, considerando-o infinito e também não levaremos em conta as interações elétron-elétron ou spin-órbita. Para isso, usaremos a aproximação de ligação forte (tight-binding). Nesse modelo, considera-se que cada elétron  $\pi$  associado a um átomo de carbono, possui uma probabilidade diferente de zero de ser encontrado apenas na vizinhança desse átomo, ou seja, nos seus vizinhos mais próximos. Dessa forma, cada elétron pode migrar de vizinho em vizinho ao longo da rede. Apesar de ser uma das abordagens microscópicas mais simples, o modelo tight-binding funciona extremamente bem para o cálculo da estrutura de bandas do Grafeno[75].

### 2.1 Cálculo da dispersão em Grafeno

O Grafeno é constituído por uma camada de átomos de carbono organizados em uma rede hexagonal. Essa estrutura cristalina não é uma rede de Bravais, no entanto ela pode ser vista como duas redes triangulares interpenetradas A e B, ou tratada como uma rede triangular com dois átomos por célula unitária[76]( conforme Fig.1.2). Os vetores da rede bem como as propriedades estruturais do Grafeno já foram abordados na seção 1.2. Para

o cálculo da dispersão em Grafeno, utilizamos o método tight-binding. O Hamiltoniano tight-binding para elétrons no Grafeno escrito no formalismo da segunda quantização, incluindo apenas o termo de hopping entre os primeiros vizinhos é escrito como:

$$H = - \sum_{i,j} t(a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i), \quad (2.1)$$

onde  $t = 2.8$  eV é o parâmetro associado á transição de elétrons entre os sítios mais próximos. Os operadores do vizinho mais próximo  $\mathbf{a}_i^\dagger$  e  $\mathbf{a}_i$  são os responsáveis pela criação e destruição respectivamente, de elétrons no sítio  $i$  da subrede  $A$ , enquanto  $\mathbf{b}_j^\dagger$  e  $\mathbf{b}_j$  tem a mesma função para um sítio  $j$  na subrede  $B$ . Os termos  $\sum_j \epsilon a_j^\dagger a_j$  e  $\sum_j \epsilon b_j^\dagger b_j$  que fornecem as energias on-site foram omitidos já que seu único efeito é deslocar os níveis de energia de Fermi do sistema. Quando uma folha de Grafeno está sob ação de um potencial de porta, a energia on-site é igual ao da voltagem de porta, caso contrário a energia on-site é nula.

Considerando a rede infinita, pode-se fazer uma transformada de Fourier no Hamiltoniano. Para isso escrevemos

$$\mathbf{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k, \quad \mathbf{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k^\dagger \quad (2.2)$$

$$\mathbf{b}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}, \quad \mathbf{b}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \mathbf{b}_{k'}^\dagger. \quad (2.3)$$

Substituindo (2.2) e (2.3) em (2.1) o Hamiltoniano fica

$$H = - \sum_{i,j} \frac{t}{N} \left[ \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} + \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k \right], \quad (2.4)$$

que pode ser reescrito como:

$$H = - \frac{t}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left[ e^{-i(k-k')\cdot r} e^{i\cdot k(r_j-r_i)} a_k^\dagger b_{k'} + e^{-i(k-k')\cdot r_i} e^{-i\cdot k(r_j-r_i)} b_{k'}^\dagger a_k \right]. \quad (2.5)$$

Cada átomo possui três primeiros vizinhos, então fixando a origem em um sítio  $i$  qualquer e fazendo  $j$  variar sobre os primeiros vizinhos, localizados por  $\vec{R}_1 = (-a, 0)$ ,  $\vec{R}_2 = (\frac{a}{2}, \frac{a\sqrt{3}}{2})$ ,  $\vec{R}_3 = (\frac{a}{2}, -\frac{a\sqrt{3}}{2})$ , obtemos:

$$H = -\frac{t}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_{k'} (e^{-ik'_x a} + e^{ik'_x a/2} e^{ik'_y \sqrt{3}a/2} + e^{ik'_x a/2} e^{-ik'_y \sqrt{3}a/2}) \\ + e^{-i(k'-k)\cdot r_i} \mathbf{b}_{k'}^\dagger \mathbf{a}_k (e^{ik'_x a/2} + e^{-ik'_x a/2} e^{-ik'_y \sqrt{3}a/2} + e^{-ik'_x a/2} e^{ik'_y \sqrt{3}a/2}), \quad (2.6)$$

$$H = -t \sum_k \left[ g(\vec{k}) \mathbf{a}_k^\dagger \mathbf{b}_k + g^*(\vec{k}) \mathbf{b}_k^\dagger \mathbf{a}_k \right], \quad (2.7)$$

onde

$$g(\vec{k}) = e^{ik'_x a} + 2 \cos(k'_y \frac{a\sqrt{3}}{2}) e^{-ik'_x a/2}, \quad (2.8)$$

é o fator de estrutura da rede cristalina.

Note que o Hamiltoniano na Eq.(2.7) acima pode ser escrito como

$$H = \sum_k \langle \Psi_k | H_k | \Psi_k \rangle, \quad (2.9)$$

onde  $|\Psi_k\rangle = (\mathbf{a}_k \mathbf{b}_k)^T$  e  $H_k$  representam, respectivamente, o estado eletrônico e o Hamiltoniano para um dado  $\vec{k}$ . Escrevemos  $H_k$  matricialmente como

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & -tg(\vec{k}) \\ -tg^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

De posse da Eq.(2.10), obtemos os autovalores de  $H_k$  correspondendo a

$$E_{\pm k} = \pm t |g(\vec{k})| = \pm t |g(\vec{k})| \sqrt{3 + f(\vec{k})}, \quad (2.11)$$

com  $f(\vec{k}) = 4 \cos(3k_x a/2) \cos(\sqrt{3}k_y a/2) + 2 \cos(\sqrt{3}k_y a)$ [87]. O gráfico da equação (2.11)

mostrado na Fig.(2.1) representa a estrutura de bandas de uma única folha de grafite. A

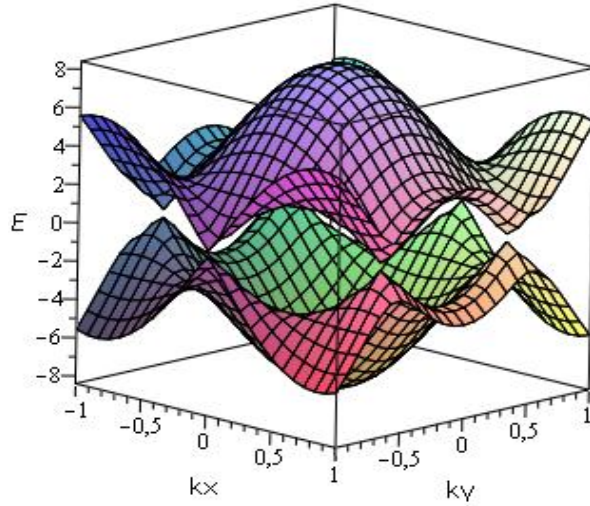


Figura 2.1: Representação da dispersão de energia das bandas em uma monocamada de Grafeno.

banda de valência ( $E < 0$ ) toca a banda de condução ( $E > 0$ ) em seis pontos localizados nos vértices da primeira zona de Brillouin. Esses pontos conhecidos como pontos de Dirac, são de particular importância no estudo do Grafeno, uma vez que nesses pontos observa-se a ausência de gap e uma dispersão eletrônica cônica incomum para pequenos valores de  $|E|$ . Os vértices de três desses cones está conectados pelos vetores da rede recíproca, por isso são equivalentes. Da mesma forma, os outros três cones também são equivalentes entre si. Cada vértice contribui com  $1/3$  de cone, por essa razão é comumente dito que dois desses seis cones não são equivalentes. Suas posições no espaço recíproco são dadas pelos vetores  $\vec{K}$  e  $\vec{K}'$  como segue:

$$\vec{K} = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \vec{K}' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (2.12)$$



## 2.2 Modelo contínuo

O Hamiltoniano da Eq.(2.10) provém de uma abordagem microscópica e seus elementos dependem explicitamente do parâmetro de rede  $a$ . Como não estamos interessados em nenhum efeito de borda e consideramos um arranjo infinito de átomos, podemos reduzir o Hamiltoniano da Eq.(2.10) ao modelo contínuo se considerarmos apenas a vizinhança dos pontos  $K$  e  $K'$ . Os termos não nulos da matriz que representa o Hamiltoniano são dados em termos de  $g(\vec{k})$ . Então, para obter uma forma aproximada desse operador na vizinhança dos vales  $K$  e  $K'$  basta fazer uma expansão em série de Taylor de  $g(\vec{k})$  em torno desses pontos. Dessa forma, considerando apenas o termo de primeira ordem,  $g(\vec{k})$  em torno de  $K'$  pode ser aproximado na forma:

$$g(\delta\vec{k}) \approx g(\vec{K}') + \frac{\partial g}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}=\vec{K}'} (k_x - K'_x) + \frac{\partial g}{\partial k_y} \Big|_{\vec{k}=\vec{K}'} (k_y - K'_y) + O(\delta k^2), \quad (2.13)$$

onde  $\delta\vec{k} = \vec{k} - \vec{K}'$ . Depois de avaliar  $g(\vec{k})$  e suas derivadas de primeira ordem no referido ponto, obtém-se as seguintes expressões:

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} \left( \frac{-\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) k'_x - \frac{3a}{2} \left( \frac{-\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) ik'_y \quad (2.14)$$

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} (k'_x - ik'_y) e^{i5\pi/6}. \quad (2.15)$$

A fase que aparece no lado direito da equação (2.15), representada pelo termo exponencial, pode ser incluída no ket de estado sem nenhuma mudança na física do sistema, uma vez que o quadrado da norma desse termo é um. Assim, o Hamiltoniano final que descreve estados com vetor de onda no vale centrado em  $\vec{K}$  é dado por

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F(k_x - ik_y) \\ \hbar v_F(k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

onde  $\hbar v_F = 3at_1/2$ . Esse é exatamente o Hamiltoniano de Dirac bidimensional para

férmions relativísticos com termo de massa nulo e velocidade da luz  $c$  substituída pela velocidade de Fermi  $v_F \approx c/300$  m/s. Por esse motivo, é dito frequentemente que os elétrons no Grafeno comportam-se como férmions relativísticos sem massa. O Hamiltoniano acima pode então ser escrito de uma forma mais concisa como

$$H_k = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (2.17)$$

onde as componentes  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  dadas pelas matrizes de Pauli. O grau de liberdade de spin, descrito pelas matrizes de Pauli  $\sigma_i$  é chamado de pseudo-spin para distinguí-lo do spin real do elétron que não está sendo considerado nessa abordagem. Se considerássemos o outro vale centrado em  $\vec{K}$ , encontraríamos o mesmo Hamiltoniano com  $k_y \rightarrow -k_y$ . Assim, a equação que descreve um elétron no Grafeno, considerando a contribuição dos dois vales, assume a seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & 0 \\ 0 & v_F \boldsymbol{\sigma}^\dagger \cdot \mathbf{p} \end{pmatrix} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle, \quad (2.18)$$

onde  $E = \pm \hbar v_F k$  fornece o espectro de energias e  $|\Psi\rangle = (\psi_{K'}, \psi_K) = (\psi'_A, \psi'_B, \psi_A, \psi_B)^T$  é um spinor cujas componentes  $\psi'_A, \psi'_B, \psi_A, \psi_B$  estão relacionadas respectivamente, com as amplitudes de probabilidade das subredes  $A$  e  $B$ . Na ausência de espalhamento intervalas, os estados correspondentes  $\vec{K}$  e  $\vec{K}'$  são degenerados, de modo que vamos trabalhar apenas com o Hamiltoniano bidimensional da Eq.(2.17).

# Capítulo 3

## Transmissão e Condutância em Simples e Dupla Barreira Magnética

### 3.1 Cálculo da transmissão para barreira magnética simples em monocamada de Grafeno

O modelo estudado neste trabalho constitui-se da seguinte forma: uma estrutura de simples barreira magnética em monocamada de Grafeno e também uma estrutura de dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno. Para uma simples barreira magnética, o potencial vetor é dado por  $A = B_1 L_B \Theta(x) + B_w L_B \Theta(x - d)$ . Para sistemas dupla barreira magnética, o potencial vetor  $\mathbf{A}$  é relacionado com o campo magnético conforme equação abaixo

$$A = B_1 L_B \Theta(x) + B_w L_B \Theta(x - d_1) + B_2 L_B \Theta(x - d_2 - L_w), \quad (3.1)$$

onde  $\Theta(x)$  corresponde a função step,  $B_1$ ,  $B_w$  e  $B_2$  correspondem ao campo da barreira da esquerda, campo magnético na região entre as barreiras ( nulo ) e o campo da barreira da direita; onde  $L_B$  é o comprimento magnético,  $d_1$ ,  $d_2$  e  $L_w$  são a largura da

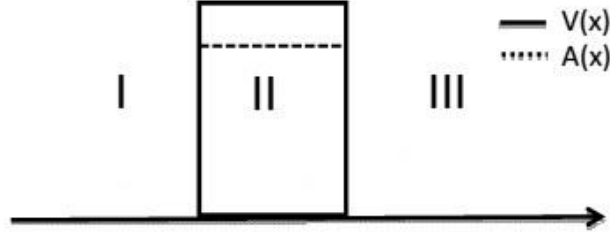


Figura 3.1: Barreira magnética em monocamada de Grafeno. Para a cada região delimitada, temos os seguintes coeficientes:  $a_1, b_1$  para a região *I* (onde  $a_1 = 1$  e  $b_1 = r$  corresponde ao próprio coeficiente de reflexão na região *I*);  $a_2, b_2$  para a região *II* e  $a_3, b_3$  para a região *III*, sendo que  $b_3$  é nulo pois não há reflexão na região *III* e  $a_3$  corresponde ao próprio coeficiente de transmissão  $t$ .

barreira da esquerda, da direita e o comprimento do poço, ou seja  $d_1 = L_{B1}$ ,  $d_2 = L_{B2}$  respectivamente.

Na Figura (3.1) nós mostramos um potencial do tipo barreira magnética simples de largura  $L = d$ . Neste sistema, elétrons em Grafeno podem ser descritos por duas componentes para cada função das equações de Dirac–Weyl (DW). Nós não consideramos o spin do elétron. Incluindo um campo magnético perpendicular através de um acoplamento mínimo, a equação de DW corresponde a

$$[v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} + e\mathbf{A}) + V_0 \sigma] \Psi = E \Psi, \quad (3.2)$$

onde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  é a matriz de Pauli,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  é o momento do elétron e  $v_F = 0.86 \times 10^6 m/s$  é a nossa velocidade de Fermi no grafeno considerada.

No gauge de Landau,  $\mathbf{A} = [0, A(y), 0]$  é o potencial vetor. Devido ao nosso sistema em nosso modelo ser homogêneo ao longo da direção  $y$ , o vetor de onda transversal  $k_y$  é conservado. O sistema de uma barreira única em monocamada de Grafeno de largura " $d$ " e altura " $B$ " pode ser representado conforme Fig.(3.1).

Resolvendo-se a equação de Schrodinger em cada região para energias menores que a altura do potencial ( $E < V_0$ ) encontramos as funções de onda do elétron na região *I*, *II* e *III* podem ser expressadas respectivamente por

$$\begin{aligned}
\Psi_I &= a_1 e^{ik_y y} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(k_x + ik_y)}{E} \end{pmatrix} + b_1 e^{ik_y y} e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(-k_x + ik_y)}{E} \end{pmatrix} \\
\Psi_{II} &= a_2 e^{ik_y y} e^{iq_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(q_x + iq_y)}{(E - V_0)} \end{pmatrix} + b_2 e^{ik_y y} e^{-iq_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(-q_x + iq_y)}{(E - V_0)} \end{pmatrix} \\
\Psi_{III} &= a_3 e^{ik_y y} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(k_x + ik_y)}{E} \end{pmatrix} + b_3 e^{ik_y y} e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(-k_x + ik_y)}{E} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Por conveniência, nós expressamos todas as quantidades em adimensionais através de dois parâmetros característicos, o comprimento magnético  $L_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_0}}$  e a energia  $E_0 = \frac{\hbar v_F}{L_{B_0}}$ . Para um valor realístico  $B_0 = 0.1$  T, nós temos  $L_{B_0} = 811$  Å e  $E_0 = 7.0$  meV[77] os quais constituem o comprimento e a escala de energia típicos. Serão estes os parâmetros utilizados em todos os cálculos seguintes.

Na Eq.(3.3), temos que  $k_x = k_\rho \cos \varphi$  e  $k_y = k_\rho \sin \phi$  são os vetores de onda perpendicular e paralelo sendo para a região do poço  $k_\rho = (E^2)^{1/2}$  e  $k_\rho = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$  e para a barreira os vetores de onda são respectivamente  $q = (q_x^2 + q_y^2)^{1/2}$ ,  $q = (|E - V_0|^2)^{1/2}$  e  $q_y = k_y + eA$ . Usando a continuidade das funções de onda e obedecendo as condições de contorno, encontramos o coeficiente de transmissão tanto pelo método da matriz de transferência quanto analiticamente.

Em ambos os casos que iremos estudar (simples e dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno), o cálculo da transmissividade é feito usando o seguinte procedimento:

(a) resolve-se a equação de Schrodinger em cada região de potencial constante, para um valor fixo da energia  $E$ , cujas soluções são ondas planas. do tipo  $e^{\pm ikx}$ , onde  $k$  é um número real na região do poço e imaginário nas regiões das barreiras.

(b) em seguida, escreve-se a função de onda em cada região, como combinação linear dessas ondas planas.

(c) usam-se as condições de contorno apropriadas em cada interface e obtém-se uma equação matricial, que relaciona os coeficientes da onda na região de incidência com aqueles na região de transmissão.

Nestes casos simples, o módulo quadrado da razão entre o coeficiente da onda de saída e o coeficiente de entrada nos dá a transmissividade da partícula  $T(E)$ , que é uma função contínua da energia.

Os passos (a)-(c) acima referidos, constituem basicamente, o método da matriz de transferência para o cálculo da transmissividade, que no contexto deste capítulo, refere-se ao caso de um movimento unidimensional.

Inicialmente, consideramos cada componente das respectivas funções de onda para cada região I, II e III conforme as equações Eqs. (3.3). Para a região I e II, obtenção dos coeficientes  $a_1$ ,  $b_1$ ,  $a_2$  e  $b_2$  considerando  $x = 0$ , sendo que  $a_1 = 1$  e  $b_1 = r$ , respectivamente o coeficiente de reflexão. Temos,

$$\begin{aligned} 1 + r &= a_2 + b_2 \\ \frac{(k_x + ik_y)}{E} + \frac{r(-k_x + ik_y)}{E} &= a_2 \frac{(q_x + iq_y)}{(E - V_0)} + b_2 \frac{(-q_x + iq_y)}{(E - V_0)}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Agora, fazendo a primeira e segunda componente das equações Eqs. (3.3) para as regiões II e III, obedecendo a condição de contorno  $x = d$ , obtemos,

$$\begin{aligned} e^{ik_x d} + r e^{-ik_x d} &= a_3 e^{ik_x d} + b_3 e^{-ik_x d} \\ \frac{(q_x + iq_y)a_2}{(E - V_0)} + \frac{(-q_x + iq_y)b_2}{(E - V_0)} &= \frac{(k_x + ik_y)}{E} a_3 + b_3 \frac{(-k_x + ik_y)}{E}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Sendo  $a_3 = t$  e  $b_3 = 0$ , pois não há reflexão para a região III e fazendo a seguinte simplificação  $\sigma_1 = (1/E)$  e  $\sigma_2 = (1/(E - V_0))$ . Reescrevendo a Eq. (3.5) em forma de

matriz, obtemos,

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sigma_1(k_x + ik_y) & \sigma_1(-k_x + ik_y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sigma_2(q_x + iq_y) & \sigma_2(-q_x + iq_y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

que pode ser simplificada como,

$$M_0 \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Isolando a matriz com os coeficientes  $a_2$  e  $b_2$  da Eq.(3.7), obtemos,

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = M_1^{-1} M_0 \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Repetindo o mesmo procedimento para a Eqs.(3.5),obtemos

$$\begin{pmatrix} e^{iq_x d} & e^{-iq_x d} \\ \sigma_2(q_x + iq_y)e^{iq_x d} & \sigma_2(-q_x + iq_y)e^{-iq_x d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_x d} & e^{-ik_x d} \\ \sigma_1(k_x + ik_y)e^{ik_x d} & \sigma_1(-k_x + ik_y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Reescrevendo a Eq.(3.9), obtemos

$$M_2 \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = M_3 \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

ou ainda,

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M_3^{-1} M_2 \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Utilizando a Eq.(3.8) em Eq.(3.10), obtemos

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M_3^{-1} M_2 M_1^{-1} M_0 \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$\begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

onde  $T_{11}$ ,  $T_{12}$ ,  $T_{21}$  e  $T_{22}$  correspondem aos elementos da matriz de transferência, que relaciona os coeficientes de saída ( $a_3$ ,  $b_3$ ) com os de entrada ( $a_1$ ,  $b_1$ ), sendo que os respectivos elementos se relacionam da seguinte forma:  $T_{11} = T_{22}^*$  e  $T_{12} = T_{21}^*$ . Sendo que  $T_{22} = [\frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2}][\frac{\alpha_4 - \alpha_3}{2}] + [\frac{\beta_1 + \beta_2}{2}][\frac{\beta_3 - \alpha_4}{2}]$  onde  $\alpha_1 = \frac{(k_x + ik_y)e^{iq_x d}}{e^{-ik_x d} k_x}$ ,  $\alpha_2 = \frac{\sigma_2(q_x + iq_y)e^{iq_x d}}{\sigma_1 e^{-ik_x d} k_x}$ ,  $\alpha_3 = \frac{-q_x + iq_y}{q_x}$ ,  $\alpha_4 = \frac{\sigma_1(k_x + ik_y)}{\sigma_2 q_x}$ ,  $\beta_1 = \frac{(k_x + ik_y)e^{-iq_x d}}{e^{-ik_x d} k_x}$ ,  $\beta_2 = \frac{\sigma_2(-q_x + iq_y)e^{-iq_x d}}{\sigma_1 e^{-ik_x d} k_x}$  e  $\beta_3 = \frac{(q_x + iq_y)}{q_x}$  respectivamente e  $T_{21} = [\frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2}][\frac{-\gamma_3 - \gamma_4}{2}] + [\frac{\delta_1 + \delta_2}{2}][\frac{\delta_3 + \delta_4}{2}]$ , onde  $\gamma_1 = \frac{(k_x + ik_y)e^{iq_x d}}{e^{ik_x d} k_x}$ ,  $\gamma_2 = \frac{\sigma_2(q_x + iq_y)e^{iq_x d}}{\sigma_1 e^{ik_x d} k_x}$ ,  $\gamma_3 = \frac{-q_x + iq_y}{q_x}$ ,  $\gamma_4 = \frac{\sigma_1(k_x - ik_y)}{\sigma_2 q_x}$ ,  $\delta_1 = \frac{(k_x + ik_y)}{e^{-ik_x d} k_x}$ ,  $\delta_2 = \frac{\sigma_2(-q_x + iq_y)e^{-iq_x d}}{\sigma_1 e^{-ik_x d} k_x}$ ,  $\delta_3 = \frac{(q_x + iq_y)}{q_x}$  e  $\delta_4 = \frac{\sigma_1(k_x - ik_y)}{\sigma_2 q_x}$  respectivamente. Temos que a transmissão  $T$  pode ser obtida utilizando  $T = 1/|t_{22}|^2$ , que corresponde a transmissão para simples barreira magnética

em monocamada de Grafeno. Em termos de comparação, obteremos agora o coeficiente de transmissão  $t$  analiticamente. Usando as condições de contorno para as equações (3.3), temos:  $a_1 = 1$ ,  $b_1 = r$ ,  $a_3 = t$  e  $b_3 = 0$ . Para as primeiras componentes da função  $\Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0)$ , conforme obtemos anteriormente, usamos  $1 + r = a_2 + b_2$  e utilizamos  $k_1^+ = k_x + ik_y$ ,  $k_1^- = k_x - ik_y$ ,  $k_2^+ = q_x + iq_y$  e  $k_2^- = q_x - iq_y$  por critério de simplificação. Obedecendo o mesmo procedimento para as primeiras e segundas componentes das funções de onda para as regiões  $II$  e  $III$ , obtemos usando  $\Psi_{II}(x=d) = \Psi_{III}(x=d)$  as seguintes equações:  $r = a_2 + b_2 - 1$ ,  $\sigma_1(k_1^- + k_1^+) = 2\sigma_1 k_x$ ,  $a_2 e^{iq_x d} + b_2 e^{-iq_x d} = t e^{ik_x d}$ ,  $a_2 e^{iq_x d} \sigma_2 k_2^+ - b_2 e^{-iq_x d} \sigma_2 k_2^- = t e^{ik_x d} \sigma_1 k_1^+$ . Fazendo as devidas substituições, obtemos:

$$b_2 = -\frac{e^{iq_x d}(\sigma_1 k_1^+ - \sigma_2 k_2^+)}{e^{-iq_x d}(\sigma_1 k_1^+ + \sigma_2 k_2^-)} a_2 \quad (3.14)$$



$$a_2 = -\frac{2\sigma_1 k_x e^{-iq_x d}}{e^{-iq_x d} |A_I|^2 e^{-iq_x d} - e^{-iq_x d} |B_I|^2 e^{iq_x d}} A_I^*, \quad (3.15)$$

onde  $A_I = (\sigma_1 k_1^- + \sigma_2 k_2^+)$ ,  $A_I^* = (\sigma_1 k_1^+ + \sigma_2 k_2^-)$ ,  $B_I = (\sigma_1 k_1^- - \sigma_2 k_2^-)$  e  $B_I^* = (\sigma_1 k_1^+ - \sigma_2 k_2^+)$ . Obtemos para o coeficiente de transmissão  $t$ ,

$$t = \frac{k_x q_x e^{-ik_x d}}{[k_x q_x \cos(q_x d) - i \operatorname{sen}(q_x d) (\frac{\sigma_1 k_x^2}{2\sigma_2} + \frac{\sigma_2 q^2}{2\sigma_1} - k_y q_y)]}. \quad (3.16)$$

Fazendo  $T = |t^* t|$ , obtemos,

$$T = \frac{k_x^2 q_x^2}{[k_x^2 q_x^2 \cos^2(q_x d) + \operatorname{sen}^2(q_x d) (\frac{\sigma_1 k_x^2}{2\sigma_2} + \frac{\sigma_2 q^2}{2\sigma_1} - k_y q_y)^2]}, \quad (3.17)$$

que corresponde ao coeficiente de transmissão para uma simples barreira magnética em monocamada de Grafeno. Na próxima seção, apresentamos o cálculo para dupla barreira magnética em Grafeno.

## 3.2 Cálculo da transmissão para dupla barreira magnética de Grafeno

Agora, realizaremos o procedimento para o cálculo da transmissão em dupla barreira magnética, conforme Fig.(3.2) de larguras  $L_{B_1} = L_{B_2} = d$ , onde  $L_{B_1}$ ,  $L_{B_2}$  correspondem às larguras das barreiras esquerda e direita e  $L_w$  é a largura do poço. Utilizando também o método da matriz de transferência. Para esta estrutura, devem ser acrescentadas as devidas funções de onda para as regiões  $IV$  e  $V$ , correspondendo a:

$$\begin{aligned} \Psi_{IV} &= a_4 e^{ik_y y} e^{iq_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(q_x + iq_y)}{(E - V_0)} \end{pmatrix} + b_4 e^{ik_y y} e^{-iq_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(q_x + iq_y)}{(E - V_0)} \end{pmatrix} \\ \Psi_V &= a_5 e^{ik_y y} e^{ik_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(k_x + ik_y)}{E} \end{pmatrix} + b_5 e^{ik_y y} e^{-ik_x x} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ \frac{(k_x + ik_y)}{E} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

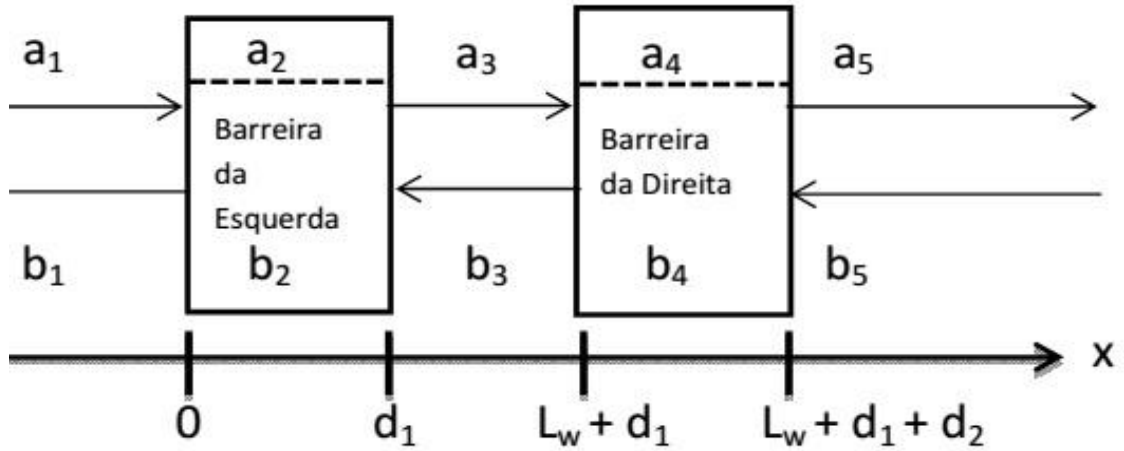


Figura 3.2: Representação esquemática de um sistema de dupla barreira, formado pela junção de duas barreiras simples, cujos coeficientes são mostrados em cada região, para os seguintes parâmetros:  $d_1$  ( largura da barreira esquerda),  $d_2$  (largura da barreira direita) e  $L_w$  ( largura do poço ).

Consideremos agora que a partícula incida sobre um sistema de dupla barreira, de largura  $L_{B1} = L_{B2} = d$ , separadas por uma região de poço de largura  $L_w$ , cujo esquema e mostrado na Fig.(3.2). Quando a partícula incidente tem a mesma energia de um desses estados ligados, a curva de transmissividade apresenta um pico de valor unitário  $T(E = E_n) = 1$ ; neste caso dizemos então que ocorreu um tunelamento ressonante.

Quando a partícula incidente tem a mesma energia de um desses estados ligados, a curva de transmissividade apresenta um pico de valor unitário  $T(E = E_n) = 1$ ; neste caso dizemos então que ocorreu um tunelamento ressonante. Como o cálculo da transmissividade não depende da posição das barreiras, mas sim dos vetores de onda  $k_\rho$  e  $q$  e da largura de cada região, podemos utilizar os resultados da análise anterior para calcular a transmissividade em barreiras duplas.

Como citado no início deste capítulo, nós analisamos as propriedades dinâmicas de simples e dupla barreiras magnéticas em monocamada de Grafeno. A escolha deste problema para compor o trabalho desta tese, deveu-se basicamente às recentes descobertas sobre o Grafeno e suas inúmeras aplicações ( com gap, com potenciais eletrostáticos,

barreiras assimétricas, etc ). Analisar as propriedades da Probabilidade de Transmissão  $T$ , em função do ângulo de incidência  $\phi$  e em função da energia de Fermi, da condutância em função da energia de Fermi, da distância e do próprio campo magnético  $B$  fornece interpretações e um bom entendimento destes sistemas utilizados na área de pesquisa do grafeno tendo em vista futuras aplicações.

Utilizando o mesmo procedimento para simples barreira e as devidas condições de contorno, obtemos o seguinte produto de matrizes:

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M_7^{-1} M_6 M_5^{-1} M_4 M_3^{-1} M_2 M_1^{-1} M_0 \begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

onde  $M_7$ ,  $M_6$ ,  $M_5$  e  $M_4$  correspondem respectivamente a:

$$M_7 = \begin{pmatrix} e^{ik_x L_{p2}} & e^{-ik_x L_{p2}} \\ e^{ik_x L_{p2}} \sigma_1 k_1^+ & -e^{ik_x L_{p2}} \sigma_1 k_1^- \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

$$M_6 = \begin{pmatrix} e^{iq_x L_{p2}} & e^{-iq_x L_{p2}} \\ e^{iq_x L_{p2}} \sigma_2 k_2^+ & -e^{iq_x L_{p2}} \sigma_2 k_2^- \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

$$M_5 = \begin{pmatrix} e^{iq_x L_{p1}} & e^{-iq_x L_{p1}} \\ e^{iq_x L_{p1}} \sigma_2 k_2^+ & -e^{iq_x L_{p1}} \sigma_2 k_2^- \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

$$M_4 = \begin{pmatrix} e^{ik_x L_{p1}} & e^{-ik_x L_{p1}} \\ e^{ik_x L_{p1}} \sigma_1 k_1^+ & -e^{ik_x L_{p1}} \sigma_1 k_1^- \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

onde  $L_{p1} = d_1 + L_w$  e  $L_{p2} = d_1 + L_w + d_2$ . Vale frisar que, para o sistema dupla barreira o termo  $a_5$  corresponde ao próprio coeficiente de transmissão  $t$  e  $b_5$  é nulo, pois não ocorrem reflexões para regiões posteriores á barreira.

Fazendo também a analogia da simples barreira para com a dupla barreira, obtemos uma expressão analítica em função da transmissão  $T_1$  para a transmissão de uma dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno. Considerando que ambas barreiras

estejam separadas por uma distância  $L_w$ . O vetor de onda  $k_x$  é o mesmo na região entre as duas barreiras, para a esquerda da primeira barreira e para a direita da segunda barreira. Para cada barreira nós podemos usar os resultados dados pela expressão de  $T$  para simples barreira magnética. O resultado para os coeficientes de transmissão e reflexão, matricialmente, pode ser escrito como,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r \end{pmatrix} = M_L M_{LW} M_R \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = M_D \begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Neste caso,  $M_L$ ,  $M_R$  e  $M_{LW}$  são as matrizes de transferência para a esquerda da primeira barreira e para a direita da segunda barreira e entre as barreiras respectivamente. O elemento  $M_{11}$  da matriz de transferência para uma barreira simples em coordenadas polares é

$$M_{11} = m_{11} e^{i\chi} \quad (3.25)$$

$$m_{11} = \left[ \cos^2(\kappa L) + \left( \frac{1 - s_0 s \text{sen} \theta \text{sen} \phi}{\cos \theta \cos \phi} \right)^2 \text{sen}^2(\kappa L) \right]^{1/2}. \quad (3.26)$$

A fase  $\chi$  é dada por

$$\chi = -\text{arctg} \left[ \left( \frac{1 - s_0 s \text{sen} \theta \text{sen} \phi}{s \cos \theta \cos \phi} \right) \text{tg}(\kappa L) \right] + \kappa L, \quad (3.27)$$

onde  $s_i = \text{sgn}(E - V_i)$ . Encontrando  $M_{D11}$ , nós obtemos

$$|M_{D11}|^2 = M_{L11} M_{R11} e^{-ik_x L} = (|m_{11}|^2 - |M_{21}|^2)^2 + 4 |m_{11}|^2 |M_{21}|^2 \cos(k_x L - \chi), \quad (3.28)$$

onde o elemento de matriz de uma simple barreira é

$$M_{21} = \frac{1}{2 \cos \theta \cos \phi} \left[ e^{i\theta} \cos(2\kappa a + \phi) - \frac{is_0}{s_1} \text{sen}(2\kappa a) \right] + \left[ \frac{i}{s_i} \text{sen}(2\kappa a) - s_0 e^{i\theta} \cos(2\kappa a - \phi) \right]. \quad (3.29)$$

Desta forma, o coeficiente de transmissão é dado por,

$$T_{tot}(E) = \frac{1}{|M_{11}|^2} = \frac{1}{T_1^2 + 4R_1 \cos^2(k_x L_w - \chi)}, \quad (3.30)$$

onde  $T_1$  e  $R = 1 - T_1$  são os coeficientes de transmissão e reflexão de uma barreira simples, respectivamente. O mínimo da transmissão ocorre para  $k_x L_w - \chi = n\pi$  e é

$$T_{tot}^{\min} = \frac{T_1^2}{T_1^2 + 4R_1} = \frac{T_1^2}{(T_1^2 - 2)^2} \quad (3.31)$$

Isto é um aumento da função de  $T_1$  com um valor máximo  $T_{tot}^{\min} = 1$  quando  $T_1 = 1$ . Verifica-se que aqui nós não podemos usar o argumento que a transmissão através de uma simples barreira é pequena desde que haja o tunelamento Klein para  $\kappa L = n\pi$  na qual a Eq.(3.31) fornece  $T_{tot}^{\min} = 1$ . Quando o cosseno da equação (3.31) se anula, a transmissão se aproxima da unidade a qual ocorre para  $T_{tot}^{\max} = 1$ ,

$$k_x L_w - \chi = (2n + 1)\pi/2, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3.32)$$

onde  $L_w$  é a distância entre as duas barreiras. Então para uma dupla barreira nós temos duas condições, para ter o máximo de transmissão, denominada

$$\kappa L_w = n\pi, \quad k_x L_w - \chi = (2n + 1)\pi/2, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (3.33)$$

Desta forma, verifica-se que para haver máximos de transmissão, são consideradas duas condições de contorno. Verifica-se que, apesar de inicialmente os resultados para transmissão em função do ângulo de incidência ser aparentemente similar para dupla barreira, as condições de obtenção dos picos de transmissão é diferente.

### 3.3 Análise da transmissividade

Para as quase-partículas de baixa energia ( elétrons e buracos) no Grafeno, o Hamiltoniano pode ser descrito como,

$$H = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + V, \quad (3.34)$$

onde  $\mathbf{p} = (p_x, p_x)$  é o operador momento,  $v_F$  é a velocidade de Fermi e  $\boldsymbol{\sigma}$  corresponde a matriz de Pauli. Nós consideramos  $V = V(x)$  como sendo o potencial unidimensional. Então a equação  $H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y)$  admite soluções de spinors da seguinte forma,

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} \psi_A(x, y) \\ \psi_B(x, y) \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

devido á invariância translacional ao longo da direção  $y$  nós tentamos soluções da forma  $\Psi(x, y) = \exp(ik_y y)[\phi_1(x), \phi_2(x)]^T$  com  $T$  denotando a transposta do vetor linha. Então  $\phi_1(x)$  e  $\phi_2(x)$  obedecem as equações diferenciais acopladas de primeira ordem,

$$\begin{aligned} -i[d/dx + k_y]\phi_2(x)\phi_2 &= \varepsilon\phi_1 \\ -i[d/dx - k_y]\phi_1 &= \varepsilon\phi_2, \end{aligned} \quad (3.36)$$

onde  $\varepsilon = E - V_0$ . Para simplificar a notação, introduzimos as variáveis adimensionais:  $t \rightarrow tl/v_F$ ,  $\vec{r} \rightarrow l\vec{r}$ ,  $\vec{v} \rightarrow v_F\vec{v}$ ,  $V_0 \rightarrow E_0V$ ,  $E \rightarrow E_0E$ ,  $E_0 = \hbar v_F/l$ . Para um potencial step  $V(x) = V_0\Theta(x)$  as soluções das equações são,

$$\Psi_A(x, y) = e^{ik_y y} \begin{pmatrix} e^{ik_1 x} + r e^{-ik_1 x} \\ s_i [e^{ik_1 x + i\theta} - r e^{-ik_1 x - i\theta}] \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

$$\Psi_B(x, y) = e^{ik_y y} \begin{pmatrix} t e^{\pm ik_2 x} \\ \pm s_i t e^{\pm(ik_2 x + i\phi)} \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

onde o sinal  $s_i = \text{sgn}(E - V_i)$ ,  $k_i = [\varepsilon_i^2 - k_y^2]$  com  $i = 1, 2$ ,  $\tan\theta = k_y/k_1$  e  $\tan\phi = k_y/k_2$ . Após o uso dessas soluções a  $x = 0$  nós obtemos a probabilidade de transmissão  $T = tt^*$

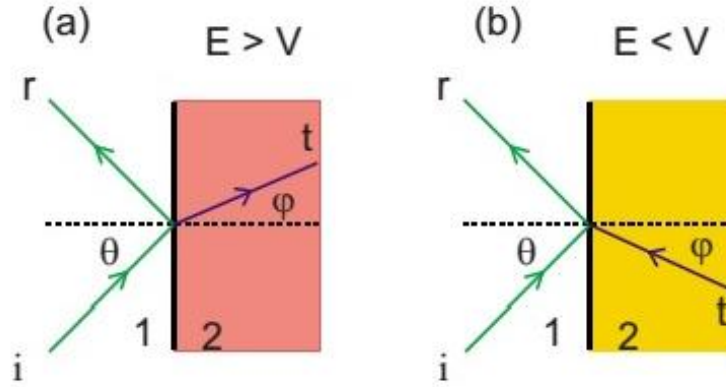


Figura 3.3: (a) Diagramas esquemáticos da transmissão através de um potencial step para um elétron com  $E > V_0$  ou índice de refração positivo. (b) similar a (a), porém para índice de refração negativo ou  $E < V_0$ .

e consideramos dois diferentes casos: (1)  $E < V_0$  nos conduzindo a,

$$t_{E < V_0} = \frac{2 \cos^2 \theta}{e^{-i\theta} + e^{-i\phi}}, \quad T_{E < V_0} = \frac{4 \cos^2 \theta}{1 + \cos(\theta - \phi)} \quad (3.39)$$

e (2)  $E > V_0$  que conduz a

$$t_{E > V_0} = \frac{2 \cos^2 \theta}{e^{-i\theta} + e^{i\phi}}, \quad T_{E > V_0} = \frac{4 \cos^2 \theta}{1 + \cos(\theta + \phi)}. \quad (3.40)$$

Usando a conservação do momento do elétron na direção  $y$  a  $x = 0$ , nós obtemos a Lei de Snell na forma  $\text{sen}\theta = (1 - V/E)\text{sen}\phi$ . Para  $E < V_0$  o potencial step atua como meio de índice de refração negativo e um feixe incidente de elétrons pode ser focalizado para a direita do potencial step (conformer Fig.3.3(b)). O ângulo crítico é  $\text{sen}\theta_c = (1 - V/E)$ . Para  $E < V_0/2$ , encontramos que  $\theta_c$  é imaginário ( $k_1$  é imaginário) e então o elétron é confinado para a direita da interface a  $x = 0$ .

Em seguida, consideramos uma barreira de potencial de largura  $W$ . De um ponto de vista da óptica, a barreira atua como um meio de índice de refração  $1 - V/E$ . Quando nós introduzimos uma onda a um ângulo de incidência  $\theta$ , ela se divide em ondas transmitidas

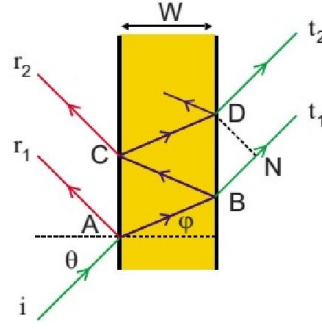


Figura 3.4: Diagrama esquemático de múltiplas reflexões dentro de uma barreira.

e refletidas, sendo que a onda transmitida dentro da barreira é refletida de forma múltipla às duas margens a  $x = 0$  e  $W$ , como mostrado na Fig.(3.4).

A diferença nas trajetórias ópticas ao longo da barreira, entre as ondas transmitidas  $t_1$  e  $t_2$  é,

$$\Delta L = (1 - V/E)(BC + CD) - BN, \quad (3.41)$$

onde  $BC = CD = W/\cos\phi$  e  $BN = 2W \tan\phi \sin\theta$ . Usando  $\sin\theta = (1 - V/E)\sin\phi$ , nós obtemos

$$\Delta L = 2(1 - V/E)W \cos\phi. \quad (3.42)$$

A transmissão total é dada por  $T = |t_1|^2 + |t_2|^2 + 2|t_1||t_2|\cos\delta$  com a correspondente diferença de fase,

$$\delta = k_1\Delta L = 2k_1(1 - (1 - V/E)W \cos\phi). \quad (3.43)$$

A transmissão é máxima quando  $|\delta| = 0, 2\pi, 4\pi$  e mínimo para  $|\delta| = \pi, 3\pi$ . Para obtermos a transmissão total nós definimos  $r$  e  $t$  para ser, respectivamente, as amplitudes de reflexão e transmissão fora da barreira e  $r'$  e  $t'$  as correspondentes amplitudes dentro da barreira. As diferentes combinações de ondas transmitidas através da barreira são,

$$t', t'r'^2 e^{i\delta}, \dots, ttr'^{2(n-1)} e^{i(n-1)\delta}, \quad (3.44)$$



e a amplitude de transmissão total

$$t_t = tt'(1 + r'^2 e^{i\delta} + \dots + r'^{2(n-1)} e^{i(n-1)\delta} + \dots) = tt'/[1 - r'^2 e^{i\delta}]. \quad (3.45)$$

Então a probabilidade de transmissão total  $T_t = t_t t_t^*$  é,

$$T_t = 1/[1 + F \text{sen}^2(\delta/2)] \quad (3.46)$$

com  $F = 4R/(1 - R)^2$ . Sendo  $R = |r'|^2$  e  $T = tt'$ . Usando as equações (3.37) e (3.38) nós obtemos  $F$  que corresponde a,

$$F = \frac{[1 - \cos(\theta - \phi)][1 + \cos(\theta + \phi)]}{\cos^2 \theta \cos^2 \phi}. \quad (3.47)$$

Usando as equações (3.46) e (3.47), nós encontramos a probabilidade de transmissão para uma barreira simples,

$$T = \frac{\cos^2 \theta \cos^2 \phi}{[\cos \mu \cos \theta \cos \phi]^2 + \text{sen}^2 \mu (1 - \text{sen} \theta \text{sen} \phi)^2}, \quad (3.48)$$

onde  $\mu = k_2 W$ . Substituindo  $\mu = n\pi$  na eq.(3.37), nós obtemos as energias as quais a ressonância ocorre ( $T = 1$ ),

$$E = V_0 \pm \hbar v_F [k_y^2 + n^2 \pi^2 / W^2]^{1/2}. \quad (3.49)$$

Nós teremos ao menos uma ressonância se

$$W > \pi / V_0. \quad (3.50)$$

Enfatizaremos a influência do campo magnético nos resultados das ressonâncias.

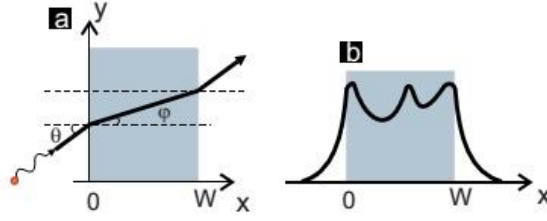


Figura 3.5: (a) Diagrama esquemático da transmissão através de uma barreira de largura  $W$ . (b) A função de onda de um estado localizado.

### 3.4 Cálculo da condutância para única e dupla barreira magnética em Grafeno e densidade de corrente para dupla barreira magnética

Baseada na fórmula da condutância de Landauer-Buttiker[79], a condutância balística neste sistema pode então ser escrita como

$$G/G_0 = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(E_F, E_F \sin \phi) \cos \phi d\phi, \quad (3.51)$$

onde  $\phi$  é o ângulo relativo a direção  $x$  e  $E_F$  é a energia de Fermi. O fator  $G_0 = 2e^2 E_F L_y / (\pi h)$  é considerado como unidade de condutância, onde  $L_y \gg L_B$  é a largura da amostra na direção  $y$ . Aqui nós consideramos somente a condutância através das barreiras e não consideramos a contribuição da região antes e depois da estrutura ressonante. Usando a probabilidade de transmissão, a densidade de corrente ( $I$ ), devido a voltagem bias ( $V_b - E'L$ ) ao longo da direção  $x$  é dada por,

$$I = -\frac{4eL_y}{h^2 v_F} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(\phi) [f(E) - f(E + eV_b)] E dE \cos(\phi) d\phi \quad (3.52)$$

onde  $f(E)$  é a função de Fermi. Para baixas temperaturas, a função  $[f(E) - f(E + eV_b)]$  pode ser aproximada por  $-eV_b \delta(E - E_F)$ . Então, podemos encontrar a expressão para

a densidade de corrente para baixas temperaturas como

$$I = \lambda V_b \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(\phi, eV_b) \cos(\phi) d\phi \quad (3.53)$$

onde  $\lambda = 4e^2 L_y v_F / (2\pi L_B)^2$ . Os cálculos das grandezas probabilidade de Transmissão, Condutância e densidade de corrente, fornece uma análise detalhada das propriedades da estrutura barreira magnética simples e dupla em monocamada de Grafeno.

# Capítulo 4

## Resultados

Antes de discutirmos os resultados numéricos obtidos das expressões analíticas para a transmissividade em simples barreira magnética em monocamada de Grafeno e dos resultados para a matriz de transferência para dupla barreira magnética, desenvolvidas nos capítulos anteriores, convém recapitularmos a metodologia para o cálculo dessa transmissão. De um modo geral, esta técnica consiste em relacionar os coeficientes das ondas que incidem nas interfaces da barreira magnética [veja a Fig. (3.1)] com os coeficientes das ondas que são espalhadas (refletidas). Os portadores de carga nessas estruturas são descritas como férmions sem massa governados pela equação de Dirac. Como dito anteriormente, isso resulta em propriedades incomuns nas propriedades de transporte devido às características quirais.

### 4.1 Transmissão para barreira magnética simples e dupla em monocamada de Grafeno

A Fig. (4.1) mostra a transmissão através de uma barreira magnética para uma incidência normal como função da energia de Fermi para  $d = 1$  e campos magnéticos de 0, 0.1, 0.2 e 0.5 Tesla e potencial da barreira  $V_0 = 0$ . Os resultados mostram que para cam-

pos magnéticos diferentes de zero, oscilações características de tunelamento ressonante aparecem. A medida que o campo aumenta ocorre um aumento do confinamento dos eletrons fato que pode ser observados nos picos ressoanantes mais estreitos. Os picos ressonantes são associados a Fabry-Pérot e são obtidos quando  $T = 1$  na expressão da probabilidade de transmissão  $T = k_x^2 q_x^2 / [k_x^2 q_x^2 \cos^2(q_x d) + \text{sen}^2(q_x d) [(\frac{\sigma_1 k_x^2 \rho}{2\sigma_2} + \frac{\sigma_2 q^2}{2\sigma_1} - k_y q_y)^2]]$  quando  $q_x d = n\pi$  e vale  $E = V_0 \pm \hbar v_F [k_y^2 + n^2 \pi^2 / W^2]^{1/2}$  para incidência normal.

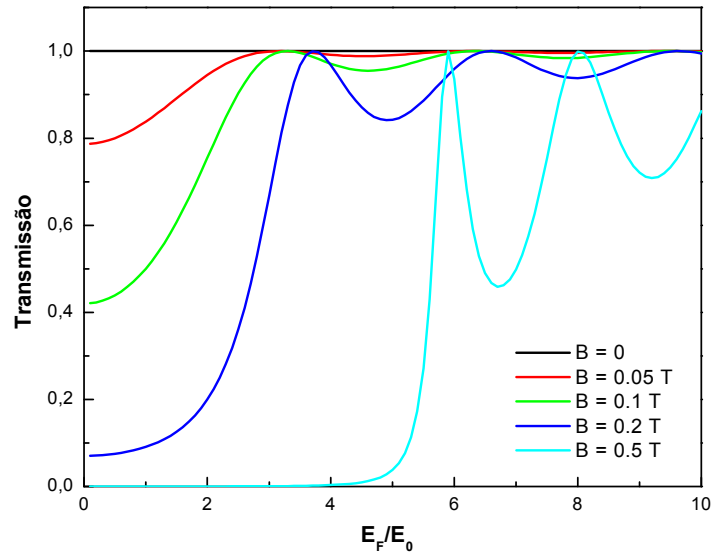


Figura 4.1: Probabilidade de transmissão para uma simples barreira magnética em monocamada de Grafeno, para os seguintes parâmetros:  $V_0 = 0$ ,  $d = 1$  e  $\phi = 0$ . Caso o campo magnético seja nulo, temos uma transmissão total.

Na Fig.(4.2) mostramos o efeito do campo magnético na transmissividade, agora adicionando uma barreira de potencial ( $V_0 = 10E_0$ ). Podemos observar que para  $B = 0$  a barreira de potencial permanece perfeitamente transparente. Isto é uma característica dos férmions sem massa de Dirac e está diretamente relacionado ao paradoxo de Klein da eletrodinâmica quântica e distingue claramente a transmissividade de uma estrutura com barreira magnética de uma estrutura de barreira elétrica. Podemos ainda observar que o

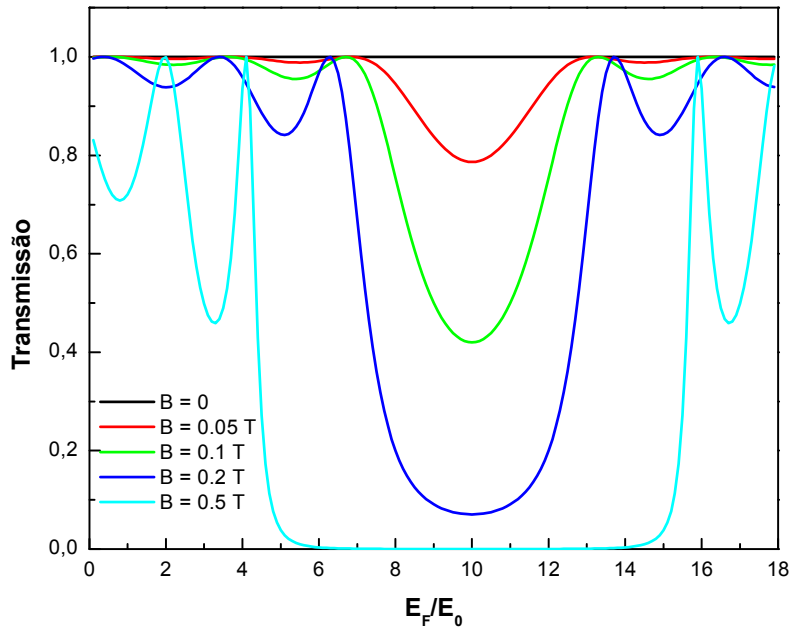


Figura 4.2: Transmissão para barreira única de Grafeno para diferentes campos magnéticos com os seguintes parâmetros:  $d = 1$  e  $V_0 = 10E_0$ .

aumento do campo magnético diminui a transmissividade nas regiões fora da ressonância criando um gap de transmissão no intervalo  $V_0 - A < E < V_0 + A$  e que cresce com o aumento do campo magnético. Realmente para ângulo incidência zero nesse intervalo, o vetor de onda na barreira é complexo (ver Fig. 4.3 para  $B = 0.5$  Tesla) não existindo estado eletrônico (ondas propagantes) mais sim ondas evanescentes na região da barreira

e a probabilidade de transmissão decai exponencialmente. Fora desse intervalo os elétrons

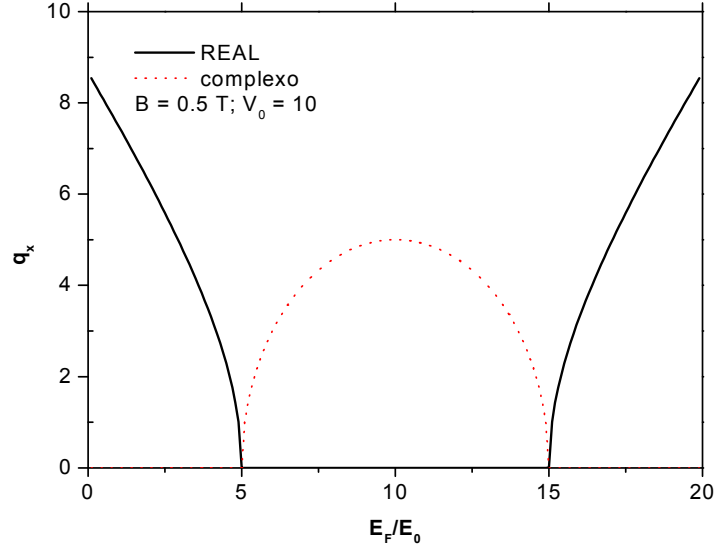


Figura 4.3: Vetor de onda  $q_x$  em função da  $E_F/E_0$  para os parâmetros:  $B = 0.5$  T e  $V_0 = 10E_0$  para uma barreira magnética simples em monocamada de Grafeno.

estão no modo propagante e os picos ressonantes de Fabry-Pérot valem  $E = V_0 \pm \hbar v_F [k_y^2 + n^2 \pi^2 / W^2]^{1/2}$ . Uma outra distinção entre a transmissividade com barreiras magnéticas e elétricas pode ser observado no gráfico da transmissã em função do ângulo de incidência conforme mostrado na Fig.(4.4) para uma barreira magnética com campo magnético igual a 0.2 T e uma barreira elétrica com potencial  $V_0 = 10E_0$ . Podemos observar que a aplicação do campo magnético gera uma quebra de simetria no gráfico da transmissã quando comparado com a barreira elétrica. Nos dois casos existem determinados ângulos, chamados de ângulos críticos a partir do qual a transmissividade se anula e que distingue o modo propagante do modo evanescente e podem ser obtidos a partir do momento que o vetor de onda  $q_x$  se tornar complexo, isto é, quando  $(E - V_0)^2 = (k_y + A)^2$  que corresponde a um angulo crítico dado por  $\phi_c = \arcsen((|E_F - V_0| - A)/E_F)$ . Dessa forma, o ângulo crítico para um potencial  $V_0$  constante pode ser relacionado com a energia de Fermi e

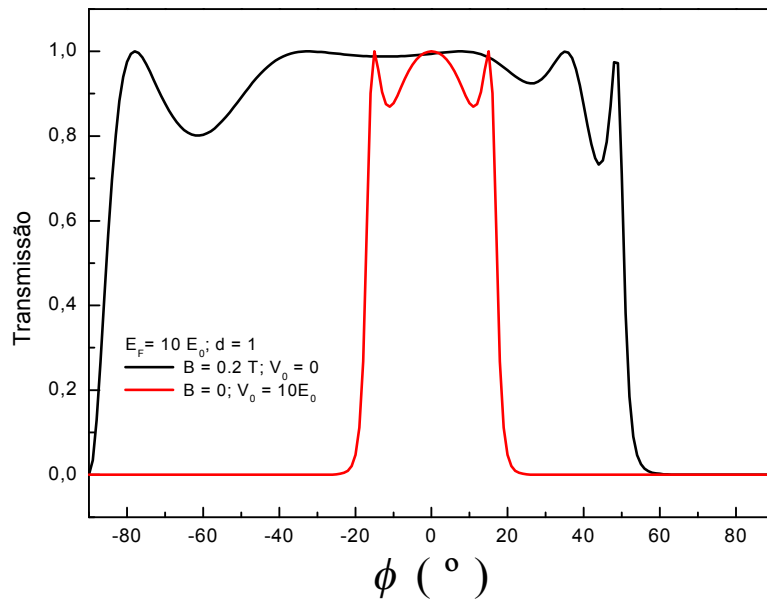


Figura 4.4: Probabilidade de transmissão para uma simples barreira magnética com os seguintes parâmetros:  $B = 0.2 \text{ T}$  e  $V_0 = 0$  (linhas pretas) e  $B = 0$  e  $V_0 = 15E_0$  (linhas vermelhas), para uma energia fixa de  $E_F = 15E_0$ .



com o campo magnético. Analisaremos os efeitos da variação no campo magnético das barreiras, conforme pode ser visto na Fig.(4.5), para os seguintes parâmetros: na parte (a), usamos  $B = 0.1$  T; na parte (b),  $B = 0.2$  T e na parte (c),  $B = 0.5$  T, sendo o potencial  $V_0 = 0$  e a largura da barreira  $d = 1$ .

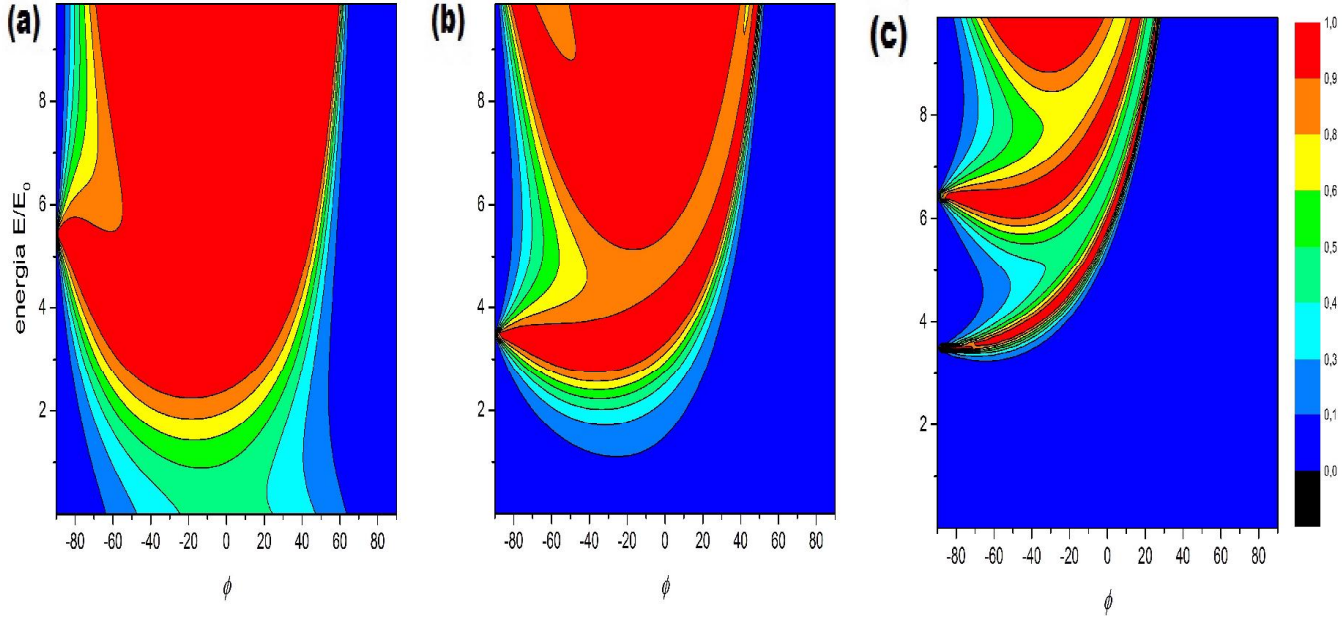


Figura 4.5: Contorno do plot de transmissão através de simples barreira magnética, para os seguintes campos magnéticos: na parte (a),  $B = 0.1$  T, na parte (b),  $B = 0.2$  T e na parte (c),  $B = 0.5$  T, sendo o potencial  $V_0 = 0$  e a largura da barreira  $d = 1$ .

O contorno do plot de transmissão que pode ser observado na Fig.(4.5), mostra a probabilidade de transmissão em função da energia de Fermi e em função do ângulo de incidência. A medida que o campo aumenta ocorre um aumento do confinamento dos elétrons fato que pode ser observado nos picos ressonantes mais estreitos.

Neste momento, analisaremos a transmissão para duplas barreiras magnéticas, em função da energia de Fermi e em função do ângulo de incidência. A probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética é mostrada nas figuras 4.6 a 4.9 onde pro-

cederemos de forma similar á análise da simples barreira, com transmissão dependendo do ângulo de incidência e da energia de Fermi, separadamente, verificando a influência dos parâmetros estruturais. Nas Figs. 4.6(a) e 4.6(b) mostramos a probabilidade de transmissão  $T$  para dupla barreiras magnéticas simétricas com potencial  $V_{01} = V_{02} = 0$ . Observamos dessas Fig.(4.6) (a) e (b) oscilações ressonantes ( $T = 1$ ) devido á interferência de Fabry-Perot para ângulos de incidências oblíquas em vez da incidência normal. Das Figs.4.6(a) e (b), podemos verificar que o ângulo crítico aumenta com o aumento da energia de Fermi e a diminui com o aumento da intensidade do campo magnético.

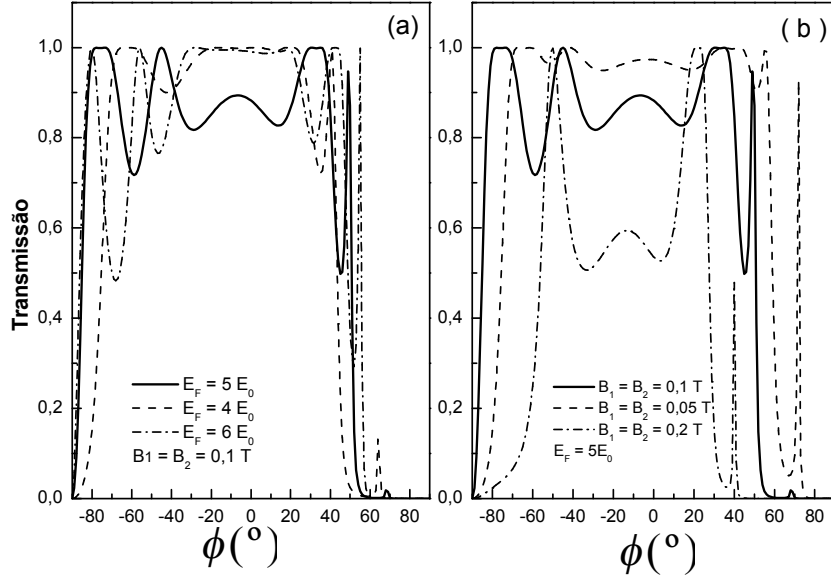


Figura 4.6: Probabilidade de transmissão para o sistema dupla barreira magnética em monocamda de Grafeno para os seguintes parâmetros comuns em (a) e (b):  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , correspondendo ás larguras da barreira esquerda, direita e largura do poço. e potencias  $V_{01} = V_{02} = 0$ .

As Figs.4.7(a) e (b) mostram a transmissividade para dupla barreira assimétrica, para  $B_1 = B_2 = 0.1$  T e  $E_F = 5E_0$ . Verifica-se que as posições e o número dos picos de

ressonância mudam com o aumento da largura  $d_2$  e com o crescimento da largura do poço  $Lw$ , mas o ângulo crítico permanece com o mesmo valor. Essas características implicam que, ambas, a largura da barreira magnética e a largura da região não-magnética tem influência na dependência angular da probabilidade de transmissão mas não tem efeito no ângulo crítico.

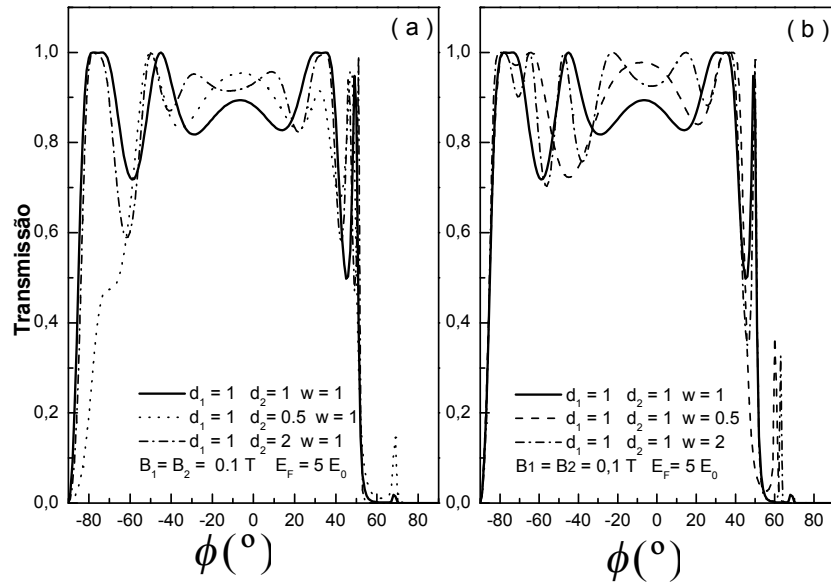


Figura 4.7: Probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros:  $B_1 = B_2 = 0.1$  T,  $d_1 = d_2 = Lw = 1$  e os potenciais correspondem a  $V_{01} = V_{02} = 0$ . Para (a) e (b) usamos para o mesmo valor para energia de Fermi,  $E_F = 5E_0$ .

As Figs.4.8(a) e (b) mostram a dependência da probabilidade de transmissão em função da energia de Fermi para uma dupla barreira magnética simétrica.. Na parte (a), usamos ângulo de incidência  $\phi = 0$  e  $B_1 = B_2 = 0.1$  T (linha contínua),  $B_1 = B_2 = 0.05$  T (linha tracejada) e  $B_1 = B_2 = 0.2$  T ( traço e ponto) e potencial de  $V_{01} = V_{02} = 0$ . Na parte (b), usamos  $B_1 = 0.1$  T e  $B_2 = 0.1$ T (linha contínua),  $B_1 = 0.1$  T e

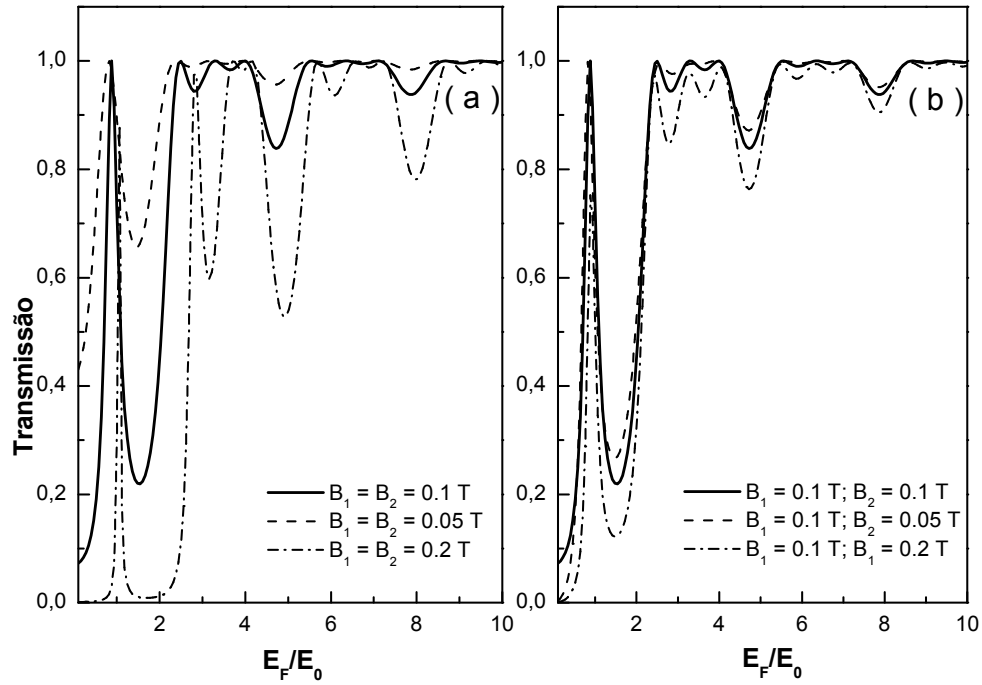


Figura 4.8: Probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética como função da energia de Fermi. Para (a) e (b), são considerados os parâmetros  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ ,  $V_{01} = V_{02} = 0$  e  $\phi = 0$ .

$B_2 = 0.05$  T ( linha tracejada) e  $B_1 = 0.1$  T e  $B_2 = 0.2$  T ( traço e ponto). Para ambas figuras, consideramos largura da barreira esquerda, direita e largura do poço  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ . Podemos observar dessas figura que o aumento do campo magnetico produz um deslocamento dos picos e maior confinamento dos elétrons, isto pode ser visto mais claramente no primeiro pico ressonante que é mais estreito.

Nas Figs (4.9) (a) e (b) mostramos a transmissividade em função da energia de Fermi para diferentes parâmetros estruturais com incidência normal e campos magnéticos  $B_1 = B_2 = 0.1$  T. Na parte (a), usamos  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  ( linha contínua ),  $d_1 = 1, d_2 = 0.5$  e  $L_w = 1$ (linha tracejada) e  $d_1 = 1, d_2 = 1$  e  $L_w = 2$  (traço e ponto). Para a parte (b), usamos:  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  ( linha contínua ),  $d_1 = 1, d_2 = 1$  e  $L_w = 0.5$ (linha tracejada) e  $d_1 = 1, d_2 = 1$  e  $L_w = 2$  (traço e ponto).

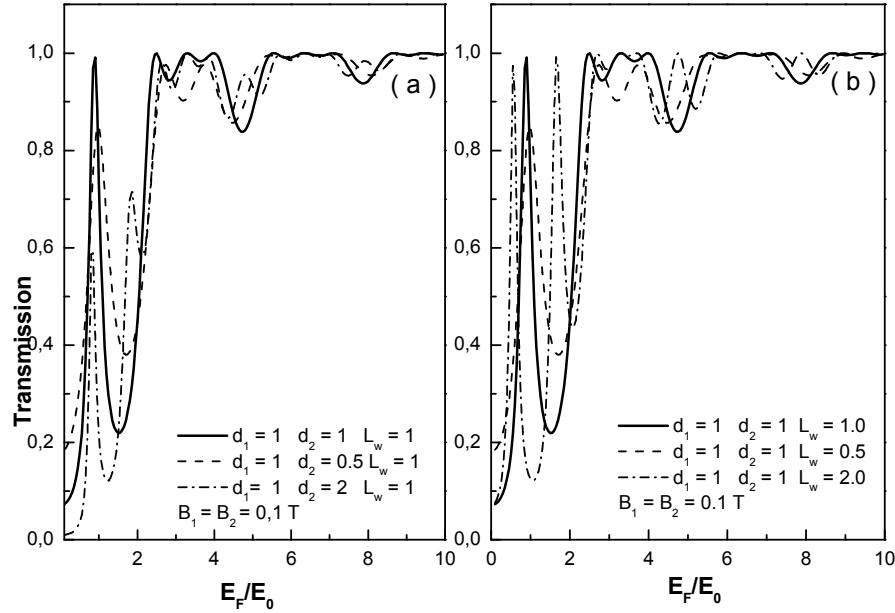


Figura 4.9: Probabilidade de transmissão para dupla barreira em monocamada de Grafeno com incidência normal Em (a) e (b) considera-se as barreiras simétricas, correspondendo a  $B_1 = B_2 = 0.1$  T e potenciais  $V_{01} = V_{02} = 0$ .

Na Fig.(4.9)(a), podemos observar que quando a barreira é assimétrica, ocorre uma supressão do primeiro pico ressonante que fica mais estreito para  $d_2 > d_1$  ( linha traço-ponto) e mais largo para  $d_2 < d_1$  (linha tracejada).

Na parte (b) da Fig.(4.9), observamos que, aumentando a largura do poço, ocorre o aparecimento de mais um pico ( linha tracejada ) em comparação com outros parâmetros estruturais ( linha contínua e pontilhada ). Em linhas gerais podemos observar que a probabilidade de transmissão oscila com a variação da energia de Fermi para incidência normal. As formas das curvas estão intimamente relacionadas com a altura e a largura da barreira. Em outras palavras, para incidência normal a probabilidade de transmissão pode ser modulada através da mudança dos parâmetros estruturais e a energia incidente. Como já foi mencionado acima, no caso de uma barreira elétrica, temos um transporte perfeito conhecido como tunelamento Klein, que é independente da largura e do potencial da barreira. Entretanto, a situação é completamente diferente para estruturas barreiras magnéticas.

Na Fig.(4.10) temos a probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno para os seguintes parâmetros:  $B = 0.1\text{T}$  ( linha preta ),  $B = 0.2\text{ T}$  ( linha vermelha ) e  $B = 0.5\text{ T}$  ( linha verde) para potencial de  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$  e  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ . Vale frisar que para as três situações, as barreiras são simétricas (  $B_1 = B_2$ ) e em comparação com a barreira simples (Fig.4.2), a transmissão para dupla adiciona picos ressonantes na região do gap de transmissão devido a estados ligados na região do poço.

Essas propriedades especiais oferecem a possibilidade para controlar feixes de elétrons em Grafeno. Similar ao procedimento da análise da transmissão para simples barreira, onde analisamos a transmissão com os seguintes gráficos:  $T \times E$ ,  $T \times \phi$  e  $T \times E \times \phi$ ,

procederemos da mesma maneira para uma estrutura dupla barreira magnética, conforme pode ser visto na Fig.(4.11). Os resultados verificados tanto para a Figura (4.11) quanto Fig.(4.12) indicam as mesmas leituras, no que se refere aos primeiros picos surgirem para

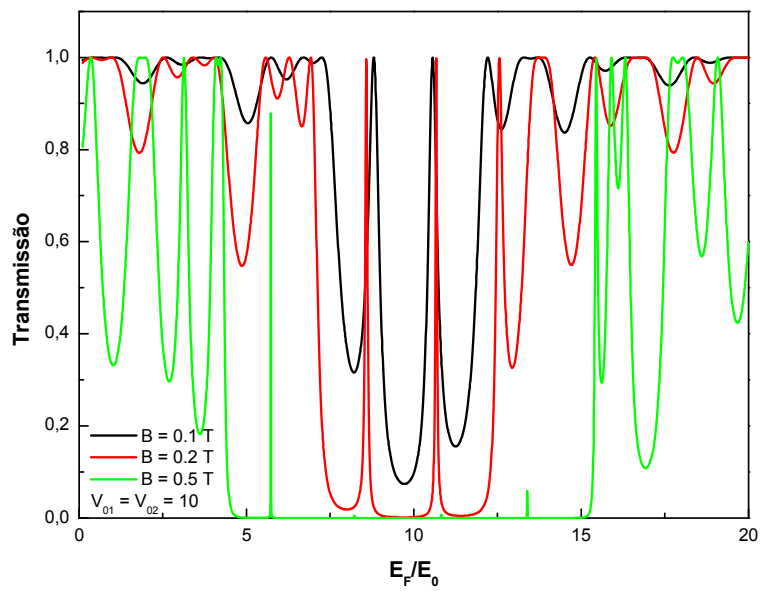


Figura 4.10: Transmissão em função da energia de Fermi para dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros:  $B = 0.1\text{T}$ ,  $B = 0.2\text{ T}$  e  $B = 0.5\text{ T}$  para potencial de  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$  e  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ .

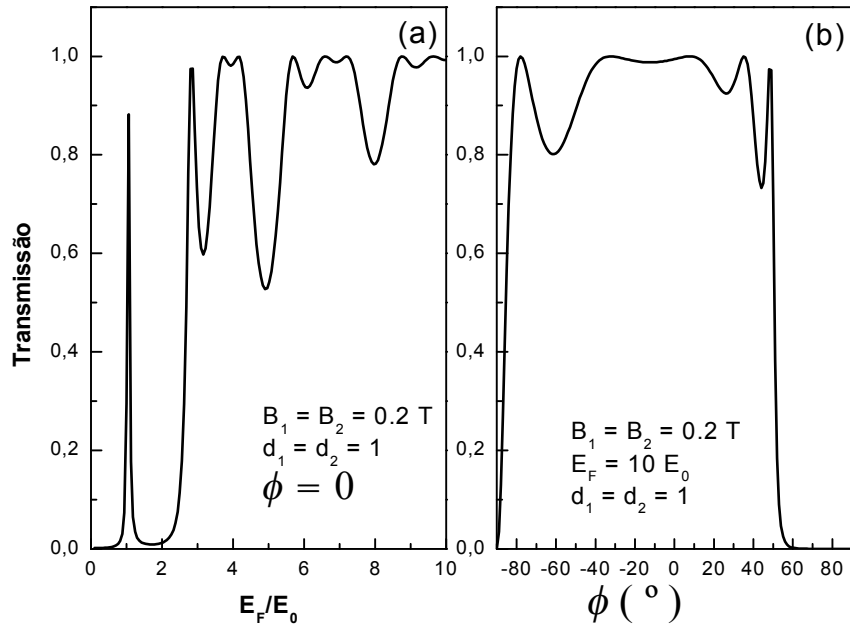


Figura 4.11: Probabilidade de transmissão para dupla barreira magnética. Em (a), com dependência na energia de Fermi. Em (b), mostramos a dependência da Transmissão com o ângulo de incidência para os seguintes parâmetros estruturais: Em (a):  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , correspondendo á largura da barreira esquerda, direita e largura do poço e  $B_1 = B_2 = 0.2 \text{ T}$ . Em (b):  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , para campos de  $B_1 = B_2 = 0.2 \text{ T}$ . Para ambas Figuras, (a) e (b), o potencial das barreiras corresponde a  $V_{01} = V_{02} = 0$ .



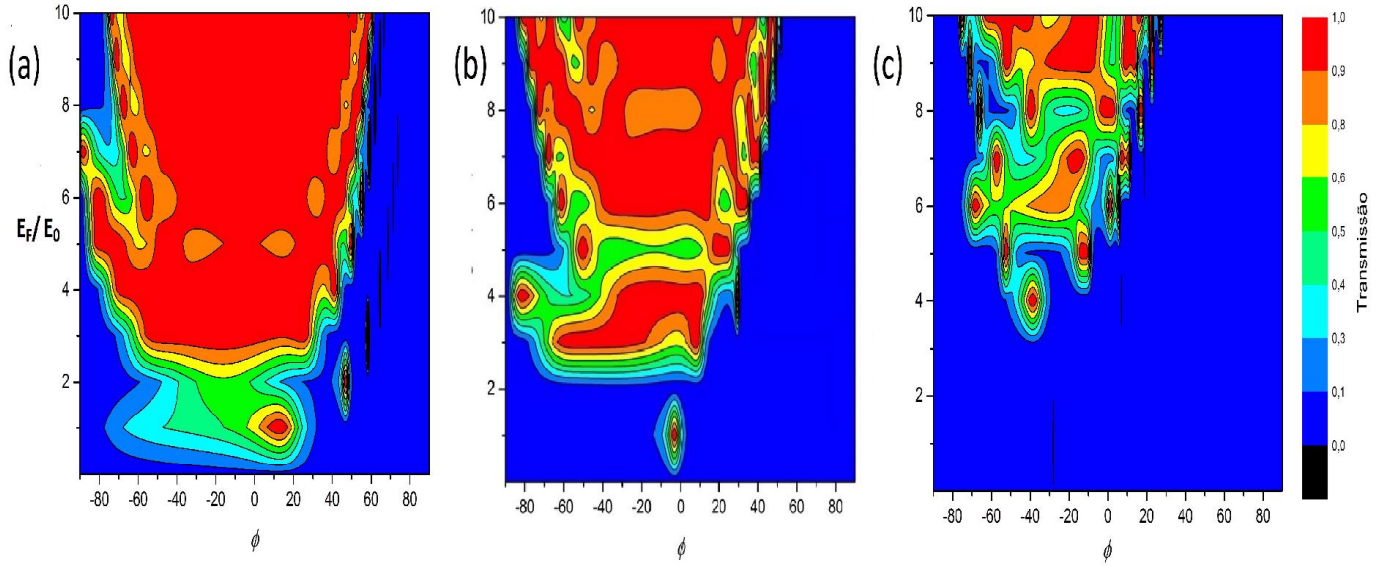


Figura 4.12: Contorno do plot de transmissão para dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros: na parte (a),  $B_1 = B_2 = 0.1$  T, na parte (b),  $B_1 = B_2 = 0.2$  T e na parte (c)  $B_1 = B_2 = 0.5$  T. Em (a), (b) e (c), usamos para largura da barreira direita e esquerda  $d_1 = d_2 = 1$  e largura do poço  $L_w = 1$ , sendo os potenciais  $V_{01} = V_{02} = 0$ , respectivamente.

os primeiros valores da energia de Fermi (conforme Fig. 4.11(a)). A região de  $\phi$  negativo já evidenciam picos, mesmo para valores relativamente baixos de energia de Fermi.

## 4.2 Condutância para simples e dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno

A probabilidade de transmissão nos conduz diretamente ao fato que a condutância angularmente medida está relacionada aos parâmetros estruturais. Na Fig.(4.13) apresentamos a condutância em função da energia de Fermi para uma simples barreira magnética em Grafeno, para os seguintes campos: 0.1( linha preta), 0.2 (linha vermelha) e 0.5 T (linha verde). Podemos observar que a medida que o campo magnético aumenta os elétrons ficam mais confinados na região da barreira diminuindo o valor da condutância e aumentando as oscilações ressonantes. Observamos também que para baixas energias de Fermi ocorre uma supressão do tunelamento com o aumento do campo magnético da barreira. Uma situação diferente, com relação a Fig.(4.13), é a inserção de um potencial

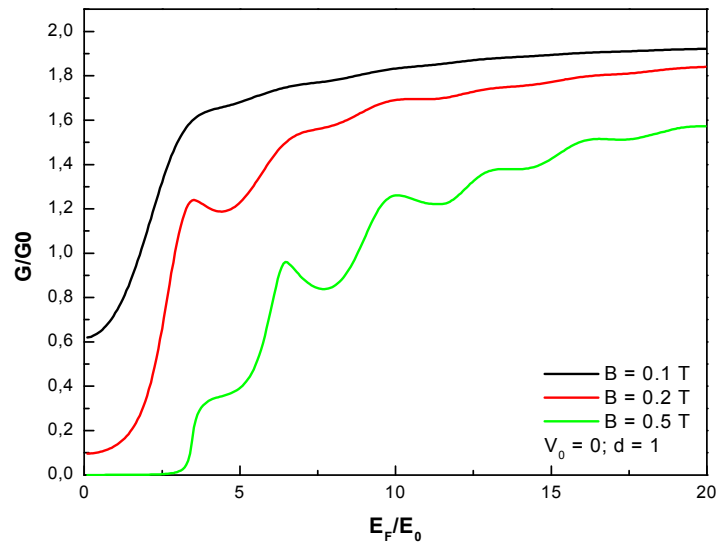


Figura 4.13: Condutância em função da Energia de Fermi para uma simples barreira magnética de Grafeno para os seguintes parâmetros:  $V_0 = 0$  e largura da barreira  $d = 1$ , para os campos magnéticos de 0.1, 0.2 e 0.5 T.

eletrostático juntamente com o campo magnético, conforme mostra a Fig.(4.14). Nesta figura, mostramos a condutância para simples barreira em função da energia de Fermi, com os seguintes parâmetros:  $B = 0.1$  (linha preta),  $0.2$  (linha vermelha) e  $0.5$  T ( linha verde), para  $V_0 = 10E_0$  e  $d = 1$ . Para baixas energias o efeito do campo é diminuir a condutância diminuindo as oscilações ressonantes. Podemos observar ainda que para região  $V_0 + A < E_F/E_0 < A$ , onde ( $A = B/B_0$ ) a condutância cai drasticamente uma vez que nessa região os vetores de onda da barreira são complexos (estados evanescentes).

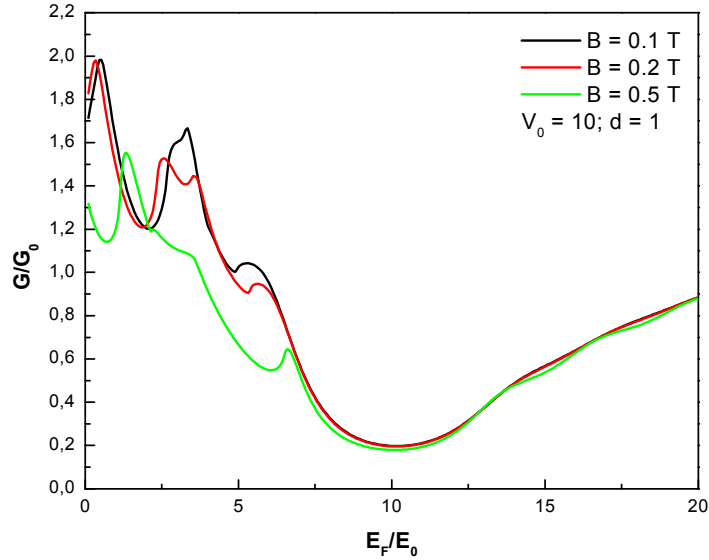


Figura 4.14: Condutância em função da Energia de Fermi para uma simples barreira magnética de Grafeno para os seguintes parâmetros:  $V_0 = 10E_0$  e largura da barreira  $d = 1$ , para os campos magnéticos de  $0.1$ ,  $0.2$  e  $0.5$  T.

Na Fig.(4.15) nós plotamos condutâncias como função da energia de Fermi para estruturas com alturas de barreiras simétricas  $B_1 = B_2$  e as larguras das barreiras e do poço correspondem a  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ . Podemos verificar a faixa de valores da condutância em cada subplot muda de  $0$  a  $1.85$  unidades de  $2e^2L_yE_F/(\pi h)$ . Para este tipo de estrutura de barreira magnética com alturas simétricas, nós podemos ver que a condutância

tem um pico de ressonância na região de energia de Fermi baixa. Como a condutância é media angular da transmissividade, observamos os mesmos efeitos característicos apresentados nas curvas de transmissão. Assim observamos de imediato uma diminuição dos picos de condutância e um aumento das oscilações em função da energia com o aumento da intensidade do campo. Para região de alta de energia a condutância atinge um regime de saturação para baixa intensidade do campo magnético.

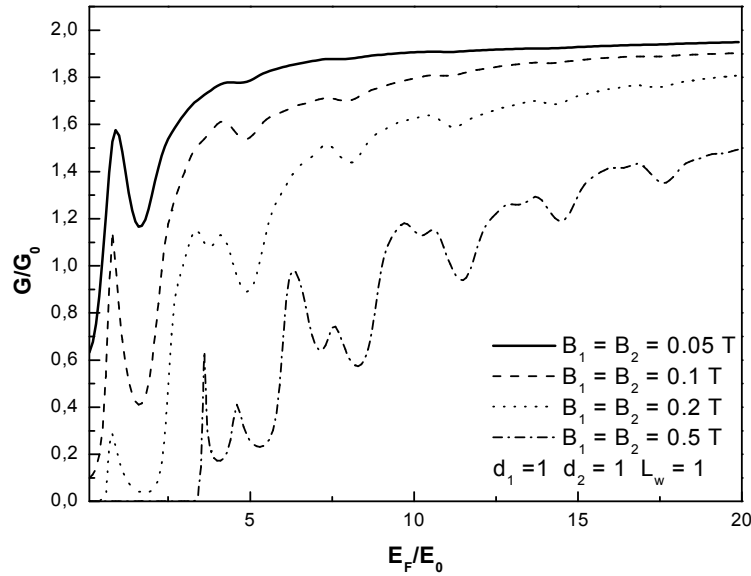


Figura 4.15: Condutância como função da energia de Fermi para uma dupla barreira magnética. O potencial para as duas barreiras corresponde a  $V_{01} = V_{01} = 0$ .

Na Fig.(4.16), temos a condutância para dupla barreira magnética novamente em função da energia de Fermi, porém para barreiras magnéticas assimétrica para os quatros casos (  $B_2 = 0,05$  T,  $B_2 = 0,1$  T,  $B_2 = 0,2$  T,  $B_2 = 0,5$  T ) a barreira da esquerda é mantida constante (  $B_1 = 0,1$  T ).

Nesta figura, é verificado que a condutância exibe uma variação drástica com o aumento da altura da barreira para alguns valores adequados de  $E_F$ . Podemos verificar

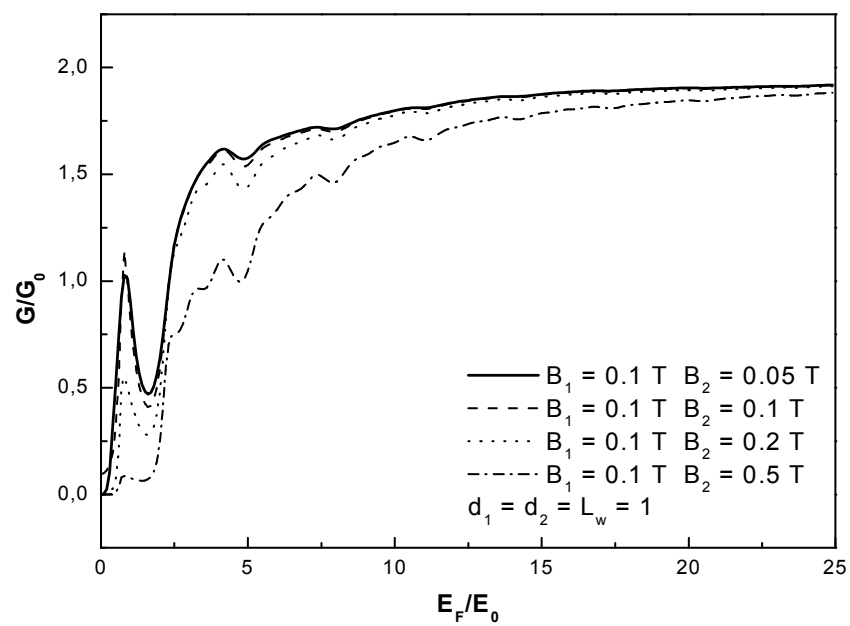


Figura 4.16: Dupla barreira magnética assimétrica mantendo fixo o valor da primeira barreira:  $B_1 = 0.1\text{T}$ .

com o seguinte exemplo: quando a altura da barreira é mudada de  $B_1 = B_2 = 0.1$  T para  $B_1 = B_2 = 0.5$  T na energia  $E_F = 5E_0$ , a condutância diminui 49%. Verifica-se também que, quando a altura da barreira esquerda é fixa, o pico de ressonância é também suprimido pelo aumento da altura da barreira direita ( conforme o gráfico, uma linearidade aparece a partir de  $5E_0$  e a condutância não apresenta mais picos).

Continuando nossa análise sobre as relações entre a condutância e os parâmetros estruturais, mostramos na Fig.(4.17), a condutância em função de  $B_2/B_1$  para uma dupla barreira magnética para os seguintes parâmetros:  $E_F = 6E_0$  (linha contínua),  $E_F = 4E_0$ (linha pontilhada) e  $E_F = 5E_0$  ( traço e ponto). A largura das barreiras e do poço é mantida  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  e a altura da barreira esquerda é mantida fixa (  $B_1 = 0.1$  T ). Observa-se que a condutância é drasticamente reduzida pelo aumento da altura da barreira direita a uma dada energia de Fermi. Este fato é similar ao caso da probabilidade de transmissão e pode ser entendido da mesma forma.

A largura da estrutura é um importante parâmetro ( como já demonstrado anteriormente) para criação de dispositivos baseados no efeito do tunelamento ressonante. Nós encontramos que a condutância depende sensivelmente da largura das barreiras. A condutância como função de  $d_2/d_1$  para dupla barreira magnética é mostrada na Fig.(4.18) com os seguintes parâmetros:  $B_1 = B_2 = 0.1$  T e para as seguintes energias de Fermi:  $E_F = 4E_0$  ( linha contínua),  $E_F = 5E_0$  ( tracejada) e  $E_F = 6E_0$  ( pontilhada).

É verificado que a condutância oscila com o aumento de  $d_2$ . Observamos que quando as barreiras são iguais ( no caso  $d_1 = d_2 = 1$ ) a intensidade da oscilação é mais acentuada. Para o maior valor da energia de  $E_F = 6E_0$ , obtemos os valores mais altos para a condutância. Além disso, a amplitude de oscilação da condutância diminui com o aumento da largura da barreira. Esses resultados sugerem uma forma adicional de controlar a condutância da estrutura em estudo.

Neste momento faremos uma análise da condutância em função da voltagem para dupla barreira magnética na Fig.( 4.20 ) com os seguintes parâmetros:  $B_1 = B_2 = 0.1$  T ( linha preta),  $B_1 = B_2 = 0.2$  T ( linha vermelha ) e  $B_1 = B_2 = 0.5$  T ( linha verde

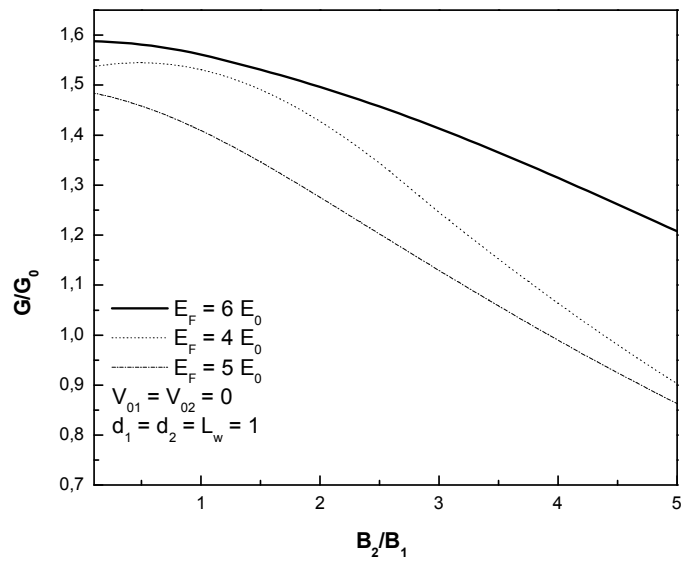


Figura 4.17: Condutância para dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno para os seguintes valores de energia:  $E_F = 6E_0$  ( linha contínua ),  $E_F = 4E_0$  ( linha pontilhada) e  $E_F = 5E_0$  ( linha traço e ponto), para  $V_{01} = V_{02} = 0$  e  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ , correspondendo às larguras da barreira esquerda, direita e largura do poço.

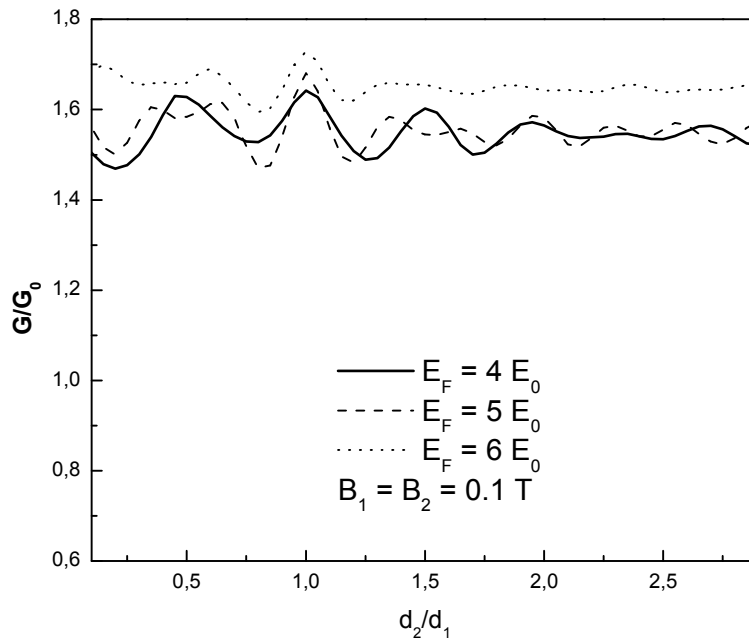


Figura 4.18: Condutância em função de  $d_2/d_1$  para uma dupla barreira de Grafeno para  $B_1 = B_2 = 0.1 \text{ T}$ , largura do poço  $L_w = 1$  e  $V_{01} = V_{02} = 0$ .



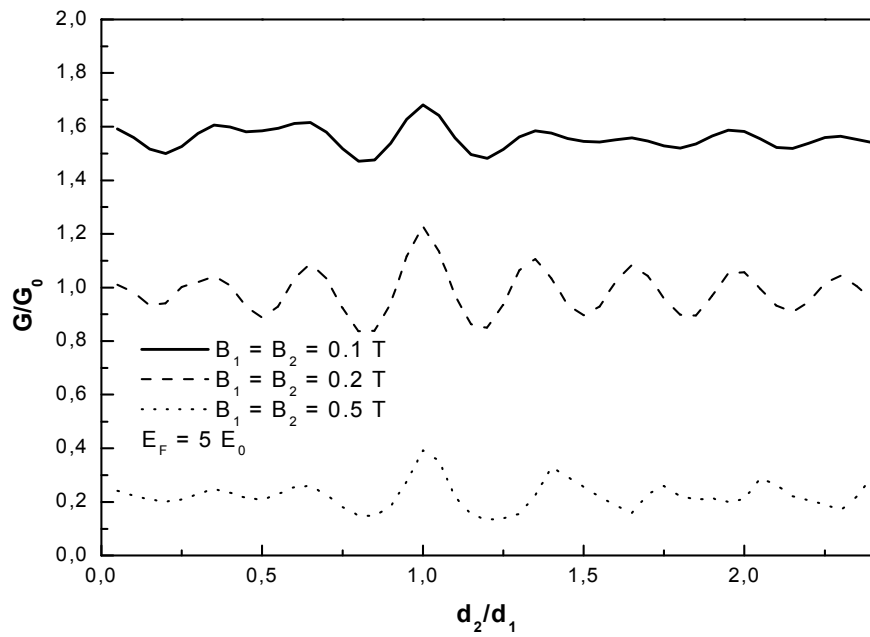


Figura 4.19: Condutância para dupla barreira, mantendo fixo a energia ( $E_F = 5E_0$ ) e aumentando as barreiras (0.1, 0.2 e 0.5 T) para largura do poço  $L_w = 1$  e  $V_{01} = V_{02} = 0$ .

), energia de Fermi  $E_F = 5E_0$  e potencial de  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$  e  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  correspondendo á largura da barreira esquerda, direita e poço. Observamos que à medida que o campo magnético vai aumentando, ocorre uma diminuição na condutância. Esse aumento da barreira magnética ( conforme verificado para campo de  $B_1 = B_2 = 0.5$  T ) resulta em elétrons mais confinados na região da barreira, diminuindo por sua vez o valor da condutância e aumentando as oscilações ressonantes.

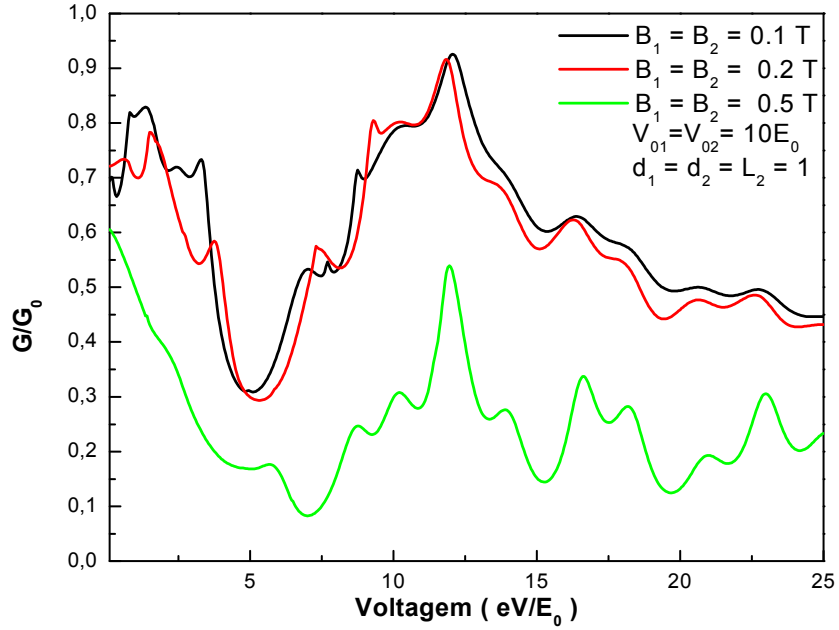


Figura 4.20: Condutância em função da tensão para dupla barreira magnética em Grafeno para:  $B_1 = B_2 = 0.1$  T ( linha preta),  $B_1 = B_2 = 0.2$  T ( linha vermelha ) e  $B_1 = B_2 = 0.5$  T ( linha verde ), com potencial de  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$  e  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  correspondendo á largura da barreira esquerda, direita e poço.

A seguir, na Figura ( 4.21 ) analisamos a condutância em função da tensão para dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros:  $B_1 = B_2 = 0.5$  T,  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$ ,  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  para as respectivas energias:  $E_F = 4E_0$  ( linha preta ),  $E_F = 5E_0$

( linha vermelha ) e  $E_F = 6E_0$  ( linha verde ). Para as três energias de Fermi, as curvas tem as mesmas características. A condutância diminui para pequenas voltagens entre 0 e  $5E_0$  e acima dessa região entre 5 e  $15E_0$  a condutância é drasticamente maior quanto maior a energia de Fermi. Na faixa central, os picos ressonantes aparecem deslocados para cada energia de Fermi, uma vez que precisamos de mais potencial (  $eV/E_0$  ) para alinhar o nível ressonante do poço, quanto menor é a energia de Fermi no emissor da estrutura.

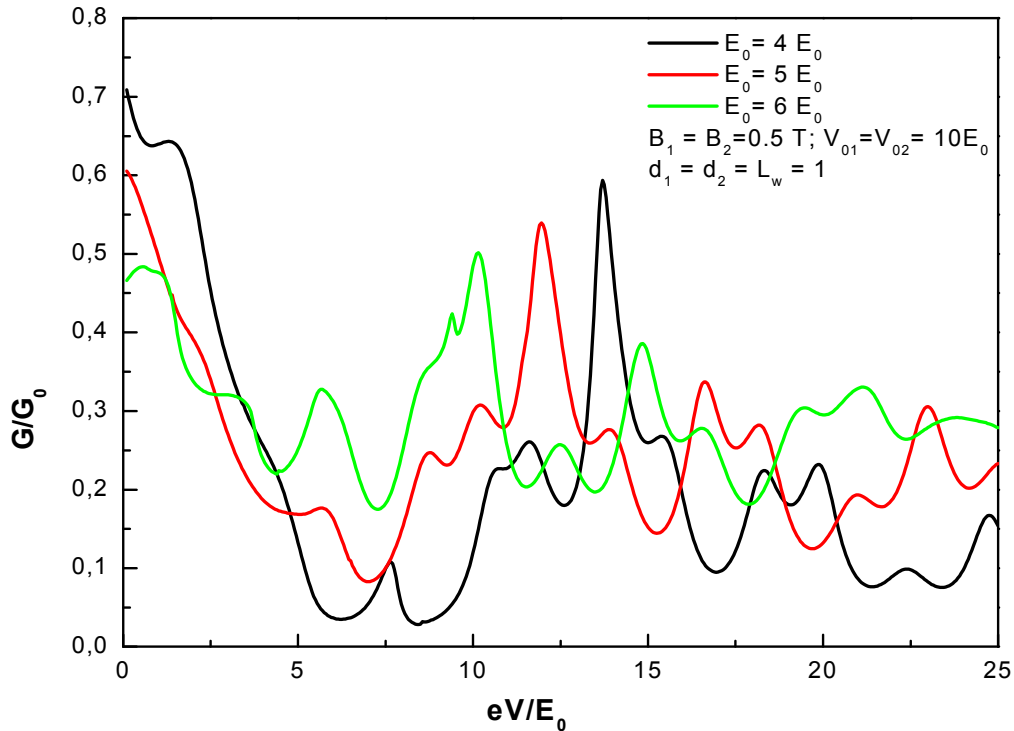


Figura 4.21: Condutância em função da voltagem para dupla barreira magnética em Grafeno para:  $E_F = 4E_0$  ( linha preta),  $E_F = 5E_0$  ( linha vermelha ) e  $E_F = 6E_0$  ( linha verde ),  $B_1 = B_2 = 0,5$  T com potencial de  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$  e  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  correspondendo á largura da barreira esquerda, direita e poço.

### 4.3 Cálculo da corrente para dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno

A análise da densidade de corrente em função da voltagem será feita agora para um sistema dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno. A Fig.(4.22) mostra a densidade de corrente para uma dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros: energia de Fermi  $E_F = 4E_0$  ( linha preta ),  $E_F = 6E_0$  ( linha vermelha ) e  $E_F = 8E_0$  ( linha verde ) e potenciais de  $V_{01} = V_{02} = 15E_0$  e campos magnético:  $B_1 = B_2 = 0.2$  T. É verificado que a amplitude de oscilação da densidade de corrente aumenta com a redução da energia de Fermi. Diferentes valores de energia de Fermi podem ser selecionados através da  $n$  dopagem. Podemos observar ainda que a densidade de corrente aumenta linearmente com a voltagem para baixos campos eletricos. Isso é esperado desde que a probabilidade de transmissão aumente através do aumento do campo externo.

A Fig.(4.23) mostra a densidade de corrente para uma dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros: energia de Fermi  $E_F = 10E_0$ , potenciais de  $V_{01} = V_{02} = 15 E_0$  e seguintes campos magnéticos:  $B_1 = B_2 = 0.1$  T ( linha preta),  $B_1 = B_2 = 0.2$  T ( linha vermelha ) e  $B_1 = B_2 = 0.5$  T ( linha verde). Para baixas voltagens a densidade de corrente varia lineamente com potencial aplicado  $eV/E_0$  ( $E_F = \hbar E_0/L_B$ ) com intensidades bem proximas. A medida que a voltagem aumenta, podemos observar mais claramente que o aumento do campo magnético diminui a intensidade da corrente. Essa diminuição da densidade de corrente pode ser vista claramente na Fig.(4.24) onde temos a densidade de corrente para dupla barreira magnética para os seguintes parâmetros:  $B_1 = B_2 = 0$  ( linha preta ),  $B_1 = B_2 = 0.5$  T ( linha vermelha ) e  $B_1 = B_2 = 1.0$  T ( linha verde), com  $d_1 = d_2 = 0.5$  e  $L_w = 1$ , correspondendo a largura das barreiras esquerda, direita e largura do poço e energia de Fermi  $E_F = 7E_0$  e potenciais  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$ . A característica mais notável é que em algumas faixas de valores do campo elétrico externo, a densidade de corrente diminui através do aumento do campo externo, o qual significa que o sistema demonstra uma resistência diferencial negativa para algumas faixas de valores

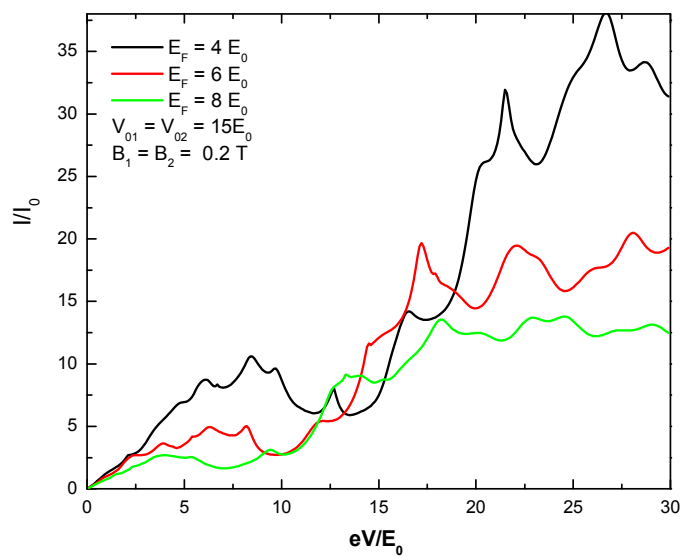


Figura 4.22: Densidade de corrente para um sistema dupla barreira magnética com os seguintes parâmetros:  $E_F = 4E_0$  (linha preta),  $E_F = 6E_0$  (linha vermelha) e  $E_F = 8E_0$  (linha verde) e potenciais de  $V_{01} = V_{02} = 15E_0$ , campos magnéticos:  $B_1 = B_2 = 0.2 \text{ T}$  e  $d_1 = d_2 = L_w = 1$  correspondendo às larguras da barreira esquerda, direita e largura do poço.

da voltagem aplicada.

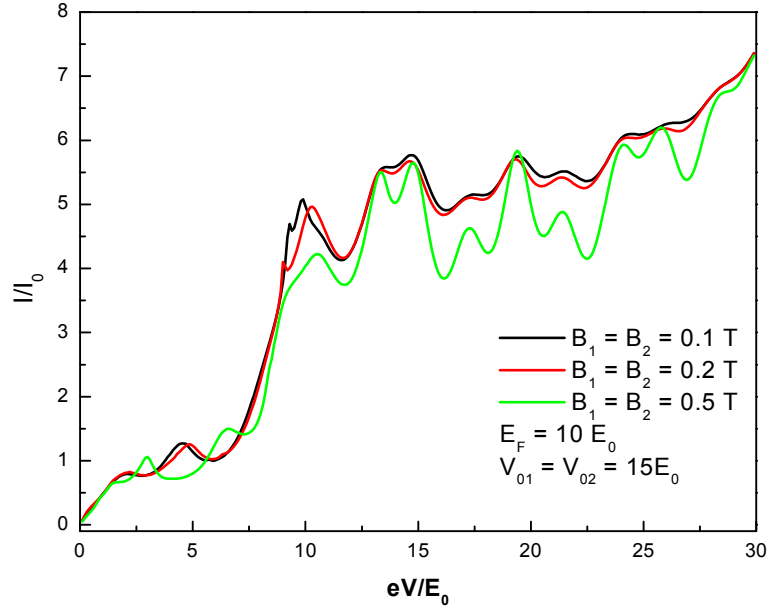


Figura 4.23: Densidade de corrente em função do potencial para um sistema dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno para os seguintes parâmetros:  $E_F = 10E_0$ , campos de 0.1, 0.2 e 0.5 T ( linha preta, vermelha e verde, respectivamente) e potencial de  $V_{01} = V_{02} = 15E_0$ . Para a largura da barreira direita, esquerda e largura do poço usamos:  $d_1 = d_2 = L_w = 1$ .

É verificado que com o aumento do campo da barreira magnética, ocorre uma diminuição da densidade de corrente. Além disso, o valor de zero de densidade de corrente pode ocorrer para nossa estrutura, o qual significa que para todos os ângulos de incidência, a probabilidade de transmissão é zero. A densidade de corrente tem drasticamente seu valor reduzido devido ao aumento do campo magnético e o campo magnético localiza melhor os portadores.

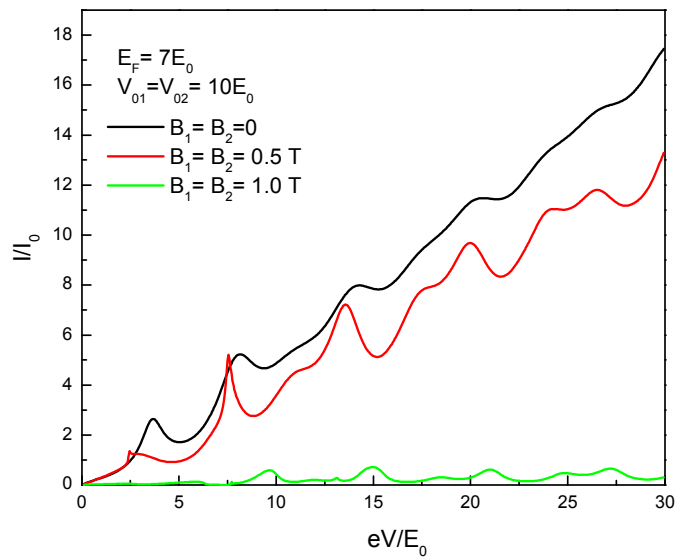


Figura 4.24: Densidade de corrente para dupla barreira para campos de 0.5, 1.0 e 0 T. A energia de Fermi corresponde a  $E_F = 7E_0$  e  $d_1 = d_2 = 0.5$  e  $L_w = 1$ , correspondendo a largura da barreira direita, largura da barreira esquerda e largura do poço, respectivamente e os potenciais das barreiras  $V_{01} = V_{02} = 10E_0$ .

# Capítulo 5

## Conclusões

Neste trabalho apresentamos uma análise para estruturas de simples e dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno usando a técnica da matriz de transferência e através deste método, obtemos a transmissão, condutância e corrente. Nossa barreira magnética corresponde a uma função delta de Dirac. Motivados pelas recentes pesquisas em estruturas de Grafeno com barreira magnéticas, estudamos o tunelamento ressonante em simples e dupla barreira de Grafeno usando o hamiltoniano de Dirac em conjunto com a técnica da matriz de transferência.

Analisamos a transmissão obedecendo a seguinte ordem: simples barreira magnética e dupla barreira magnética. Para simples barreira magnética em monocamada de Grafeno com potencial eletrostático  $V_0 = 0$ , inicialmente verificamos a importância dos campos magnéticos nos resultados da transmissão. Observamos que para incidência normal ( $\phi = 0^\circ$ ), aparecem as oscilações características do tunelamento ressonante. Conforme o campo magnético vai aumentando, o confinamento dos elétrons também vai aumentando. Este fato pode ser verificado nos picos ressonantes mais estreitos, conforme gráficos da transmissão em função da energia de Fermi e do ângulo de incidência. Ainda sobre a análise em função do ângulo de incidência, temos que os picos ressonantes são associados à ressonância de Fabry-Pérot e podemos obtê-los quando a transmissão for máxima ( $T = 1$ ) na expressão analítica para simples barreira, quando  $q_x d = n\pi$  e a energia corresponder



a energia de ressonância. Com a inclusão de um potencial eletrostático as curvas de transmissão são bastantes diferentes; para campo magnético zero e incidência normal a transmissividade é igual a um para qualquer valor de energia e altura do potencial. Esse tunelamento é conhecido como tunelamento Klein que ocorre devido a uma transição da banda de condução para a banda de valência, ou seja, na região da barreira o portador se propaga através de um estado de buraco.

Observamos também para incidência normal um gap de transmissão nas regiões fora da ressonância no intervalo  $V_0 - A < E < V_0 + A$  e que cresce com o aumento da barreira magnética. Neste intervalo, para ângulo de incidência normal, o vetor de onda  $q_x$  na barreira é complexo, não existindo por sua vez ondas propagantes, mas sim, ondas evanescentes e neste caso a transmissão decai exponencialmente. Na região fora desse intervalo, os elétrons estão no modo propagante e os picos ressonantes de Fabry-Pérot correspondem à Eq.(3.49). Outra diferença entre barreira magnética e elétrica foi verificada quando analisamos a transmissão para simples barreira em função do ângulo de incidência, com campo de 0.2 T e potencial de  $V_0 = 15E_0$ . Verificamos que o campo magnético gera uma quebra de simetria no gráfico da transmissão quando comparada com a barreira elétrica. Nestas duas situações, observa-se a existência de um ângulo crítico, a partir do qual a transmissão se anula e distingue o modo propagante do modo evanescente e podem ser obtidos a partir do momento que o vetor de onda  $q_x$  se tornar complexo, ou seja, quando  $(E - V_0)^2 = (k_y + A)^2$  que corresponde a um ângulo crítico expresso por  $\phi_c = \arcsen((|E_F - V_0| - A)/E_F)$ . Dessa forma, o ângulo crítico para um potencial constante  $V_0$  pode ser relacionado com a energia de Fermi e com o campo magnético. Em seguida analisamos a transmissão para dupla barreira magnética em monocamada de Grafeno. Foi verificado que, para este sistema, a probabilidade de transmissão oscila com a variação da energia de Fermi para incidência normal. À medida que os campos magnéticos aumentam, os picos ressonantes são suprimidos em regiões de baixa energia uma vez que os vetores de onda da barreira se tornam complexos. As formas das curvas estão intimamente relacionadas com a altura e a largura da barreira. Em outras palavras, para

incidência normal a probabilidade de transmissão pode ser modulada através da mudança dos parâmetros estruturais e a energia incidente. Também verificamos a influência da barreira elétrica em nossos cálculos e, como já foi mencionado acima, no caso de barreira elétrica, temos um transporte perfeito conhecido como tunelamento Klein, que é independente da largura e do potencial da barreira. Entretanto, a situação é completamente diferente para estruturas barreiras magnéticas. É observado que, os sistemas de dupla barreira magnética são mais eficientes, uma vez que os mesmos apresentam mais picos de ressonância. Alguns de nossos resultados para transmissão foram comparados com [39], utilizando o mesmo método, mostrando excelente concordância.

A condutância para simples e dupla barreira magnética também foi calculada usando a equação de Landauer-Buttiker. Para simples barreira magnética foi observado que a medida que o campo magnético aumenta, os elétrons ficam mais confinados na região da barreira diminuindo o valor da condutância e aumentando as oscilações ressonantes. Observamos também que para baixas energias de Fermi ocorre uma supressão do tunelamento com o aumento do campo magnético da barreira. Para condutância em dupla barreira magnética, foi verificado que a condutância exibe uma variação drástica com o aumento da altura da barreira para alguns valores adequados de  $E_F$ . Para condutância em função da energia de Fermi, verificamos que quando a altura da barreira é mudada de  $B_1 = B_2 = 0.1\text{T}$  para  $B_1 = B_2 = 0.5\text{ T}$  a  $E_F = 5E_0$ , a condutância diminui 49%. Verifica-se também que, quando a altura da barreira esquerda é fixa ( $B_1$ ), o pico de ressonância é também suprimido pelo aumento da altura da barreira direita. Ao fazermos nossa análise da condutância em função do campo magnético, verificamos que a condutância exibe uma variação drástica com o aumento da altura da barreira para alguns valores adequados de  $E_F$ .

A corrente elétrica em função de  $V$  também foi calculada para dupla barreira magnética em duas situações: para energias diferentes (fixando o campo magnético) e para campos diferentes, fixando a energia de Fermi. É verificado que a amplitude de oscilação da densidade de corrente aumenta com a redução da energia de Fermi. Diferentes valores

de energia de Fermi podem ser selecionados através da  $n$  dopagem. Entretanto a densidade de corrente aumenta monotonicamente através da diminuição do campo elétrico externo. Isso é esperado desde que a probabilidade de transmissão aumenta através do aumento do campo externo.

Como trabalho futuro, vamos aplicar esse formalismo da matriz de transferência para investigarmos as propriedades de transporte para super-redes de Grafeno e também para barreiras magnéticas com gap. Este último, além do efeito produzido pelas barreiras magnéticas em Grafeno, também levaremos em conta os efeitos do gap de energia. As propriedades de transporte para bi-camadas de Grafeno também serão investigadas e a interação spin-órbita também será levada em conta. O trabalho para bi-camada de Grafeno já está em andamento.

# Referências

- [1] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos and F. M. Peeters. *Appl.Phys.Letters* **93**, 242103 2008.
- [2] A. De Martino L. Dell' Anna, and R. Egger, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 066802 ( 2007 ).
- [3] M. Ramezani Masir, P. Vasilopoulos, A. Matulis, and F. M. Peeters, *PhysRev. B* **77**, 235443 2008.
- [4] P. Wallace *Phys.Rev.* **71**, 622 (1947).
- [5] K. S. Novoselov et al., *Science*, **306**, 666, (2004).
- [6] K. S. Novoselov et al., *Nature*, **108**, 197 (2005).
- [7] McClure, *Phys. Rev.* **108**, 612 (1957).
- [8] J. C. Slonczewski e P. R. Weiss, *Phys. Rev.* **109**, 272 (1958).
- [9] H. W. Kroto, J. R. Healt, S. C O'Brien, R. F. Curl e R. E. Smalley, *Nature* 318, 162 (1985).
- [10] S. Iijima, *Nature* **56**, 354 (1991).
- [11] R. Saito, G. Dresselhaus e M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London (1998).
- [12] R. B. Capaz e H. Chacham, *Nanotubos e a nova era do carbono*, *Ciência Hoje* **33**, 21-27 (2003).

- [13] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos e A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [14] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov e A. K. Geim, *PNAS* **102**, 10451 (2005).
- [15] A. Voskoboynikov, S.S. Liu, C.P. Lee, O. Tretyak, *J. Appl. Phys.* **87** (2000) 387.
- [16] A. K. Geim, *Science* **324**, 530 (2009).
- [17] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).
- [18] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim. The electronic properties of graphene, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109-162 (2009).
- [19] A. K. Geim e K. S. Novoselov, *Nature Materials* **06**, 183-191 (2007).
- [20] M. Katsnelson, and K. Novoselov, Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics. *Solid State Comm.* **143**, 3(2007).
- [21] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morosov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva e A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [22] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov e A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
- [23] Y. -M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H. -Y. Chiu, A. Grill e Ph. Avouris, *Science* **327**, 562 (2010).
- [24] Tung V. C., Allen M. J., Yang Y. et al., *Nature Nanotechnology* **4**, 25 (2009).
- [25] O. V. Sinitsyna e I. V. Yaminsk, *Russ. Chem. Rev.* **75**, 23 (2006).
- [26] C. Berger, Z. M. Song. T. B. Li, X. B. li, A. Y. Ogbazghi, R. Feng, Z. T. Dai, A. N. Marchenkov, E. H. Conrad, P. N. First e W. A. de Heer, *J. Phys. Chem. B* **108**, 19912 (2004).

- [27] Reina A., Jia X. T., Ho J. et al., Nano Letters **9**, 30 (2009).
- [28] P.R.Wallace, The Band Theory of Graphite. Phys.Rev.**71**, 662-634 ( 1947).
- [29] J.W.McClure, Diamagnetism of graphite. Phys.Rev.**104**, 666-671 (1956).
- [30] J.C.Slonczewski and P.R.Weiss, Band Structure of graphite. Phys.Rev.**109**, 272-279(1958).
- [31] A.K.Geim and K.S.Novoselov, The rise of graphene, Nature Materials **6**, 183-191 (2007).
- [32] A.Voskoboynikov, S.S.Liu, C.P.Lee, O.Tretyak. J.Appl.Phys.**87** (2000) 387.
- [33] A.K.Geim, Science **324**, 530 (2009).
- [34] K.S.Novoselov, A.K.Geim, S.V.Morozov, D.Jiang, Y.Zhang, S.V.Dubonos, I.V.Grigorieva, A.A.Firsov.Electric Field Effect in Atomically Thi Carbon Films, Science, **306**, 666-669 ( 2004).
- [35] K.S.Novoselov, A.K.Geim, S.V.Morozov, D.Jiang, M.I.Katsnelson, I.V.Grigorieva, S.V.Dubonos and A.A.Firsov. Two-Dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. Nature, **438**, 197-200(2005).
- [36] F.Schedin, A.K.Geim, S.V.Morozov, E.W.Hill, P.Blake, M.I.Katsnelson and K.S.Novoselov. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene. Nature Materials, **6**, 652-655 (2007).
- [37] M.Ramezani Masir, P.Vasilopoulos and F.M.Peeters. Applier Physics Letters **93**, 242103 ( 2008).
- [38] Yu-Xian Li. J.Phys.Condens.Matter 22 (2010) 015302(5pp).
- [39] Wang Su-Xin, Li Zhi-Wen, Liu Jian-Jun and Li-Yu-Xian. Chin. Phys.B vol.20, N<sup>o</sup>.7 (2011) 077305.

- [40] N.Agrawal (Garg), G.Ghosh and M.Sharma. Electron optics with Dirac fermions: electron transport in monolayer and bilayer graphene through magnetic barrier and their superlattices. Feb. 2013.
- [41] S.Khizroev and D.Litvnov J.App.Phys.**95**, 4521 ( 2004); M.Lu, L.Zhang, Y.Jin and X.Yan, Eur.Phys.J.B. **27**, 565-70 (2002).
- [42] A.Masseboeuf et al. Nano lett., **9** ( 8 ), pp.2803-2806 ( 2009).
- [43] M.Y. Han; B. Ozyilmaz; Y. Zhang and P. Kim. Energy band gap engineering of graphene nanoribbons. Phys. Rev. Lett., **98**:206805, 2007.
- [44] X. Li; X. Wang; L. Zhang; S. Lee and H. Dai. Chemically derived, ultrasmooth graphene nanoribbon semiconductors. Science, 319:1229, 2008.
- [45] T.Luo Q.W.Shi H. Zheng, Z.F.Wang and J.Chen. Analytical study of electronic structure in armchair graphene nanoribbons. Phys. Rev. B, **75**:165414, 2007.
- [46] A.Nogaret, J.Phys.Cond.Matt. **22**, 253201 (2010).
- [47] Tahir M and Sabeeh K 2008 Phys.Rev.B **77** 113409.
- [48] Zhai F and Chang K 2008 Phys.Rev.B **77** 113409.
- [49] J.Milton Pereira, Jr, P.Vasilopoulos, and F.M.Peeters, Appl.Phys.Lett.**90**, 132122(2007).
- [50] J.Velasco, Jr., G.Liu, W.Bao and C.N.Lau, New J.Phys.**11**, 095008 ( 2009).
- [51] Buttiker M.Imry Y, Landauer R and Pinhas S 1985. Phys.Rev.B **31** 6207; Buttiker M 1986 Phys.Rev.Lett **57** 1761; Masir M R, Vasiloupoulos P and Peeters F M 2009. New J.Phys. **11** 095009.
- [52] de Martion A, Dell'Anna L and Egger. R 2007 Phys.Rev.Lett **98** 066802.

- [53] Pan H Z, Xu M, Chen L, Sun Y Y and Wang Y L, 2010. Acta Phys. Sin **59** 6443(em chinês).
- [54] Matulis A and Peeters F M 2007 Phys.Rev.**B** 75 125429.
- [55] Park S and Sim H S 2008, Phys.Rev.B **77**, 075433.
- [56] Oroszlany L, Rakyta P, Kormanyos A, Lambert C J and Cserti J 2008. Phys.Rev.**B** **77** 081403.
- [57] Zhai F and Chang K 2008 Phys.Rev.B **77** 113409.
- [58] Neetu Agrawal, Sankalpa Ghos and Manish Sharma. Electron optics wiht dirac fermions: electron transport in monolayer and bilayer graphene through magnetic barrier and their superlattices.
- [59] Neto, A.H; Guinea, F; Peres,N.M.R; Novoselov,K.S; Gein, A.K. The eletronic properties of graphene. Reviews of Modern Physics. Vol.81, n°1, pp.109-162, 2009.
- [60] R.Saito, G.Dresselhaus e M.S.Dresselhaus. Physical Properties of carbon nanotubes. Imperial College Press, London ( 1998).
- [61] Katsnelson M I, Novoselov K S and Geim A K 2006, Nature Phys.**2** 620.
- [62] Silvestrov P G and Efetov K B 2007, Phys.Rev. Lett.98 016802.
- [63] Cheainov V V and Falko V I 2006 Phys.Rev.B 041403.
- [64] Berger C, Song Z M, Li X B, et al., 2006 Science **312** 1191.
- [65] Jin Z F, Tong G P and Jiang Y J 2009 Acta Phys.Sin.**58** 8537.
- [66] Bai C X and Zhang X D 2007 Phys.Rev B **76** 075430.
- [67] Klein O 1929 Z.Phys **53** 157.
- [68] Li S S, Chang K and Xia J B 2006 Phys.Rev.B 68 245306.



- [69] Li S S, Abliz A, Yang F H, Niu Z C, Feng S L and Xia J B 2002. *J.Appl.Phys.***92** 6662.
- [70] Li S S, Abliz A, Yang F H, Niu Z C, Feng S L and Xia J B 2003, *J.Appl.Phys.***94** 5402.
- [71] Krekora, Su, Q & Grobe, R. Klein Paradox in spatial and temporal resolution. *Phys.Rev.Lett* **92**, 040406, 2004.
- [72] X.Wang, Y.Ouyang, X.Li, H.Wang, J.Guo and H.Dai, Room-Temperature All-Semiconducting Sub-10-nm graphene nanoribbon field-effect transistors. *Phys.Rev.Lett* **100**, p 2068-2071, 2008.
- [73] Page, D.N.Hawking. Radiation and black hole thermodynamics. *New J.Phys* **7**, p203-218, 2005.
- [74] Tworzydło, J., Trauzettel, B., Titov, M., Rycerz, A., Beenakker, C.W.J. Quantum-limited shot noise in graphene. *cond-mat/0603315*.
- [75] S.Reich, C.Thomsen, J.Maultzsch, Carbon Nanotubes: basic concepts and Physical Properties ( Willey-VCH - Verlag GmbH & co.KGAA, Weinheim 2004).
- [76] P.R.Wallace. The Band Theory of Graphite. *Phys.Rev.*71,662-634 (1947).
- [77] Zhai F and Chang K 2008 *Phys.Rev.B* **77** 113409.
- [78] Masir M R, Vasilopoulos P and Peeters F M 2009 *New J. Phys*11095009.
- [79] Buttiker M, Imry Y, Landauer R and Pinhas S 1985. *Phys.Rev.B* **31** 6207. Buttiker M 1986. *Phys.Rev.Lett* **57** 1761.
- [80] Feng Zhai and Xiaofang Zhao. *Phys.Rev B* 82, 115442 ( 2010).
- [81] Wallace P R 1947. *Phys.Rev.*71 622.
- [82] R.L.Liboff, Introduction Quantum Mechanics, Cornell University, edition 4 (2003).

- [83] .U.Rössler, F. Malcher, G. Lommer: *"Spin splitting in structured semiconductors"* in *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II* ed. by G. Landwehr (Springer, Berlin, Heidelberg, 1989), vol, **87** of Solid State Sciences, p.376.
- [84] R. Wollrab *et al.*, Semicond. Sci. Technol. **4** , 491 (1989) ...C. Y. P. Chao and S. L.Chuang, Phys. Rev. B **43**, 7027 (1990).
- [85] J. Luo *et al.*, Phys. Rev. B **41**, 7685 (1990).
- [86] S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch, Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, Weinheim 2004).
- [87] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, The electronic properties of graphene Rev. Mod. Phys., 81, 109 (2009)
- [88] The electronic properties of graphene Rev. Mod. Phys., 81, 109 (2009).
- [89] P. R. Wallace, The Band Theory of Graphite, Phys. Rev. 71, 622-634 (1947).