

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

TUNELAMENTO RESSONANTE DE FÉRMIONS MASSIVOS DE  
DIRAC EM SISTEMAS DE SIMPLES E DUPLA BARREIRAS EM  
MONOCAMADA DE GRAFENO

JOSÉ DILSON DA SILVA TEIXEIRA

Tese submetida ao Programa  
de Pós-Graduação em Física da  
Universidade Federal de São  
Carlos como parte de requisitos  
para obtenção de título de  
Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. ANTÔNIO CARLOS RODRIGUES BITTENCOURT

Manaus-Amazonas  
2015

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da  
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

T266tr

Teixeira, José Dilson da Silva.

Tunelamento ressonante de férmions massivos de Dirac em sistemas de simples e dupla barreiras em monocamada de grafeno / José Dilson da Silva Teixeira. -- São Carlos : UFSCar, 2015.

115 p.

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

1. Física. 2. Tunelamento. 3. Grafeno. I. Título.

CDD: 530 (20<sup>a</sup>)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Programa de Pós-Graduação em Física

---

Folha de Aprovação

---

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Tese de Doutorado do candidato José Dilson da Silva Teixeira, realizada em 29/04/2015:

---

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. Oleg Grigorievich Balev  
UFAM

*Ao meu bem maior, minha família.*

Ao Deus da vida e misericórdia infinita  
Em memória da minha irmã Maria Lúcia Teixeira

## Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pelo milagre da vida, que em sua infinita compaixão e misericórdia nunca deixa de socorrer àqueles que o buscam.

Agradeço aos meus amados pais, que me foram sempre exemplo de lealdade e dignidade, trabalho e perseverança. Muito obrigado !

Aos meus irmãos, que estiveram sempre comigo nessa caminhada prestando todo apoio.

Agradeço as minhas tias Maria do Carmo e Angelina Teixeira que muito contribuíram.

Agradeço ao meu orientador Bit, que me recebeu e abriu as portas para esse trabalho, pela amizade e com seu modo de ser me ensinou a ser um pesquisador.

Agradeço aos professores do PPGFIS, em especial à professora Marta e Wilson mais que professores- amigos e, aos demais professores que contribuíram para minha formação acadêmica.

Agradeço aos colegas Edvam, Márcio, Wendel, Emanuel e Denise.

Finalmente, agradeço à FAPEAM, pelo apoio financeiro.

# Sumário

<b>Resumo</b>	<b>i</b>
<b>Abstract</b>	<b>ii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Origem do Grafeno . . . . .	1
1.2 Obtenção do Grafeno . . . . .	9
1.3 Motivação . . . . .	12
<b>2 Modelo Teórico</b>	<b>14</b>
2.1 Modelo Tight-binding e a equação de Dirac . . . . .	14
2.2 Modelo contínuo . . . . .	21
2.3 Efeitos de gap de energia . . . . .	23
2.4 Propriedades de Transporte no Grafeno . . . . .	27
2.4.1 O Tunelamento Klein . . . . .	27
2.4.2 Ressonância de Fabry-Pérot . . . . .	32
2.4.3 Estados Confinados em Grafeno . . . . .	38
<b>3 Transmissividade, Condutância e Densidade de Corrente em Sistemas de Simples e Dupla Barreira de Grafeno.</b>	<b>43</b>
3.1 Tunelamento ressonante . . . . .	43

3.2	Solução do Hamiltoniano de Dirac . . . . .	45
3.2.1	Natureza das soluções de $q_x$ . . . . .	46
3.3	Método da Matriz de Transferência . . . . .	48
3.4	Cálculo do Coeficiente de Transmissão . . . . .	52
3.4.1	Aplicação no Sistema de Barreira Simples . . . . .	53
3.4.2	Aplicação no Sistema de Barreira Dupla . . . . .	59
<b>4</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>63</b>
4.1	Tunelamento ressonante em barreira simples de Grafeno . . . . .	63
4.2	Tunelamento ressonante em dupla barreira de Grafeno. . . . .	74
4.3	Condutância em barreira dupla de Grafeno . . . . .	90
4.4	Densidade de corrente em barreira dupla de Grafeno . . . . .	97
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>105</b>

# Lista de Figuras

1.1	Estruturas derivadas do Grafeno, para formar fulerenos (abaixo à esquerda), nanotubos (centro) e a grafite (à direita) (Figura obtida da referência 2) . . . . .	3
1.2	(a) Configuração eletrônica da camada de valência de um átomo de carbono no estado fundamental; (b) Configuração do carbono no primeiro estado excitado (ou ativado). . . . .	4
1.3	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) $sp^3$ . . . . .	5
1.4	(a) Representação do orbital $sp^2$ (lobo largo apontando uma direção e lobo menor apontando em direção oposta); (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) Localização dos orbitais $sp^2$ no plano e do orbital $2p$ vazio e perpendicular ao plano. . . . .	6
1.5	(a) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo $sp^2$ de dois átomos de carbono formando uma ligação sigma $\sigma$ ; (b) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo $2p$ de dois átomos de carbono perpendiculares ao plano formando uma ligação pi $\pi$ . . . . .	7
1.6	Ilustração esquemática da fabricação de uma camada de Grafeno [29]. . .	11
1.7	Técnica de deposição de vapor químico para a obtenção de folhas de Grafeno de alta qualidade [28]. . . . .	12

2.1	Orbitais de valência do carbono. Os três orbitais $\sigma$ no grafeno e o orbital $\pi$ perpendicular a folha.[33]. . . . .	15
2.2	(a) estrutura do Grafeno no espaço real. O losango representa a célula unitária, delimitadas pelos vetores de rede $\vec{a}_1$ e $\vec{a}_2$ . Essa célula envolve dois átomos $A$ e $B$ , chamados de sub-redes. (b) Estrutura do Grafeno no espaço recíproco mostrando os vetores unitários $\vec{b}_1$ e $\vec{b}_2$ e a zona de Brillouin por eles delimitado. . . . .	16
2.3	Relação de dispersão de energia do grafeno. Em (a) gráfico da superfície descrita pela Eq.2.11. Zoom em destaque da banda de energia de um dos pontos de Dirac. . . . .	19
2.4	Mapa de contorno da mesma equação onde a primeira zona de Brillouin está representada na linha branca. . . . .	20
2.5	densidade de estado por unidade de célula em função da energia (em unidades de $(t)$ , (a) ( $t' = 0.2t$ ) e (b) ( $t' = 0$ ). [32]. . . . .	21
2.6	Observação da abertura de gap de energia no ponto $k$ , a) estrutura do grafeno no espaço real e no espaço do momento, b) ARPES mapa de intensidade tomada ao longo da linha em preto a partir (a) [24]. . . . .	26
2.7	Diagrama esquemático do espectro das quase-partículas de Dirac (a) monocamada de Grafeno, (b) barreira de potencial de altura $U_0$ e largura $D$ . O nível de Fermi (linha pontilhada tracejada) está na banda de condução fora da barreira e dentro dela. As áreas de cor cheia indicam os estados ocupados [36]. . . . .	30
2.8	Esquema exibindo as múltiplas reflexões da onda transmitida dentro da barreira de potencial. . . . .	33
2.9	Relação de dispersão $E(k_y)$ na presença de barreira de potencial. A curvas pontilhadas mostram a relação de dispersão analítica Eq.(2.33) para $D = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\Delta = 0.0 \text{ meV}$ (linha vermelha) e $\Delta = 40 \text{ meV}$ (linha azul). . . . .	35

2.10	Gráfico de contorno da transmissividade versus energia incidente $E$ e vetor de onda $k_y$ para o sistema de barreira simples. As curvas em linha tracejada preta mostram a relação de dispersão analítica Eq.(2.33) com $D = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ e $\Delta = 0 \text{ meV}$ . . . . .	36
2.11	Junção $n - p - n$ em grafeno(a) Visão da seção transversal do dispositivo. (b) Perfil do potencial de elétrons no Grafeno produzido pelo dispositivo mostrado em (a) A combinação de uma tensão positiva back gate e uma tensão negativa top gate produz regiões [64]. . . . .	37
2.12	Representação esquemática de um poço simples simétrico de largura $L_0$ e profundidade $U_0$ . . . . .	41
2.13	Espectro dos estados confinados em um poço simétrico de potencial de largura $L_0 = 200 \text{ nm}$ e profundidade $U_0 = 50 \text{ meV}$ . . . . .	42
3.1	Solução da Eq.3.9 Relação de dispersão para o sistema de barreira simples com $D = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ e $\Delta = 40 \text{ meV}$ . com as energias críticas $E_{C1}$ e $E_{C2}$ . . . . .	47
3.2	Representação esquemática do sistema de dupla barreira, mostrando as posições de interface, $z_j$ entre as regiões $j - 1$ e $j$ para a construção da matriz de transferência. Os símbolos $a_{vj}$ , $r_{vj}$ e $t_{vj}$ representam os coeficientes das combinações lineares das funções no bulk, na região de incidência $j = 0$ ( $a_{vj}$ , $r_{vj}$ ) e de transmissão $j = 4$ ( $t_{vj}$ ) para uma partícula com energia $E$ . . . . .	48
3.3	Representação esquemática do sistema de barreira de potencial $2D$ em camada única de grafeno com gap de energia. . . . .	53
3.4	Representação esquemática do sistema de barreira simples de potencial, mostrando os coeficientes da combinação linear de ondas planas, em cada região. . . . .	54

3.5	Representação da parte real e imaginária da solução de $q_x$ em função do ângulo de incidência $\phi$ , com energia incidente $E = 80 \text{ meV}$ . A parte curva pontilhada representa as partes imaginárias e a curva cheia representa a parte real. O ângulo crítico ocorre para $\phi_c = 26,5^\circ$ . . . . .	57
3.6	Representação dos modos propagante e evanescente da solução de $q_x$ em função da energia incidente, com $\phi = 0^\circ$ . A curva preta pontilhada representa o modo propagante e curva em vermelho representa o modo evanescente. . . . .	58
3.7	Representação esquemática do sistema de dupla barreiras de potencial de altura $V_0$ , exibindo as regiões de interface de larguras $L_{b1}$ , $L_{b2}$ e $L_w$ . . . . .	59
3.8	Representação esquemática do sistema de dupla barreira, formado pela junção de duas barreiras simples, cujos coeficientes são mostrados em cada região. . . . .	60
4.1	Probabilidade de transmissão versus energia incidente para um sistema de simples barreira com $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ , $D = 100 \text{ nm}$ , $\Delta = 0, 20$ e $40 \text{ meV}$ , respectivamente. . . . .	64
4.2	Gráficos de contorno da transmissividade versus energia incidente e ângulo de incidência através de barreira de potencial simples com $V_0 = 120 \text{ meV}$ e $D = 100 \text{ nm}$ , em (a) $\Delta = 0.0 \text{ meV}$ , (b) $\Delta = 20 \text{ meV}$ e (c) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . . . . .	65
4.3	Barreira de potencial simples de altura $V_0$ e largura $D$ em que elétrons sem massa adquirem massa finita na região II do sistema. . . . .	66
4.4	Transmissividade em função da energia incidente para o sistema de simples barreira com $\phi = 0^\circ$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , em (a) $\Delta = 20 \text{ meV}$ e (b) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . A linha verde em (a) e (b) com $\Delta = 0 \text{ meV}$ . . . . .	68
4.5	Probabilidade de transmissão $T$ de elétrons através do sistema da Fig.(4.3) em função do ângulo de incidência $\phi$ , com $D = 100 \text{ nm}$ e $E = 65 \text{ meV}$ . . . . .	69
4.6	Barreira de potencial de altura $V_0$ e largura $D$ em que elétrons perdem massa. . . . .	70

4.7	Transmissividade em função da energia incidente para o sistema de simples barreira com $\phi = 0^\circ$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , em (a) $\Delta = 20 \text{ meV}$ e (b) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . A linha verde em (a) e (b) com $\Delta = 0 \text{ meV}$ . . . . .	72
4.8	Probabilidade de transmissão $T$ de elétrons através do sistema de barreira simples como mostrado no esquema da Fig.(4.6) em função do ângulo de incidência $\phi$ com $D = 100 \text{ nm}$ , $E = 65 \text{ meV}$ . . . . .	73
4.9	Transmissividade em função da energia incidente, $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ em (a) $L_w = 30 \text{ nm}$ e (b) $L_w = 60 \text{ nm}$ . . . . .	76
4.10	Transmissividade em função da energia incidente, $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ em (c) $L_w = 80 \text{ nm}$ , (d) $L_w = 100 \text{ nm}$ . . . . .	76
4.11	Solução de autovalor de energia da Eq.2.42 no poço de potencial de largura $L_w = 100 \text{ nm}$ , $U_0 = 120 \text{ meV}$ e $\Delta = 20 \text{ meV}$ . . . . .	77
4.12	Gráfico de contorno da transmissividade através de dupla barreira de potencial versus energia incidente e ângulo de incidência, com $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a) $\Delta = 0 \text{ meV}$ , (b) $\Delta = 20 \text{ meV}$ e (c) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . . . . .	79
4.13	Distribuição angular da transmissividade para o sistema de dupla barreira de potencial Fig.(3.7) com $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ . (a) $\Delta = 0, 20$ e $40 \text{ meV}$ e $E = 65 \text{ meV}$ . (b) com $\Delta = 0 \text{ meV}$ e energias incidente $E_1 = 15 \text{ meV}$ , $E_2 = 25 \text{ meV}$ , $E_3 = 65 \text{ meV}$ e $E_4 = 150 \text{ meV}$ . . . . .	80
4.14	Gráfico do contorno da transmissividade versus energia incidente $E$ e vetor de onda $k_y$ para o sistema de dupla barreira de potencial para diferentes valores de gap de energia, em (a) $\Delta = 0 \text{ meV}$ , (b) $\Delta = 20 \text{ meV}$ e (c) $\Delta = 40 \text{ meV}$ com $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , e $V_0 = 120 \text{ meV}$ . . .	81
4.15	Representação esquemática do sistema de dupla barreira de potencial $V_0$ , onde Férmions de Dirac sem massa adquirem massa finita. . . . .	82

4.16	Transmissividade em função da energia incidente, $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ $\Delta = 20 \text{ meV}$ em (a) $L_w = 30$ e $60 \text{ nm}$ , (b) $L_w = 80$ e $100 \text{ nm}$ . . . . .	84
4.17	Transmissividade em função da Energia incidente, $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ e $\Delta = 40 \text{ meV}$ em (a) $L_w = 30$ e $60 \text{ nm}$ , (b) $L_w = 80$ e $100 \text{ nm}$ . . . . .	84
4.18	Gráfico de contorno da transmissividade através de dupla barreira de potencial versus energia incidente e ângulo de incidência, com $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a) $\Delta = 20 \text{ meV}$ e (b) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . .	85
4.19	Representação esquemática do sistema de dupla barreira de potenciail $V_0$ . com perda de Férmiosn de Dirac. . . . .	86
4.20	Transmissividade em função da Energia incidente, $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ e $\Delta = 0 \text{ meV}$ (linha verde), em (a) $\Delta = 20 \text{ meV}$ , (b) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . . . . .	87
4.21	Transmissividade em função da Energia incidente, $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ e $\Delta = 0 \text{ meV}$ (linha verde), em (c) $\Delta = 20 \text{ meV}$ , (d) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . . . . .	88
4.22	Gráfico de contorno do coeficiente de transmissão através de dupla barreira de potencial versus energia incidente e ângulo de incidência, com $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a) $\Delta = 20 \text{ meV}$ e (b) $\Delta = 40 \text{ meV}$ . . . . .	89
4.23	Condutância versus energia incidente onde $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a) $\Delta = 0 \text{ meV}$ (linha preta), $\Delta = 20 \text{ meV}$ (linha vermelha) e $\Delta = 40 \text{ meV}$ (linha pontilhada azul), relativo ao sistema mostrado na Fig.(3.7). . . . .	91

4.24	Condutância versus energia incidente, com $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , e $\Delta = 0 \text{ meV}$ (linha preta), $\Delta = 20 \text{ meV}$ (linha vermelha) e $\Delta = 40 \text{ meV}$ (linha pontilhada azul), relativo ao esquema proposto na Fig.(4.15). . . . .	92
4.25	Condutância versus energia incidente, com $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\Delta = 0 \text{ meV}$ (linha preta), $\Delta = 20 \text{ meV}$ (linha vermelha) e $\Delta = 40 \text{ meV}$ (linha pontilhada azul), relativo ao esquema proposto na Fig.(4.19). . . . .	94
4.26	Condutância versus potencial da dupla barreira $V_0$ , com $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $\Delta = 0 \text{ meV}$ relativo ao esquema proposto na Fig.(3.7). . . . .	95
4.27	Condutância versus potencial das barreiras $V_0$ , com $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ , $L_w = 100 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\phi = 0^\circ$ $\Delta = 0, 20$ e $40 \text{ meV}$ . . . . .	96
4.28	Perfil do potencial de dupla barreira no Grafeno com efeito da aplicação de campo elétrico. . . . .	98
4.29	Densidade de corrente versus voltagem aplicada $V_b(V)$ para sistema de dupla barreira em monocamada de grafeno. $L_{b_1} = L_{b_2} = 30 \text{ nm}$ , $L_w = 80 \text{ nm}$ $V_0 = 120 \text{ meV}$ , $\Delta = 0 \text{ meV}$ e energia incidente $E = 15, 25$ e $65 \text{ meV}$ . . . . .	99
4.30	Densidade de corrente versus voltagem aplicada $V_b(V)$ para o sistema de dupla barreira $L_{b_1} = L_{b_2} = 30 \text{ nm}$ , $L_w = 80 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ e energia incidente fixa $E = 65 \text{ meV}$ , $\Delta = 0, 20$ , e $40 \text{ meV}$ . . . . .	100
4.31	Densidade de corrente versus voltagem aplicada $V_b(V)$ para o sistema de dupla barreira $L_{b_1} = L_{b_2} = 30 \text{ nm}$ , $L_w = 80 \text{ nm}$ $V_0 = 120 \text{ meV}$ , e energia incidente fixa $E = 65 \text{ meV}$ , $\Delta = 0, 20$ , e $40 \text{ meV}$ . . . . .	101
4.32	Densidade de corrente versus voltagem aplicada $V_b(V)$ para o sistema de dupla barreira $L_{b_1} = L_{b_2} = 30 \text{ nm}$ , $L_w = 80 \text{ nm}$ , $V_0 = 120 \text{ meV}$ e energia incidente fixa $E = 65 \text{ meV}$ , $\Delta = 0, 20$ , e $40 \text{ meV}$ . . . . .	102

4.33 Gráfico de contorno da Densidade de corrente versus voltagem  $V_b(V)$  e energia incidente  $E$  para o sistema de dupla barreira com  $L_{b1} = L_{b2} = 30$  nm,  $L_w = 80$  nm  $V_0 = 120$  meV e  $\Delta = 20$  meV. Em (a) consideramos o gap de energia em todas as regiões da estrutura, (b) gap de energia nas regiões II e IV e (c) gap de energia apenas nas regiões I, III e V. . . . . 104

# Lista de Tabelas

III.1 Natureza das soluções de $qx$ . . . . .	46
---	----

# Resumo

Atualmente, vários esforços tem sido empreendido por grupos de pesquisa em torno das propriedades físicas do Grafeno devido as possíveis aplicações tecnológicas de suas peculiares propriedades estruturais e eletrônicas. O Grafeno apresenta-se como um forte candidato a substituir os semicondutores inorgânicos. Inicialmente neste trabalho, foi feita uma descrição da estrutura cristalina do Grafeno, afim de elucidar sua natureza. As propriedades eletrônicas deste material são atraentes devido a várias analogias entre os fenômenos de transporte e outros fenômenos estudados pela eletrodinâmica quântica como, por exemplo, o tunelamento Klein. Sob o ponto de vista da aproximação tight-binding, obtivemos a relação de dispersão e a estrutura das bandas de energia do Grafeno, esboçando assim seu espectro eletrônico. Apontamos ainda alguns resultados curiosos que demonstram a natureza atípica deste material.

O objetivo principal deste trabalho foi analisar o comportamento dos portadores de carga por meio da técnica da matriz de transferência para obtenção da solução numérica da transmissividade, condutância e densidade de corrente de tunelamento no Grafeno. A transmissividade foi analisada em função da energia incidente e do ângulo de incidência para sistemas com barreiras de potencial simples e dupla, enfatizando o efeito da variação da gap de energia. O sistema de barreira de potencial dupla apresenta grande diferença em relação ao sistema de barreira simples nas curvas de transmissividade por apresentarem níveis de energia ressonantes adicionais em razão de estados quase-ligados na região do poço. Foram verificados ainda oscilações quânticas devido as interferências Fabry-Pérot e o tunelamento de Klein - uma propriedade única no Grafeno. A inserção de gap na energia causou o surgimento de gap na curva da transmissividade, bem como picos ressonantes que ficam mais agudos com o acréscimo desse gap.

A partir dos resultados da transmissividade, ampliamos nossa compreensão das propriedades eletrônicas em relação a condutância e a densidade de corrente no Grafeno. Tais propriedades mostram-se bastante favoráveis a fabricação de dispositivos nanoeletrônicos de alto desempenho.

# Abstract

Nowadays, several efforts have been made by research groups around the physical properties of the graphene in view of the possible technological applications of their unique structural and electronic properties. The graphene comes as a fort candidate to substitute the inorganic semiconductors.

Initially in this work, we made a description of the graphene crystal structure to elucidate its nature. The electronic properties of this material are attractive due to several analogies between the transport phenomena and other phenomena studied by quantum electrodynamic as, for instance, Klein tunneling.

From the point of view of the tight-binding approximation, we obtained the dispersion relation and the structure of the energy bands of the graphene, thus outlining its electronic spectrum. Also, we indicated some curious results that demonstrate the atypical nature of this material.

The main objective of this study was to analyze the behavior of the charge carriers by the transfer matrix technique to obtain the numerical solution of transmissivity, conductance and tunneling current density in the graphene. The transmissividade was analyzed as function of the incident energy and of the angle of incidence for systems with single and double potential barriers, emphasizing the effect of the variation of the gap of energy. We also verified quantum oscillations due to Fabry -Pérot interference and Klein tunneling - an unique property in the graphene. The insertion of the energy gap generated the gap in the transmissivity curve, as well as resonant peaks that become more sharper with the increment of that gap.

From the transmissivity results, we enlarged our understanding of the electronic properties in relation to conductance and current density in the graphene. Such properties are shown quite favorable the production of nanoelectronic devices of high performance..

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Origem do Grafeno

Nos últimos anos, uma nova classe de materiais tem sido foco de intensas pesquisas, nesses despontam os materiais cristalinos bidimensionais (2D). O Grafeno, uma monocamada de átomos de carbono, é o principal material identificado nesta nova classe. O Grafeno foi observado experimentalmente em 2004, graças à André K. Geim e Konstantin S. Novoselov [1] que foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física em 2010 como pioneiros nesta pesquisa.

Até então acreditava-se que essas estruturas bidimensionais não seriam possíveis, uma vez que, as flutuações térmicas na estrutura desses cristais ultrafinos provocariam um deslocamento dos átomos comparáveis com as distâncias interatômicas, deixando-os instáveis segundo Landau [2] 1937, Além do mais em 1962 e 1968 Mermin e Wagner [3, 4] provaram que não poderia existir ordem magnética em uma ou duas dimensões e estenderam este resultado generalizando para sistemas bidimensionais (com simetria contínua) ao estabelecer que não há ordem cristalina em duas dimensões. No entanto, no caso do Grafeno onde o cristal bidimensional torna-se intrinsecamente estável, deformando-se suavemente na terceira dimensão (3D), conduz a um ganho de energia elástica, provavelmente devido a interação fônons com grande comprimento de onda, estabilizando as

membranas atômicas finas através de uma deformação na terceira dimensão. De fato, como observado por Meyer et al [5], os cristais de Grafeno suspensos podem existir livremente, sem um substrato, e exibem deformações elásticas aleatórias, que envolvem as três dimensões. Esta descoberta, experimental, permitiu a possibilidade de uma nova área para testes das extraordinárias propriedades do Grafeno previstas teoricamente. A análise teórica do Grafeno precede 1947 quando Wallace [6], usando um plano de grafite como exemplo didático para os cálculos da Física do Estado Sólido, previu a estrutura eletrônica e observou a relação de dispersão linear. Em 1956, McClure [7] propôs a função de onda para a excitação próxima a energia de Fermi. Em 1984, a similaridade com a equação de Dirac foi discutida por Semenoff [8]. No mesmo ano, DiVincenzo e Mele [9], concluíram que em compostos intercalados com metal alcalino e grafite a carga transferida é distribuída quase que homoganeamente no plano do carbono.

O desenvolvimento nesta área de pesquisa tem atraído, com grande entusiasmo, a atenção de muitos pesquisadores da área da Física, da Química, da Computação, da Biologia, dentre outras. O Grafeno tem apresentado propriedades peculiares: é um material 100 vezes mais forte que o aço [10], devido a ligação carbono-carbono; quase transparente [11]; um excelente condutor elétrico [12] e térmico [13], conduzindo o calor 10 vezes melhor que o cobre. Além de ser flexível, resistente, com alta mobilidade eletrônica e boa condutividade térmica.

Podemos compreender tamanha empolgação ante ao Grafeno. Suas propriedades isoladas ou combinadas já sinalizam uma ampla aplicação tecnológica [14], como, por exemplo: a combinação da alta condutividade e da pouca absorção de luz para revestimento transparente e condutor, demonstrado com a construção de cristal líquido com base de Grafeno [15] e células solares [16]; a alta mobilidade do Grafeno para aplicação de dispositivos eletrônicos de alta frequência [17].

Os elétrons, presentes no Grafeno, que participam do transporte eletrônico, no limite contínuo em baixas energias, podem ser descritos a partir da equação de Dirac. Esta semelhança formal entre as excitações no Grafeno e os férmions de Dirac possibilitou novos

testes para alguns fenômenos como: o efeito Hall quântico [18]; o efeito Hall quântico fracionário [19, 20]; e a ausência de localização [21]. Em 2006, Katsnelson, Geim e Novoselov [22], sugeriram que poderia ser observado no Grafeno um fenômeno relativístico que não é observado na Física de altas energias: o paradoxo de Klein [22] - fenômeno em que elétrons relativísticos penetram em barreiras de potenciais, independente da altura ou largura delas, sendo tal fenômeno verificado por Yong e Kim [23] em 2009.

Grafeno é o nome dado a uma espessa monocamada de átomos de carbono densamente compactados em uma rede hexagonal bidimensional. Este curioso material pode ser pensado como bloco básico de construção de materiais à base de carbono, de diferentes dimensionalidades, formas e tamanhos. Por exemplo, estas “folhas” de carbono – Grafenos – podem ser enroladas afim de formarem nanotubos de carbono, ou empilhadas afim de formarem um grafite tridimensional, ou ainda, arranjadas tridimensionalmente em forma curvas - como superfícies esféricas - gerando grandes fulerenos Fig.(1.1).

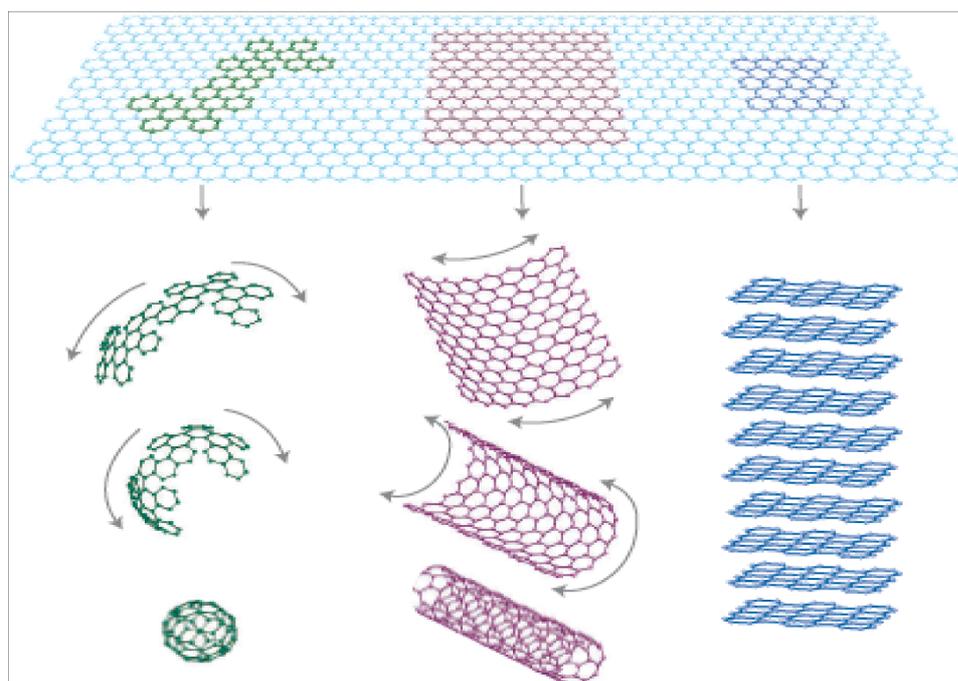


Figura 1.1: Estruturas derivadas do Grafeno, para formar fulerenos (abaixo à esquerda), nanotubos (centro) e a grafite (à direita) (Figura obtida da referência 2)

As diversas estruturas de carbono possuem dimensionalidade que pode variar de  $0D$  a  $3D$ . A capacidade de formar materiais com formas estruturais, dimensionalidades e, conseqüentemente, propriedades tão variadas deve-se às diferentes possibilidades de ligação química entre átomos de carbono, que por sua vez, provém de hibridizações distintas dos orbitais atômicos. desse modo, o carbono pode estar associado a diversas estruturas orgânicas estáveis, denominadas alotrópicas, como, por exemplo, o grafite, o diamante, os fulerenos, os nanotubos, os polímeros, nanofitas, dentre outras.

Nesse contexto, o Grafeno é uma das formas alotrópicas do carbono totalmente bidimensional  $2D$  composto por anéis hexagonais de átomos de carbono formando uma rede denominada tipo *favo de mel* (*honeycomb lattice*). O nome Grafeno tem origem na grafite mais o sufixo -ene.

Para melhor compreensão da estrutura eletrônica do Grafeno, faz-se necessário o entendimento do tipo de hibridização eletrônica existente nesse material. Para tal, precisamos saber qual a configuração eletrônica e os tipos de ligações realizados entre os átomos de carbono. No estado fundamental, a configuração dos elétrons num átomo de carbono isolado,  $1s^2 2s^2 2p^2$ . No entanto, quando o átomo de carbono está em seu estado excitado um elétron da camada  $2s^2$  absorve energia sendo promovido para um dos orbitais  $p$  vazio, observe a Fig.(1.2).

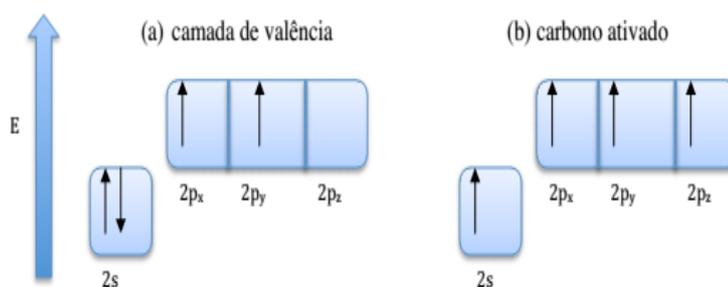


Figura 1.2: (a) Configuração eletrônica da camada de valência de um átomo de carbono no estado fundamental; (b) Configuração do carbono no primeiro estado excitado (ou ativado).

Segundo a teoria de orbitais, as ligações químicas ( ou ligações interatômicas) são efetuadas apenas 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), constituindo uma ligação forte e de difícil rompimento. A ligação do tipo  $\pi$  é formada através de uma aproximação lateral entre orbitais (eixos paralelos), constituindo ligações do tipo mais fraca e de fácil rompimento.e só ocorrem entre orbitais do tipo  $p$ .

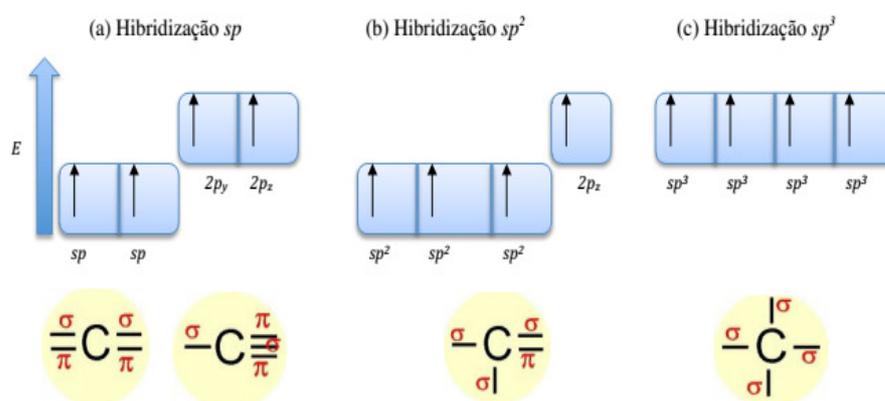


Figura 1.3: Representação da configuração eletrônica da camada de valência do carbono e das suas possíveis ligações atômicas para hibridização do tipo (a)  $sp$ , (b)  $sp^2$ , (c)  $sp^3$ .

A hibridização do tipo  $sp$  no carbono ocorre com a mescla dos orbitais  $2s$  com orbitais do tipo  $2p$  gerando orbitais híbridos do tipo  $sp$ , restando dois orbitais  $2p$  não hibridizados. esta hibridização apresenta uma geometria linear plana. Os dois orbitais híbridos  $sp$  se localizam no plano linear e os dois orbitais  $2p$  são perpendiculares entre si e ao plano linear, formando um ângulo de  $180^\circ$ . A hibridização do tipo  $sp^2$  no carbono é gerada através de interação  $2s$  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. Desse modo, essa configuração eletrônica

permite a existência de três ligações covalentes planares com outros átomos, separadas por um ângulo de  $120^\circ$ , tendo um arranjo hexagonal, sendo por esse motivo denominada de geometria trigonal plana. Esta mesma configuração apresenta três ligações do tipo  $\sigma$  e uma do tipo  $\pi$ . Um exemplo desse tipo de hibridização é uma molécula de acetileno  $(C_2H_2)_n$  à qual, apresenta alternância entre ligações duplas e simples entre átomos de carbono em sua estrutura.

Por outro lado, na 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 ângulos de separação entre os 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, moléculas do gás de metano  $(CH_4)$ .

No Grafeno, observa-se a hibridização do tipo  $sp^2$ , na qual ocorre a combinação de um orbital  $2s$  e dois orbitais  $2p$  resultando em três orbitais equivalentes, orbitais híbridos do tipo  $sp^2$ . Cada orbital  $sp^2$  é representado por um lobo largo apontando para uma direção e outro menor apontando para a direção oposta, como mostrado na Fig.(1.4).

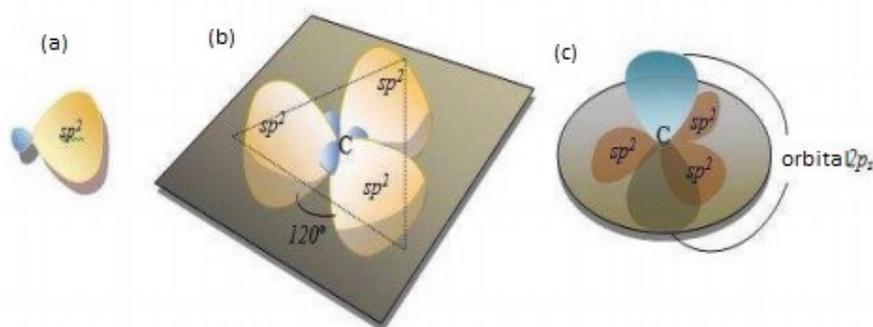


Figura 1.4: (a) Representação do orbital  $sp^2$  (lobo largo apontando uma direção e lobo menor apontando em direção oposta); (b) Três orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  de um átomo de carbono ligados entre si e separados por um ângulo de  $120^\circ$ ; (c) Localização dos orbitais  $sp^2$  no plano e do orbital  $2p$  vazio e perpendicular ao plano.

Os eixos dos três orbitais híbridos  $sp^2$  estão sobre o mesmo plano e se encontram

apontados em direção aos vértices de um triângulo equilátero, Fig.(1.4) (b). O orbital atômico  $2p_z$  não é envolvido na hibridização e consiste de dois lobos situados no plano perpendicular ao plano dos orbitais híbridos  $sp^2$  Fig.(1.4) (c).

Conforme descrição anterior, uma ligação tipo  $\sigma$  é formada pela sobreposição de dois orbitais híbridos  $sp^2$  sobre um eixo comum Fig.(1.5) (a), que constitui o caso de três ligações simples que o carbono realiza no mesmo plano, o que resulta numa estrutura hexagonal, de modo 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  $1,42\text{\AA}$  ( no caso do Grafeno) Fig.(1.5).

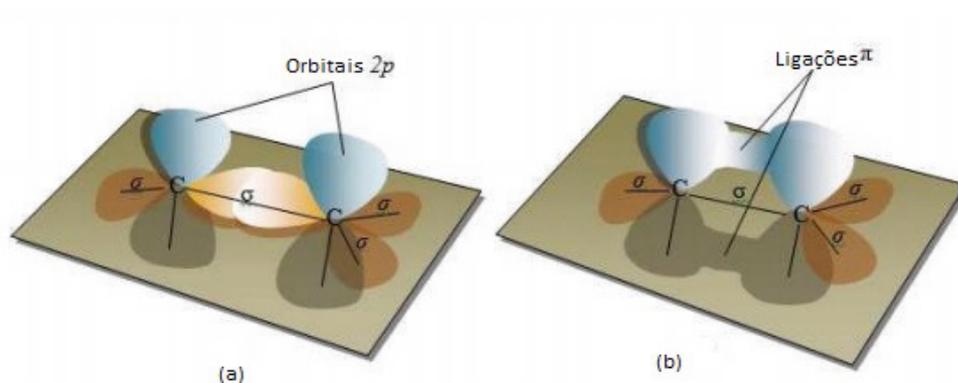


Figura 1.5: (a) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  de dois átomos de carbono formando uma ligação sigma  $\sigma$ ; (b) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo  $2p$  de dois átomos de carbono perpendiculares ao plano formando uma ligação pi  $\pi$ .

Por último, o orbital  $2p$ , remanescente em cada um dos átomos de carbono no plano do Grafeno, está paralelo aos orbitais  $2p$  remanescente de todos os outros átomos de carbono. Todos esses orbitais se sobrepõem, formando uma ligação do tipo  $\pi$  Fig.(1.5) (b). Dessa forma, a superfície plana do Grafeno apresenta uma espécie de "lençol" de orbitais  $\pi$  vazios que interagem entre si.

A principal diferença das folhas de Grafeno em relação a todos os demais materiais descobertos até o momento é que o mesmo pode ser considerado tanto semicondutor

como condutor, devido ao fato de que sua estrutura de bandas eletrônicas, no ponto de Dirac ( $K$  e  $K'$ ) o Grafeno apresenta gap nulo, ou seja, a banda valência e a banda de condução se tocam e nesses pontos o gap varia linearmente com o momento  $k$  de elétron.

Além de todas as propriedades eletrônicas peculiares do Grafeno, descritas nos parágrafos anteriores, podemos citar outra propriedade única, que o torna interessante do ponto de estudos da área de física de partículas elementares. Nos planos de Grafeno, os elétrons se movimentam a velocidades extremamente altas, próximas a velocidade da luz, e podem executar o movimento balístico ao longo de distâncias muito grandes, isto é, os elétrons podem percorrer grandes distâncias no Grafeno sem sofrerem nenhum evento de espalhamento com outros elétrons. A velocidade eletrônica é independente da energia, ou seja, os elétrons se movem como se fossem ondas de luz; de modo que os elétrons se comportam como se fossem partículas de massa praticamente nula, por essa razão são chamados de férmions de Dirac sem massa. Tal propriedade de transporte foi comprovada por meio de experimentos de efeito Hall Quântico [18].

Uma importante propriedade Física para o estudo de propriedades de transporte está relacionada com o sistema no qual as partículas têm seus movimentos limitados a faixas de energias permitidas (bandas e energias), separadas por faixas de energias proibidas (*gaps*), que corresponde a faixa de energia proibida que separa o fundo da banda de condução, cujos portadores são elétrons, do topo da banda de valência, cujos portadores são os buracos. O potencial de dupla barreira para cada portador é então formado pela descontinuidade dessas bandas, que tem origem com a formação das heteroestruturas com *gaps* diferentes, na direção de crescimento. Desta forma, podemos ter tunelamento, tanto de elétrons na banda de condução, como de buracos nas bandas de valência.

Experimentos realizados, mostram que um gap finito de energia pode ser induzido devido o substrato que é uma propriedade intrínseca do Grafeno crescido epitaxialmente [24, 69]. O espectro do gap de energia induzido no Grafeno resulta do fato de que o portador de carga ter massa finita e a relação de dispersão de energia ser não linear com o momento sob o regime de baixas energias. Isto demonstra que os portadores e carga

obedecem a equação massiva de Dirac bidimensional (2D) e o tunelamento característico difere do caso de férmions sem massa no Grafeno.

Apesar de todos os avanços científicos conquistados em torno do Grafeno, em tão pouco tempo, ainda existe muito a ser compreendido, principalmente, com respeito as propriedades eletrônicas. A compreensão dos fenômenos de transporte é essencial para a fabricação de dispositivos eletrônicos. Nossa contribuição é proporcionar uma investigação teórica que permita compreender melhor os fenômenos de transporte próximo ao nível de Fermi, elucidando os efeitos reais de parâmetros na estrutura do Grafeno.

No presente trabalho, iremos investigar uma dupla barreira de potencial 2D crescida epitaxialmente no Grafeno com gap de energia. Faremos um estudo da probabilidade de transmissão, condutância e corrente de transmissão de elétrons massivos de Dirac e sua dependência com a energia incidente, ângulo de incidência, gap de energia, bem como as dimensões das barreiras e do poço por meio do método da matriz de transferência.

## 1.2 Obtenção do Grafeno

No passado, acreditava-se que estruturas cristalinas bidimensionais não seriam possíveis, Landau e Peierls argumentaram que cristais  $2D$  eram termodinamicamente instáveis e não poderiam existir. Flutuações térmicas não comportariam ordens de longo alcance, resultando em destruição da estrutura cristalina bidimensional a qualquer temperatura finita [25, 26]. O mesmo argumento foi estendido por Mermin [27] e era bastante consistente com observações experimentais. Precede que a temperatura de fusão dos filmes finos decresce rapidamente com a espessura, tornando os filmes instáveis. Por essa razão, o Grafeno era conhecido como parte integrante do grafite, sendo impossível obtê-lo por se tratar de uma estrutura bidimensional. Pesquisadores tem conseguido isolar em solução finas camadas de grafite, mas jamais construída de apenas uma simples camada com a "espessura" de um único átomo. Contudo, um grande avanço nessa área foi realizado quando o grupo de pesquisadores liderados por K. A. Novoselov e A. K. Geim [1], obser-

vou uma única folha de Grafeno sobre uma superfície de dióxido de silício,  $SiO_2$ , abrindo novas perspectivas para uma nova tecnologia baseada em estruturas bidimensionais de carbono.

Diferentemente de muitos materiais com grande potencial tecnológico, o Grafeno pode ser obtido facilmente. Um dos métodos mais simples para a obtenção do Grafeno sobre um substrato é conhecida como a técnica de esfoliação. O substrato comumente usado é o do silício ( $Si$ ) coberto com uma camada de oxigênio,  $SiO_2$ . A esfoliação do grafite é feita com o uso de uma fita adesiva [28], inicialmente coloca-se um floco de grafite na fita adesiva e dobra-se a fita de modo que a região em que está o grafite fique em contato com uma região em que não há grafite. Dessa forma, ao desdobrar a fita o grafite se divide. Repete-se esse processo várias vezes até que apenas pedaços bem finos de grafite estejam colados na fita adesiva. Pressiona-se a fita com o grafite esfoliado sobre um substrato previamente limpo e fricciona-se levemente a fita sobre o substrato. Em seguida remove-se a fita, e o material estará pronto para a observação.

O grupo de Geim obteve filmes de Grafeno por meio da técnica de esfoliação mecânica, obtendo de forma termodinamicamente estável, as primeiras estruturas isoladas bidimensionais de carbono. Inicialmente, utilizaram uma plaqueta de  $1mm$  de espessura de HOPG (*Highly Ordered Pyrolytic Graphite*). Usando a técnica de gravura seca com plasma de oxigênio produziram blocos de grafite com  $5\mu m$  de profundidade no topo da plaqueta. A superfície estruturada, foi, então, prensada contra um fotoreistor disposto sobre um substrato de vidro. Após a secagem, as bases ficam presas a camada de fotoreistor, possibilitando sua clivagem do resto da amostra de HOPG. Por meio de uma fita adesiva, os pesquisadores iniciaram uma esfoliação repetida de fragmentos de grafite dessas amostras. Os finos fragmentos que restaram no fotoreistor foram depositados em acetona. Quando as amostras (*wafers*) de  $Si$  foi mergulhada na solução e então lavada com água e propanol, alguns fragmentos foram capturados na superfície do substrato. Após isto, fez-se uma limpeza, eliminando os fragmentos mais espessos. Os fragmentos mais delgados ( $d < 10nm$ ) foram encontrados absorvidos no  $SiO_2$  [30]. Dessa forma,

surgiu o Grafeno, constituído por anéis aromáticos condensados com apenas um átomo de carbono de espessura e comprimento de ligação carbono-carbono de  $1,42 \text{ \AA}$ .

Recentemente, um grupo de pesquisadores mostraram um método de produção extremamente eficiente e a custo muito menor. Aplicando radiação laser de um gravador de DVD *Lightscribe* sob um filme de óxido de grafite produziu uma camada finíssima de Grafeno de alta qualidade e muito resistente, excelente para funcionar como capacitor ou semiconductor [29].

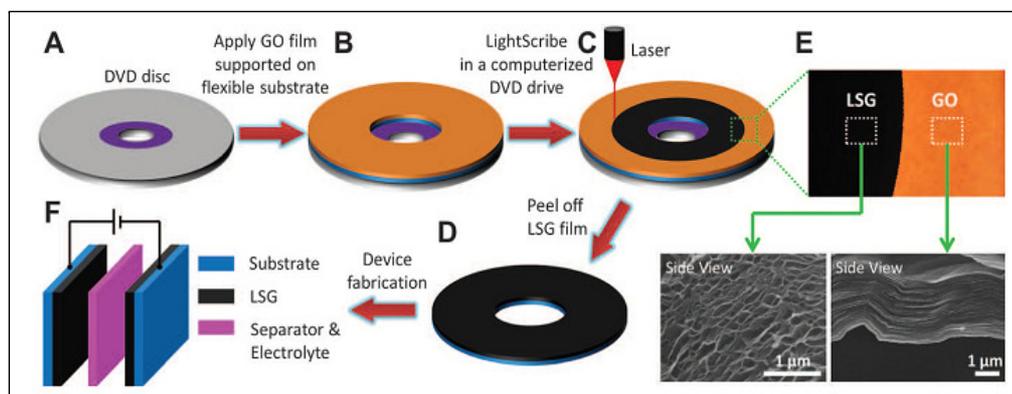


Figura 1.6: Ilustração esquemática da fabricação de uma camada de Grafeno [29].

Outra técnica proposta, conhecida como deposição de vapor químico é possível a obtenção de folhas de Grafeno maiores e de maior qualidade, crescendo o material como um filme de carbono de uma só camada em cima de outra superfície. Tipicamente, uma mistura de metano e hidrogênio (*gás*) é passado através de uma folha de cobre mantido em um forno à temperatura de  $800$  a  $1000 \text{ }^\circ\text{C}$ . Uma camada única de carbono forma-se no topo do cobre. A partir de um processamento químico remove-se o cobre e deposita-se o Grafeno de uma forma mais precisa sobre um substrato, tal como o dióxido de silício

No capítulo subsequente será mostrado a razão da analogia entre o comportamento dos portadores de carga no Grafeno e férmions de massa nula na eletrodinâmica quântica. Para isso, vamos partir do Hamiltoniano tight-binding escrito na forma de segunda quantização e obter um Hamiltoniano análogo ao de Dirac para férmions relativísticos.

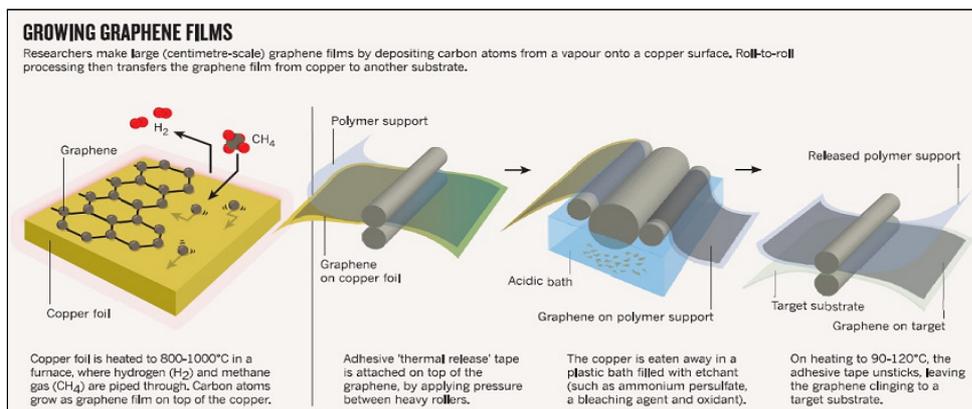


Figura 1.7: Técnica de deposição de vapor químico para a obtenção de folhas de Grafeno de alta qualidade [28].

No capítulo posterior, será apresentado o método da matriz de transferência, método esse utilizado na obtenção de todos os resultados numéricos apresentados nesse trabalho.

### 1.3 Motivação

Devido às inúmeras propriedades diferenciadas do Grafeno já descritas, dentre outras não descritas, abrindo assim a possibilidade de aplicações tecnológicas do Grafeno como, por exemplo transistores produzidos exclusivamente de átomos de carbono. O que elimina o uso de junções metálicas, o que torna possível a construção de dispositivos muito menores que os atuais.

O controle sobre as propriedades eletrônicas de um material sempre foram motivo de muita atenção por parte da indústria, a maior parte das inovações tecnológicas nessa área, se deu aos avanços da indústria dos semi-condutores, materiais com propriedades estruturais bem características.

Nesse enredo o Grafeno desponta, despertando grande interesse da indústria dos semi-condutores, pois nenhuma película de espessura dessa ordem, é conhecida como sendo mais estável sob condições ambientes, ou com melhores propriedades de condução.

Esta alta qualidade eletrônica do Grafeno claramente aponta para um pronunciado efeito de campo elétrico ambipolar, no qual portadores de carga podem ser alternados entre elétrons e buracos, à concentrações de zero até a ordem de  $10^{13}$  *portadores/cm<sup>2</sup>*. E ainda, uma mobilidade, à temperatura ambiente, da ordem de  $10^4$  *cm<sup>2</sup>/V · s*, pode ser induzida aplicando-se uma tensão de *gate*.

Além do mais, a mobilidade destes portadores de carga dependerem fracamente da temperatura, têm levado a intensas pesquisas, por estudos de propriedades eletrônicas deste singular material. Neste trabalho propomos analisar as propriedades de transporte eletrônico desse material, seu espectro eletrônico, bem como algumas outras propriedades eletrônicas relevantes.

# Capítulo 2

## Modelo Teórico

Neste capítulo, partiremos de uma descrição microscópica do Grafeno afim de obtermos um modelo contínuo no limite de baixas energias. Nessa descrição, desprezaremos os efeitos de bordas do cristal, considerando-o infinito e também não levaremos em conta as interações elétron-elétron ou spin-órbita. Para isso, faremos uso da 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 nas vizinhanças desse átomo, ou seja, nos seus vizinhos mais próximos. Dessa forma, cada vizinho pode migrar de vizinho em vizinho ao longo da rede. Muito embora, seja uma das abordagens microscópicas mais simples, o modelo tight-binding mostra-se muito bem para o cálculo de estruturas de banda do Grafeno [31].

### 2.1 Modelo Tight-binding e a equação de Dirac

Uma das formas alotrópicas do carbono, o Grafeno, constitui-se de uma folha de átomos de carbono com hibridização do tipo  $sp^2$  arranjados em uma estrutura hexagonal planar bidimensional (2D) Fig.(2.1). Os orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  formam as ligações  $\sigma$  no plano da folha de Grafeno, enquanto os orbitais  $p_z$  formam as ligações do tipo  $\pi$  que são paralelas ao plano atômico do Grafeno.

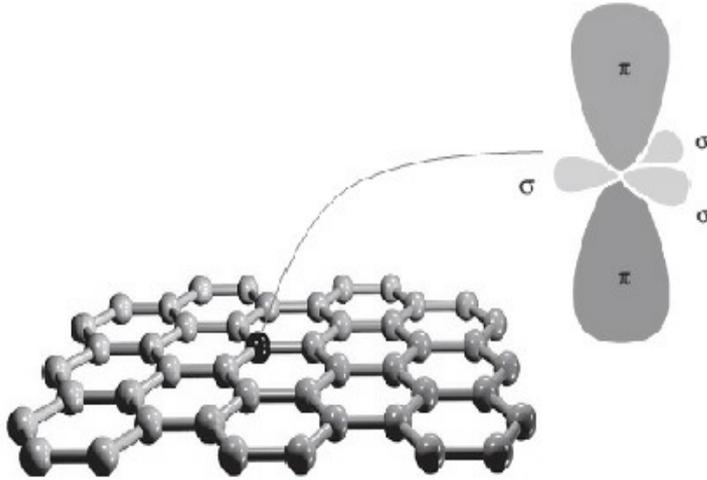


Figura 2.1: Orbitais de valência do carbono. Os três orbitais  $\sigma$  no grafeno e o orbital  $\pi$  perpendicular a folha.[33].

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 do tipo  $\sigma$  são do tipo covalente, e dessa forma, consideravelmente fortes, e são responsáveis em grande parte pelas propriedades mecânicas e elásticas do Grafeno. Outrossim, os elétrons dos orbitais  $2p_z$  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 os elétrons de maior importância para a determinação das propriedades elétricas e ópticas no Grafeno.

O Grafeno é constituído por uma camada de átomos de carbono arranjados 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 [6]. Os vetores de rede são escritos como:

$$\vec{a}_1 = \frac{3a}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \vec{a}_2 = \frac{3a}{2}\hat{x} - \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{y}, \quad (2.1)$$

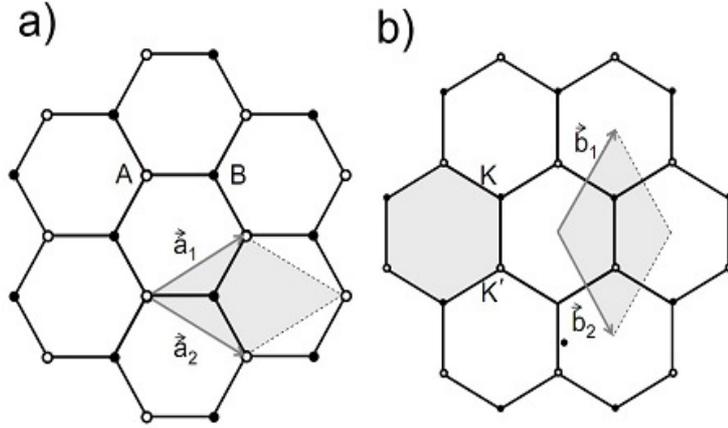


Figura 2.2: (a) estrutura do Grafeno no espaço real. O losango representa a célula unitária, delimitadas pelos vetores de rede  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ . Essa célula envolve dois átomos A e B, chamados de sub-redes. (b) Estrutura do Grafeno no espaço recíproco mostrando os vetores unitários  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  e a zona de Brillouin por eles delimitado.

onde  $a$  é a distância entre dois átomos de carbono e  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  são vetores unitários Fig(2.2) (a). Os vetores que definem a rede recíproca Fig.(2.2) (b) são dados por:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}\hat{x} + \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\hat{y}, \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}\hat{x} - \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\hat{y}, \quad (2.2)$$

O Hamiltoniano tight-binding para a descrição de elétrons no Grafeno escrito no formalismo de segunda quantização, considerando apenas o termo de hopping entre os primeiros vizinhos, é escrito como:

$$H = - \sum_{i,j} t(\mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{b}_j + \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{a}_i), \quad (2.3)$$

onde  $t \approx 1,28 \text{ eV}$  é o parâmetro associado entre a transição de elétrons entre os sítios mais próximos. Os operadores  $\mathbf{a}_i^\dagger$  e  $\mathbf{a}_i$  são responsáveis pela criação e destruição, respectivamente, de elétrons do sítio  $i$  da subrede A e  $\mathbf{b}_j^\dagger$  e  $\mathbf{b}_j$  desempenham a mesma função para um sítio  $j$  da subrede B. Nessa expressão, os termos  $\sum_i \epsilon \mathbf{a}_i^\dagger \mathbf{a}_i$  e  $\sum_j \epsilon \mathbf{b}_j^\dagger \mathbf{b}_j$  que

forneem as energias no sítio foram omitidos, visto que seu único efeito é deslocar o nível da energia de Fermi <sup>1</sup> no sistema. Quando uma folha de Grafeno está sob a ação de um potencial de porta, a energia no sítio é igual ao da voltagem de porta, caso contrário, a energia do sítio é nula.

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

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_k, \quad a_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a_k^\dagger, \quad (2.4)$$

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} b_{k'}, \quad b_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} b_{k'}^\dagger, \quad (2.5)$$

onde  $N$  é o número de sítios das subredes  $A$  e  $B$ . Substituindo-as o Hamiltoniano fica:

$$H = - \sum_{i,j} \frac{t}{N} \left[ \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} a_k^\dagger b_{k'} + \sum_{k,k'} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}_j} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} b_{k'}^\dagger a_k \right], \quad (2.6)$$

que pode ser reescrito por:

$$H = - \frac{t}{N} \sum_{i,j} \sum_{k,k'} \left[ e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} a_k^\dagger b_{k'} + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}_j-\vec{r}_i)} b_{k'}^\dagger a_k \right], \quad (2.7)$$

Cada átomo possui três primeiros vizinhos, desse modo, fixando a origem em um sítio  $i$  qualquer e fazendo  $j$  variar sobre os primeiros vizinhos localizados por  $R_1 = (-a, 0)$ ,  $R_2 = (a/2, a\sqrt{3}/2)$  e  $R_3 = (a/2, -a\sqrt{3}/2)$ , obtemos:

$$H = - \frac{t}{N} \sum_i \sum_{k,k'} \left[ e^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}_i} a_k^\dagger b_{k'} (e^{-ik'_x a} + e^{ik'_x a/2} e^{ik'_y a\sqrt{3}/2} + e^{ik'_x a/2} e^{-ik'_y a\sqrt{3}/2}) \right. \\ \left. + e^{-i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}_i} b_{k'}^\dagger a_k (e^{ik'_x a} + e^{-ik'_x a/2} e^{-ik'_y a\sqrt{3}/2} + e^{-ik'_x a/2} e^{ik'_y a\sqrt{3}/2}) \right], \quad (2.8)$$

---

<sup>1</sup>A Energia de Fermi é a energia do nível ocupado mais energético em um sistema quântico fermiônico à temperatura de zero absoluto.

que também pode ficar

$$H = -t \sum_k [g(\vec{k}) a_k^\dagger b_{k'} + g^*(\vec{k}) b_{k'}^\dagger a_k], \quad (2.9)$$

onde  $g(\vec{k}) = e^{ik'_x a} + 2 \cos(k'_y a \sqrt{3}/2) e^{ik'_x a/2}$  é o fator de estrutura cristalina.

O Hamiltoniano na Eq.2.9 pode escrito como  $\mathbf{H} = \sum_k \langle \Psi_k | \mathbf{H}_k | \Psi_k \rangle$ , onde  $|\Psi_k\rangle = (a_k, b_k)^T$  representam, respectivamente, o estado eletrônico e  $\mathbf{H}_k$  o Hamiltoniano para um dado  $\vec{k}$ . Escrevemos  $\mathbf{H}_k$  por

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

Podemos obter os autovalores de  $\mathbf{H}_k$  como

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

onde

$$f(\vec{k}) = 2 \cos(k_y a \sqrt{3}) + 4 \cos(k_x 3a/2) \cos(k_y a \sqrt{3}/2) \quad (2.12)$$

O gráfico da Eq.2.11, mostrado na Fig.(2.3), representa a estrutura de bandas de uma única folha de grafite: o Grafeno. A 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 ausência de gap e uma dispersão eletrônica cônica incomum para pequenos valores de  $|E|$ . Os vértices de três desses cones estão conectados pelos vetores da rede recíproca, por isso eles 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:

$$\vec{K} = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \vec{K}' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right). \quad (2.13)$$

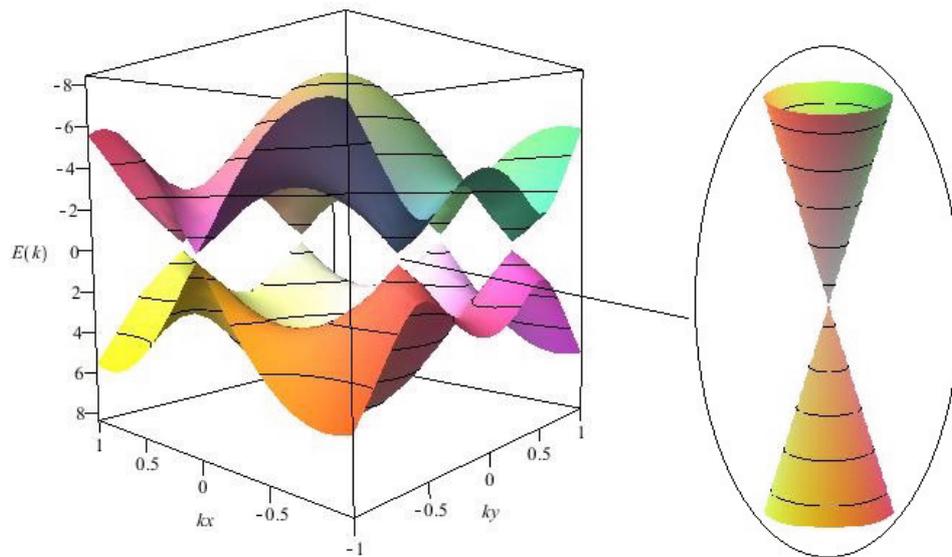


Figura 2.3: Relação de dispersão de energia do grafeno. Em (a) gráfico da superfície descrita pela Eq.2.11. Zoom em destaque da banda de energia de um dos pontos de Dirac.

Na Fig.(2.4) é mostrado o mapa de contorno da Eq.2.11 onde a pode ser visto a primeira zona de Brillouin.

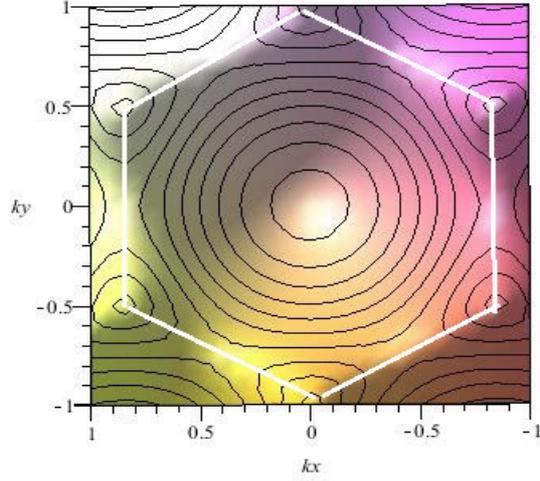


Figura 2.4: Mapa de contorno da mesma equação onde a primeira zona de Brillouin está representada na linha branca.

Cálculos de densidades de estados mostraram que a mesma é nula no nível de Fermi ( $E = E_F$ ), de acordo com a Fig.(2.3). Dessa forma, o Grafeno pode ser classificado como um semicondutor de gap nulo nos vértices da zona de Brillouin nos pontos  $K$  e  $K'$ .

Desde os primeiros estudos no Grafeno já fora notado que a relação  $E \times K$  é linear para baixas energias próximo aos seis cantos da zona de Brillouin hexagonal  $2D$ , e que a estrutura eletrônica do Grafeno apresenta gap nulo nos pontos de alta simetria, conduzindo a uma massa efetiva nula para elétrons e buracos. Desse modo, os elétrons podem mover-se com altíssima velocidade e perder pouca energia no nível de Fermi, em outras palavras, os elétrons movem-se como se fossem partícula praticamente sem massa, equivalentes a fótons, podendo ser assim descritas por meio da equação relativística de Dirac para partículas com spin  $1/2$ . Assim, elétrons e buracos são denominados de "férmions de Dirac" e os seis cantos da zona de Brillouin são denominados de "Pontos de Dirac".

Muito do otimismo inicial baseado no Grafeno está relacionado a sua notável mobilidade de carga. De acordo com resultados teóricos - que estão em concordância com

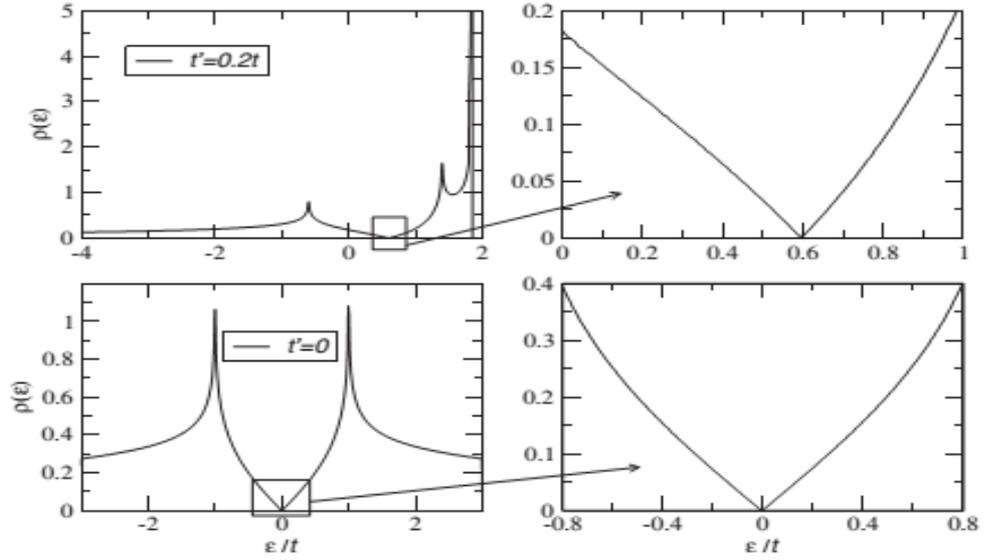


Figura 2.5: densidade de estado por unidade de célula em função da energia (em unidades de  $t$ ), (a) ( $t' = 0.2t$ ) e (b) ( $t' = 0$ ). [32].

trabalhos experimentais - o Grafeno se comporta como um semimetal cujos elétrons de Dirac sem massa têm uma velocidade de Fermi aproximadamente igual a  $v_F \approx 10^6$  m/s (cerca de 1% da velocidade da luz) [18, 42]. Embora esta característica tenha levado, por exemplo, a dispositivos de rádio-frequência de alto desempenho, talvez não seja particularmente útil para a lógica digital, uma vez que, no Grafeno está faltando uma chave característica requerida para a construção de dispositivos digitais, um *gap* de energia, que será objeto de estudo proposto neste trabalho.

## 2.2 Modelo contínuo

O Hamiltoniano da Eq.2.10 advém 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 restringirmos apenas a vizinhança dos

pontos  $K$  e  $K'$ . Os termos não nulos da matriz que representa o Hamiltoniano são dados em termos de  $g(\vec{k})$ . Desse modo, 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. Assim, considerando apenas termos de primeira ordem,  $g(\vec{k})$  em torno de  $\vec{K}'$  pode ser aproximado na forma:

$$g(\delta\vec{k}) \approx g(\vec{K}') + \frac{\partial g}{\partial k_x} \Big|_{\vec{k}=\vec{K}'} (k_x - K'_x) + \frac{\partial g}{\partial k_y} \Big|_{\vec{k}=\vec{K}'} (k_y - K'_y) + 0(\delta k^2), \quad (2.14)$$

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

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) k'_x - \frac{3a}{2} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right) ik'_y, \quad (2.15)$$

$$g(\delta\vec{k}) \approx \frac{3a}{2} (k'_x + ik'_y) e^{i5\pi/6}. \quad (2.16)$$

A fase que aparece no lado direito da Eq.2.16, representada pelo termo exponencial, pode ser incluída no ket de estado sem promover 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:

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F (k_x - ik_y) \\ \hbar v_F (k_x + ik_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

com  $\hbar v_F = 3at/2$ . Esse é exatamente o Hamiltoniano de Dirac bidimensional para férmions relativístico com termo de massa nulo e a velocidade da luz  $c$  substituída pela velocidade de Fermi  $v_F \approx 1 \times 10^6$  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 forma mais concisa como

$$\mathbf{H}_k = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}, \quad (2.18)$$

onde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ , são as matrizes de Pauli,

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

$\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  é o operador momento. O Hamiltoniano Eq.2.17 atua sobre os estados representados por duas componentes de spinor  $\Psi = [\psi_A, \psi_B]^T$ , onde  $T$  denota a transposta do vetor linha,  $\psi_A$  e  $\psi_B$  representam as funções envelopes associados com a amplitude de probabilidade das respectivas sub-redes do sitio do Grafeno. O grau de liberdade de spin, descritos pelas matrizes de Pauli  $\sigma_i$ , é chamado de pseudospin para distingui-lo do spin real do elétron que não está sendo considerado nessa abordagem.

Na seção subseqüente, serão apresentados resultados de trabalhos teóricos e experimentais referentes a possibilidade de obtenção de *gap* de energia no Grafeno, uma vez que sua formação é de suma importância para o uso do Grafeno em dispositivos eletrônicos.

## 2.3 Efeitos de gap de energia

Uma importante propriedade Física para o estudo da transmissão está relacionada com o sistema no qual as partículas têm seus movimentos limitados a faixas de energias permitidas (bandas e energias), separadas por faixas de energias proibidas (*gaps*). A região de energia de maior interesse para processos de transporte, ópticos, etc., corresponde àquela que envolve o *gap* fundamental, que é a faixa de energia proibida que separa o fundo da banda de condução, cujos portadores são elétrons, do topo da banda de valência, cujos portadores são os buracos. O potencial de dupla barreira para cada portador é então formado pela descontinuidade dessas bandas, que tem origem com a formação das heteroestruturas com *gaps* diferentes, na direção de crescimento. Desta forma, podemos ter tunelamento, tanto de elétrons na banda de condução, como de buracos na banda de valência.

A investigação teórica do tunelamento de elétrons em heteroestruturas semicondu-

toras foi feita inicialmente por Ezaki e Tsu [40] em 1973, e realizada experimentalmente por Ezak, Tsu e Chang [41], nos laboratórios da IBM, utilizando heteroestruturas do tipo  $GaAs/GaAlAs$ . Medidas de corrente eletrônica nesses sistemas são realizadas, acoplando-se as duas barreiras por meio de eletrodo de  $GaAs$ , com dopagem tipo  $n^+$  (emissor e coletor) e aplicando-se em seguida um campo elétrico. A corrente flui através da heteroestrutura entre os dois eletrodos e a ressonância (será melhor tratada a seguir) ocorre quando a energia de Fermi na região do emissor (que representa a energia do elétron incidente) se alinha com um nível ressonante dentro do poço quântico. Este foi o primeiro experimento que serviu como demonstração da quantização de energia em heteroestruturas semicondutoras.

Desde a sua primeira obtenção por esfoliação [18, 42], o Grafeno tornou-se um dos tópicos mais discutidos em ciências de materiais. Tendo em vista suas propriedades incomuns, isto é, sua extrema, alta mobilidade de portadores de carga [43, 44] e o efeito Hall quântico observado em temperatura ambiente [45] rendem ao Grafeno ser um promissor candidato para futuro dispositivos eletrônicos [22]. Para a camada única de Grafeno, a célula unitária consiste de dois átomos de carbono nas subredes  $A$  e  $B$ . As propriedades físicas interessantes no Grafeno derivam da equivalência entre as quase-partículas de férmions de Dirac sem massa e o formato cônico das bandas  $\pi$  e  $\pi^*$  que se cruzam apenas nos pontos ( $K$  e  $K'$ ) no espaço recíproco Fig.(2.3). Próximo a esses pontos, a dispersão eletrônica se assemelha a elétrons relativísticos de Dirac. Por essa razão, os pontos ( $K$  e  $K'$ ) são tratados como pontos de Dirac. Nesses pontos, as bandas de valência e condução são degeneradas, mostrando que o Grafeno é um semicondutor sem *gap* de energia. No entanto, a ausência de *gap* de energia próximo a esses pontos de cruzamento limitam potenciais aplicações do Grafeno, e o preparo de sistemas baseados em Grafeno com *gap* de energia é um importante passo para o seu futuro uso na engenharia. O mecanismo mais simples para a abertura de *gap* constitui-se por meio da quebra de simetria de duas subredes do Grafeno que fecham esse *gap* [46], por exemplo em nanofitas de armchair [47] e se estende a bicamada de Grafeno [48, 49], ou através da quebra de simetria da

subredes pela ligação de Grafeno (ou bicamada de Grafeno) em um substrato [50] tem sido propostos. Abaixo, é exibido uma forma mais simples e clara de se induzir um gap de energia no Grafeno crescido epitaxialmente em substrato de *SiC*. Tal resultado surge da interação entre a rede de Grafeno e o substrato culminando na quebra de simetria entre as subredes *A* e *B* Fig.(2.6) (a). Na Fig.(2.6). é possível observar por meio da técnica espectroscopia de fotoemissão de ângulo resolvido (ERPES) cujos resultados são obtidos de uma monocamada de Grafeno para uma linha de um dos pontos de Dirac *K*. A Fig.(2.6) (b), exibe a intensidade fotoelétrica como função da energia e do momento ao longo da linha em preto sobre *K* da Fig.(2.6) (a) . A linha em preto demarca a localização da posição do pico na curva de distribuição de energia (EDCs). Seguindo o mapa, podemos notar uma curva dispersante para cima e outra para baixo no cone de dispersão. O que, concordam com a dispersão cônica esperada de elétrons relativísticos próximos ao ponto de Dirac. A partir do ponto médio entre o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência, deduz-se que a energia esperada no ponto de Dirac  $E_D$  é cerca de  $0.4 \text{ eV}$  abaixo do nível de Fermi  $E_F$ . Isto mostra um contraste com o esperado no Grafeno não dopado onde  $E_D = E_F$ , mostrando que o que tem crescido no Grafeno são eletrons dopados [51, 52]. Surpreendentemente, a dispersão em  $E_D$ , isto é, a interseção dos cones, não é caracterizada por único ponto através da simples rede de Grafeno como esperado. Ao invés disso, as bandas de valência e condução são separadas por uma energia finita mesmo no ponto *K* e um gap de energia é observado. isto decorre diretamente na análise da curva de distribuição de energia (EDCs) mostrado na Fig.(2.6) (c) e na curva de distribuição do momento (MDCs) na Fig.(2.6) (d). Próximo do ponto *K* nas EDCs sempre são verificados dois picos com um mínimo de separação de energia, ou gap, verificados em *K*. A partir de então, deduz-se um gap da ordem de  $\approx 0.26 \text{ eV}$ . Os picos na MDC são não-dispersivos dentro da mesma faixa de energia e  $E_D$  espalhado  $0.26 \text{ eV}$  na Fig.(2.6) (d).[24].

Experimentos realizados, mostram que um *gap* finito de energia pode ser induzido devido o substrato que é uma propriedade intrinseca do Grafeno crescido epitaxialmente

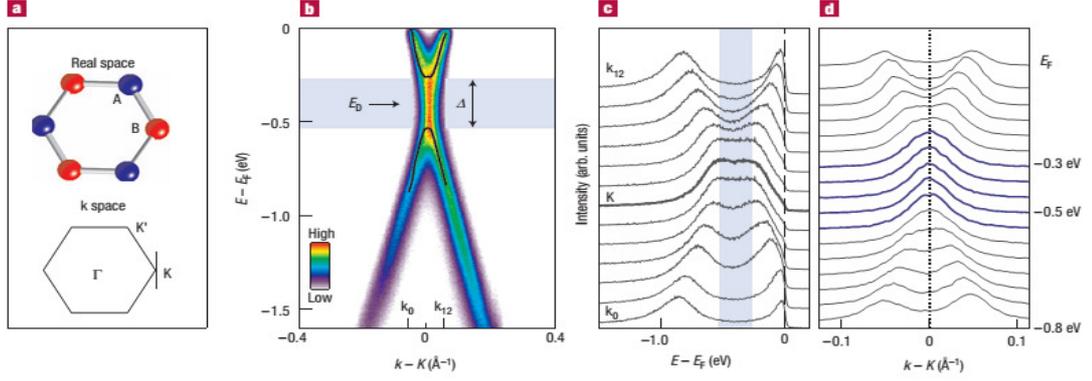


Figura 2.6: Observação da abertura de gap de energia no ponto  $k$ , a) estrutura do grafeno no espaço real e no espaço do momento, b) ARPES mapa de intensidade tomada ao longo da linha em preto a partir (a) [24].

[24, 69]. O espectro do *gap* de energia induzido no Grafeno resulta do fato do portador de carga ter massa finita e a relação de dispersão de energia ser não linear com o momento sob regime de baixas energias. Isto demonstra que os portadores e carga obedecem a equação massiva de Dirac bidimensional (2D) e o tunelamento característico difere do caso de férmions sem massa no Grafeno.

Desse modo, o Hamiltoniano da Eq.2.17 pode ser reescrito considerando-se a formação de gap de energia no sistema de interesse [6, 8], assim

$$H_k = \begin{pmatrix} \Delta & \hbar v_F(k_x - ik_y) \\ \hbar v_F(k_x + ik_y) & -\Delta \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

onde  $\Delta$  é gap finito de energia.

Em face a possibilidade do uso de método de indução de gap finito no espectro de energia do Grafeno alguns trabalhos relacionados manifestam tal feito como por exemplo, o Grafeno crescido sobre nitreto de boro com distância B-N muito próximo a distância C-C do Grafeno [53] ou ainda, com o uso de ouro intercalado com rutênio  $Ru(001)$  usando a técnica de Espectroscopia de fotoemissão de ângulo determinado (ARPES),

onde a intercalação conduz a dissociação de filmes de Grafeno, e são observados gap de energia próximo ao ponto de Dirac [54]. Desta forma é possível construir algumas regiões no Grafeno onde seu espectro de energia revela um gap finito, o que significa que os portadores de carga se comportam como férmions massivos de Dirac embora ainda hajam regiões onde férmions de Dirac sem massa também estejam presentes [55].

## 2.4 Propriedades de Transporte no Grafeno

Do ponto de vista das propriedades eletrônicas, o Grafeno é um semicondutor bidimensional sem gap de energia como mostrado na Fig.(2.3) para monocamada de Grafeno. Juntamente com a estrutura de banda sem gap de energia a quiralidade dos portadores tornam esse material definitivamente diferente dos demais materiais convencionais em estado sólido. Uma de suas incomuns propriedades de transporte é o tunelamento quiral de quase-partículas de baixas energias, o que conduz ao paradoxo de Klein em estruturas de monocamada de Grafeno e demonstrado experimentalmente, por exemplo, em [56]. Outro importante aspecto da transmissão eletrônica através de estruturas quânticas é a ressonância de Fabry-Pérot que é uma consequência da natureza da onda do elétron, cuja comprovação fora realizada através de várias estruturas como barreira simples e dupla barreira no Grafeno. Apesar do tunelamento Klein tornar potenciais eletrostáticos estruturas transparentes aos portadores no Grafeno, existe a possibilidade de confinar elétrons (buracos) em poços (barreiras) de potencial, na condição de que a componente  $k_y \neq 0$ .

### 2.4.1 O Tunelamento Klein

O tunelamento Klein fora primeiro reportado no contexto da eletrodinâmica quântica. Em 1929, o físico Oscar Klein [57], encontrou um resultado quando resolvia o problema de propagação de férmions de Dirac através de uma barreira única de potencial.

Um dos fatores que fazem do Grafeno ser tão atrativo para pesquisa é a dinâmica de elétrons nesse material. Mais uma característica singular dos portadores de carga

do Grafeno surge quando esses são submetidos a potenciais eletrostáticos, tais como barreiras de potencial. Elétrons no Grafeno são capazes de tunelar qualquer barreira de potencial com probabilidade 1 desde que sua incidência seja normal. Isso 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. Esse comportamento é normalmente referido como paradoxo de Klein no Grafeno, em analogia ao paradoxo de Klein na eletrodinâmica quântica, onde partículas começam a penetrar uma barreira de potencial quando sua altura excede duas vezes a sua energia de repouso  $mc^2$ . A partir desse ponto, a transmissividade praticamente independe da altura da barreira e aproxima-se da transmissividade perfeita para barreiras de potencial muito altas.

De forma consistente com a estrutura eletrônica mostrada na Fig.(2.3), as quase-partículas de baixas energias na monocamada de Grafeno são formalmente descritas pelo Hamiltoniano de Dirac [21].

$$H = v_F(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) + V_0, \quad (2.21)$$

onde  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  são as matrizes de Pauli,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  é o vetor momento  $2D$  e  $U$  é a energia potencial. Nota-se que, além da descrição feita na Fig.(2.2) do capítulo anterior, a estrutura de rede do Grafeno pode ser vista como uma combinação de duas subredes equivalentes, denotadas por  $A$  e  $B$ . Este Hamiltoniano descreve os portadores sob regime de baixa energia e atuam sobre os estados representados pelas duas componentes de spinor de Dirac  $\Psi = [\psi_A, \psi_B]^T$ , onde  $\psi_{A,B}$  representam as funções envelopes associadas com a amplitude de probabilidade dos sítios das respectivas subredes da estrutura hexagonal do Grafeno.

Bem como discutido em [36] o espectro linear não é apenas uma característica essencial que sustenta a descrição do transporte quântico no Grafeno pela equação de Dirac. Na região de energia positiva, os portadores são sempre elétrons e negativamente carregados. Nas energias negativas, se a banda de valência não está cheia, os seus estados desocupados se comportar como quase-partículas carregadas positivamente (buracos). Nota-se

que elétrons e buracos em Física da matéria condensada são normalmente descritos de forma independente pela equação de Schrödinger, que não são inter-relacionados. Em contrapartida, estados de elétrons e buracos no Grafeno são interligados, exibindo propriedades análogas a simetria de carga descritas em eletrodinâmica quântica [8]. Essa simetria é uma consequência da simetria do cristal do Grafeno, ou seja, a equivalência das duas subredes de carbono  $A$  e  $B$ . Portanto, quase-partículas do Grafeno têm de ser descrita por duas componentes de funções de onda, muito semelhantes a funções de onda spinor em eletrodinâmica quântica, mas o índice de "spin" de Grafeno especifica a subrede ao invés da conotação real de spin dos elétrons e refere-se ao pseudospin  $\sigma$ . Conseqüentemente, um elétron com energia  $E$  que se propaga no sentido positivo origina a partir do mesmo ramo do espectro eletrônico como o buraco com a propagação de energia  $-E$  na direção oposta. Isto produz uma importante consequência que os elétrons e buracos pertencentes a um mesmo ramo tem pseudo-spin na mesma direção, a qual é paralela ao momento para eletrons e antiparalelo para buracos. Este aspecto pode ser visto como uma quiralidade característica das quase-partículas em Grafeno. Em razão dessas quase-partículas de férmions de Dirac terem comportamento semelhante na eletrodinâmica quântica, o Grafeno torna possível a criação de um experimento de tunelamento semelhante ao analisado por Klein [57]. O diagrama esquemático de tal experiência é apresentado na Fig.(2.7).onde a anergia potencial tem a formato retangular e é apenas função e  $x$ .

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq D, \\ 0 & x > D \text{ e } x < 0, \end{cases} \quad (2.22)$$

A partir do Hamiltoniano da Eq.2.21, as equações para as duas componentes de spinor de Dirac  $\psi_{A,B}$  são dadas por

$$\begin{aligned} U\psi_A - i\hbar v_F(\partial_x - i\partial_y)\psi_B &= E\psi_A \\ U\psi_B - i\hbar v_F(\partial_x + i\partial_y)\psi_A &= E\psi_B \end{aligned} \quad (2.23)$$

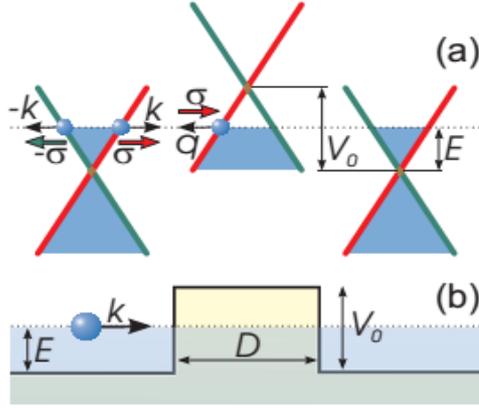


Figura 2.7: Diagrama esquemático do espectro das quase-partículas de Dirac (a) monocamada de Grafeno, (b) barreira de potencial de altura  $U_0$  e largura  $D$ . O nível de Fermi (linha pontilhada tracejada) está na banda de condução fora da barreira e dentro dela. As áreas de cor cheia indicam os estados ocupados [36].

Devido a invariância translacional ao longo da direção  $y$  as soluções dessas equações ficam da seguinte forma  $\psi_A(x, y) = \varphi_A(x)e^{ik_y y}$  e  $\psi_B(x, y) = \varphi_B(x)e^{ik_y y}$ . A equação diferencial de primeira ordem  $\varphi_A(x)$  e  $\varphi_B(x)$  pode ser desacoplada

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \varphi_A}{\partial x^2} + \left[ \frac{(E-V)^2}{\hbar^2 v_F^2} - k_y^2 \right] \varphi_A + \frac{1}{E-V} \frac{\partial V}{\partial x} \left( \frac{\partial}{\partial x} - k_y \right) \varphi_A &= 0 \\ \varphi_B &= -\frac{i\hbar v_F}{(E-V)} \left( \frac{\partial}{\partial x} - k_y \right) \varphi_A \end{aligned} \quad (2.24)$$

Assumindo um elétron incidente com onda propagante e ângulo  $\phi$  com respeito a direção  $x$  através da estrutura, temos as seguintes componentes  $\varphi_A$  e  $\varphi_B$  nas respectivas interfaces

$$\varphi_A(x) = \begin{cases} e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x} & x \leq 0 \\ a e^{iq_x x} + b e^{-iq_x x} & 0 < x \leq D \\ t e^{ik_x x} & x > D \end{cases}$$

$$\varphi_B(x) = \begin{cases} s(e^{ik_x x + i\phi} - r e^{-ik_x x - i\phi}) & x \leq 0 \\ s'(a e^{iq_x x + i\theta} - b e^{-iq_x x - i\theta}) & 0 < x \leq D \\ s t e^{ik_x x + i\phi} & x > D \end{cases}$$

onde  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  é o vetor de onda associado com a energia  $E$  (ou seja  $k = E/\hbar v_F$ ) fora da barreira  $k_x = k \cos \phi$ ,  $k_y = k \sin \phi$ ,  $q_x = \sqrt{(E - V_0)^2 / \hbar^2 v_F^2 - k_y^2}$ ,  $\theta = \tan^{-1}(k_y/q_x)$  é o ângulo de refração,  $s = \text{sgn}(E)$  e  $s' = \text{sgn}(E - V_0)$ . Assumindo a continuidade da função de onda e resolvendo em termos dos coeficientes  $a$ ,  $b$ ,  $t$  e  $r$  encontra-se as seguintes expressões para os coeficientes de transmissão e reflexão, respectivamente

$$t = \frac{2 \cos \phi \cos \theta e^{ik_x D}}{\cos(\phi + \theta) e^{-iq_x D} + \cos(\phi - \theta) e^{iq_x D} - 2iss' \sin(q_x D)}, \quad (2.25)$$

$$r = \frac{2ss'(\sin \phi - \sin \theta) \sin(q_x D) e^{i\phi}}{\cos(\phi + \theta) e^{-iq_x D} + \cos(\phi - \theta) e^{iq_x D} - 2iss' \sin(q_x D)}, \quad (2.26)$$

A probabilidade então é dada por  $T = |t|^2 = 1 - |r|^2$

$$T = \frac{\cos^2 \phi \cos^2 \theta}{\cos^2 \phi \cos^2 \theta + ss'(\sin \phi - \sin \theta)^2 \sin^2(q_x D)}. \quad (2.27)$$

Quando  $\phi = 0^\circ$ , temos que  $k_y = 0$ , dessa forma  $\theta = 0$  e  $T = 1$ . Isso significa que a barreira é perfeitamente transparente a partícula com incidência normal, esta característica para férmions de Dirac sem massa está relacionada com o paradoxo de Klein [57] em eletrodinâmica quântica. Isto pode ser entendido em termos de conservação de pseudospin. Com efeito, na ausência de pseudospin, um elétron se movendo para a direita pode ser espalhado apenas por um certo estado de elétrons em movimento ou estado de buraco de movedo para a esquerda. A correspondência entre estes estados de carga dentro e fora da barreira resultam no tunelamento perfeito. Além disso, a partir das Eqs.2.25 e 2.26 segue que a barreira se torna também transparente ( $T = 1$ ) sob a condição de ressonância  $q_x D = n\pi$ ,  $n = 0, \pm 1, \dots$ , isto conduz a dependência da direção no processo de tunelamento como mostrado na Fig.(2.7).

Devemos lembrar que, apesar do nome, o efeito túnel Klein não envolve o tunelamento como visto normalmente na mecânica quântica, uma vez que não depende de ondas evanescentes. Pois, é a conservação do pseudospin e a simetria elétron-buraco que são essenciais nesse processo. Esta transmissão perfeita para incidência normal não se trata

de uma ressonância. Esse efeito túnel perfeito pode ser entendido como uma conservação de pseudospin.

Apesar do tunelamento Klein tornar potenciais eletrostáticos estruturas transparentes aos portadores no Grafeno, existe a possibilidade de confinar elétrons (buracos) em poços (barreiras) de potencial, desde que estes possuam a componente  $k_y \neq 0$ . Na seção a seguir estudaremos uma importante característica ressonante presente no Grafeno: a ressonância de Fabry-Pérot.

## 2.4.2 Ressonância de Fabry-Pérot

Outro importante aspecto que vem sendo reportado ao Grafeno no processo de transporte através de estruturas quânticas é a ressonância de Fabry-Pérot (FP), que é uma propriedade natural da onda do elétron. Vários trabalhos tem apresentado resultados de tal ressonância para diferentes estruturas semi-infinitas tais como barreira simples, dupla barreiras [58, 59, 60]. Além de estruturas especiais como junções do tipo  $p - n$ ,  $p - n - p$  ou  $n - p - n$  podem ser produzidas [59, 62] em que o tunelamento Klein e a ressonância de Fabry-Pérot são observadas [23, 61, 63]. Nesses dispositivos a altura da barreira de potencial e a posição do nível de Fermi podem ser ajustado por meio da aplicação de um potencial de porta.

Vamos analisar a barreira de potencial apresentada na Fig.(2.7) (b) fazendo a largura  $D = W$ . Sob o ponto de vista da óptica física a barreira será tomada como a metade com índice de refração  $1 - V_0/E$ . Quando uma onda incidente atinge a barreira com ângulo incidência  $\theta$  ocorre separação em ondas transmitidas e onda refletidas, as ondas transmitidas dentro da barreira sofrem então, múltiplas reflexões nas duas extremidades internas à barreira desde  $x = 0$  e  $W$ , como mostrar a Fig.(2.8). Em analogia com ondas ópticas, a diferença do caminho óptico ao longo da barreira entre as ondas transmitidas  $t_1$  e  $t_2$  é dado por

$$\Delta L = (1 - V_0/E) (BC + CD) - BN, \quad (2.28)$$

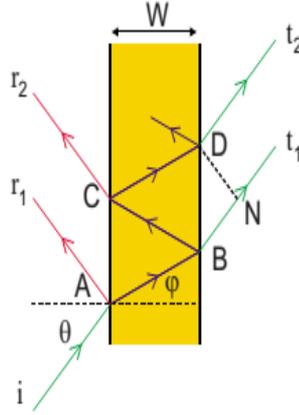


Figura 2.8: Esquema exibindo as múltiplas reflexões da onda transmitida dentro da barreira de potencial.

onde  $BC = CD = W/\cos \phi$  e  $BN = 2W \tan \phi \sin \theta$ . Usando  $\sin \theta = (1 - V_0/E) \sin \phi$ , obtêm-se

$$\Delta L = 2(1 - V_0/E)W \cos \phi. \quad (2.29)$$

A transmissão total é determinada por  $T = |t_1|^2 + |t_2|^2 + 2|t_1||t_2| \cos \delta$  que corresponde a diferença de fase  $\delta = k_1 \Delta L = 2k_1(1 - V_0/E)W \cos \phi$ . A transmissão é máxima quando  $|\delta| = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$ , e mínima quando  $|\delta| = \pi, 3\pi, \dots$ . Para obtenção da transmissão total, defini-se  $r$  e  $t$  como sendo as amplitudes de reflexão e transmissão fora da barreira, respectivamente,  $r'$  e  $t'$  como as amplitudes dentro da barreira. As diferentes combinações das ondas transmitidas através da barreira são

$$tt', tt'r'^2 e^{i\delta}, \dots, tt'r'^{2(n-1)} e^{i(n-1)\delta}, \dots, \quad (2.30)$$

e a amplitude de transmissão total

$$t_{tot} = tt'(1 - r'^2 e^{i\delta} + \dots + r'^{2(n-1)} e^{i(n-1)\delta} + \dots). \quad (2.31)$$

A probabilidade de transmissão  $T_{tot} = t_{tot}t_{tot}^*$  é

$$T_{tot} = 1/[1 + F \sin^2(\delta/2)] \quad (2.32)$$

onde  $F = 4R/(1 - R)^2 = ([1 - \cos(\theta - \phi)][1 + \cos(\theta + \phi)])/\cos^2 \theta \cos^2 \phi$ . Desse modo, podemos obter as energias em que as ressonâncias ocorrem, isto é, quando  $T = 1$

$$E = V_0 \pm \hbar v_F \sqrt{\Delta^2/\hbar^2 v_F^2 + (k_y^2 + n^2 \pi^2/d^2)}. \quad (2.33)$$

Na Fig.(2.9) são vistas três regiões distintas. Na região contida entre as linhas em vermelho os vetores de onda  $k_x$  e  $q_x$  são reais e as soluções dentro e fora da barreira são ondas propagantes e devido ao tunelamento Klein temos alta probabilidade de transmissão cuja transmissão máxima é dada pela Eq.2.33 representadas pelas linhas pontilhadas. Podemos ainda dividir esta região em duas partes:  $E > V_0$  e  $E < V_0$ . Para  $E > V_0$  encerram todos os máximos de elétrons livres no espectro  $E = V_0 \pm \hbar v_F k_y$  que são deslocados pela barreira de potencial.

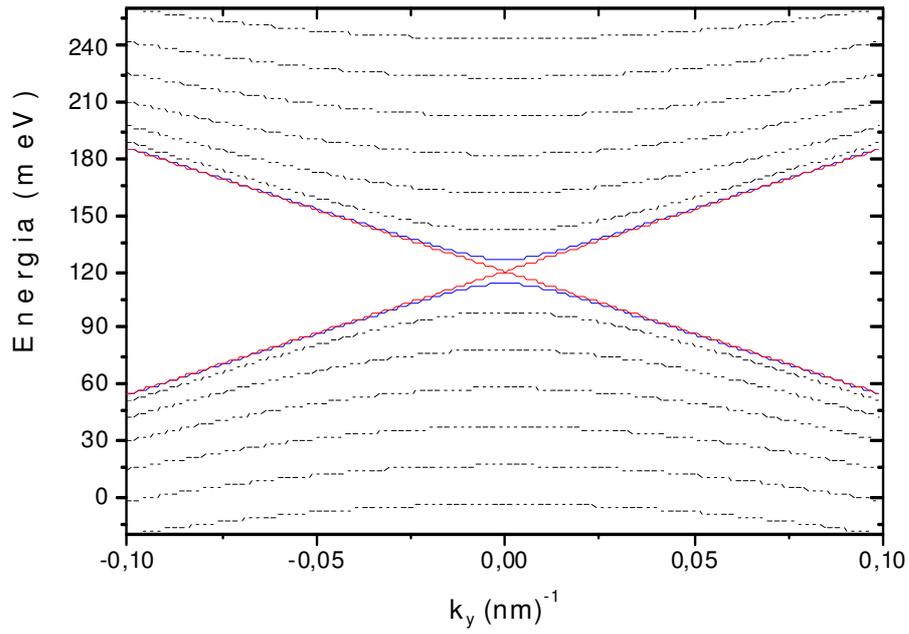


Figura 2.9: Relação de dispersão  $E(k_y)$  na presença de barreira de potencial. A curvas pontilhadas mostram a relação de dispersão analítica Eq.(2.33) para  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0.0 \text{ meV}$  (linha vermelha) e  $\Delta = 40 \text{ meV}$  (linha azul).

A Fig.(2.10) mostra o contorno da transmissão versus energia incidente  $E$  e vetor de onda  $k_y$  para  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 0 \text{ meV}$ . Podemos notar claramente a ressonância de Fabry-Pérot, cuja diferença principal correspondentes a resultados de elétrons tipo de Schrödinger reside na dependência do vetor de onda  $k_y$  e não apenas do vetor de onda  $k_x$ .

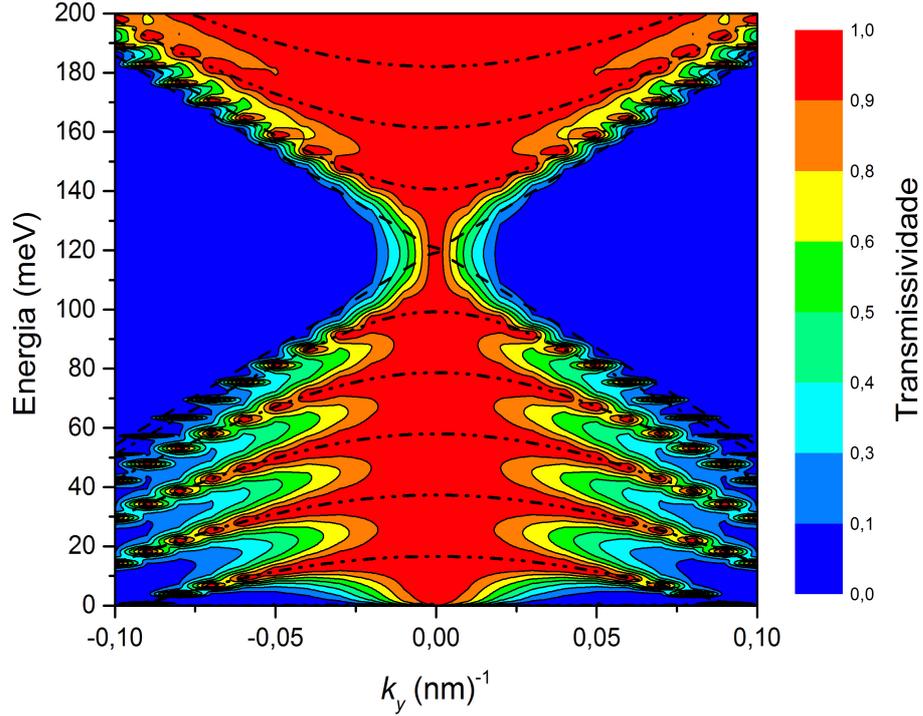


Figura 2.10: Gráfico de contorno da transmissividade versus energia incidente  $E$  e vetor de onda  $k_y$  para o sistema de barreira simples. As curvas em linha tracejada preta mostram a relação de dispersão analítica Eq.(2.33) com  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 0 \text{ meV}$ .

Para construir dispositivos de Grafeno suspenso: a amostra do Grafeno é depositada sobre o substrato de  $SiO_2$ , contatos metálicos são feitos no Grafeno e em seguida o substrato é corroído na região em baixo do Grafeno. Deste modo, o Grafeno fica suspenso sustentado tão somente pelos contatos metálicos. Como consequência da alta mobilidade, foi possível observar o efeito Hall quântico fracionário [19, 20]. O uso de gates superiores,

em conjunto com o gate do substrato, possibilitou o estudo de várias propriedades de junção em flocos de Grafeno. Com o top gate controlando localmente a densidade de carga no Grafeno é possível alternar regiões com densidades de carga diferentes que podem ser de mesmo tipo, ou de tipos diferentes, apresentando propriedades interessantes [61, 62, 64, 65].

A Fig.(2.11) exibe como produzir experimentalmente barreiras de potencial em Grafeno (junção do tipo  $n - p - n$ ). O perfil de potencial mostrado em *b*) deve-se às voltagens de porta inferior  $V_b$  e superior  $V_t$  aplicadas à folha de Grafeno. A voltagem  $V_b$  devida a camada de substrato  $n++Si$  define a densidade  $n_1$  de portadores na região 1, enquanto a voltagem de porta  $V_t$  define outra densidade  $n_2$  na região 2.

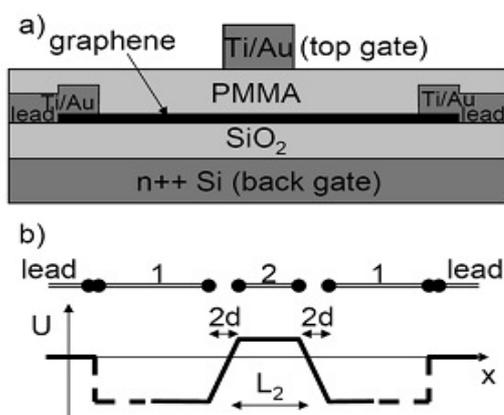


Figura 2.11: Junção  $n - p - n$  em grafeno(a) Visão da seção transversal do dispositivo. (b) Perfil do potencial de elétrons no Grafeno produzido pelo dispositivo mostrado em (a) A combinação de uma tensão positiva back gate e uma tensão negativa top gate produz regiões [64].

### 2.4.3 Estados Confinados em Grafeno

Estudaremos, nessa seção, o caso de um poço de potencial simples em Grafeno. Muito embora, o tunelamento Klein tornar potenciais eletrostáticos estruturas transparentes aos portadores no Grafeno, existe a possibilidade de confinar elétrons (buracos) em poços (barreiras) de potencial, desde que estes possuam a componente  $k_y \neq 0$ . Nos interessamos em investigar o comportamento de estados confinados nesses poços bem como a forma do espectro de energia por eles formados. Na verdade, pode-se dizer que são tratados como estados quase-confinados, já que os portadores só estão confinados em uma única direção.

Objetivamos nessa seção desenvolver um método para resolver a Eq.2.18. Consideremos o Grafeno como uma estrutura cristalina perfeita, sem nenhuma impureza ou defeito. Dessa forma, incluiremos dois termos ao Hamiltoniano 2.18, de maneira que a equação assume a forma:

$$(v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + mv_F^2\sigma_z + U)\Psi = E\Psi, \quad (2.34)$$

o segundo termo da Equação é um termo de massa, responsável pela introdução de um gap no espectro de energia  $\Delta$ , que pode surgir de uma interação com o substrato [24], ou acoplamento spin-órbita [34], enquanto um terceiro representa o efeito de um potencial eletrostático externo, cujo único efeito é o deslocamento do nível de energia de Fermi no sistema.

A Eq.2.34, pode ser reescrita de seguinte forma

$$\hbar v_F \left( \frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_B = i (E - U - mv_F^2) \psi_A, \quad (2.35)$$

$$\hbar v_F \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi_A = i (E - U - mv_F^2) \psi_B, \quad (2.36)$$

Para prosseguirmos precisamos de alguma informação sobre o potencial. Então, a partir de agora consideremos um potencial unidimensional  $U = U(x)$ . Dessa forma,

como  $[\mathbf{H}, \mathbf{p}_y] = 0$  podemos assumir  $\psi_{A(B)}(x, y) = e^{ik_y y} \phi_{A(B)}(x)$ . Assim, o par de equações diferenciais parciais acima torna-se o seguinte par de equações ordinárias acopladas:

$$\frac{d\phi_B}{d\xi} + \beta\phi_B = i(\varepsilon - u - \Delta)\phi_A, \quad (2.37)$$

$$\frac{d\phi_A}{d\xi} - \beta\phi_B = i(\varepsilon - u - \Delta)\phi_B, \quad (2.38)$$

onde  $\xi = x/L$ ,  $\beta = k_y L$ ,  $\varepsilon \equiv EL/\hbar v_F$ ,  $u(x) = U(x)L/\hbar v_F$  e o gap normalizado  $\Delta \equiv mv_F L/\hbar$ . As equações acima podem ser facilmente desacopladas. Fazendo isso para  $\phi_A$  obtêm-se que

$$\frac{d^2\phi_A}{d\xi^2} + \frac{u'}{(\varepsilon - u + \Delta)} \frac{d\phi_A}{d\xi} - \left[ \beta^2 + \beta \frac{u'}{(\varepsilon - u + \Delta)} - (\varepsilon - u)^2 + \Delta^2 \right] \phi_A = 0, \quad (2.39)$$

onde  $u'$  é a derivada do potencial. Para um poço de potencial quadrado estas derivadas são caracterizadas como funções delta de Dirac.

O caráter das soluções dependem dos valores de  $\beta$ , que determina o sinal da última parte do termo do lado esquerdo da Eq.2.39. As soluções podem ser de três tipos: (i) ondas viajantes, que descrevem elétrons livres, buracos livres, bem como estados mistos que ocorrem devido o tunelamento Klein de elétrons para buracos fora da região do poço de potencial; (ii) ondas estacionárias, o que para férmions sem massa surgem apenas para valores finitos de  $\beta$ , acima de um corte de energia dependente e decai exponencialmente na região da barreira; e (iii) ondas de tunelamento, que são oscilatórias fora do poço enquanto que no seu interior são combinações de exponenciais com expoentes reais; isto corresponde aos estados de buracos que se submetem tunelamento comum em todo o poço de potencial. Isto suprime o tunelamento de Klein uma vez que depende da conversão elétron-buraco na interface.

Nosso interesse está focado na solução do tipo (ii) que descrevem estados de elétrons confinados no poço e se propagando ao longo deste. Suas energias são delimitadas na região pela curva  $E = [(\hbar v_F k_y)^2 + m^2 v_F^4]^{1/2} + U_0$  e  $E = [(\hbar v_F k_y)^2 + m^2 v_F^4]^{1/2}$ . Para

vetores de onda menores o tunelamento através das barreiras introduz um corte no espectro para  $E < - [(\hbar v_F k_y)^2 + m^2 v_F^4]^{1/2} + U_0$ . Para estados confinados, as componentes de spinor decaem exponencialmente na região  $\xi < -1/2$ . Assim, as componentes das funções envelopes nos sítios  $A$  e  $B$  podem ser escritas como  $\phi_A(\xi) = A_1 e^{\alpha\xi}$  e  $\phi_B(\xi) = i f_- A_1 e^{\alpha\xi}$ , onde  $f_- = (\beta - \alpha) / (\epsilon - u_0 + \Delta)$  e a constante de decaimento  $\alpha = [\beta^2 - (\epsilon - u_0)^2 + \Delta^2]^{1/2}$  e  $u_0 = U_0 L / \hbar v_F$ .

As soluções de  $\phi_A$  e  $\phi_B$  para  $|\xi| \leq 1/2$  são do tipo

$$\phi_A(\xi) = C_2 \cos(\kappa\xi) + D_2 \sin(\kappa\xi),$$

Encontrado  $\phi_A^j$ , temos da Eq.2.37 que

$$\phi_B(\xi) = [i / (\epsilon + \Delta)] \{C_2 [\beta \cos(\kappa\xi) + \kappa \sin(\kappa\xi)] + D_2 [\beta \sin(\kappa\xi) - \kappa \cos(\kappa\xi)]\}, \quad (2.40)$$

onde  $\kappa^2 = \epsilon^2 - \beta^2 - \Delta^2$ . Para  $\xi > 1/2$  as soluções são similares a  $\xi < -1/2$ , porém, com expoente negativo.

$$\phi_A(\xi) = A_3 e^{-\alpha\xi}. \quad (2.41)$$

$$\phi_B(\xi) = i f_+ A_1 e^{-\alpha\xi},$$

onde  $f_+ = (\beta + \alpha) / (\epsilon - u_0 + \Delta)$ . Deve-se ressaltar, que em contraste com casos não relativísticos, a componente de spinor não são nem pares nem ímpares apesar do potencial ser simétrico. Contudo, esta simetria, é refletida na densidade de probabilidade  $\rho = \Psi^\dagger \Psi = \phi_A(\xi)^\dagger \phi_A(\xi) + \phi_B(\xi)^\dagger \phi_B(\xi)$  [9] que é uma função par. Aplicando a condição de continuidade de  $\phi_A$  e  $\phi_B$  em  $\xi = -1/2$  e  $\xi = 1/2$ , obtêm-se a seguinte equação transcendental para os autovalores de energia:

$$S_-(\epsilon, \beta, +1) S_+(\epsilon, \beta, +1) + S_-(\epsilon, \beta, -1) S_+(\epsilon, \beta, -1) = 0 \quad (2.42)$$

onde  $S_\pm(\epsilon, \beta, s) = \beta - f_\pm(\epsilon + \Delta) - s\kappa\delta^{\mp s}$  e  $\delta = \tan(\kappa/2)$ .

Consideremos o caso de um poço simples simétrico de largura  $L_0$  e profundidade  $U_0$ , como mostrado na Fig.(2.12). A Eq.2.42 é resolvida numericamente e seu resultado é mostrado na Fig.(2.13).

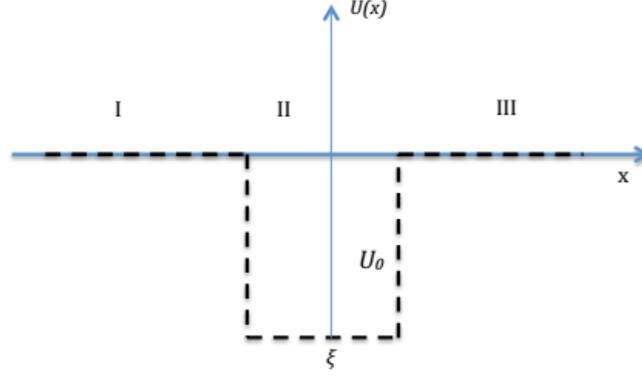


Figura 2.12: Representação esquemática de um poço simples simétrico de largura  $L_0$  e profundidade  $U_0$ .

A Fig.(3.3) mostra as energias correspondentes aos estados eletrônicos confinados em um poço simétrico de potencial no Grafeno como função da componente  $k_y$  do vetor de onda. Onde  $U_0 = 50 \text{ meV}$  e  $L_0 = 200 \text{ nm}$ . e  $\Delta = 0 \text{ meV}$ . As linhas contínuas delimitam o limite entre estados propagantes (elétrons para  $E > \hbar k_y + U_0$  e buracos para  $E < -\hbar k_y + U_0$ ) que se propagam no sistema por meio do mecanismo do tunelamento Klein e, estados ligados de elétrons. Pode-se observar que para um dado par de parâmetros  $(U_0, L_0)$ , o número de ramos, bem como o espaçamento entre eles, depende do valor do vetor de onda  $k_y$ . Para pequenos valores existe um cut-off (região I) que surge devido a conversão de elétrons confinados na região do poço em buracos livres na região da barreira. Para valores grandes de  $k_y$  os ramos são aproximados por

$$E = \hbar v_F \left[ \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 + k_y^2 \right]^{1/2}, \quad (2.43)$$

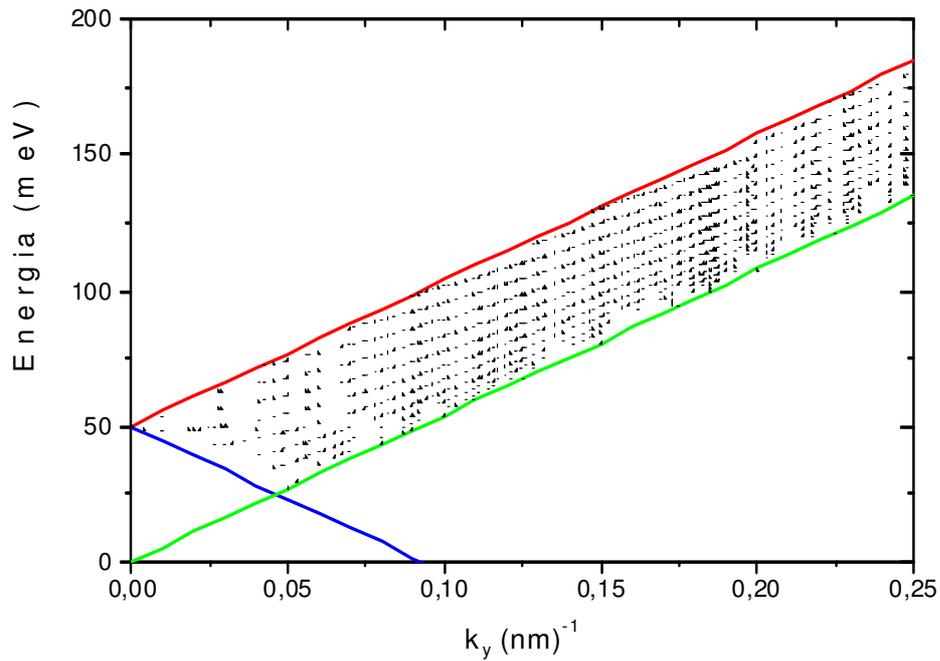


Figura 2.13: Espectro dos estados confinados em um poço simétrico de potencial de largura  $L_0 = 200 \text{ nm}$  e profundidade  $U_0 = 50 \text{ meV}$ .

onde  $n$  é um número inteiro.

No Capítulo a seguir, será feita a descrição da solução do Hamiltoniano de Dirac, bem como o desenvolvimento do método da matriz de transferência aplicados aos sistemas de simples e dupla barreira em vistas à obtenção das soluções analíticas dos coeficientes de transmissão para posterior análise dos resultados numéricos presentes neste trabalho.

## Capítulo 3

# Transmissividade, Condutância e Densidade de Corrente em Sistemas de Simples e Dupla Barreira de Grafeno.

### 3.1 Tunelamento ressonante

Neste capítulo faremos uma descrição do processo de tunelamento no Grafeno em vistas ao método da matriz de transferência para a obtenção do coeficiente de transmissão.

A transmissividade de uma partícula, através de uma única barreira de potencial, de altura  $V_0$ , como mostrada na Fig.(3.2), constitui-se num dos problemas clássicos, de interesse acadêmico, em cursos básico de mecânica quântica. Sua solução serve para introduzir o conceito do fenômeno de tunelamento, que descreve a possibilidade dessa partícula atravessar uma região classicamente proibida, isto é, uma situação onde a energia total da partícula é menor do que a energia potencial da região da qual emerge. O coeficiente de transmissão, ou transmissividade, é uma função da energia da partícula ,

dependendo fortemente da espessura da barreira.

Diferentemente deste, o sistema de dupla barreira, apresenta um mecanismo de transmissão que o torna mais eficiente do que o primeiro e, deste modo, mais atraente como base para aplicações tecnológicas. De fato, como veremos mais adiante, a presença de níveis localizados,  $E_1, E_2, \dots$ , na região do poço entre as barreiras, introduz picos na curva da transmissividade para certos valores da energia, que são chamados de ressonância de transmissão. No limite em que a espessura das barreiras tornam-se infinita, a posição desses picos ocorrem nas energias dos estados ligados  $E_1, E_2, \dots$ , uma situação que nos leva a um resultado nulo para a transmissividade através de uma única barreira.

Em ambos os casos que iremos estudar, o cálculo da transmissividade é feito, usando o seguinte procedimento:

(a) resolve-se, inicialmente o Hamiltoniano de Dirac em cada região de potencial constante considerando a invariância translacional na direção  $y$  obtém-se as componentes das funções envelopes da forma  $\Psi(x, y)$

(b) em seguida, escreve-se a função de onda em cada região, como combinação linear dessas funções envelopes

(c) usa-se a condição de continuidade 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, sem nenhuma estrutura de bandas. O cálculo mais geral para a matriz de transferência será mostrado nas seções a seguir, usando qualitativamente o mesmo procedimento aqui introduzido.

## 3.2 Solução do Hamiltoniano de Dirac

O primeiro procedimento básico para a obtenção da matriz de transferência, é resolver a equação de férmions de Dirac em cada região de potencial constante, para um valor fixo de energia  $E$ , cujas soluções são ondas planas, e em seguida, escreve-se a função de onda em cada região como combinação linear dessas ondas planas. A equação então é dada por:

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y) \quad (3.1)$$

onde  $H$  é o Hamiltoniano dado pela Eq.2.20 e  $\Psi(x, y)$  são as funções de onda com duas componentes devido as duas sub-redes  $A$  e  $B$ . Podemos escrever  $\Psi(x, y)$  da seguinte forma:

$$\Psi(x, y) = \boldsymbol{\psi}(k, x)e^{ik_y y}. \quad (3.2)$$

devido a invariância translacional na direção  $y$ ,  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ .

A Eq.3.1 pode ainda ser escrita como :

$$(H - E\mathbf{I})\boldsymbol{\psi}(k, x) = 0, \quad (3.3)$$

que tem solução quando

$$\det(H - E\mathbf{I}) = 0, \quad (3.4)$$

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} \boldsymbol{\psi}(k, x) = E\boldsymbol{\psi}(k, x), \quad (3.5)$$

agrupando os termos e resolvendo o sistema, obtemos a seguinte solução para os autovalores:

$$\psi_k(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( s \sqrt{\frac{1}{|E| - s\Delta}} e^{i\phi} \right) e^{i(k_x x + k_y y)}, \quad (3.6)$$

onde  $s = \text{sgn}(E)$  e  $\phi$  o ângulo de incidência medido no plano  $xy$ .

As soluções da Eq.3.4 nos fornece a relação de dispersão

$$E_k = \pm \sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v_F^2 k^2}. \quad (3.7)$$

onde  $k^2 = (k_x^2 + k_y^2)$ .

No esquema de cálculo para a obtenção da matriz de transferência, o parâmetro  $q_x$  é uma quantidade importante para a construção das funções de onda em cada região do sistema. Dessa forma reservamos a próxima subseção para uma análise detalhada da natureza de  $q_x$  no *bulk*, cujas informações teóricas nos serão úteis para o cálculo numérico da transmissividade.

### 3.2.1 Natureza das soluções de $q_x$

O esquema de cálculo para a obtenção da matriz de transferência, requer, como vimos anteriormente, expressar  $q_x$  em termos de  $E$ ,  $k$  e  $\Delta$ . Para isto, usando a Eq.3.7

$$q_x = \pm \sqrt{\left(\frac{(V_0 - E)^2 - \Delta^2}{\hbar^2 v_F^2}\right) - k_y^2}. \quad (3.8)$$

dividindo todo o espectro de energia em três regiões (*i*), (*ii*).e (*iii*) dispostos na Tab.III.1.

Para cada região considerada,  $q_x$  tem as seguintes soluções:

Tabela III.1: Natureza das soluções de  $q_x$

Região	Energia	$q_x$
<i>i</i>	$E \geq V_0 + \Delta$	real (modo propagante)
<i>ii</i>	$V_0 - \Delta \leq E \leq V_0 + \Delta$	complexo (modo evanescente)
<i>iii</i>	$E \leq V_0 - \Delta$	real (modo propagante)

Nesse caso, os valores de  $q_x$  são sempre reais na região do poço e nem sempre imaginário na região a barreira, e dependem das magnitudes de  $k_x$ ,  $k_y$  e  $E$ , de fato, fixando-se

$k_x, k_y, \phi$  e  $E$  na Eq.3.7 e impondo-se as condições necessárias para termos soluções reais ou complexas, encontramos para quais intervalos de energia essas condições se verificam. Assim procedendo, as condições mencionadas acima, podem ser representadas por duas superfícies de energias críticas no plano  $xy$  ( $E_{c1}$  e  $E_{c2}$ ) assim

$$E_{c_{1,2}} = V_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + \hbar^2 v_F^2 k^2}, \quad (3.9)$$

onde  $k^2 = (k_x^2 + k_y^2)$ .

Com o objetivo de ilustrar as energias críticas definidas anteriormente, mostramos na Fig.(3.1), os cortes dessas superfícies no plano  $k_x = 0$  para o Grafeno, com  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 40 \text{ meV}$ .

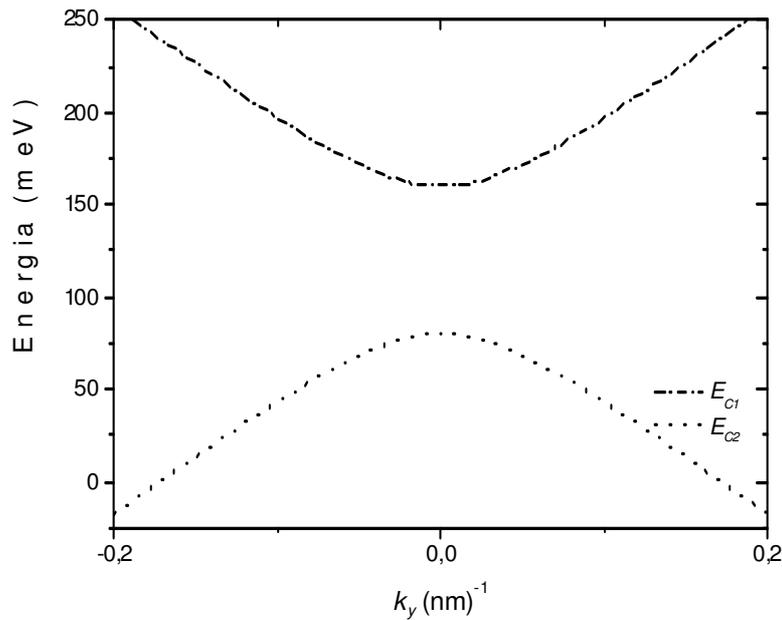


Figura 3.1: Solução da Eq.3.9 Relação de dispersão para o sistema de barreira simples com  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 40 \text{ meV}$ . com as energias críticas  $E_{C1}$  e  $E_{C2}$ .

### 3.3 Método da Matriz de Transferência

Nesta seção, introduziremos o método da matriz de transferência para um sistema de dupla barreira Fig.(3.2), usando o modelo simples de uma banda, seguindo o procedimento descrito nas três etapas discutidas anteriormente no início do capítulo.

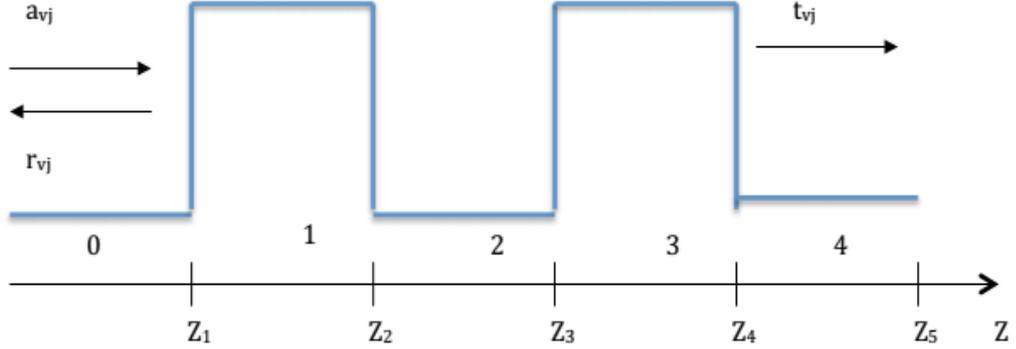


Figura 3.2: Representação esquemática do sistema de dupla barreira, mostrando as posições de interface,  $z_j$  entre as regiões  $j - 1$  e  $j$  para a construção da matriz de transferência. Os símbolos  $a_{vj}$ ,  $r_{vj}$  e  $t_{vj}$  representam os coeficientes das combinações lineares das funções no bulk, na região de incidência  $j = 0$  ( $a_{vj}$ ,  $r_{vj}$ ) e de transmissão  $j = 4$  ( $t_{vj}$ ) para uma partícula com energia  $E$ .

A partir das Equações obtidas anteriormente, a função de onda em cada região pode ser escrita como combinação linear das funções envelopes do *bulk* do tipo  $q_x(+)$  com ondas propagantes e evanescentes  $q_x(-)$  para valores fixos da energia,  $E$ , e dos vetores de onda no plano  $k_x$  e  $k_y$ . Sendo assim, fazendo uso das Eqs.3.1, 3.3, 3.6, 3.7 as funções de onda nas regiões  $j = 0, 1, 2, 3$  e  $4$  são

$$\begin{aligned}
\psi_0(x, y) &= \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s\alpha e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s\alpha e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(k_x x - k_y y)}, \\
\psi_1(x, y) &= \frac{b_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s'\beta e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{b_2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s'\beta e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-i(q_x x - k_y y)}, \\
\psi_2(x, y) &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s\alpha e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s\alpha e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(k_x x - k_y y)}, \\
\psi_3(x, y) &= \frac{d_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s'\beta e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{d_2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s'\beta e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-i(q_x x - k_y y)}, \\
\psi_4(x, y) &= \frac{t_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s\alpha e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{t_2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s\alpha e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(k_x x + k_y y)}
\end{aligned} \tag{3.10}$$

onde  $\alpha = \sqrt{\frac{|E| - s\Delta}{|E| + s\Delta}}$ ,  $\beta = \sqrt{\frac{|E - V_0| - s'\Delta}{|E - V_0| + s'\Delta}}$ ,  $k_x = k \cos \phi$  e  $k_y = k \sin \phi$  são as componentes do vetor de onda perpendicular e paralelo fora da barreira,

$$k = (E^2 - \Delta^2)^{1/2} / \hbar v_F, \tag{3.11}$$

$$q_x = (k'^2 - k_y^2)^{1/2}, \tag{3.12}$$

são os vetores de onda na região do poço e da barreira, respectivamente;  $s = \text{sgn}(E)$  e  $s' = \text{sgn}(E - V_0)$ ,  $\phi$  é o ângulo de incidência, e  $\theta = \arctan(k_y/q_x)$  é o ângulo de refração,  $k' = [(V_0 - E)^2 - \Delta^2]^{1/2} / \hbar v_F$ . Os sinais  $ss' = \pm 1$  distinguem elétrons e buracos de condução nas respectivas regiões de potencial constante.

Uma vez obtida a função de onda em cada região como combinação linear das soluções da função envelope, o próximo passo é determinar a matriz de transferência para o cálculo da transmissividade. Isso é feito com a ajuda das condições de contorno em cada interface, que asseguram tanto a conservação da densidade de probabilidade, como a densidade de corrente. Assim sendo, aplicando-se a condição de continuidade à interface  $z = z_1$

obtêm-se o seguinte sistema de equações lineares

$$\begin{aligned} a + r &= b_1 + b_2 \\ a\alpha s e^{i\phi} - r\alpha s e^{-i\phi} &= b_1\beta s' e^{i\theta} - b_2\beta s' e^{-i\theta} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Este sistema ode ser escrito na forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \alpha s e^{i\phi} & -\alpha s e^{-i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \beta s' e^{i\theta} & -\beta s' e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

ou

$$M_0 \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

onde  $M_0$  e  $M_1$  são respectivamente, as matrizes de casamento da região  $j = 0$  e  $j = 1$ . Multiplicando-se ambos os membros da Eq.3.15 pela matriz inversa de  $M_1$ ,  $M_1^{-1}$ , obtém-se

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = M_1^{-1} M_0 \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

que relaciona os coeficientes  $(a, r)$  da região 0 com os coeficientes  $(c, d)$  da região 1. Aplicando-se o mesmo procedimento para a interface  $z = z_2$ , e usando o resultado anterior obtém-se

$$M_1 P_1 \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

onde

$$P_1 = \begin{pmatrix} e^{ik_1 L_{b1}} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 L_{b1}} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

é a matriz de propagação na região  $j = 1$  que faz a correção de fase das funções de onda entre as interfaces  $z_1$  e  $z_2$ , na região de largura  $L_{b1} = z_2 - z_1$ . Novamente, multiplicando-se ambos os membros da Eq.3.17 por  $M_2^{-1}$ , para isolar os coeficientes  $c_1$  e  $c_2$ , e usando a

Eq.3.16, obtem-se

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = M_2^{-1} (M_1 P_1 M_1^{-1}) M_0 \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

que relaciona os coeficientes da região  $j = 0$  com os da região  $j = 2$ .

Aplicando sucessivamente as condições de contorno nas interfaces  $z = z_3$  e  $z = z_4$ , e usando o mesmo procedimento acima descrito para isolar os coeficientes da onda em cada região, relacionando-os com aqueles da onda incidente obtem-se, finalmente,

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = M_4^{-1} (M_3 P_3 M_3^{-1}) (M_2 P_2 M_2^{-1}) (M_1 P_1 M_1^{-1}) M_0 \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

que conecta os coeficientes da onda transmitida na região  $j = 4$ , com os coeficientes da onda incidente na região  $j = 0$ . Desta forma, podemos escrever

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

onde:

$$T = M_4^{-1} (M_3 P_3 M_3^{-1}) (M_2 P_2 M_2^{-1}) (M_1 P_1 M_1^{-1}) M_0 \quad (3.22)$$

é a chamada matriz de transferência para o sistema de dupla barreira, que contém todas as informações da estrutura do potencial, sendo uma função contínua da energia.

Os coeficientes  $t_1$  e  $r$  podem ser calculados facilmente, reescrevendo a Eq.3.22 numa forma mais conveniente

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Considerando-se que a partícula se propaga inicialmente no sentido positivo do eixo- $z$ , vê-se que o coeficiente  $t_2$  se anula. De fato, uma vez que não há partícula refletida na região  $j = 4$  (saída), devido às condições iniciais do movimento adotadas, podemos tomar

$t_2 = 0$ . Assim, resolvendo-se o sistema indicado na Eq.3.23 para  $r$  e  $t_1$ , em função do coeficiente da onda incidente  $a$ , encontra-se

$$R = \left| \frac{r}{a} \right|^2 \quad (3.24)$$

$$T = \left| \frac{t_1}{a} \right|^2 \quad (3.25)$$

### 3.4 Cálculo do Coeficiente de Transmissão

O calcular os coeficientes de transmissão e reflexão, introduzimos na densidade de corrente  $J$  em nosso sistema.

$$\mathbf{J} = \pm i \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi \quad (3.26)$$

onde  $\psi$  representa  $\psi^{in} = \psi_{(1,n)}^+(x, y)$ ,  $\psi^{ref} = r\psi_{(1,n)}^-(x, y)$  e  $\psi^{tr} = t\psi_{(5,n)}^+(x, y)$ . Explicitamente, as componentes da densidade de corrente incidente, refletida e transmitida são

$$j_x^{in} = \pm i(x_1 + x_1^*) = \pm 2is_1 \frac{k_{x1}}{\sqrt{k_{x1}^2 + k_y^2}} \quad (3.27)$$

$$j_x^{ref} = \mp ir^*r(x_1 + x_1^*) = \mp 2ir^*rs_1 \frac{k_{x1}}{\sqrt{k_{x1}^2 + k_y^2}} \quad (3.28)$$

$$j_x^{tr} = \pm it^*t(x_5 + x_5^*) = \pm 2it^*ts_5 \frac{k_{x5}}{\sqrt{k_{x5}^2 + k_y^2}} \quad (3.29)$$

representam as densidades de probabilidade e de corrente de probabilidade, respectivamente.

Os coeficientes de transmissão e reflexão, são expressos da seguinte forma:

$$T = \frac{|j_x^{tr}|}{|j_x^{in}|} = \left| \frac{k_{x5}}{k_{x1}} \right| \frac{\sqrt{k_{x1}^2 + k_y^2}}{\sqrt{k_{x5}^2 + k_y^2}} |t|^2 = |K| |t|^2 \quad (3.30)$$

No nosso caso, devido a simetria de configuração do potencial nas regiões de incidência e transmissão teremos  $|K| = 1$ , isto é,  $k_{x1} = k_{x5}$ , e dessa forma  $T = |t|^2$ . Da Eq.3.23 temos que a probabilidade de transmissão pode ser escrita como

$$t = \frac{1}{|T_{22}|}. \quad (3.31)$$

### 3.4.1 Aplicação no Sistema de Barreira Simples

Na Fig.3.3 mostramos um potencial tipo barreira simples de largura  $L_B$ , onde ilustramos os coeficientes das ondas em cada região. Resolvendo a Equação de Dirac em cada região para energias menores que a altura do potencial ( $E < V_0$ ), determina-se as respectivas funções de onda em cada uma das regiões da estrutura

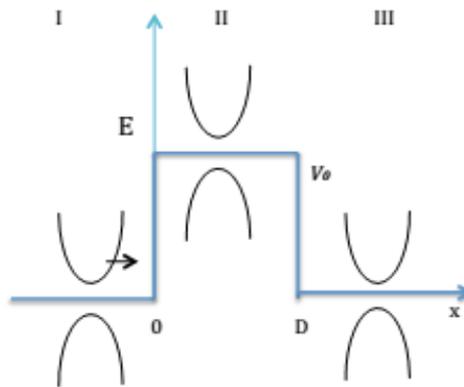


Figura 3.3: Representação esquemática do sistema de barreira de potencial 2D em camada única de grafeno com gap de energia.

$$\begin{aligned}
\psi_I(x, y) &= \frac{a}{\sqrt{2}} \left( s \sqrt{\frac{1}{|E-s\Delta|}} e^{i\phi} \right) e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2}} \left( -s \sqrt{\frac{1}{|E+s\Delta|}} e^{-i\phi} \right) e^{-i(k_x x - k_y y)}, \quad (3.32) \\
\psi_{II}(x, y) &= \frac{b}{\sqrt{2}} \left( s' \sqrt{\frac{1}{|E-V_0|-s'\Delta}} e^{i\theta} \right) e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{c}{\sqrt{2}} \left( -s' \sqrt{\frac{1}{|E-V_0|+s'\Delta}} e^{-i\theta} \right) e^{-i(q_x x - k_y y)}, \\
\psi_{III}(x, y) &= \frac{t_1}{\sqrt{2}} \left( s \sqrt{\frac{1}{|E-s\Delta|}} e^{i\phi} \right) e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{t_2}{\sqrt{2}} \left( s \sqrt{\frac{1}{|E+s\Delta|}} e^{-i\phi} \right) e^{-i(k_x x + k_y y)}.
\end{aligned}$$

Vamos considerar que a partícula incide da esquerda para a direita, não tendo, portanto, nenhuma onda refletida na região de transmissão ( $t_2 = 0$ ).

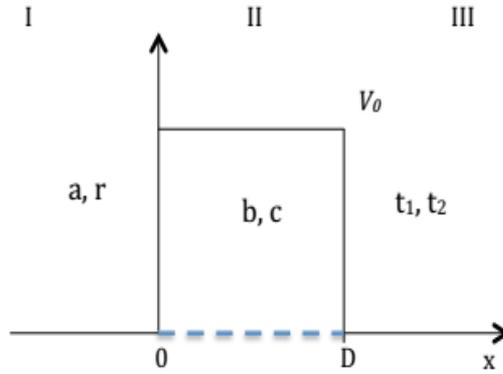


Figura 3.4: Representação esquemática do sistema de barreira simples de potencial, mostrando os coeficientes da combinação linear de ondas planas, em cada região.

Seguindo os mesmos critérios feitos anteriormente para o sistema de dupla barreira, porém, agora restringindo a região que encerra o sistema de barreira simples e sendo a condição de continuidade da função de onda  $\psi(x, y)$  em cada interface obtém-se a equação matricial de modo análoga a Eq.3.21 onde  $T$  para o sistema de barreira simples é dada por

$$T = (M_1 P_1 M_1^{-1}) M_0 \quad (3.33)$$

Na região III o coeficiente  $t_2 = 0$  uma vez que nessa região não há nada que reproduza

reflexão, desse modo a Eq.3.33 fica

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

onde  $T$  é a matriz de transferência, que relaciona os coeficientes de saída  $(t_1, t_2)$  com o coeficientes de entrada  $(a, r)$ , cujos elementos são definidos por:

$$T_{22} = \frac{e^{ik_x d}}{4\alpha\beta ss' \cos \phi \cos \theta} (\alpha\beta ss' ((2 \cos(\phi - \theta) e^{iq_x d} + 2 \cos(\phi + \theta) e^{-iq_x d}) - 2i \sin(q_x d) (\alpha^2 + \beta^2))), \quad (3.35)$$

$$T_{21} = \frac{e^{-ik_x d}}{4\alpha\beta ss' \cos \phi \cos \theta} (2i \sin(q_x d) (-\alpha\beta ss' 2i \sin(\theta) e^{-i\phi} - \alpha^2 e^{-2i\phi} + \beta^2)), \quad (3.36)$$

onde  $\alpha = \sqrt{\frac{|E| - s\Delta}{|E| + s\Delta}}$  e  $\beta = \sqrt{\frac{|E - V_0| - s'\Delta}{|E - V_0| + s'\Delta}}$ , respectivamente.  $T_{22}$  pode ainda ser reescrito por

$$T_{22} = \frac{2ss' e^{-ikd} \cos \phi \cos \theta}{ss' [(\cos(\phi - \theta) e^{iq_x d} + \cos(\phi + \theta) e^{-iq_x d}) - iF \sin(q_x d)],} \quad (3.37)$$

onde  $F = 2[E|V_0 - E| - ss'\Delta^2] / \hbar^2 v_F^2 k k'$ .

$$T_{11} = T_{22}^* \quad (3.38)$$

$$T_{12} = T_{21}^* \quad (3.39)$$

A partir dessas relações, é fácil mostrar que  $\det(T) = 1$ .

Aqui temos dois diferentes casos: O tunelamento Klein ( $E < V_0$ ) e o movimento clássico ( $E > V_0$ ), que correspondem aos sinais  $ss' = -1$  e  $ss' = 1$ , respectivamente. Quando consideramos a influência de  $k_y$  que é uma quantidade conservada podemos verificar que a transmissividade pode ser dividida em modo propagante ou evanescente, para o modo propagante  $k'^2 > k_y^2$  e quando  $k'^2 < k_y^2$  que corresponde ao modo evanescente usando a expressão analítica da Eq.3.35 a transmissividade pode ser escrita como

$$T_p(E) = \frac{k_x^2 q_x^2}{k_x^2 q_x^2 \cos^2(q_x d) + \left(\frac{E}{2} k k' - s s' k_y^2\right)^2 \sin^2(q_x d)}, \quad (3.40)$$

e

$$T_e(E) = \frac{k_x^2 \kappa^2}{k_x^2 \kappa^2 \cosh^2(q_x d) + \left(\frac{E}{2} k k' - s s' k_y^2\right)^2 \sinh^2(\kappa d)}. \quad (3.41)$$

onde,  $\kappa = (k_y^2 - k'^2)^{1/2}$ ,  $\cosh(x) = (e^x + e^{-x})/2$  e  $\sinh(x) = (e^x - e^{-x})/2$

Quando  $e^{\kappa d} \gg 1$ ,  $T_e$  decai exponencialmente da seguinte forma:

$$T_e(E) = \frac{4k_x^2 \kappa^2}{k_x^2 \kappa^2 + \left(\frac{E}{2} k k' - s s' k_y^2\right)^2} e^{-2\kappa d}. \quad (3.42)$$

Podemos definir ainda um ângulo crítico de incidência  $\phi_c$  separando os modos propagante e evanescente que são determinados pela condição  $k'^2 = k_y^2$  e é escrito por

$$\phi_c = \sin^{-1} \left( \left| \frac{(V_0 - E)^2 - \Delta^2}{(E^2 - \Delta^2)} \right|^{1/2} \right). \quad (3.43)$$

Quando o ângulo de incidência  $\phi < \phi_c$  os elétrons podem tunelar através da barreira de potencial, e com  $\phi > \phi_c$  os elétrons decaem exponencialmente na barreira de potencial. Quando os elétrons estão em modo propagante, a probabilidade de transmissão depende periodicamente da energia incidente. Enquanto que, quando o elétron está em modo evanescente, a probabilidade de transmissão se aproxima de zero rapidamente. Devido ao modo evanescente há um gap de transmissão determinado pela condição  $q_x^2 < 0$ . Na Fig.(3.5) temos a ilustração de tal condição para o sistema de barreira simples com  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 20 \text{ meV}$  onde estão dispostas as soluções para  $q_x$  versus ângulo de incidência  $\phi$ . Na Fig.(3.6) são dispostas as curvas dos modos propagante e evanescente, respectivamente,  $q_x$  em função da energia incidente  $E$ .

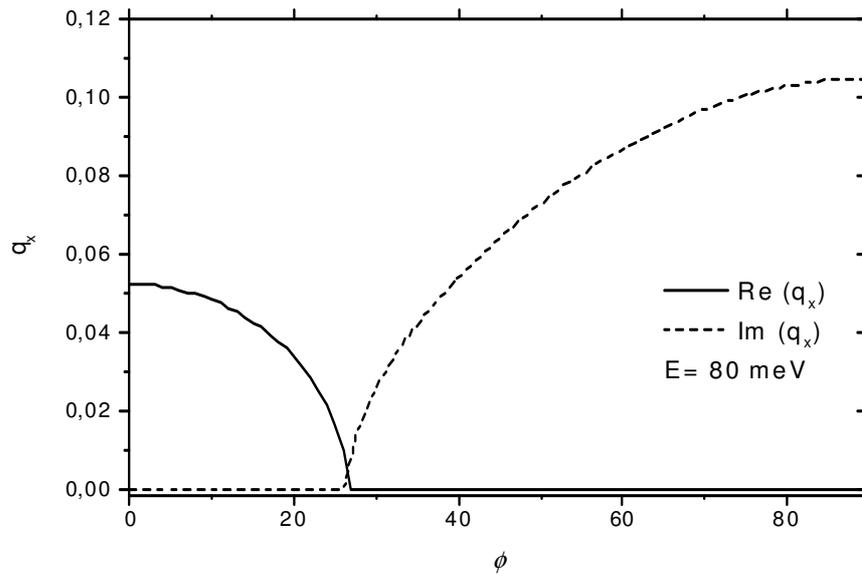


Figura 3.5: Representação da parte real e imaginária da solução de  $q_x$  em função do ângulo de incidência  $\phi$ , com energia incidente  $E = 80 \text{ meV}$ . A parte curva pontilhada representa as partes imaginárias e a curva cheia representa a parte real. O ângulo crítico ocorre para  $\phi_c = 26,5^\circ$ .

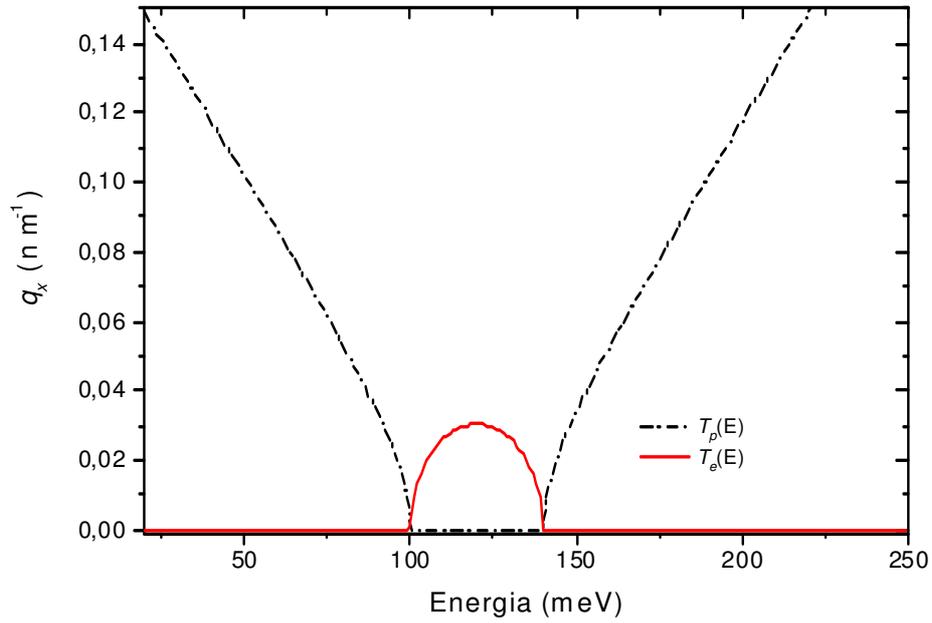


Figura 3.6: Representação dos modos propagante e evanescente da solução de  $q_x$  em função da energia incidente, com  $\phi = 0^\circ$ . A curva preta pontilhada representa o modo propagante e curva em vermelho representa o modo evanescente.

Na seção a seguir, desenvolveremos o processo para obtenção do coeficiente de transmissão para o sistema de dupla barreiras de potencial, que diferentemente do sistema de simples barreira apresenta um mecanismo de transmissão que o torna mais eficiente que o primeiro, e deste modo, mais atraente como base para aplicações tecnológicas.

### 3.4.2 Aplicação no Sistema de Barreira Dupla

Na Fig.(3.7), mostramos um potencial tipo dupla barreira de larguras  $L_{b1}$  e  $L_{b2}$ , intercalado por um poço quântico de largura  $L_w$  e potencial  $V_0$ . Resolve-se a equação de Dirac em cada região para energias menores que a altura do potencial ( $E < V_0$ ), as funções de onda nas regiões *I, II, III, IV* e *V* são dadas por:

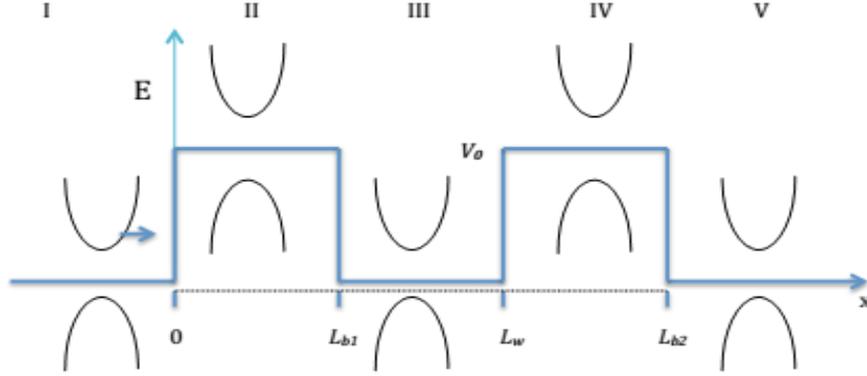


Figura 3.7: Representação esquemática do sistema de dupla barreiras de potencial de altura  $V_0$ , exibindo as regiões de interface de larguras  $L_{b1}$ ,  $L_{b2}$  e  $L_w$ .

Vamos considerar, agora, que a partícula incida sobre um sistema de dupla barreira, de larguras  $L_{b1} = L_{b2}$ , separados por uma região de poço de largura  $L_w$ , cujo esquema é mostrado na Fig.(3.7). Devido ao confinamento, o sistema possui níveis discretos na região do poço, também chamados de estados *quase-ligados*, em alusão ao fato de que, num desses níveis  $E_i$  a partícula tem um tempo de vida característico  $\tau_i$ , que, devido a relação de incerteza, introduz um alargamento do nível da ordem de  $\Delta E \propto \frac{1}{\tau_i}$ .

Quando a partícula incidente tem a mesma energia de um desses estados ligados, a curva de transmissividade apresenta um pico e 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  $k$  e  $q$ , e da largura de cada região, podemos utilizar os resultados da análise anterior para calcular a transmissividade em barreira duplas.

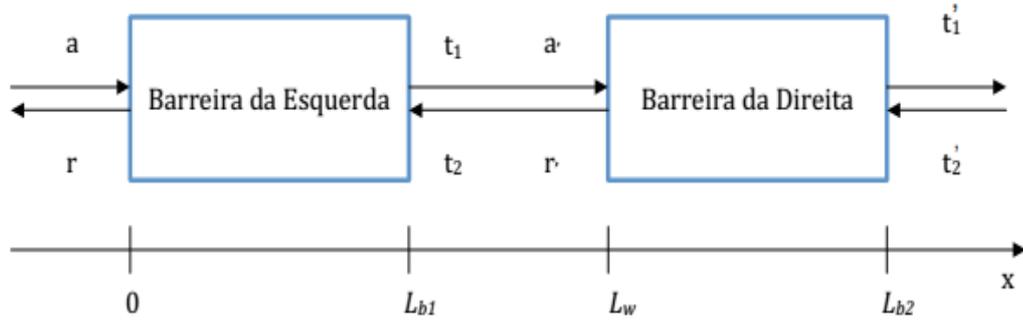


Figura 3.8: Representação esquemática do sistema de dupla barreira, formado pela junção de duas barreiras simples, cujos coeficientes são mostrados em cada região.

Da Fig.(3.8), observa-se que os coeficientes das ondas incidentes  $a'$  e  $t_1$  descrevem uma onda propagante para a direita, correspondentes aos coeficientes de saída da barreira da esquerda e de entrada na barreira da direita, na mesma região do poço, respectivamente, seus valores devem diferir apenas de uma fase. Da mesma forma,  $t_2$  e  $r'$  correspondem a uma onda propagante para a esquerda. Assim, podemos relacioná-los através de forma matricial.

$$\begin{pmatrix} a' \\ r' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikL_w} & 0 \\ 0 & e^{-ikL_w} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

onde  $k$  é o vetor de onda na região do poço. A matriz

$$P_w = \begin{pmatrix} e^{ikL_w} & 0 \\ 0 & e^{-ikL_w} \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

que relaciona esses coeficientes, através da região de largura  $l$ , é conhecida como matriz de propagação. Usando formalmente a Eq.3.34 para as barreiras da direita e da esquerda com os seus respectivos coeficientes, associadas à Eq.3.44, obtém-se

$$\begin{pmatrix} t_1' \\ t_2' \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} a \\ r \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

onde  $T = T^D \times T^W \times T^E$  é a matriz de transferência total e  $T^D$  e  $T^E$  são as matrizes de transferência da barreira da direita e da esquerda, respectivamente. Desta relação, podemos escrever o elemento  $T_{22}$  como

$$T_{22} = T_{22}^D \times T_{22}^E \times e^{-ikl} + T_{21}^D \times T_{12}^E \times e^{ikl} \quad (3.47)$$

Para uma barreira simples, o elemento  $T_{22}^{D,E}$  da matriz de transferência da barreira da esquerda ou da direita pode ser reescrito na forma complexa

$$T_{22}^{D,E} = \tau_{22} e^{-i\chi} \quad (3.48)$$

onde

$$\tau_{22} = \sqrt{(\cos^2(q_x d) + \left( \frac{(\sin \phi \sin \theta - \frac{F}{ss'})^2 \sin^2(q_x d)}{(\cos \phi \cos \theta)^2} \right))}, \quad (3.49)$$

é o módulo e

$$\chi = \tan^{-1} \left[ \tan(q_x d) \left( \frac{ss'k_y^2 - \frac{F}{2}kk'}{k_x q_x} \right) \right], \quad (3.50)$$

é a fase de  $T_{22}^{D,E}$ . Assim, podemos escrever o elemento  $T_{22}$  da matriz de transferência total no sistema de dupla barreira Eq.3.46 como

$$|T_{22}|^2 = T_{22}^E T_{22}^D e^{-ikl} + T_{12}^E T_{21}^D e^{ikl} \quad (3.51)$$

$$|T_{22}|^2 = \left( |T_{22}^{D,E}|^2 - |T_{21}^{D,E}|^2 \right)^2 + 4 |T_{22}^{D,E}|^2 |T_{21}^{D,E}|^2 \cos(k_x l - \chi), \quad (3.52)$$

No entanto o primeiro termo entre parênteses é exatamente o determinante da matriz  $T^D$  (ou  $T^E$ ) para uma barreira simples que, como já vimos vale 1. Logo

$$|T_{22}^{D,E}|^2 = 1 + 4 |\tau_{22}|^2 \times |T_{22}^{D,E}|^2 \cos^2(k_x l - \chi), \quad (3.53)$$

Desse modo

$$T(E) = \frac{1}{1 + 4|\tau_{22}|^2 \times |T_{22}^{D,E}|^2 \cos^2(k_x l - \chi)}, \quad (3.54)$$

$$T(E) = \frac{T_1^2}{T_1^2 + 4R_1 \cos^2(k_x l - \chi)}, \quad (3.55)$$

onde  $T_1$  e  $R_1 = 1 - T_1$  são os coeficientes de transmissão e reflexão, respectivamente, para o sistema de simples barreira dado, anteriormente, na Eq.3.40.

Desta última expressão, observa-se que a transmissão ressonante,  $T(E) = 1$ , ocorre para  $\cos(kl + \chi) = 0$ . Isto acontece quando

$$k_x l + \chi = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \quad (3.56)$$

que é exatamente a condição de autovalores para um poço de potencial de largura  $L_w = l$ . Portanto, a ressonância ocorre, quando a partícula incidente tem a mesma energia de um desses estados obtidos da Eq.3.56. De uma maneira geral, podemos dizer que, para essas energias particulares, as duas barreiras atuam como espelhos, refletindo sucessivamente as ondas de de Broglie na região do poço; o tunelamento ressonante ocorre, então, quando existe uma interferência construtiva, cujos comprimentos de onda  $\lambda = 2\pi/k$  satisfazem à condição da Eq.3.56.

No Capítulo subsequente, apresentamos os resultados numéricos da probabilidade de transmissão, condutância e corrente de tunelamento obtidos por meio do método da matriz de transferência para os sistemas de simples e dupla barreiras em Grafeno puro abordados acima em vistas às propriedades de transporte dessas interessantes estruturas.

Serão abordados três casos distintos de sistema de barreiras simples e dupla nas denominadas heterojunções onde serão investigados o comportamento dos portadores de cargas.

# Capítulo 4

## Resultados e Discussões

### 4.1 Tunelamento ressonante em barreira simples de Grafeno

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos da probabilidade de transmissão para o sistema de barreira simples com uso do método da matriz de transferência.

A Fig.(4.1) apresenta a dependência da probabilidade de transmissão com a energia incidente do elétron no sistema de simples barreira com ângulo de incidência  $\phi = 0^\circ$  para três valores diferentes de gap de energia  $\Delta$ . Podemos observar, que quando o gap de energia  $\Delta = 0 \text{ meV}$  a barreira de potencial permanece perfeitamente transparente para quaisquer valores de energia incidente. Que é uma característica única para férmions de Dirac sem massa e que estão relacionados com o paradoxo de Klein na eletrodinâmica quântica [70]. Contudo, mais significativamente, quando levamos em conta a existência de um gap finito de energia a probabilidade de transmissão com ângulo de incidência  $\phi = 0^\circ$  surge um gap de transmissão centrado  $E = V_0$  onde é observado o crescimento do gap de transmissão com aumento do gap de energia. Fora da região da barreira de potencial a probabilidade de transmissão obedece um perfil oscilatório, segundo a condição de ressonância,  $q_x d = N\pi$  ( $N = 0, 1, \dots$ ) a probabilidade de transmissão  $T$  é 1. De fato o

vetor de onda paralelo  $k_y = 0$  quando o ângulo de incidência é zero, conseqüentemente o fator  $q_x^2 = k'^2 = (V_0 - E)^2 - \Delta^2 < 0$  o que muda o elétron em modo propagante para modo evanescente. A probabilidade de transmissão  $T$  decai exponencialmente na barreira de potencial quando  $V_0 - \Delta < E < V_0 + \Delta$  que determina o gap de transmissão  $\Delta E = 2\Delta$ . Em razão deste regime de energia incidente não há estado eletrônico na barreira de potencial, neste caso, a probabilidade de transmissão decai exponencialmente para formar o gap de transmissão. A probabilidade de transmissão no Grafeno com gap finito de energia e ângulo de incidência normal, mostra-se bastante diferente do caso sem gap de energia em monocamada de Grafeno [70].

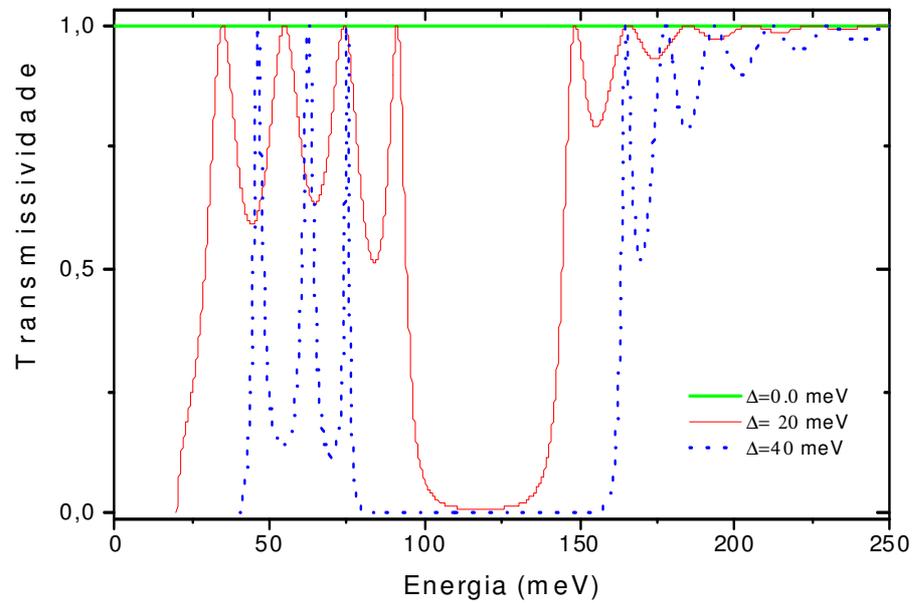


Figura 4.1: Probabilidade de transmissão versus energia incidente para um sistema de simples barreira com  $V_0 = 120$  meV,  $\phi = 0^\circ$ ,  $D = 100$  nm,  $\Delta = 0, 20$  e  $40$  meV, respectivamente.

A Fig.(4.2) revela a dependência na transmissão da energia incidente e do ângulo de incidência para três valores de gap diferentes. Fixando a barreira tem dimensão  $D = 100$  nm,  $V_0 = 120$  meV. Em (a) temos  $\Delta = 0.0$  meV, (b)  $\Delta = 20.0$  meV e (c)  $\Delta = 40.0$  meV. Nessas Figuras é possível verificar o tunelamento e regiões de energia proibida. Quando uma energia incidente ou ângulo incidente estão fora da região de tunelamento estados eletrônicos não serão encontrados dentro da barreira fazendo o coeficiente de transmissão decair exponencialmente conduzindo a estados de energias proibidas no espectro da transmissividade. Podemos notar que a diferença torna-se mais ampla com o aumento do ângulo de incidência devido o crescimento de  $\Delta E = 2\sqrt{\hbar^2 v_F^2 k_y^2 + \Delta^2}$  com o ângulo de incidência. Esse efeito no gap de transmissão na estrutura desses dispositivos podem ser usados em diversos dispositivos eletrônicos baseados em Grafeno.

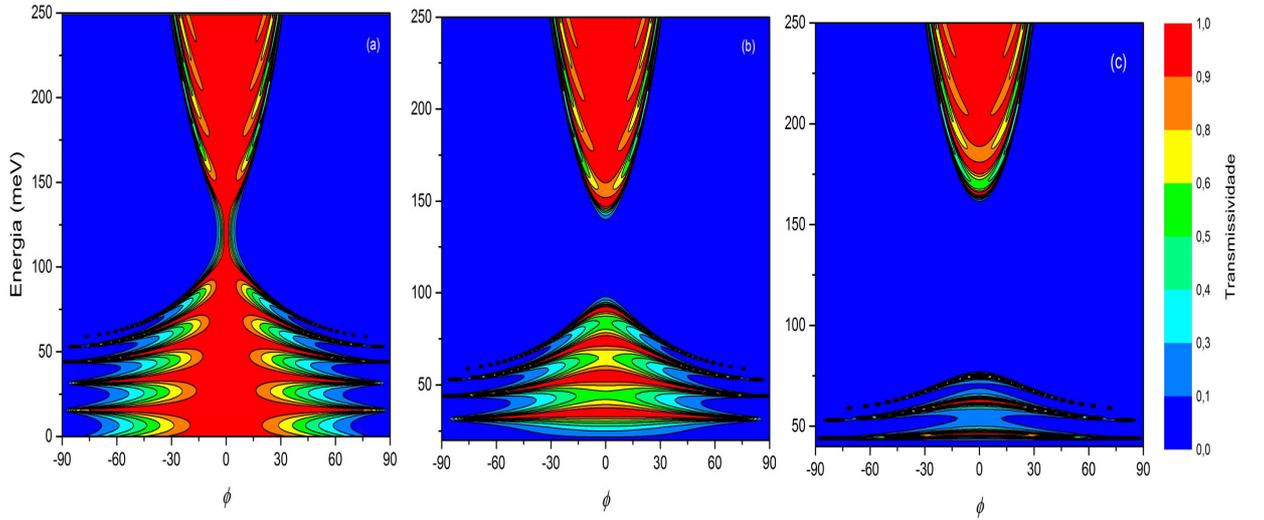


Figura 4.2: Gráficos de contorno da transmissividade versus energia incidente e ângulo de incidência através de barreira de potencial simples com  $V_0 = 120$  meV e  $D = 100$  nm, em (a)  $\Delta = 0.0$  meV, (b)  $\Delta = 20$  meV e (c)  $\Delta = 40$  meV.

A seguir, apresentamos a possibilidade de produzir estruturas do tipo barreira de potencial de altura  $V_0$  e largura  $D$  e analisar o tunelamento de elétrons através dessa estrutura com energia  $E$ . Supomos que a barreira é tal que em ambos os lados da região

entre as barreiras (região I e III) temos elétrons sem massa e na região II temos elétrons com massa diferente de zero. Fig.(4.3). Assim, nas regiões I e III temos férmions de Dirac sem massa, contudo na região II, as quase-partículas adquirem massa finita devido a presença de um gap de energia  $2\Delta$  localizado nesta região. Dessa modo, a função de onda nas regiões I e III são modificadas assumindo a seguinte forma:

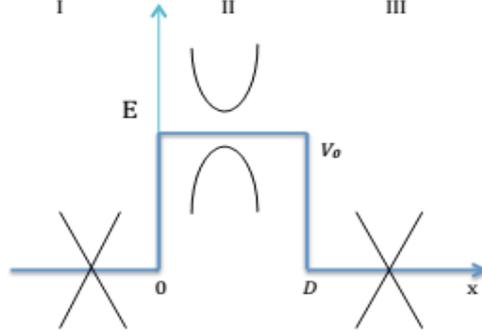


Figura 4.3: Barreira de potencial simples de altura  $V_0$  e largura  $D$  em que elétrons sem massa adquirem massa finita na região II do sistema.

$$\begin{aligned}\psi_I(x, y) &= \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_{x1}x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -se^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(k_{x1}x - k_y y)}, \\ \psi_{II}(x, y) &= \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s' \sqrt{\frac{|E-V_0|-s'\Delta}{|E-V_0|+s'\Delta}} e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s' \sqrt{\frac{|E-V_0|-s'\Delta}{|E-V_0|+s'\Delta}} e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-i(q_x x - k_y y)}, \\ \psi_{III}(x, y) &= \frac{t_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ se^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_{x3}x + k_y y)}.\end{aligned}\quad (4.1)$$

Impondo a condição de continuidade da função de onda nas interfaces em que  $(x = 0$  e  $x = L_b)$  e resolvendo em termos do coeficiente de transmissão  $t_1$ , onde  $T = t^*t$ . A probabilidade de transmissão é dada por:

$$T(E) = \frac{k_x^2 q_x^2}{k_x^2 q_x^2 \cos^2(q_x d) + (Zkk' - ss'k_y^2)^2 \sin^2(q_x d)}.\quad (4.2)$$

onde  $Z = \sqrt{\frac{v_F^2 \hbar^2 (q_x^2 + k_y^2)}{\Delta^2 + v_F^2 \hbar^2 (q_x^2 + k_y^2)}}$ .

A Fig.(4.4) apresenta a dependência da probabilidade de transmissão com a energia incidente do elétron no sistema de simples barreira com ângulo de incidência  $\phi = 0^\circ$  para três valores diferentes de gap de energia  $\Delta$ . Podemos observar, que quando o gap de energia  $\Delta = 0 \text{ meV}$  (linha verde) a barreira de potencial permanece perfeitamente transparente para quaisquer valores de energia incidente, identificando-se com o paradoxo de Klein. Como pode ser visto, quando  $E = 0$  a probabilidade de transmissão é 1, pois está associada ao nível de Fermi e nesta região não há gap de energia, pois encontra-se na interseção dos pontos de Dirac. Contudo, quando consideramos (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$  com ângulo de incidência  $\phi = 0^\circ$  surge um gap de transmissão centrado  $E = V_0$  onde é observado o crescimento do gap de transmissão com aumento do gap de energia. Nesses casos, observamos que mesmo para ângulo de incidência normal a probabilidade de transmissão é menor que a unidade e dessa forma a barreira não permanece completamente transparente, tal resultado não pode ser visto para o caso do Grafeno sem gap de energia. Na sequência, a transmissividade obedece um perfil oscilatório  $E < V_0 - \Delta$ . A probabilidade de transmissão  $T$  então, decai exponencialmente na barreira de potencial quando  $V_0 - \Delta < E < V_0 + \Delta$  que determina o gap de transmissão  $\Delta E = 2\Delta$ . Em razão deste regime de energia incidente não há estado eletrônico na barreira de potencial, neste caso, a probabilidade de transmissão decai exponencialmente para formar o gap de transmissão. Quando  $E > V_0 + \Delta$ , a probabilidade de transmissão oscila para valores de mais altas energias até atingirem a unidade. Nessas Fig.(4.4) (a) e (b) podemos notar o efeito do parâmetro de largura da barreira de potencial  $D$ , onde a probabilidade de transmissão decai mais rapidamente a medida que  $D$  aumenta produzindo o aumento no gap de transmissão.

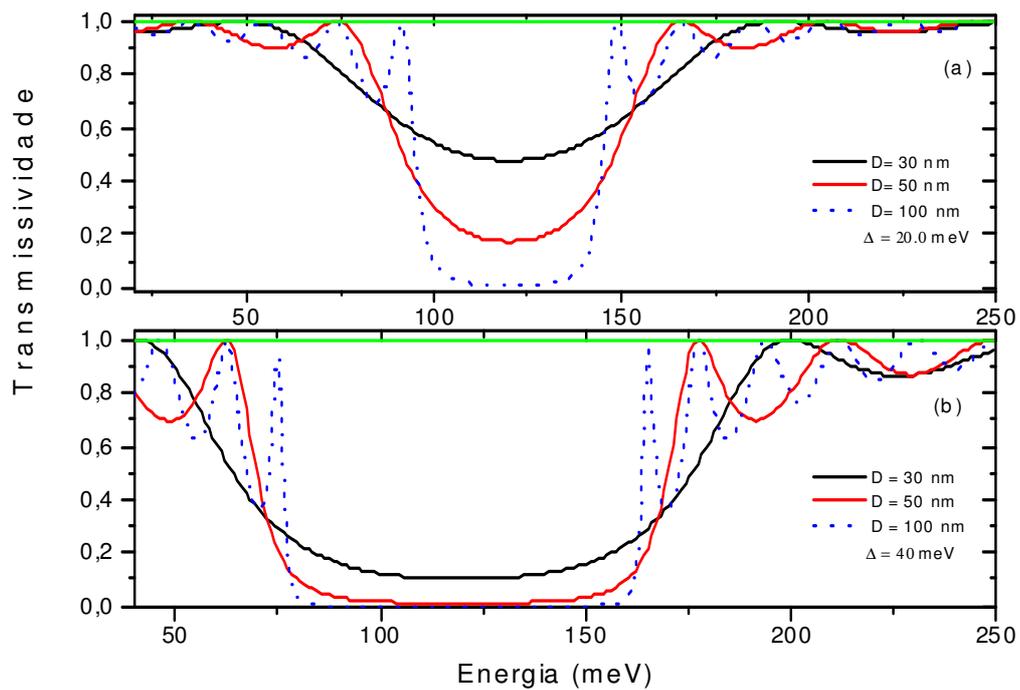


Figura 4.4: Transmissividade em função da energia incidente para o sistema de simples barreira com  $\phi = 0^\circ$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ , em (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ . A linha verde em (a) e (b) com  $\Delta = 0 \text{ meV}$ .

A Fig.(4.5) mostra a probabilidade de transmissão  $T$  em função do ângulo de incidência  $\phi$  para um energia fixa  $E = 65 \text{ meV}$  e  $D = 100 \text{ nm}$  para diferentes valores de gap  $\Delta$  para o sistema de simples barreira como indicado na Fig.(4.3). Para ângulo de incidência normal não há mudança no gap de transmissão como pode ser visto (linha verde) com  $\Delta = 0 \text{ meV}$  característico do paradoxo de Klein. Podemos notar a influência do ângulo de incidência, a medida que o mesmo cresce produz uma diferença notável no probabilidade de transmissão. Mais signitivamente ainda ao considerarmos o gap de energia  $\Delta = 20 \text{ meV}$  (linha vermelha) e  $\Delta = 40 \text{ meV}$  (linha pontilhada azul ) observamos a drástica diferença na probabilidade de transmissão, onde,  $T$  é menor que 1, mesmo para ângulo de incidência normal como fora predito analiticamente nos trabalhos de [35] e dessa forma a barreira não permanece perfeitamente transparente.

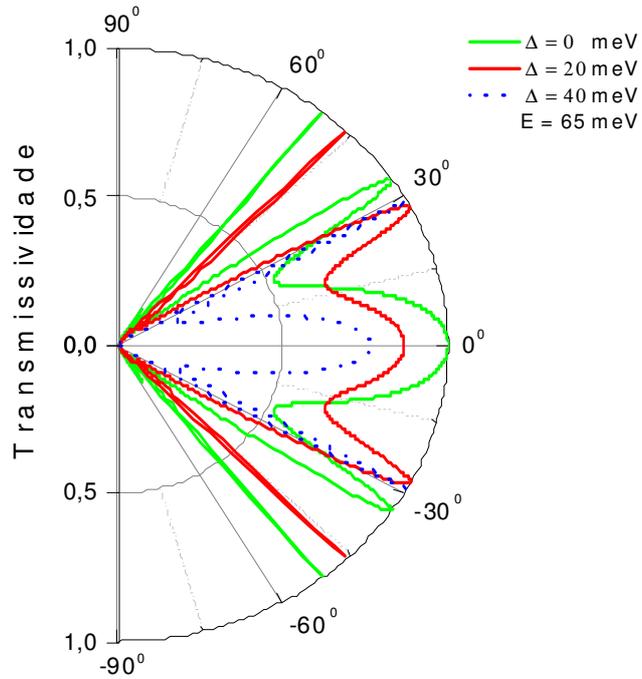


Figura 4.5: Probabilidade de transmissão  $T$  de elétrons através do sistema da Fig.(4.3) em função do ângulo de incidência  $\phi$ , com  $D = 100 \text{ nm}$  e  $E = 65 \text{ meV}$ .

Alternativamente apresentamos uma nova estrutura do tipo barreira de potencial eletrostático  $V_0$  com largura  $D$ . Supomos que a barreira é tal que em ambos os lados da região entre as barreiras (região I e III) temos elétrons de massa finita devido a presença de um gap de energia  $2\Delta$  e na região II temos elétrons sem massa Fig.(4.6). Assim, nas regiões I e III temos férmions massivos de Dirac, contudo na região II, as quase-partículas perdem massa finita. A função de onda nas regiões I, II e III são modificadas assumindo a seguinte forma:

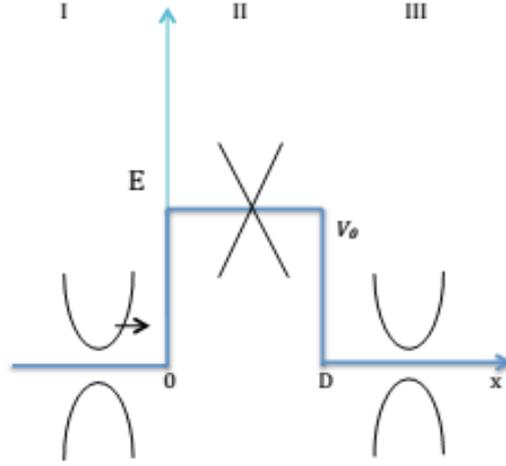


Figura 4.6: Barreira de potencial de altura  $V_0$  e largura  $D$  em que elétrons perdem massa.

$$\begin{aligned}\psi_I(x, y) &= \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s\sqrt{\frac{|E|-s\Delta}{|E|+s\Delta}} e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)} + \frac{r}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s\sqrt{\frac{|E|-s\Delta}{|E|+s\Delta}} e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(k_x x - k_y y)} \quad (4.3) \\ \psi_{II}(x, y) &= \frac{a}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s'e^{i\theta} \end{pmatrix} e^{i(q_x x + k_y y)} + \frac{b}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -s'e^{-i\theta} \end{pmatrix} e^{-i(q_x x - k_y y)}, \\ \psi_{III}(x, y) &= \frac{t_1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ s\sqrt{\frac{|E|-s\Delta}{|E|+s\Delta}} e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(k_x x + k_y y)}.\end{aligned}$$

Novamente, impondo a condição de continuidade da função de onda nas interfaces em que  $(x = 0$  e  $x = D)$  e resolvendo em termos do coeficiente de transmissão  $t_1$ , onde

$T = t^*t$ . A probabilidade de transmissão é dada por:

$$T(E) = \frac{k_x^2 q_x^2}{k_x^2 q_x^2 \cos^2(q_x d) + (Z k k' - k_y^2)^2 \sin^2(q_x d)}. \quad (4.4)$$

onde  $Z = \sqrt{\frac{v_F^2 \hbar^2 (q_x^2 + k_y^2)}{\Delta^2 + v_F^2 \hbar^2 (q_x^2 + k_y^2)}}$ .

A seguir apresentamos os resultados numéricos da Transmissividade versus energia incidente do elétrons para o sistema considerado.

Na Fig.(4.7) apresentamos a probabilidade de transmissão versus energia incidente para o sistema proposto acima. Em (a) e (b) a linha verde representa  $\Delta = 0 \text{ meV}$  e o ângulo de incidência  $\phi = 0^\circ$  característica de férmions de Dirac sem massa que se relacionam com o paradoxo de Klein. Pode-se verificar, nesses gráficos que todas as curvas iniciam com zero de transmissão  $0 \leq E \leq \Delta$  e tem comportamento crescente até alcançarem a transmissão total, os vales se alargam com a redução de  $D$  para valores mais altos na energia  $E \geq V_0 + \Delta$ . Nessas Figuras é possível observar a forte correlação entre o férmions de Dirac sem massa 2D e férmios de Dirac 1D. Isto é, nosso sistema 2D sugerido com massa efetiva  $m^* \neq 0$  nas regiões I, III, e massa efetiva  $m^* = 0$  nas regiões II. O sistema é semelhante ao sistema 1D que comporta-se como se a dinâmica de massa do portador dependesse de um número de onda quantizado transversso. Na Fig.(4.7)  $D = 30 \text{ nm}$ ,  $D = 50 \text{ nm}$  e  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$ . Em (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ .

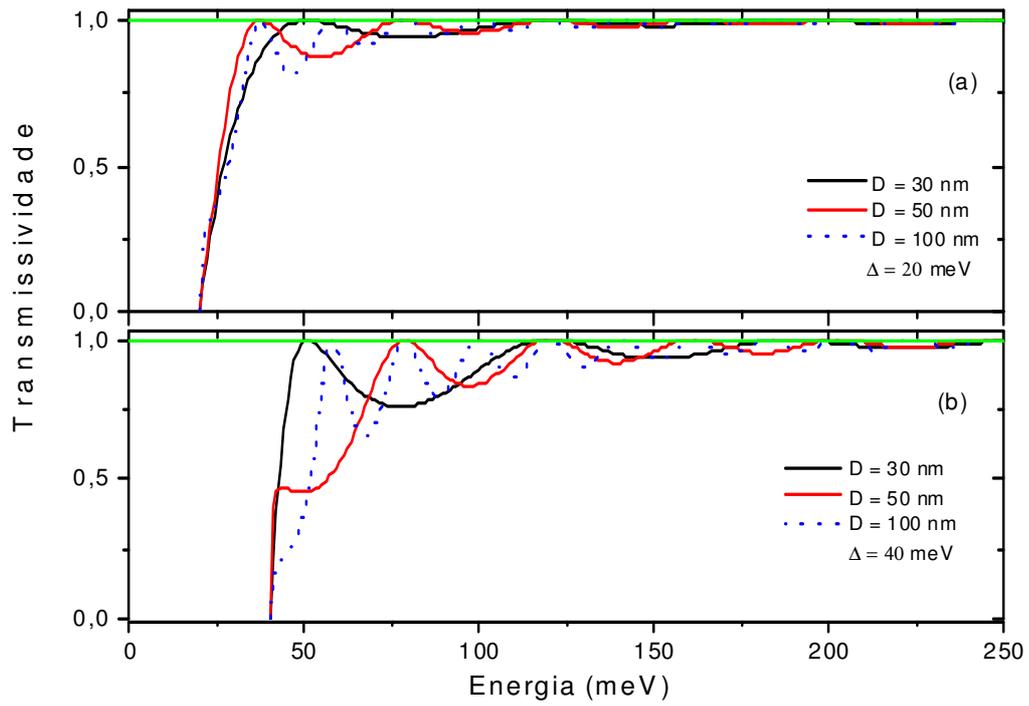


Figura 4.7: Transmissividade em função da energia incidente para o sistema de simples barreira com  $\phi = 0^\circ$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ , em (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ . A linha verde em (a) e (b) com  $\Delta = 0 \text{ meV}$ .

Na Fig.(4.8) exibimos a probabilidade de transmissão  $T$  em função do ângulo de incidência  $\phi$  para uma energia fixa  $E = 65 \text{ meV}$  e  $D = 100 \text{ nm}$  para diferentes valores de gap  $\Delta$  para o sistema de simples barreira como indicado na Fig.(4.6) para ângulo de incidência normal não há mudança no gap de transmissão como pode ser visto nas Figs.(4.7) (a) e (b) (linha verde) característico do paradoxo de Klein de acordo com os dois casos estudados anteriormente. A influência do ângulo de incidência pode ser observada, a medida que o mesmo cresce produz uma diferença notável no probabilidade de transmissão. Ao considerarmos o gap de energia  $\Delta = 20 \text{ meV}$  (linha vermelha) e  $\Delta = 40 \text{ meV}$  (linha pontilhada azul ) observamos a drástica diferença na probabilidade de transmissão, onde,  $T$  é menor que 1, mesmo para ângulo de incidência normal em concordância com o resultado analítico de [35] e dessa forma a barreira não permanece perfeitamente transparente.

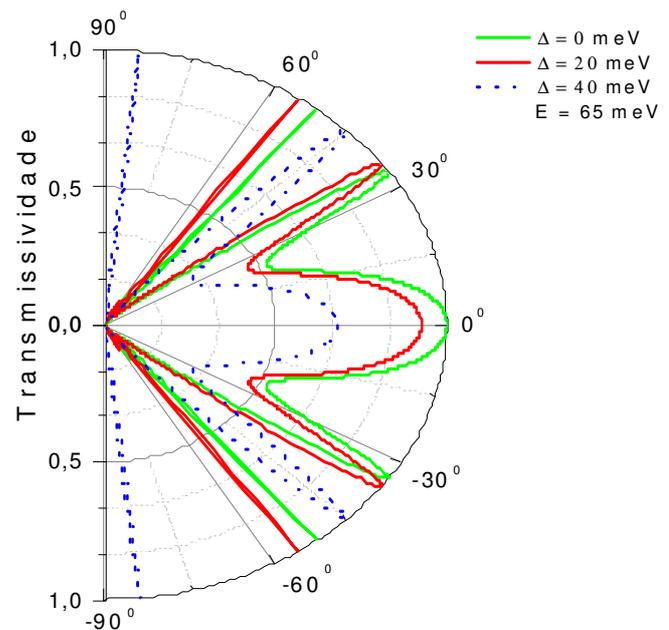


Figura 4.8: Probabilidade de transmissão  $T$  de elétrons através do sistema de barreira simples como mostrado no esquema da Fig.(4.6) em função do ângulo de incidência  $\phi$  com  $D = 100 \text{ nm}$ ,  $E = 65 \text{ meV}$ .

Nessa seção, realizamos um estudo de tunelamento de elétrons sem massa com energia  $E$  que podem adquirir massa finita  $\Delta$  dentro de uma barreira e potencial eletrostático de altura  $V_0$  e largura  $D$  e encontramos que a probabilidade de transmissão independe do índice da banda  $s' = \pm 1$  em contraste com a solução da probabilidade de transmissão obtida para férmions massivos de Dirac em Grafeno como pode ser visto esquema da Fig.(3.3). Nessas condições, verificamos que a probabilidade de transmissão muda e não atinge mais a unidade. Em seguida, analisamos a probabilidade de transmissão para a heterojunção de largura  $D$  segundo o sistema indicado na Fig.(4.6) (equivalente a junção do tipo p-n-p de um nanotransistor de Grafeno) onde férmions massivos de Dirac são considerados devido o gap de energia  $2\Delta$ , em razão da existência do espectro linear presente na região subsequente da estrutura a probabilidade de transmissão independe do índice da banda  $s'$ . O que pode ser útil para detectar as regiões em que o Grafeno apresenta uma relação de dispersão linear. Verifica-se ainda que com o uso apropriado da função de onda para o elétron com energia  $E < V_0$  fica claro que para ambos os casos  $s' = 1$  e  $-1$  (que resultam na mesma magnitude de  $q_x$ ) encontra-se os mesmos resultados para a probabilidade de transmissão, o que contradiz os resultados encontrados para  $T$  em [34].

## 4.2 Tunelamento ressonante em dupla barreira de Grafeno.

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos da transmissividade para o sistema de dupla barreiras de potencial constante  $V_0$ . A transmissividade  $T$  e a condutância serão calculadas como função da energia incidente e do ângulo de incidência através do uso da técnica da matriz de transferência e que serão um importante resultado para o cálculo da densidade de corrente.

Lembrando, que o espectro de férmions de Dirac em camada única de Grafeno tem comportamento linear sob o regime de baixas energias. Nas Figs.(4.9) e (4.10), mostramos

a dependência da probabilidade de transmissão com a anergia incidente e ângulo de incidência normal para três diferentes valores de gap de energia num sistema de dupla barreiras de potencial,  $L_{b1} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_{b2} = 50 \text{ nm}$  com  $\Delta = 0, 20 \text{ e } 40 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$  em (a)  $L_w = 30 \text{ nm}$ , (b)  $L_w = 60 \text{ nm}$ , (c)  $L_w = 80 \text{ nm}$  e (d)  $L_w = 100 \text{ nm}$ . Podemos observar quando o gap de energia é zero a barreira de potencial sempre permanece perfeitamente transparente para quaisquer valores de energia incidente que é uma confirmação do comportamento dos portadores segundo o paradoxo de Klein. Como visto, o sistema de dupla barreiras obedece a duas condições e ressonância onde a probabilidade de transmissão  $T$  é 1, as ressonâncias de Fabry-Pérot associados às interferências internas das ondas na região das barreiras e estados quase-ligados localizados na região do poço. Podemos analisar quatro regiões distintas na curva de transmissividade. Na primeira região  $0 \leq E \leq \Delta$  a transmissividade é nula uma vez que os vetores de onda nessa região de incidência são complexos. A segunda, é a zona de mais baixa energia de Klein característica ressonante  $\Delta \leq E \leq V_0 - \Delta$ . Aqui, temos transmissão completa para alguns valores de energia, apesar do fato da energia da partícula ser menor que a altura da barreira de potencial. Estas energias dentro da barreira são devidas as oscilações características de Fabry-Pérot, o mesmo ocorrendo na quarta região  $E > V_0 + \Delta$ . A terceira zona  $V_0 - \Delta \leq E \leq V_0 + \Delta$ , a função de onda é amortecida e a probabilidade de transmissão decai exponencialmente indo zero, surgindo picos ressonantes correspondentes a estados quase-ligados associados com o poço quântico, diferindo do sistema de simples barreira onde o gap de transmissão corresponde ao gap de energia. Pode-se notar ainda, que devido ao aumento do gap de energia esses estados ressonantes ficam mais agudos uma vez que os férmions de Dirac tornam-se mais massivos. Com respeito as dimensões do sistema, podemos observar nessas Figuras que o aumento da largura do poço aumenta o número de ressonâncias de Fabry-Pérot e o número de estados ligados.

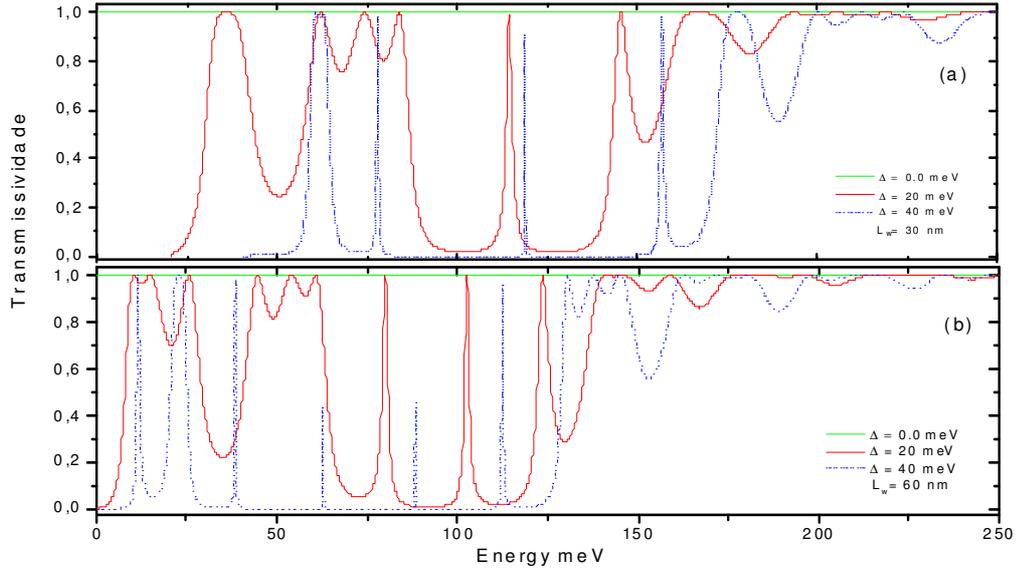


Figura 4.9: Transmissividade em função da energia incidente,  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$  em (a)  $L_w = 30 \text{ nm}$  e (b)  $L_w = 60 \text{ nm}$ .

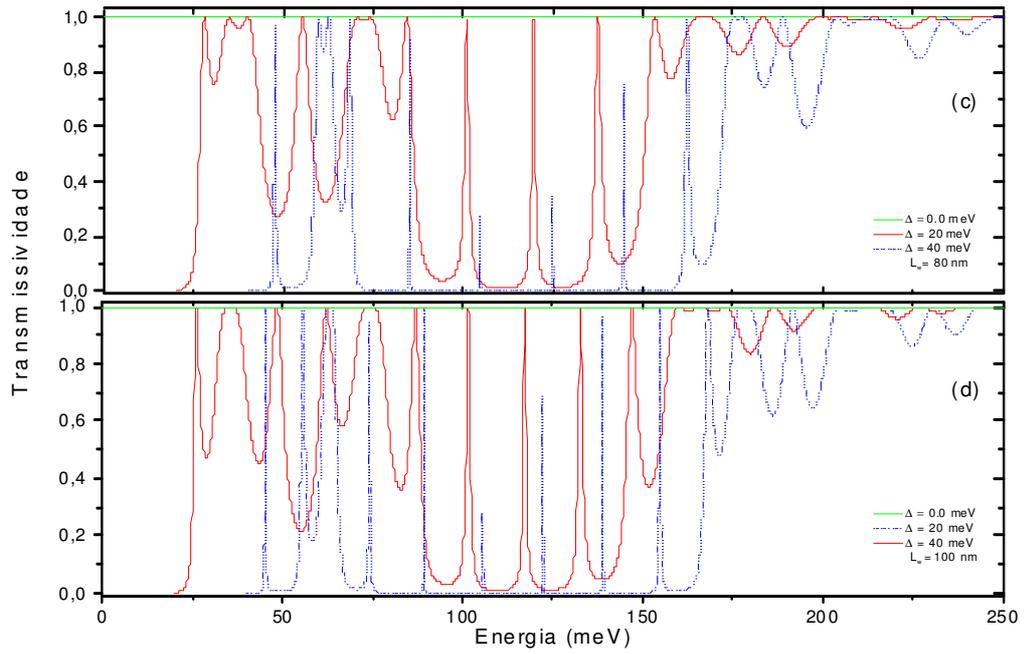


Figura 4.10: Transmissividade em função da energia incidente,  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$  em (c)  $L_w = 80 \text{ nm}$ , (d)  $L_w = 100 \text{ nm}$ .

A Seguir, apresentamos na Fig.(4.11) a solução numérica da equação transcendental Eq.2.42 para um poço de potencial de profundidade  $U_0 = 120 \text{ meV}$  com largura  $L_w = 100 \text{ nm}$  e gap de  $\Delta = 20 \text{ meV}$  onde pode ser confirmado a natureza dos picos ressonantes na região do poço quântico que emergem na curva de transmissão em vistas a análise descrita acima com respeito a região  $V_0 - \Delta \leq E \leq V_0 + \Delta$  da dupla barreiras de potencial, os pontos que cruzam o eixo vertical na origem são as raízes e, portanto, correspondem aos picos na transmissão.

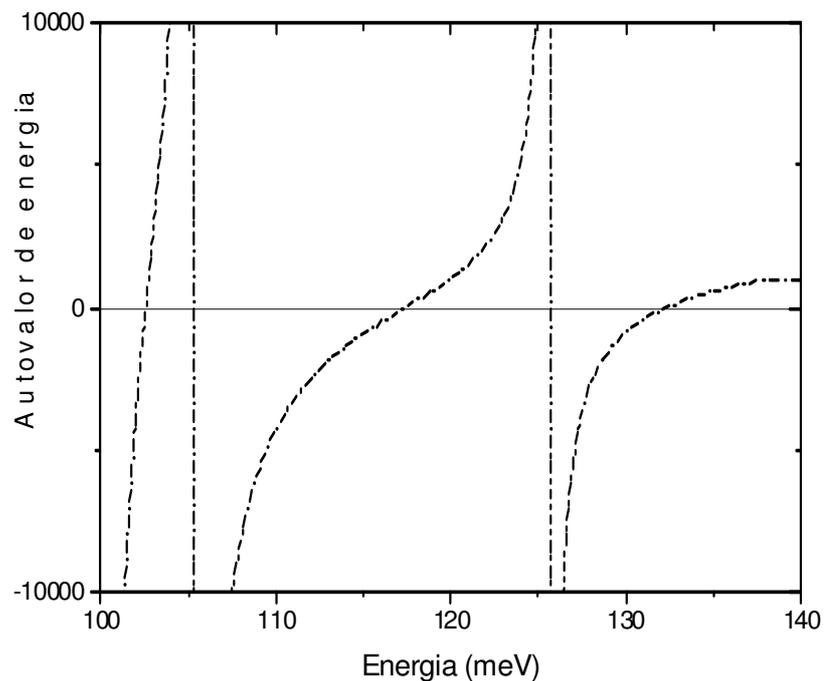


Figura 4.11: Solução de autovalor de energia da Eq.2.42 no poço de potencial de largura  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $U_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 20 \text{ meV}$ .

A Fig.(4.12) revela a dependência na transmissividade da energia incidente e do ângulo de incidência para três casos com gap diferente. Fixando as barreiras  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$  e  $V_0 = 120 \text{ meV}$ . Em (a) temos  $\Delta = 0 \text{ meV}$ , (b)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (c)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ . Nessas Figuras é possível verificar o tunelamento ressonante e regiões de energia proibida. Quando uma energia incidente ou ângulo incidente estão fora da região de tunelamento estados eletrônicos não serão encontrados dentro da barreira fazendo o coeficiente de transmissão decair exponencialmente e conduzindo a estados de energias proibidas no espectro da transmissividade. As regiões de tunelamento podem ser avaliadas desde  $E < V_0$  até  $E > V_0$  nos casos evidenciados. Para  $E < V_0$  em alguns casos os elétrons são perfeitamente transmitidos para quaisquer energia incidente para monocamada de Grafeno e a barreiras são transparentes em algumas situações para pequeno ângulo de incidência Fig.(4.12) (a). No entanto, para algumas energias incidentes bem como ângulos de incidência o transporte ocorre apenas em condições restritas como pode ser observada nas regiões ressonantes mais estreitas na Fig.(4.12) (a), (b) e (c) a medida que o gap de energia é aumentado. As regiões tornam-se tão estreitas que podem ser usadas para energia de alta performance ou como filtro de onda. Para o caso  $E > V_0$  a transmissividade neste caso são semelhantes, a medida que aumentam a energia incidente e o ângulo de incidência a transmissão oscila, atingindo valores restritos no espectro da transmissão devido a ressonância de Fabry-Pérot. O gap de transmissão desses dispositivos podem ser usado em vários dispositivos eletrônicos baseados no Grafeno.

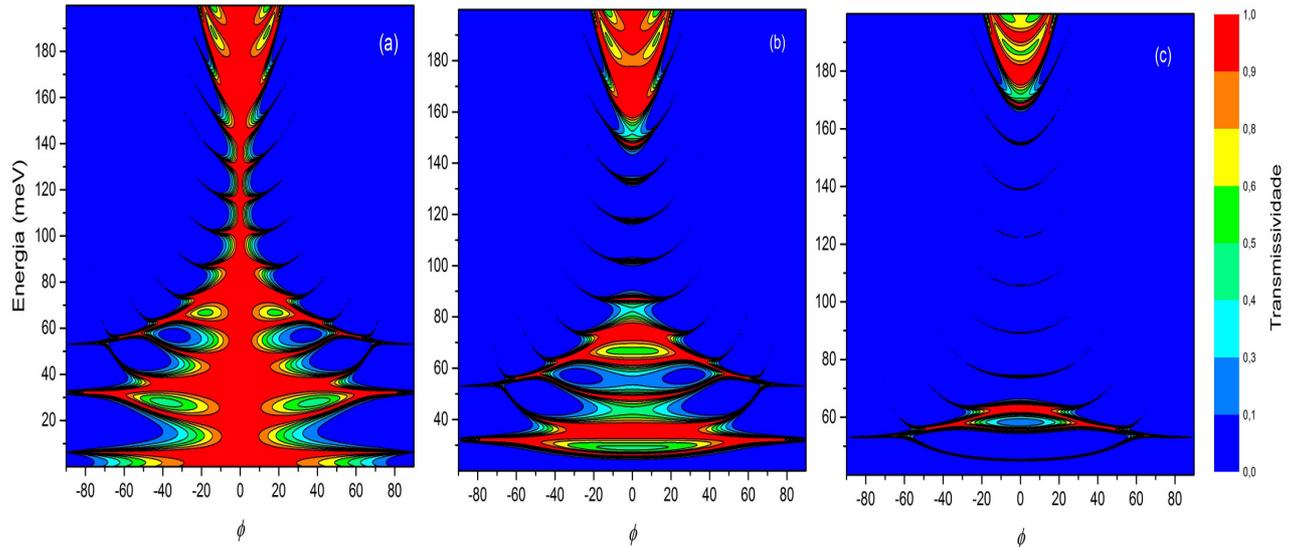


Figura 4.12: Gráfico de contorno da transmissividade através de dupla barreira de potencial versus energia incidente e ângulo de incidência, com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a)  $\Delta = 0 \text{ meV}$ , (b)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (c)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ .

A Fig.(4.13) exhibe a distribuição angular da probabilidade de transmissão. Nessas Figuras, podemos notar a evolução da transmissividade com respeito a segunda barreira intercalada pelo poço quântico de largura  $L_w = 100 \text{ nm}$ . Em (a) a energia do elétron incidente é fixada  $E = 65 \text{ meV}$ ,  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 0, 20$  e  $40 \text{ meV}$ , como pode ser visto quando  $\Delta = 0 \text{ meV}$  (linha verde) o tunelamento Klein manifesta-se claramente para incidência normal independentemente do poço e da segunda barreira. No entanto, quando consideramos o gap de energia, verifica-se uma mudança drástica na transmissividade mesmo para incidência normal, onde agora a transmissividade admite valor menor que a unidade e as barreiras não permanecem perfeitamente transparentes. Em (b) fixamos  $\Delta = 0 \text{ meV}$  e a energia incidente variando  $E = 15, 25, 65$  e  $150 \text{ meV}$ , novamente podemos notar o tunelamento Klein em todos os casos para ângulo de incidência normal, independentemente do poço e da segunda barreira, apresentando uma ampliação com dois pequenos picos a medida em que se aumenta o valor da energia incidente. Esse efeito está relacionado com o carácter propagante do elétron com energia incidente menor

que a altura da barreira de potencial. De maneira semelhante, em todos os casos, a medida que o ângulo de incidência aumenta, aproximando-se da incidência perpendicular a probabilidade de transmissão vai a zero, esta tendência, decorre do carácter evanescente dos elétrons incidentes, não importando se suas energias são maiores ou menores que a altura da barreira de potencial. Podemos ainda verificar o surgimento de picos ressonantes na transmissividade. Essas ressonâncias estão relacionadas com os estados quase-ligados na região do poço.

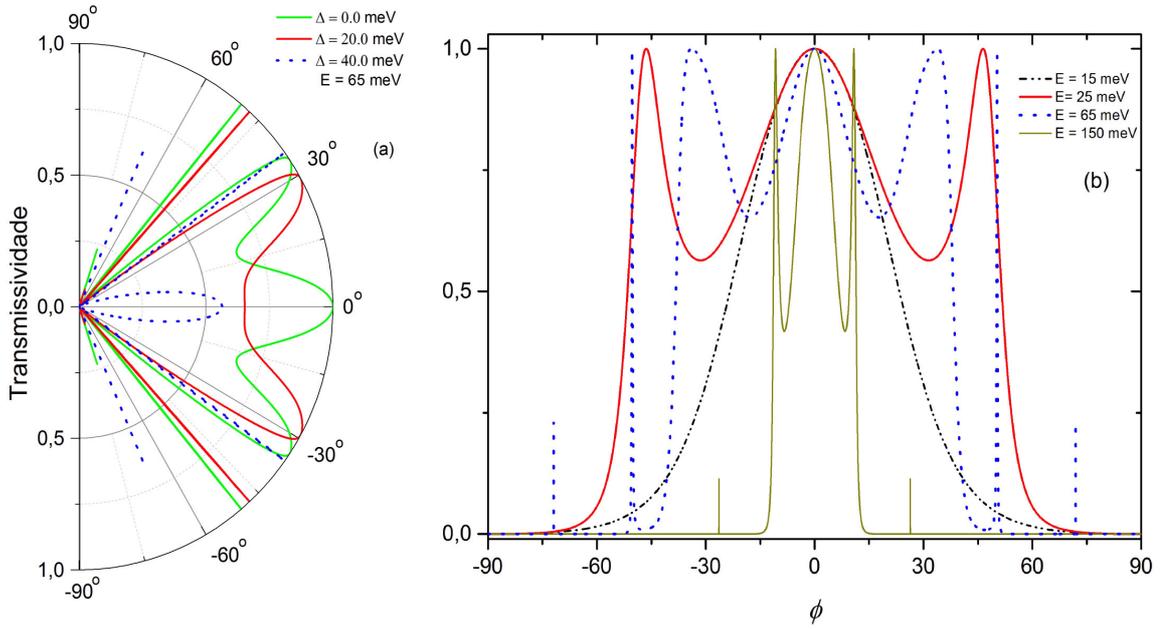


Figura 4.13: Distribuição angular da transmissividade para o sistema de dupla barreira de potencial Fig.(3.7) com  $L_{b1} = L_{b2} = 50$  nm,  $L_w = 100$  nm,  $V_0 = 120$  meV. (a)  $\Delta = 0$ , 20 e 40 meV e  $E = 65$  meV. (b) com  $\Delta = 0$  meV e energias incidente  $E_1 = 15$  meV,  $E_2 = 25$  meV,  $E_3 = 65$  meV e  $E_4 = 150$  meV.

Na Fig.(4.14), exibimos o gráfico do contorno da transmissividade em função da energia incidente e vetor de onda  $k_y$  para o sistema de dupla barreira de potencial, com  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ , e  $V_0 = 120 \text{ meV}$ . Em (a) Observamos que o resultado numérico é similar ao mostrado para barreira simples Fig.(2.10) para  $E > V_0$ . As diferenças mostram-se na ressonâncias de Fabry-Pérot e estados ligados devido ao poço que são mais pronunciadas e não estão restritas apenas na região superior. Note que para  $E < V_0$  as ressonâncias para barreira simples tem perfil côncavo  $E - k_y$  enquanto que a estrutura ressonante tem perfil convexo, com exceção  $E \sim V_0/2$ . Em (b) e (c) são considerados  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e  $\Delta = 40 \text{ meV}$ , respectivamente, onde pode ser visto o efeito de tal parâmetro, produzindo um gap na transmissão intercalado por picos ressonantes no espectro da transmissividade e estados onde não há transmissão.

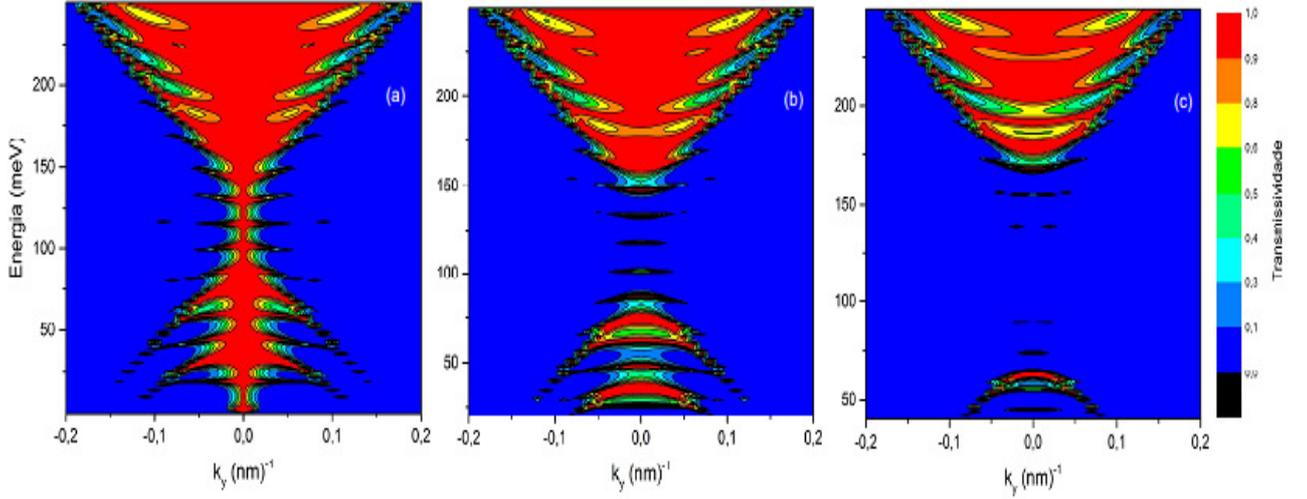


Figura 4.14: Gráfico do contorno da transmissividade versus energia incidente  $E$  e vetor de onda  $k_y$  para o sistema de dupla barreira de potencial para diferentes valores de gap de energia, em (a)  $\Delta = 0 \text{ meV}$ , (b)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (c)  $\Delta = 40 \text{ meV}$  com  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ , e  $V_0 = 120 \text{ meV}$ .

Apresentamos agora um caso especial no tunelamento de elétrons com energia  $E$  através de dupla barreira de potencial  $2D$  e altura  $V_0$  no Grafeno puro. Nas regiões I, III e V, temos férmions de Dirac sem massa, contudo nas regiões II e IV temos quase-partículas de massa finita, devido a presença de gap finito  $2\Delta$  de energia nesta região como mostra a Fig.(4.15). Essa condição, acarreta uma mudança nas funções de onda nas respectivas regiões. Nesse caso, consideremos  $\eta = 1$  e  $\gamma = \sqrt{\frac{|E-V_0|-s'\Delta}{|E-V_0|+s'\Delta}}$ , que seguem os mesmos critérios de continuidade da função de onda em cada interface.

Para a obtenção da transmissividade  $T(E)$  para esse novo esquema, seguimos os mesmos procedimentos descritos no Capítulo anterior para obtenção da matriz de transferência total, com esse novo caso o elemento  $T_{22}$  da matriz de transferência agora assume o mesmo da Eq.4.2 onde  $T$  será determinado por meio da Eq.3.55, onde  $T_1$  e  $R_1 = 1 - T_1$  são os coeficientes de transmissão e reflexão, respectivamente, para o sistema de simples barreira dado, anteriormente, na Eq.4.2.

$$T_{22} = \frac{k_x^2 q_x^2}{k_x^2 q_x^2 \cos^2(q_x d) + (Z k k' - s s' k_y^2)^2 \sin^2(q_x d)}. \quad (4.5)$$

onde  $Z = \sqrt{\frac{v_F^2 \hbar^2 (q_x^2 + k_y^2)}{\Delta^2 + v_F^2 \hbar^2 (q_x^2 + k_y^2)}}$ .

Com essas considerações, ocorre uma mudança na probabilidade de transmissão para os mesmos valores de  $|E - V_0|$  o que torna a transmissividade menor que a unidade e, dessa forma, as barreiras não são mais completamente transparentes.

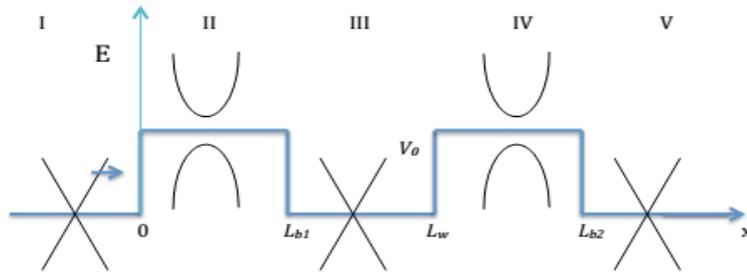


Figura 4.15: Representação esquemática do sistema de dupla barreira de potencial  $V_0$ , onde Férmions de Dirac sem massa adquirem massa finita.

Nas Figs.(4.16) e (4.17) apresentamos a transmissividade versus energia incidente do elétron em dupla barreira de Grafeno com a sugestão de gap de energia apenas nas regiões *II* e *IV* conforme gráfico acima. Inicialmente, a largura das barreiras  $L_{b1} = L_{b2} = 50$  *nm* são mantidas fixas e variamos a largura do poço  $L_w$ , com  $\phi = 0^\circ$  e  $V_0 = 120$  *meV*. Aqui verificamos regiões distintas que caracterizam o coeficiente de transmissão e sua dependência com alguns parâmetros, como as dimensões do poço ( $L_w$ ), o modo de propagação e o gap de energia  $\Delta$ . Observamos nessas Figuras (a), (b), (c) e (d) com  $\Delta = 0$  *meV* (linha verde) em todos os casos, a barreira de potencial permanece perfeitamente transparente para quaisquer valores de energia, igualmente ao caso anteriormente estudado onde  $T = 1$  característico do tunelamento Klein. Em (a) temos  $L_w = 30$  *nm* (linha vermelha) e  $L_w = 60$  *nm* (linha pontilhada azul) com  $\Delta = 20$  *meV* e (b)  $\Delta = 40$  *meV*,  $0 \leq E \leq V_0 - \Delta$  nessa região observamos que a probabilidade de transmissão tem modo oscilante. Na segunda região  $V_0 - \Delta \leq E \leq V_0 + \Delta$  a função de onda é amortecida e a transmissão decai exponencialmente indo a zero, em seguida apresenta alguns picos ressonantes mais agudos atingindo a unidade que correspondem a estados quase-ligados na região do poço, diferindo assim, do sistema de barreira simples. Na terceira região  $E \geq V_0 + \Delta$  temos as mais altas energias oscilantes na barreira e vão a unidade para valores de mais altas energias. Esses resultados nos picos ressonantes estão associados com o fenômeno de férmions de Dirac penetrando em dupla barreiras simétricas [16, 75, 76, 77], obedecendo as duas condições de ressonância já mencionadas. Nessas Figuras podemos observar novamente a influência da largura do poço  $L_w$  e do gap de energia  $\Delta$  que determinam a largura no gap de transmissão, como descrito [72], contudo consideramos apenas energias positivas em nosso trabalho, diferindo do caso anterior Fig.(3.7) onde consideramos estados de quase-partículas de massa finita em todo o sistema.

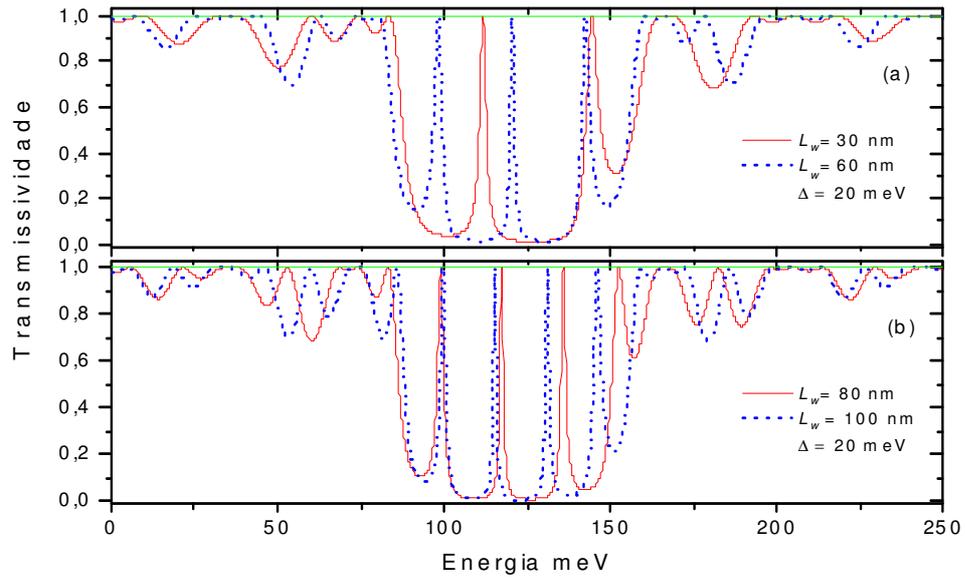


Figura 4.16: Transmissividade em função da energia incidente,  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$   $\Delta = 20 \text{ meV}$  em (a)  $L_w = 30$  e  $60 \text{ nm}$ , (b)  $L_w = 80$  e  $100 \text{ nm}$ .

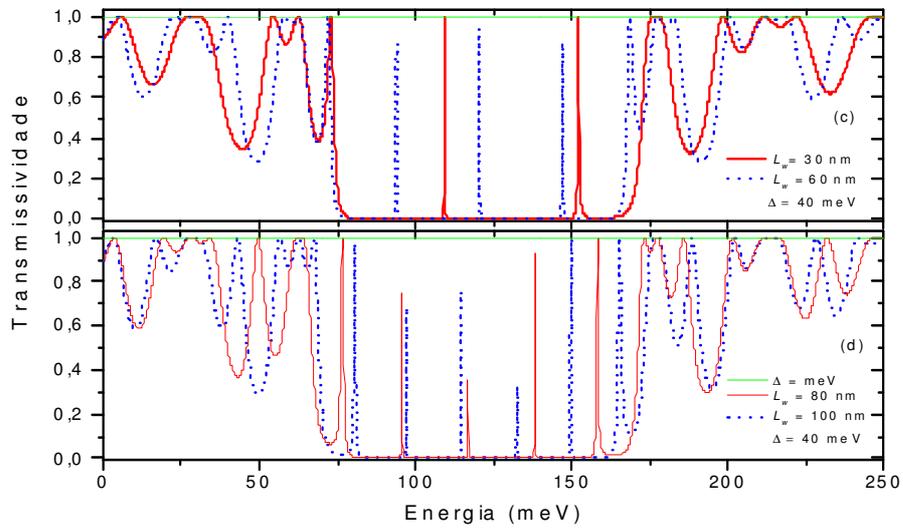


Figura 4.17: Transmissividade em função da Energia incidente,  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$  e  $\Delta = 40 \text{ meV}$  em (a)  $L_w = 30$  e  $60 \text{ nm}$ , (b)  $L_w = 80$  e  $100 \text{ nm}$ .

A Fig.(4.18) revela a dependência da transmissividade com a energia incidente e ângulo de incidência do elétron com  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$  e  $V_0 = 120 \text{ meV}$ . O sistema considerado de acordo com a Fig.(4.15). Em (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ . Nessas figuras, são verificadas as regiões ressonantes na transmissividade bem como as regiões de energia proibida, a forma da região de tunelamento são ligeiramente semelhantes seguindo um espectro parabólico devido a influência do gap de energia  $\Delta$ . Para alguns valores de energia incidente e ângulo de incidência normal pequeno em (a) são verificados alguns picos ressonantes e regiões com gap de transmissão tornando as ressonâncias ainda mais restritas, para  $E > V_0$  observamos oscilações com a energia. Em (b) podemos observar a energia incidente e ângulo de incidência ainda mais restritos no espectro de transmissão devido o aumento do gap de energia  $\Delta = 40 \text{ meV}$  que produzem efeito no gap de transmissão.e a separação entre picos ressonantes devido o poço quântico, essas estreitas linhas de energias podem ser usadas como filtro de onda.

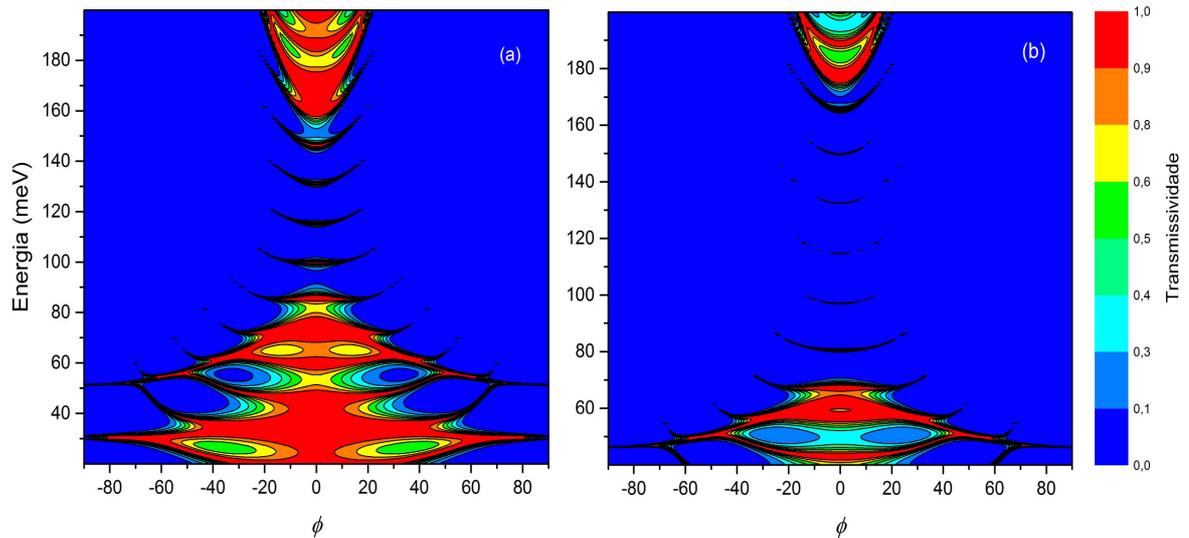


Figura 4.18: Gráfico de contorno da transmissividade através de dupla barreira de potencial versus energia incidente e ângulo de incidência, com  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$  .

Agora, voltamos nossa atenção para o caso do tunelamento de elétrons com energia  $E$  através de dupla barreira de potencial  $2D$  de altura  $V_0$  e larguras  $L_{b1}$  e  $L_{b2}$  intercaladas por um poço de largura  $L_w$  no Grafeno puro. Diferentemente do sistema anterior, sugerimos a aplicação de um gap finito de energia apenas nas regiões I, III e V o que muda as características presentes nessas regiões por meio de quase-partículas de massa finita e nas regiões II e IV, alternativamente teremos férmions de Dirac sem massa. Assim, consideremos  $\eta = \sqrt{\frac{|E|-s\Delta}{|E|+s\Delta}}$  e  $\gamma = 1$ , o que muda a probabilidade de transmissão.

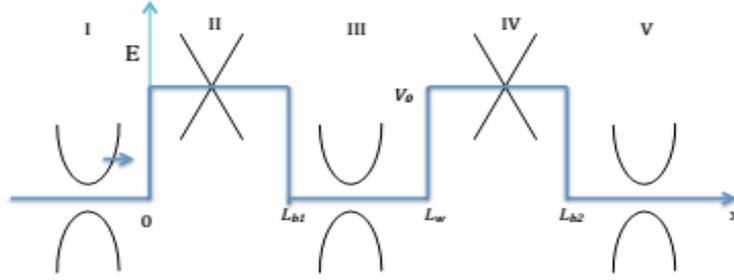


Figura 4.19: Representação esquemática do sistema de dupla barreira de potencial  $V_0$  com perda de Férmions de Dirac.

Novamente, para obtenção da transmissividade total no sistema, façamos o mesmo procedimento descrito no Capítulo... Levando em conta o sistema proposto na Fig.(4.19), assumimos o elemento  $T_{22}$  igualmente descrito para o sistema de simples barreira introduzido anteriormente, ficamos com :

$$T_{22} = \frac{k_x^2 q_x^2}{k_x^2 q_x^2 \cos^2(q_x d) + (Z k k' - k_y^2)^2 \sin^2(q_x d)}. \quad (4.6)$$

dessa forma, a transmissividade será obtida a partir da Eq.3.55.

Nas Figs.(4.20) e (4.21) é possível notar (linha verde) usando  $\Delta = 0 \text{ meV}$  e o ângulo de incidência  $\phi = 0^\circ$  temos que as barreiras permanecem perfeitamente transparentes como visto nos dois casos anteriores que são uma característica de férmions de Dirac sem massa e estão relacionados com o paradoxo de Klein. Pode-se verificar nesses gráficos que

todas as curvas iniciam com zero de transmissão  $0 \leq E \leq \Delta$  e oscilam até alcançarem a transmissão total, os vales se alargam com a redução de  $L_w$  e para valores mais altos na energia  $E \geq V_0 + \Delta$ .

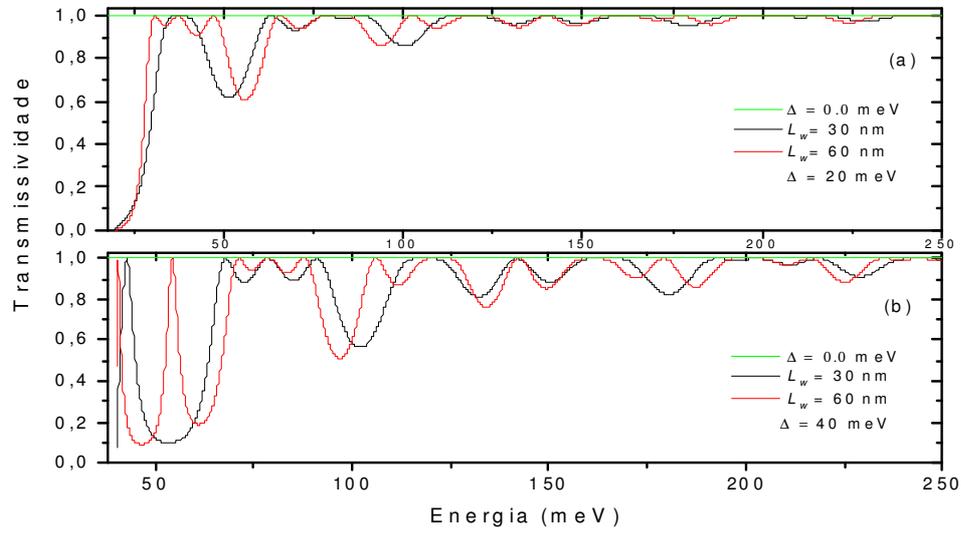


Figura 4.20: Transmissividade em função da Energia incidente,  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$  e  $\Delta = 0 \text{ meV}$  (linha verde), em (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$ , (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ .

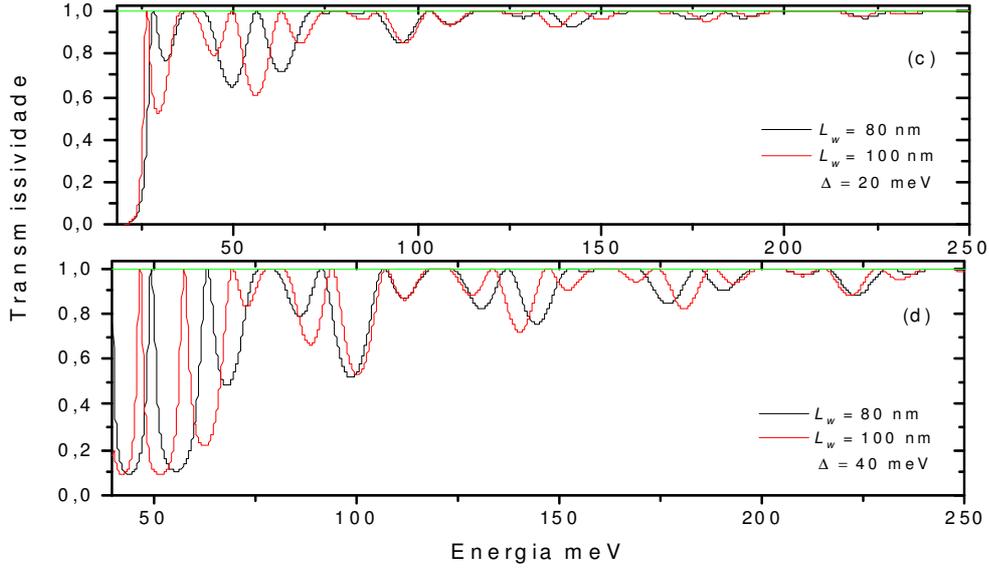


Figura 4.21: Transmissividade em função da Energia incidente,  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$  e  $\Delta = 0 \text{ meV}$  (linha verde), em (c)  $\Delta = 20 \text{ meV}$ , (d)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ .

Para esse mesmo sistema Fig.(4.19) apresentamos na Fig.(4.22) a dependência da energia incidente e do ângulo de incidência no espectro de transmissividade, aqui  $L_{b1} = L_{b2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$  e  $V_0 = 120 \text{ meV}$  onde são mostradas as regiões de tunelamento ressonantes e regiões de energia proibida. Em (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ , de modo análogo na ocorrência de energia incidente ou ângulo de incidência fora da região de tunelamento estados eletrônicos não serão encontrados dentro da barreira fazendo com que o coeficiente de transmissão decaia exponencialmente conduzido a estados de energias proibidas no espectro de transmissividade. Para ângulo de incidência normal são observamos valores discretos na energia incidente que conduzem a picos ressonantes na transmissividade, os vales entre os mesmos tornam-se cada vez mais largos indo a unidade para valores superiores da energia, o efeito do aumento do gap de energia (b) podemos ver o estreitamento nos níveis de energia incidente e alargamento nos vales, a medida que o ângulo de incidência são aumentados ocorre um aumento drástico nos valores de energia incidente para os quais a probabilidade de transmissão vai a zero.

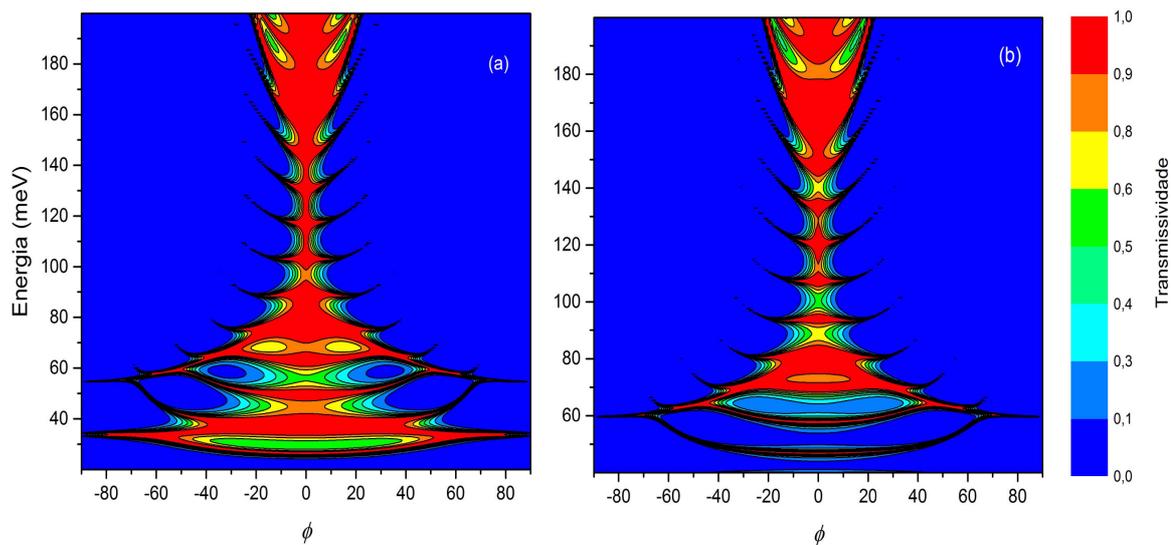


Figura 4.22: Gráfico de contorno do coeficiente de transmissão através de dupla barreira de potencial versus energia incidente e ângulo de incidência, com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a)  $\Delta = 20 \text{ meV}$  e (b)  $\Delta = 40 \text{ meV}$ .

A partir dos resultados da transmissividade acima encontrados, estendemos nosso estudo na investigação de outra importante propriedade Física do Grafeno: a condutância quântica. A condutância é uma propriedade elétrica que representa a capacidade de transportar portadores de carga através de um condutor.

### 4.3 Condutância em barreira dupla de Grafeno

A condutância balística de temperatura abaixo de zero é obtida através da medida do fluxo de elétrons a metade da superfície de Fermi [24, 78].

$$G = G_0 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(\phi) \cos \phi d\phi, \quad (4.7)$$

onde  $G_0 = (2e^2/\hbar) (l/\pi\hbar v_F)$  denomina-se quantum de condutância,  $l$  é comprimento da estrutura tomado ao longo da direção  $y$ .

Na Fig.(4.23) mostramos a condutância como função da energia incidente do elétron para o sistema mostrado na Fig.(3.7) onde consideramos férmions massivos de Dirac em todas as regiões da estrutura de dupla barreira de potencia. Podemos observar várias torções na condutância causadas pela transmissão ressonante que estão relacionadas com os estados quase ligados. Mais significativamente, verifica-se em todas as curvas da condutância a formação de zonas de energia proibida, que são uma consequência do gap de energia que produzem gap na probabilidade de transmissão. As energias proibidas ficam mais afastadas com o aumento do gap de energia e os picos ressonantes sugem devido a estados quase-ligados na região do poço.

Também podemos observar que ao se incrementar  $V_0$  oscilações na condutância começam a se manifestar, devido as interferências quânticas, que são conhecidas como oscilações de Fabry-Pérot com efeito das barreiras de potencial que atuam como interfaces nas quais ocorrem reflexão e transmissão eletrônica. De modo análogo, uma cavidade óptica de Fabry-Pérot consiste em espelhos altamente refletores, que é usada frequentemente como um espectômetro óptico na qual se observa transmissões dadas por ressonâncias muito bem definidas. Do ponto de vista eletrônico, podemos também pensar numa cavidade de Fabry-Pérot, exibindo padrões de interferência construtiva provenientes das reflexões que ocorrem nas junções das distintas regiões do sistema considerado.

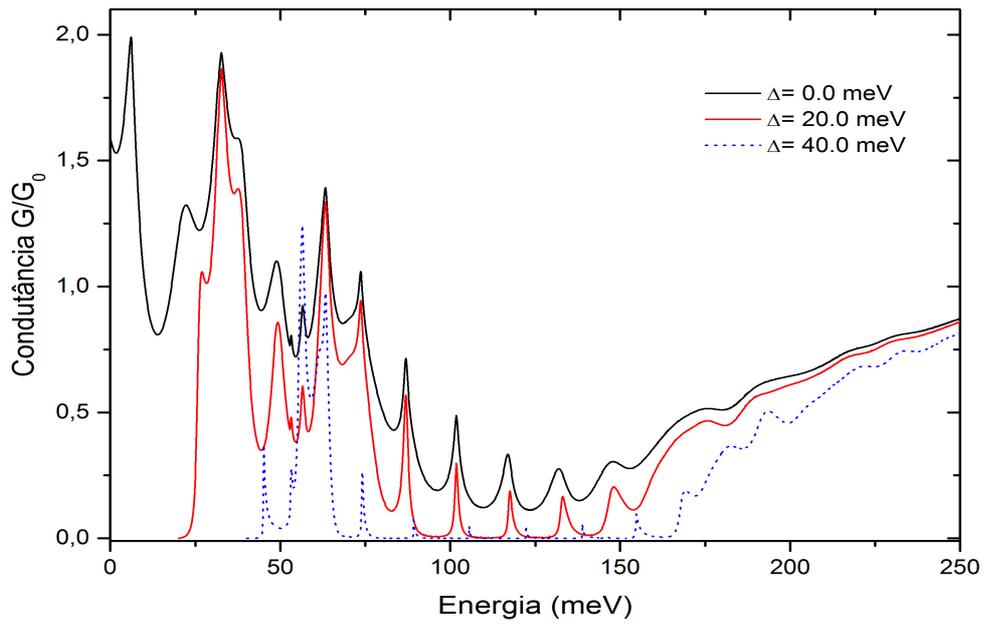


Figura 4.23: Condutância versus energia incidente onde  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ , (a)  $\Delta = 0 \text{ meV}$  (linha preta),  $\Delta = 20 \text{ meV}$  (linha vermelha) e  $\Delta = 40 \text{ meV}$  (linha pontilhada azul), relativo ao sistema mostrado na Fig.(3.7).

Na Fig.(4.24), apresentamos os resultados da condutância versus energia incidente do elétron para o sistema proposto esquematizado na Fig.(4.15) com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50$  nm,  $L_w = 100$  nm,  $V_0 = 120$  meV, fazendo  $\Delta = 0.0$  meV (linha preta),  $\Delta = 20.0$  meV (linha vermelha) e  $\Delta = 40.0$  meV (linha pontilhada azul). São observadas várias torções na condutância causadas pela transmissão ressonante devido aos estados quase-ligados. Verifica-se ainda em todas as curvas da condutância a formação de zonas de energia proibida, como consequência do gap na probabilidade de transmissão. As energias proibidas são afastadas com o aumento do gap de energia e os picos ressonantes surgem devido a estados quase-ligados na região do poço, é notado uma leve diferença nas oscilações que ficam mais suaves em relação ao primeiro caso apresentado acima que tem sua origem nas oscilações de Fabry-Pérot.

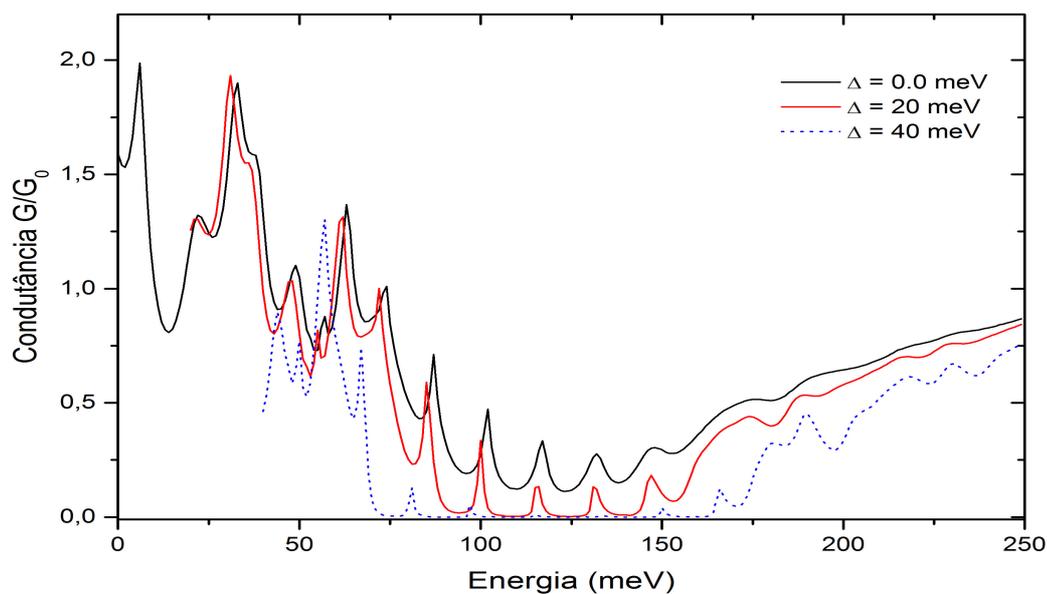


Figura 4.24: Condutância versus energia incidente, com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50$  nm,  $L_w = 100$  nm,  $V_0 = 120$  meV, e  $\Delta = 0$  meV (linha preta),  $\Delta = 20$  meV (linha vermelha) e  $\Delta = 40$  meV (linha pontilhada azul), relativo ao esquema proposto na Fig.(4.15).

Na Fig.(4.25), apresentamos os resultados da condutância versus energia incidente do elétron para o sistema proposto esquematizado na Fig.(4.19) com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50$  nm,  $L_w = 100$  nm,  $V_0 = 120$  meV, fazendo  $\Delta = 0.0$  meV (linha preta),  $\Delta = 20.0$  meV (linha vermelha) e  $\Delta = 40.0$  meV (linha pontilhada azul). O comportamento da transmissividade ressonante mostran-se como torções na curva de condutância como consequência dos estados quase-ligados. Não são verificadas zonas de energia proibida, uma vez que para esse sistema não temos a formação de gap de transmissão, com exceção dos pontos em que  $0 \leq E \leq \Delta$  como visto na curva de transmissividade. Então, é notado um crescimento na curva da condutância e os picos ressonantes são devido a estados quase-ligados na região do poço. Diferentemente dos resultados anteriores não são vistos gap de transmissão e as oscilações criam vales cada vez mais largos em relação aos dois primeiros casos apresentados acima, que tem sua origem nas oscilações de Fabry-Pérot devido a fenômeno de interferências quânticas. Em todas as curvas podemos notar quando as energias icidente ficam acima do máximo de altura das barreiras o perfil de ressonância quase praticamente desaparece.

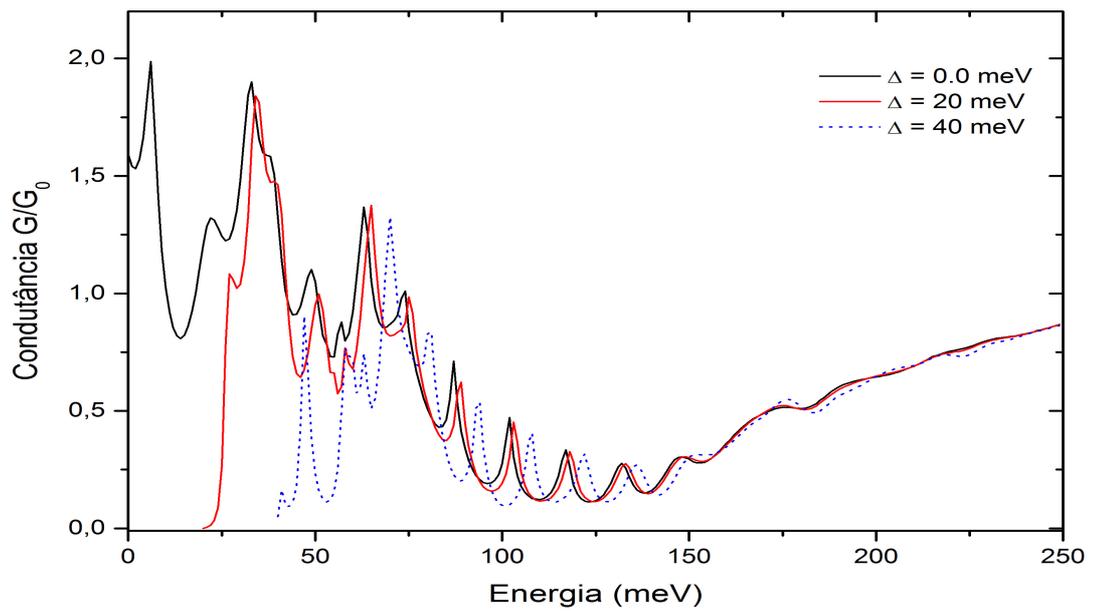


Figura 4.25: Condutância versus energia incidente, com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0 \text{ meV}$  (linha preta),  $\Delta = 20 \text{ meV}$  (linha vermelha) e  $\Delta = 40 \text{ meV}$  (linha pontilhada azul), relativo ao esquema proposto na Fig.(4.19).

Na Fig.(4.26), apresentamos a condutância versus potencial das barreiras  $V_0$  com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0.0 \text{ meV}$  e energia incidente fixa  $E = 15, 25, 85$  e  $150 \text{ meV}$ . Podemos notar que ocorrem oscilações periódicas na condutância em função do potencial das barreiras, que é uma consequência direta dos efeitos de ressonância no sistema para  $E < V_0$ . Esses resultados são válidos apenas para regime balístico. Na presença de desordem os resultados da condutância devem ser alterados. Como pode ser visto, o aumento da energia incidente  $E$  reduz o número de oscilações na condutância, quando  $E = V_0$  observamos uma brusca mudança onde a condutância passa a ser crescente com o potencial.

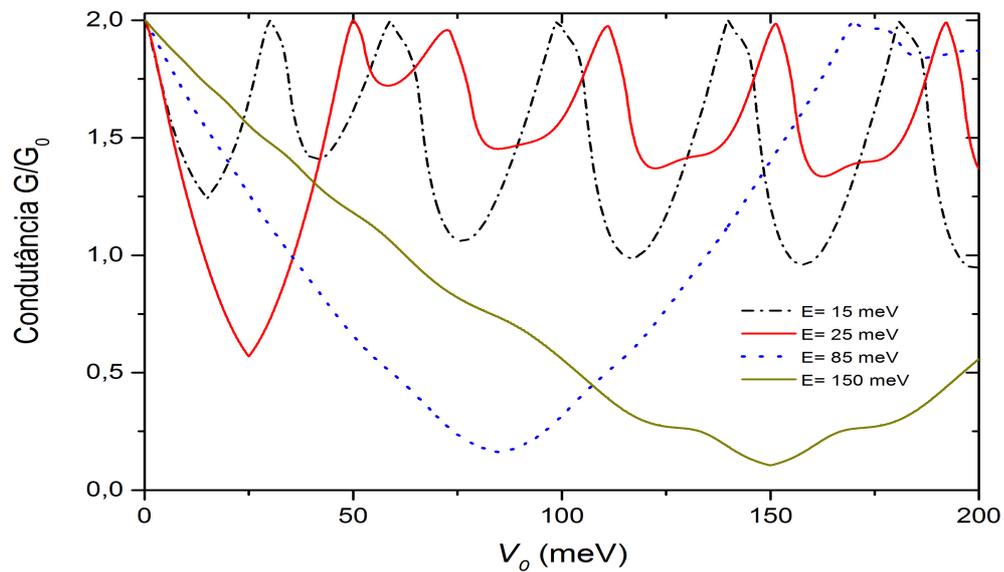


Figura 4.26: Condutância versus potencial da dupla barreira  $V_0$ , com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $\Delta = 0 \text{ meV}$  relativo ao esquema proposto na Fig.(3.7).

Na Fig.(4.27), apresentamos a condutância versus potencial das barreiras com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0, 20 \text{ e } 40 \text{ meV}$  e energia incidente fixa  $E = 65 \text{ meV}$ , com a inserção do gap de energia verifica-se um gap na curva da condutância que está centrado em  $E = V_0$  e aumenta segundo o valor de  $\Delta$ .

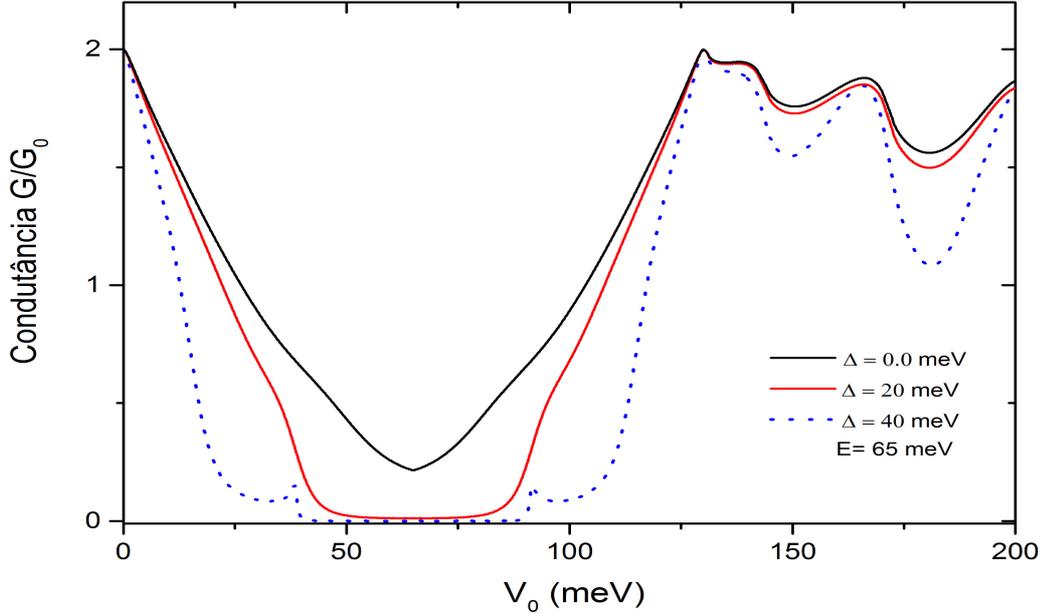


Figura 4.27: Condutância versus potencial das barreiras  $V_0$ , com  $L_{b_1} = L_{b_2} = 50 \text{ nm}$ ,  $L_w = 100 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\phi = 0^\circ$   $\Delta = 0, 20 \text{ e } 40 \text{ meV}$ .

As análises acima descritas implicam que esses fenômenos podem ser testados experimentalmente usando dispositivos de Grafeno. O princípio básico para a realização de tais experimentos consiste no uso de gates local e colimadores similares aos usados na óptica eletrônica para medir gases  $2D$  para a medida de tunelamento de elétrons em camada única de Grafeno separado do *SiC* [33]. Para a realização experimental, a partir do Grafeno obtido usa-se o portão de voltagem para criar as barreiras de altura variáveis. O portão simplesmente atravessa toda a amostra de Grafeno em ângulos diferentes correspondendo a diferentes ângulos incidentes com o elétron incidente ao longo da direção vertical da porta. A queda de tensão através da barreira pode ser medida através do

potencial de contato e medindo a queda de tensão através da barreira, tal como uma função da tensão da porta aplicada, a sua transparência para diferentes valores de  $V_0$  pode então ser analisada.

## 4.4 Densidade de corrente em barreira dupla de Grafeno

Nessa seção reservamos atenção ao cálculo densidade de corrente para o sistema de dupla barreira de Grafeno. O esquema da estrutura (enviesada) na presença de um campo elétrico externo aplicado  $F'$  desde a região  $x = 0$  e  $x = L_{b2}$  está representado na Fig.(4.28). O perfil do potencial do sistema ao longo da direção  $x$  de crescimento da dupla barreira é então dado por

$$V'(x) = \begin{cases} V_0 - eF'x, & \text{para a barreira,} \\ -eF'x, & \text{para o poço,} \end{cases} \quad (4.8)$$

onde  $V_0$  representa a altura da barreira de potencial. Desse modo, temos um termo adicional de potencial no Hamiltoniano  $V'(x)$ , e os vetores de onda agora são

$$k_{ix} = \begin{cases} q_x = \frac{((E-V_0)^2 - \Delta^2) + eF'x}{\hbar^2 v_F^2} \cos \theta, & \text{para a barreira,} \\ k_x = \frac{(E^2 - \Delta^2) + eF'x}{\hbar^2 v_F^2} \cos \phi, & \text{para o poço,} \end{cases} \quad (4.9)$$

$$k_{iy} = \begin{cases} q_y = \frac{((E-V_0)^2 - \Delta^2) + eF'x}{\hbar^2 v_F^2} \sin \theta, & \text{para a barreira,} \\ k_y = \frac{(E^2 - \Delta^2) + eF'x}{\hbar^2 v_F^2} \sin \phi, & \text{para o poço,} \end{cases} \quad (4.10)$$

Usando a probabilidade de transmissão, a densidade de corrente ( $I$ ) para camada única de Grafeno devido a tensão aplicada ( $V_b = F'L$ ) ao longo da direção  $x$  é dada por [58, 79, 80, 81].

$$I = -\frac{4e}{v_F \hbar^2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(\phi) [f(E) - f(E + eV_b)] E dE \cos(\phi) d\phi, \quad (4.11)$$

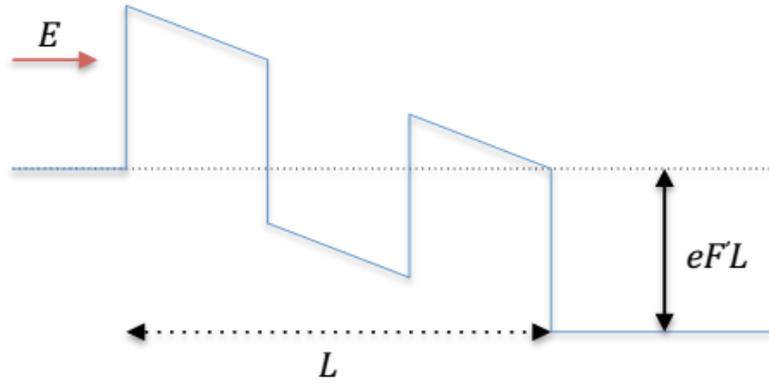


Figura 4.28: Perfil do potencial de dupla barreira no Grafeno com efeito da aplicação de campo elétrico.

onde  $f(E)$  é a função de Fermi, no regime de baixas temperaturas a função  $[f(E) - f(E + eV_b)]$  pode ser aproximada por  $-eV_b\delta(E - E_F)$ . Podemos então reescrever a expressão da densidade de corrente para baixas temperaturas como

$$I = \lambda V_b \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(\phi, eV_b) \cos(\phi) d\phi, \quad (4.12)$$

onde  $\lambda = 4e^2 E_F / v_F h^2$  e  $E_F$  é a energia de Fermi.

Na Fig.(4.29) apresentamos os resultados da densidade de corrente em função da tensão aplicada para o sistema de dupla barreiras conforme o esquema da Fig.(3.7) com os seguintes parâmetros:  $L_{b1} = L_{b2} = 30 \text{ nm}$ ,  $L_w = 80 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0.0 \text{ meV}$  e energia incidente  $E = 15, 25 \text{ e } 65 \text{ meV}$ . A amplitude das oscilações na densidade de corrente aumentam a medida que se reduz a energia de Fermi. A escolha desses diferentes valores da energia de Fermi podem ser obtidos por meio da dopagem na estrutura [82]. A presença do tunelamento Klein causa um mínimo na densidade de corrente em monocamada de Grafeno e é sempre maior que zero. No entanto, o tunelamento Klein visto na monocamada de Grafeno não é tão interessante para uso em dispositivos nanoestruturados.

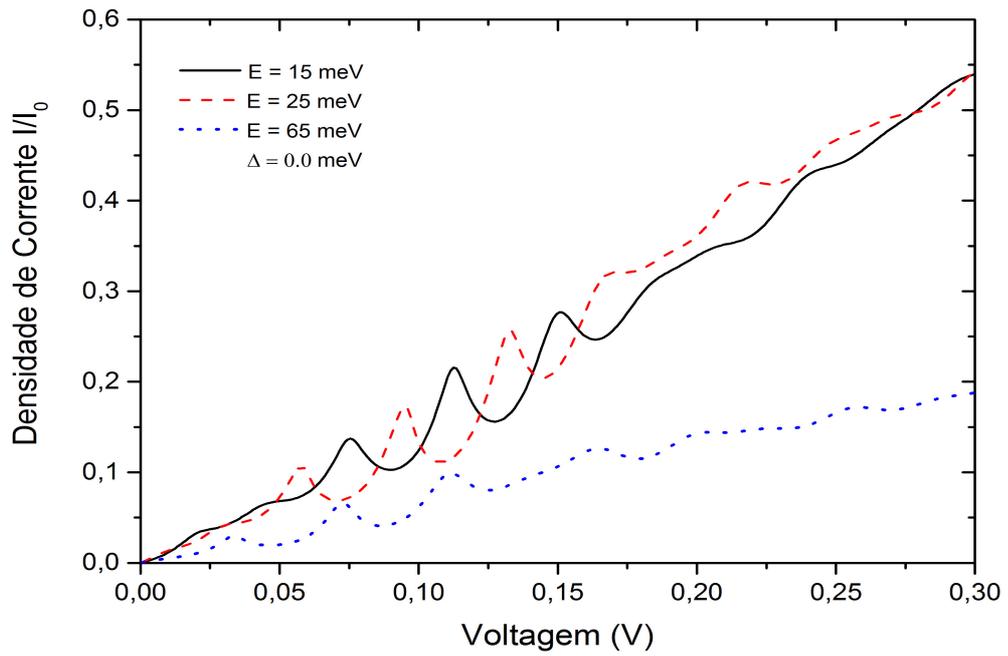


Figura 4.29: Densidade de corrente versus voltagem aplicada  $V_b(V)$  para sistema de dupla barreira em monocamada de grafeno.  $L_{b1} = L_{b2} = 30$  nm,  $L_w = 80$  nm  $V_0 = 120$  meV,  $\Delta = 0$  meV e energia incidente  $E = 15, 25$  e  $65$  meV.

Na Fig.(4.30) apresentamos os resultados da densidade de corrente versus tensão aplicada para o sistema de dupla barreiras de potencial com  $L_{b1} = L_{b2} = 30 \text{ nm}$ ,  $L_w = 80 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0.0, 20, 40 \text{ meV}$  e energia incidente  $E = 65 \text{ meV}$ . Na presença de gap de energia a probabilidade de transmissão sofre grandes modificações como já visto nos resultados da transmissividade, desse modo a amplitude das oscilações na densidade de corrente decrescem com o aumento do gap de energia como consequência de tais efeitos. A manipulação dos parâmetros de potencial no sistema como largura das barreiras, altura e campos elétricos aplicados são de fundamental importância para os resultados na curva de densidade de corrente.

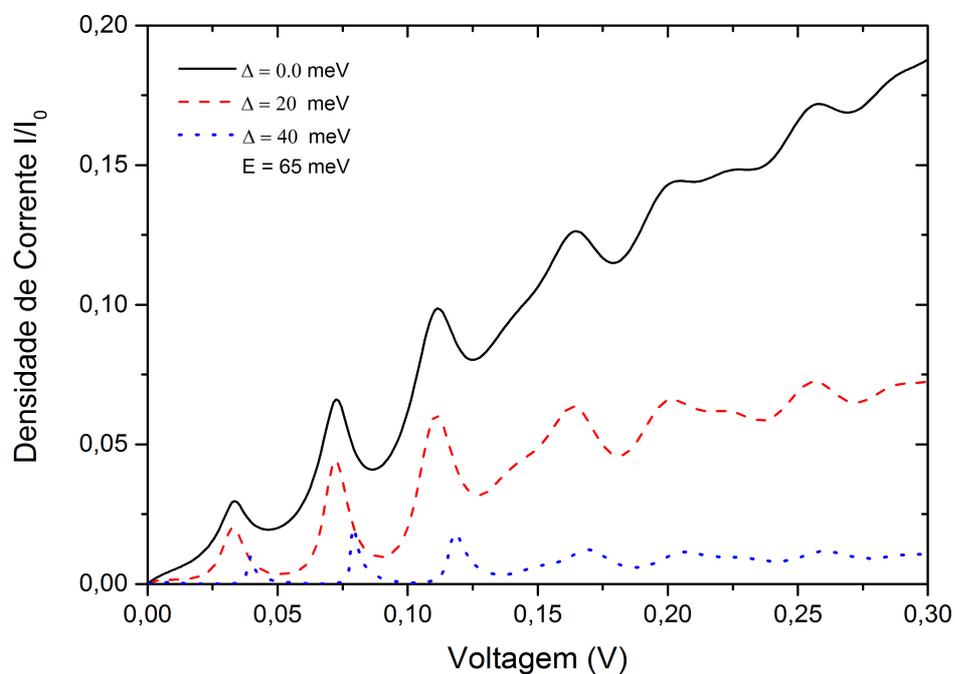


Figura 4.30: Densidade de corrente versus voltagem aplicada  $V_b(V)$  para o sistema de dupla barreira  $L_{b1} = L_{b2} = 30 \text{ nm}$ ,  $L_w = 80 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e energia incidente fixa  $E = 65 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0, 20, \text{ e } 40 \text{ meV}$ .

Na Fig.(4.31) mostramos a densidade de corrente versus tensão aplicada para o sistema de dupla barreira segundo esquema da Fig.(4.15) com  $L_{b1} = L_{b2} = 30 \text{ nm}$ ,  $L_w = 80 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0, 20 \text{ e } 40 \text{ meV}$  e energia incidente  $E = 65 \text{ meV}$ . Podemos notar a influência do gap de energia na probabilidade de transmissão e conseqüentemente na densidade de corrente, onde as amplitudes das oscilações na densidade de corrente decrescem consideravelmente com o aumento do gap de energia.

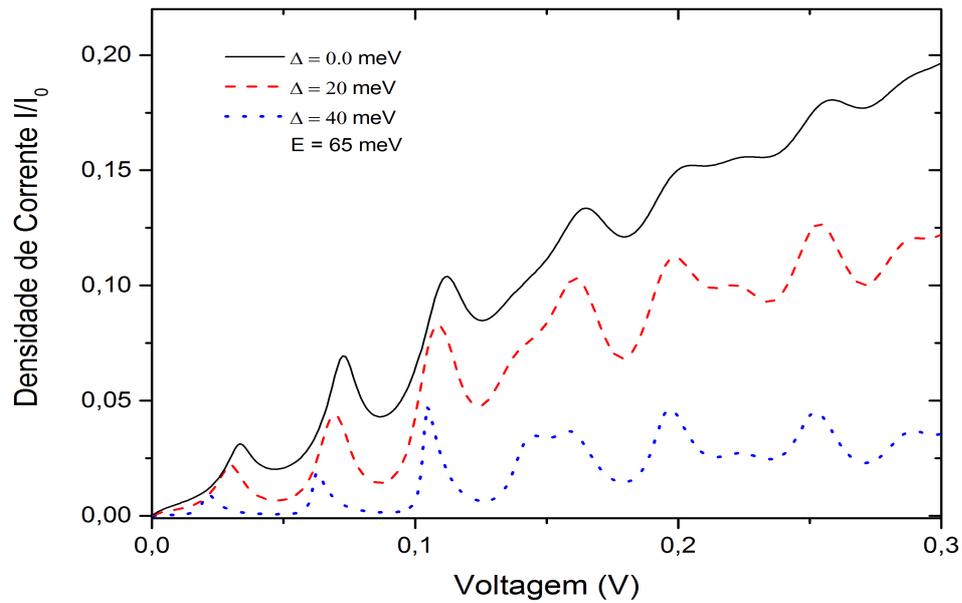


Figura 4.31: Densidade de corrente versus tensão aplicada  $V_b(V)$  para o sistema de dupla barreira  $L_{b1} = L_{b2} = 30 \text{ nm}$ ,  $L_w = 80 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$ , e energia incidente fixa  $E = 65 \text{ meV}$ ,  $\Delta = 0, 20, \text{ e } 40 \text{ meV}$ .

A seguir na Fig.(4.32) mostramos a densidade de corrente versus tensão aplicada para o sistema de dupla barreira segundo esquema da Fig.(4.19) com  $L_{b1} = L_{b2} = 30$  nm,  $L_w = 80$  nm,  $V_0 = 120$  meV,  $\Delta = 0.0, 20$  e  $40$  meV e energia incidente  $E = 65$  meV. A presença de gap de energia para esse sistema produz mudanças no perfil da transmissividade diferenciando-se dos resultados anteriores, desse modo a amplitude das oscilações na densidade de corrente decrescem mais suavemente com o aumento do gap de energia. A manipulação dos parâmetros de potenciais são a chave principal para a obtenção desses resultados no sistema como largura das barreiras. A presença de campo elétrico aplicado na região do coletor é responsável pelo surgimento de oscilações na curva de transmissividade, que serão visto nas curvas de densidade de corrente, respectivamente. Os resultados da densidade de corrente de tunelamento são uma ferramenta de informação importantes para efeitos de comparações com futuros resultados experimentais.

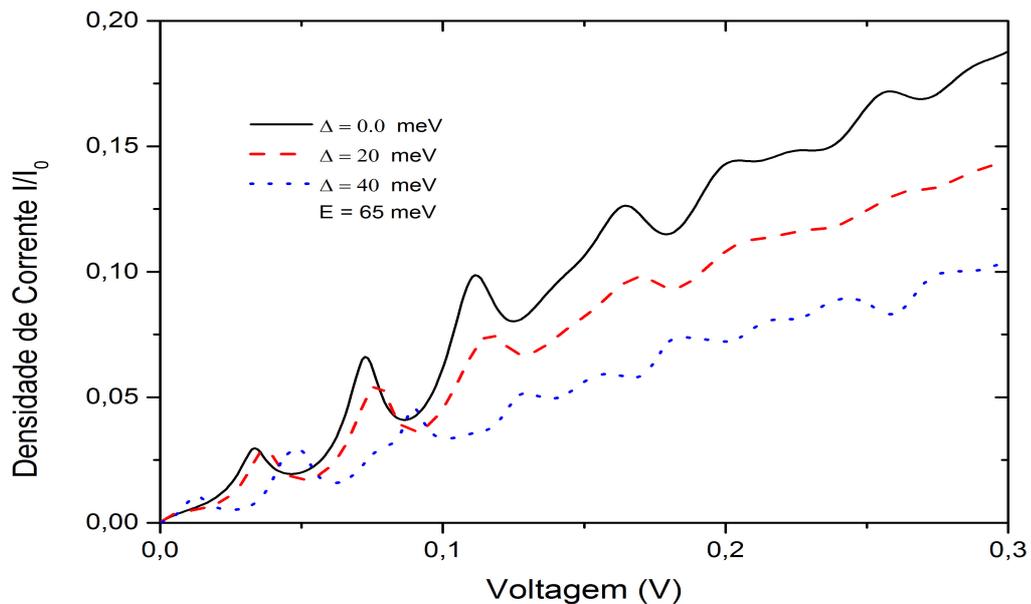


Figura 4.32: Densidade de corrente versus tensão aplicada  $V_b(V)$  para o sistema de dupla barreira  $L_{b1} = L_{b2} = 30$  nm,  $L_w = 80$  nm,  $V_0 = 120$  meV e energia incidente fixa  $E = 65$  meV,  $\Delta = 0, 20$ , e  $40$  meV.

A Fig.(4.33) revela a dependência da densidade de corrente versus voltagem e energia incidente  $E$  para o sistema de dupla barreira de potencial com  $L_{b1} = L_{b2} = 30 \text{ nm}$ ,  $L_w = 80 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 20 \text{ meV}$ . Em (a) consideramos gap de energia em todo o sistema (veja Fig.(3.7)), em (b) temos gap de energia apenas nas regiões II e IV segundo sistema proposto na Fig.(4.15) e em (c) aplicamos gap de energia nas regiões I, III e V como na Fig.(4.19)). Nessas Figuras é possível notarmos regiões onde a amplitude das oscilações da densidade de corrente podem atingir valores máximos em razão da presença de gap de energia, o que muda consideravelmente a transmissividade como visto nos casos estudados anteriormente onde férmions de Dirac sem massa podem ganhar massa em determinadas regiões do sistema de dupla barreiras. Nesses gráficos é possível notarmos os valores para os quais as amplitudes da densidade de corrente pode ser aumentada ou reduzida em função da energia incidente e voltagem aplicada. Para valores mais altos de energia incidente é possível notar uma queda brusca nas oscilações da densidade de corrente.

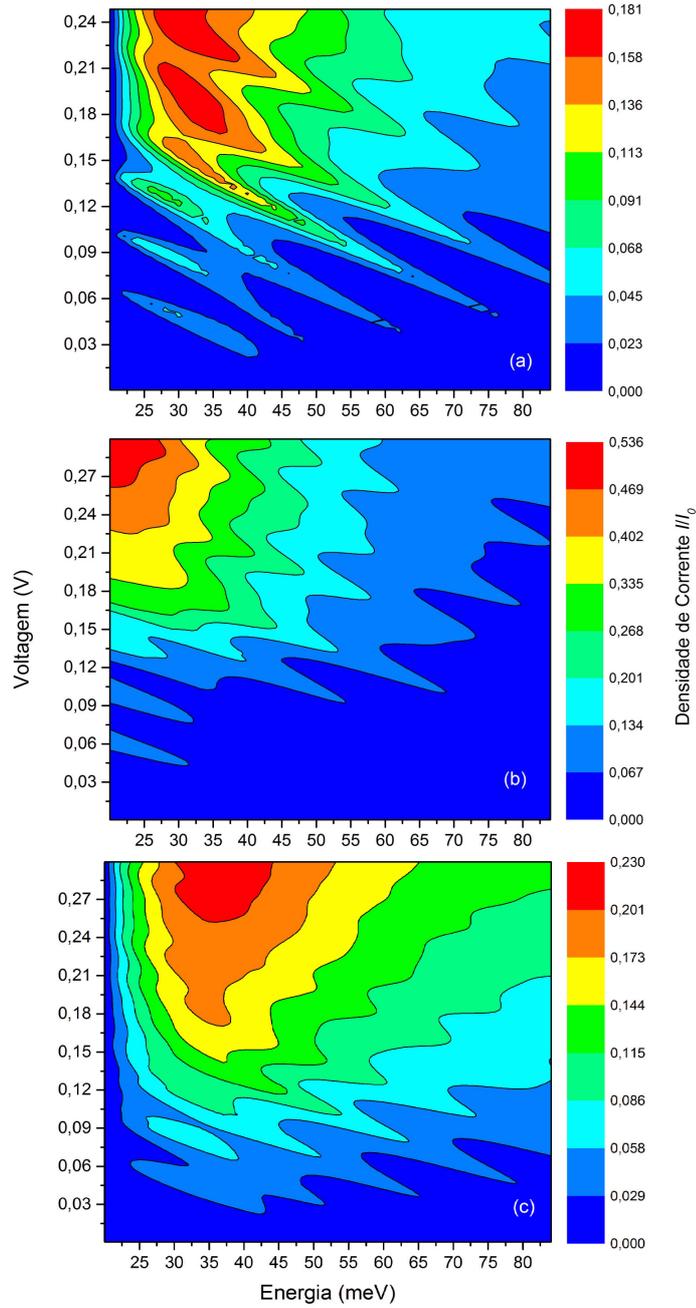


Figura 4.33: Gráfico de contorno da Densidade de corrente versus voltagem  $V_b(V)$  e energia incidente  $E$  para o sistema de dupla barreira com  $L_{b1} = L_{b2} = 30 \text{ nm}$ ,  $L_w = 80 \text{ nm}$ ,  $V_0 = 120 \text{ meV}$  e  $\Delta = 20 \text{ meV}$ . Em (a) consideramos o gap de energia em todas as regiões da estrutura, (b) gap de energia nas regiões II e IV e (c) gap de energia apenas nas regiões I, III e V.

# Capítulo 5

## Conclusão

Neste trabalho, analisamos as propriedades de transporte em camada única de Grafeno através de estruturas de simples e dupla barreira de potencial, que são dispositivos altamente promissores para uso numa variedade de aplicações tecnológicas. A principal ferramenta utilizada para o estudo teórico foi a aproximação "tight-binding". O modelo, apesar de sua simplicidade tem sido largamente utilizado em trabalhos teóricos para elucidar uma grande variedade de propriedades físicas importantes do Grafeno. Utilizamos o método da matriz de transferência para a determinação do coeficiente de transmissão, uma vez que tal método também tem sido bastante usado para tal tarefa devido sua simplicidade de uso. Nosso interesse principal é focado na possibilidade da construção de estruturas com gap de energia no Grafeno puro, que pode ser conseguido por meio de interação com o substrato e técnicas experimentais. Por esse motivo nos capítulos iniciais apresentamos uma revisão das principais propriedades físicas do Grafeno bem como a viabilidade da formação de gap de energia e a construção de estruturas visando o confinamento de quase-partículas.

Orientados por uma série de trabalhos consolidados no estudo de propriedades de transporte do Grafeno, focamos nosso problema no estudo em sistemas contendo gap de energia em regiões distintas do sistema de simples e dupla barreiras de Grafeno em face a já provada fabricação de junções especiais do tipo  $n - p$ ,  $n - p - n$  ou  $p - n - p$ .

Em dispositivos reais, as propriedades de transporte no Grafeno são muito diferentes do regime balístico devido a existência de desordem no Grafeno. Os defeitos no Grafeno modificam fortemente os estados próximos aos pontos de Dirac [34, 83], por exemplo, ondulações são cruciais para a produção de Grafeno [5], por exemplo, estados de vacância mudam a densidade de estados perto do nível de Fermi [84], o excesso de impureza induz uma assimetria elétron-buraco [44]. A inserção de defeitos pode introduzir mudança na densidade de estados, conduzindo ao aumento ou supressão do transporte coerente de elétrons.

O comportamento dos portadores de carga no grafeno em sistemas como barreiras de potenciais nos permite observar que: possuem considerável probabilidade de transmissão para um amplo conjunto de ângulos de incidência como também apresentam efeito de tunelamento, que possibilita o estudo do tunelamento Klein: uma importante característica também provada no Grafeno. Tal efeito desempenha importante papel nas propriedades de transporte de carga, especialmente no regime de baixas energias. Tendo um grande potencial tecnológico de modo particular em nanotecnologia. Esta observação difere dos portadores de carga em semicondutores convencionais onde a probabilidade de transmissão decai exponencialmente com o aumento da largura e da altura da barreira.

Por outro lado verifica-se consideráveis diferenças entre sistemas de simples e dupla barreiras de potencial. De um modo geral para uma barreira de potencial, observa-se em relação a dupla barreira de potencial o surgimento de picos na curva de transmissividade em função da energia incidente devido a estados quase-ligados na região do poço, tornando esses sistemas mais eficazes e interessantes do ponto de vista tecnológico. No entanto, quando comparadas as curvas de transmissividade considerando-se gap nulo e ângulo de incidência normal as barreiras permanecem perfeitamente transparentes devido a uma característica única para férmions de Dirac sem massa relacionados com o paradoxo de Klein. São ainda verificadas as interferências quânticas que em analogia às interferências de Fabry-Pérot em óptica dependem da qualidade dos contatos entre a amostra e eletrodos metálicos. Nesse caso temos um interferômetro elétrico de Fabry-Pérot que dá origem as

interferências quântica vistas nos sistema estudados. Essas evidência baseia-se na observação de oscilações na condutância quando a tensão de porta é alterada. A partir dos sistemas de heterojunções propostos é possível notarmos drásticas mudanças no perfil da transmissividade, que pode ser explorado experimentalmente, permitindo aumentar a eficiência desses dispositivos do ponto de vista do transporte de carga. Ainda, é possível notarmos uma certa restrição quanto a variedade de ângulos de incidência promovendo mudança drásticas na probabilidade de transmissão, e a manipulação de outros ângulos em que o dispositivo é transparente. Os efeitos de gap de energia, bem como a dopagem nessas estruturas têm respostas bem diferenciadas nas curvas de transmissividade. Nesse sentido o comportamento diferenciado das propriedades dos portadores de carga, em camada única de Grafeno, em sistemas de barreiras apresenta-se como mais uma propriedade exótica deste material. E pode ser explorada tanto do ponto de vista da física envolvida quanto da sua utilização tecnológica em dispositivos mais eficientes no que diz respeito ao transporte de carga. motivando assim o desenvolvimento de trabalhos experimentais na busca pelos dispositivos proposto. Os resultados da densidade de corrente de tunelamento constituem um importante instrumento teórico para efeitos de comparação com resultados experimentais.

Nossa proposta futura versa sobre outras propriedade bastante interessante, por nós já desenvolvida em outras estruturas semicondutoras- a interação spin-órbita [85], com aplicações à monocamada e bicamada de Grafeno [86, 87] bem como propriedades magnéticas.

# Referências

- [1] K.S. Novoselov, A. K. Geim et al, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science*, **306**, 666-669 (2004)
- [2] L.D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics Part I*, Sections 137 and 138 (Pergamon, Oxford, 1980)
- [3] N. D. Mermin e H. Wagner, Absence Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models, *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133-1136 (1966)
- [4] N. D. Mermin e H. Wagner, Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.*, **176**, 250-154 (1968)
- [5] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, S, Roth. The structure of suspended graphene sheets, *Nature*, **446**, 60-63 (2007).
- [6] P. R. Wallace, The Band Theory of Graphite, *Phys. Rev.*, **71**, 622-634 (1947).
- [7] J. W. McClure, Diamagnetism of Graphite, *Phys. Rev.*, **104**, 666-671 (1956).
- [8] G. W. Semenoff, Condensed-Matter Simulation of a Tree Dimensional Anomaly, *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 2449-2452 (1984).
- [9] D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Self-consistent effective-mass theory intralayer screening in graphite intercalation compounds, *Phys. Rev. B*, **29**, 1685-1694 (1984).

- [10] C. Lee, X. D. Wei, J. W. Kysar and J. Hone, *Science*, **321** 385 (2005).
- [11] R. R. Nair, P. Blake, U. M. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. R. Peres and A. K. Geim, *Science*, **320**, 1308 (2008).
- [12] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M.I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak and A. K. Geim, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 016602-016605 (2008).
- [13] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao and C. N. Lau, *Nano Letters*, **8**, 902-907 (2008).
- [14] A. K. Geim, Graphene: Status and Prospects, *Science*, **324**, 1530-1534 (2009).
- [15] P. Blake, P. D. Brimicombe, R. R. Nair, T. J. Booth, D. Jiang, F. Scheding, L. A. Ponomarenko, S. V. Morozov, H. F. Gleeson, E. W. Hill, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, *Graphene-Based Liquid Crystal Device Nano Lett.*, **8**, 1704-1708 (2008)
- [16] X. Wang, L. Zhi, K. and Mullen, Transparent Conductive graphene Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells, *Nano Letters*, **8**, 323-327 (2008).
- [17] Y. M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H. Y. Chiu, A. Gril and P. Avouris, 100-GHz Transistors from Wafer-Scale Epitaxial Graphene, *Science*, **327**, 662 (2010).
- [18] Y. Zhang, Y. Tan, H. L. Stormer and P. Kim, *Nature* **438**, 201-204 (2005).
- [19] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican and E. Y. Andrei, *Nature* **462**, 192-195 (2009).
- [20] K. I. Bolotin, F. Ghahar, M. D. Shulman, H. L. Stormer and P. Kim, Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene, *Nature*, **462**, 196-199 (2009).
- [21] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M.I. Katsnelson, F. Schedin, L.A. Ponomarenko, D. Jiang, and A. K. Geim, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 016801 (2006).

- [22] A. K. Geim and K. S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature Materials*. **6**, 183-191 (2007).
- [23] A. F. Young and P Kim, *Nature Phys.* **5**, 222-226 (2009).
- [24] S. Y. Zhou, G. H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, A. W. Heer, D. H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro and A. Lanzara, Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene, *Nature Mater*, **6**, 770 (2007).
- [25] R.E. Peierls, Quelques proprietes typique des corpses solides. *Ann. H. Poincare*, 5:177–222 (1935).
- [26] L.D., Landau. Zur Theorie der phasenumwandlungen ii. *Phys. Z. Sowjetunion*, (1937).
- [27] .N.D. Mermin. Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.*, **176**, 250 (1968).
- [28] Richard Van Noorden, Beyond sticky tape, *Nature* **483**, S32 (2012).
- [29] S. Dubin M. F. El-Kady, V. Strong and R.B. Kaner, Laser scribing of high-performance and flexible graphene-based electrochemical capacitors, *Science*, 335:1326 (2012)
- [30] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov and A. K. Geim. Two dimensional atomic crystals, *American Proc.Natl. Acad. Sci.*, 102:10451 (2005).
- [31] S. Reich, C. Thomsen, J. Maultzsch, *Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties* (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, Weinheim 2004).
- [32] G. Messina, Santangelo, S. Carbone: The future Material for Advanced Technology Application, Itália, SpringerLink, vol 100, pg 26-28, (2005).
- [33] E. F. Luis, R. Stephan and J-C. Charles, *Introduction to Graphen-based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport*, Cambridge, (2014).

- [34] 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).
- [35] M. R. Setare and D. Jahani, Phys.B, **405**, 1433-1436 (2010).
- [36] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov and A. K. Geim, Nature Phys., **2**, 620-625 (2006).
- [37] Y. Ando and T. Itoh, Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers, J. Appl. Phys., **61**, 1497 (1987).
- [38] John H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors. An introduction (Cambridge University Press, Cambridge (1998).
- [39] H. Chau Nguyen and V. Lien Nguyen, Tunneling of Dirac electrons through onedimensional potentials in graphene: a T-matrix approach, J. Phys. Condens. Matter, **21**, 1 (2009).
- [40] L. Ezaki and R. Tsu, IBM J. Res. Dev. **14**, 61 (1970).
- [41] R. Tsu, L. Ezaki and L.L.Chang, App. Phys. Lett. **24**, 593 (1974).
- [42] K.S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morosov, V. I. Fal'ko, M.I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin and A.K. Geim, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, Nature, **438**, 192-200 (2005).
- [43] K. I. Bolotin, K. J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenber, J. Hone, P. Kim and H. L. Stormer, M. D. Shulman, Ultrahigh electron mobility in suspended graphene, Solid State Commun., **146**, 351-355 (2008).
- [44] X. Du, I. Skachko, A. Barker and E. Y. Andrei, Approaching ballistic transport in suspended graphene, Nat. Nano, **3**, 491-495 (2008).

- [45] K.S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morosov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim and A.K. Geim, Room-temperature quantum Hall effect in graphene, *Science*, **315**, 1137201 (2007).
- [46] H. Jones, Applications of the Bloch theory to the study of alloys and of the properties of bismuth, *Proc. R. Soc. A*, **147**, 396-417 (2007).
- [47] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus, Edge state in graphene ribbons: nanometer size effect and edge shape dependence, *Phys. Rev. B*, **54**, 17954 (1996).
- [48] E. McCann and V. I. Fal'ko, Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 086805 (2006).
- [49] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn and E. Rotenberg, Controlling the electronic structure of bilayer graphene, *Science*, **313**, 951-954 (2006).
- [50] G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, V. M. Karpan, J. van den Brink and P. J. Kelly, Doping graphene with metal contacts, *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 026803 (2008).
- [51] C. Berger, et al., Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene, *Science* **312**, 1191-1196 (2006).
- [52] E. Rollings, et al, Synthesis and characterization of atomically-thin graphite films on a silicon carbide substrate, *J. Phys. Chem. Solids* **67**, 2172-2177 (2006).
- [53] Zupan, J., Energy Bands in Boron Nitride and Graphite, *Phys. Rev. B*, **6** 2477.(1972)
- [54] C. Enderlein, Y. S. Kim, A. Bostwick, E. Rotenberg and K. Horn, The formation of an energy gap in graphene on ruthenium by controlling the interface, *New J. Phys.***12**, 033014 (2010).

- [55] M. R. Setare and D. Jahani, Electronic transmission through p-n and n-p-n junctions of graphene, *J. Phys. Condens. Matter*, **22**, 245503 (2010).
- [56] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon, Evidence for Klein Tunneling in Graphene p-n Junctions, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026807 (2009).
- [57] O. Klein, *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
- [58] J. Milton Pereira, Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Graphene-based resonant-tunneling structure, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 132122 (2007).
- [59] A. V. Shytov, M. S. Rudner, and L. S. Levitov, Klein Backscattering and Fabry-Pérot Interference in Graphene Heterojunctions, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 156804 (2008).
- [60] M. Dragoman, D. Dragoman, G. Deligiorgis, G. Konstantinidis, D. Neculoiu, A. Cismaru, and R. Plana, Current oscillations in a wide graphene sheet, *J. Appl. Phys.* **106**, 044312 (2009).
- [61] J. Velasco, Jr., G. Liu, W. Bao, and C. N. Lau, Electrical transport in high-quality graphene pnp junctions, *New J. Phys.* **11**, 095008 (2009).
- [62] B. Özyilmaz, P. Jarillo-Herrero, D. Efetov, D. A. Abanin, L. S. Levitov, and P. Kim, Electronic Transport and Quantum Hall Effect in Bipolar Graphene p-n-p Junctions, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 166804 (2007).
- [63] M. R. Masir, P. Vasilopoulos and F. M. Peeters, Fabry-Pérot resonances in graphene microstructures: Influence of a magnetic field, *Phys. Rev. B*, **82** 115417 (2010).
- [64] B. Huard, J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, and D. Goldhaber-Gordon, Transport Measurements Across a Tunable Potential Barrier in Graphene, *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 236803 (2007).
- [65] J. R. Williams, L. DiCarlo, and C. M. Marcus, Quantum Hall Effect in a Graphene p-n Junction, *Science* **317**, 638 (2007).

- [66] Kittel C Introduction to Solid State Physics 8th edn (New Jersey: Wiley) (2005).
- [67] Rycerz A, Tworzydło J and Beenakker, C. W. J., Valley filter and valley valve in graphene, *Nat. Phys.*, **3**, 172 (2007)
- [68] V. A. Yampol'skii, S. Savel'ev and Franco Nori, Voltage-driven quantum oscillations in graphene, *New J.of Physics* **10**, 053024 (2008).
- [69] S. Y. Zhou, A. D. Siegel, A. V. Federov, F. E. Gabaly, A. K. Schmid, A. H. Castro, D. H. Lee and A. Lanzara, Origin of the energy bandgap in epitaxial graphene, *Nature Mater*, **7**, 259 (2008).
- [70] Xu, X. G. and Cao J. C., Nonlinear response induced strong absorptance of graphene in the terahertz regime, *Mod. Phys. Lett. B* **24** 2243.(2010).
- [71] Xu, Xu-Guang, Zang Chao, Xu, Gong-Jie and Cao Jun-Cheng, Electron tunneling in single layer graphene with an energy gap, *Chin. Phys. B*, **20**, 027201 (2011).
- [72] G. J. Xu, X. G. Xu, B. H. Wu, J. C. Cao, and C. Zhang, The resonant tunneling through a graphene multiquantum well system, *J. Appl. Phys.* **107**, 123718 (2010).
- [73] M.R. Masir, P. Vasilopoulos and F. M. Peeters, Tunneling, conductance, and wavevector filtering through magnetic barriers in bilayer graphene, *Phys. Rev. B*, **79** 035409 (2009).
- [74] J. M. Pereira, V. Mlinar, F. M. Peeters, and P. Vasilopoulos, Confined states and direction-dependent transmission in graphene quantum wells, *Phys. Rev. B*, **74**, 045424 (2006).
- [75] C. -X. Bai, and X. -D. Zhang, Phys., Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice, *Phys. Rev. B*, **76**, 075430 (2007).
- [76] S. Ghosh and M Sharma, Electron optics with magnetic vector potential barriers in graphene, *J. Phys. Condens. Matter* **21**, 292204 (2009).

- [77] W. T. Lu, S. J. Wang, W. Li, Y. L. Wang, and H. Jiang, Tunable electronic transmission gaps in a graphene superlattice, *Physica B* **407**, 918 (2012).
- [78] Xi Chen, Jia-Wei Tao, Design of electron wave filters in monolayer graphene by tunable transmission gap, *Appl. Phys. Lett.* **94**, 262102 (2009).
- [79] Pereira, J.M., Vasilopoulos, P., Peeters, F.M.: Resonant tunneling in graphene microstructures. *Microelectron. J.* **39** (3), 534–536 (2008).
- [80] Biswas, R., Mukhopadhyay, S., Sinha, C.: Biased driven resonant tunneling through a double barrier graphene based structure. *Phys. E* **42**, 1781 (2010).
- [81] Nam Do, V.: Comment on “Negative differential conductance of electrons in graphene barrier”. *Appl. Phys. Lett.* **92**, 216101 (2008).
- [82] Dragoman, D., Dragoman, M.: Negative differential resistance of electrons in graphene barrier. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 143111 (2007).
- [83] N M R Peres, The transport properties of graphene, *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 323201 (2009).
- [84] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, Electronic properties of disordered two-dimensional carbon, *Phys. Rev. B* **73**, 125411 (2006)..
- [85] J D S Teixeira, H O Frota and A C R Bittencourt, Spin-polarized transmissivity in an asymmetrical double barrier, *Phys. Scr.* **89** 085804 (2014).
- [86] Yokoyama, T.: Controllable spin transport in ferromagnetic graphene junctions. *Phys. Rev. B* **77**, 073413 (2008).
- [87] Sattari, F., Faizabadi, E.: Spin transport and wavevector-dependent spin filtering through magnetic graphene superlattice. *Solid State Commun.* **79**, 48 (2014).