



UNIVERSIDADE FEDERAL DA CAMPINA GRANDE  
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA  
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**DINÂMICA ELETRÔNICA EM GRAFENO  
NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO**

**Renan de Oliveira Alves**

CAMPINA GRANDE

- 2015 -

UNIVERSIDADE FEDERAL DA CAMPINA GRANDE  
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA  
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO**

**DINÂMICA ELETRÔNICA EM GRAFENO  
NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO**

**Renan de Oliveira Alves**

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos, apresentada à Unidade Acadêmica de Física em complementação aos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

CAMPINA GRANDE

- 2015 -

A474d     Alves, Renan de Oliveira.  
              Dinâmica eletrônica em grafeno na presença de um campo magnético  
              externo / Renan de Oliveira Alves. – Campina Grande, 2015.  
              65 f. : il. color.

              Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Campina  
              Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2015.  
              "Orientação: Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos, Prof.  
              Dr. Lincoln Rodrigues Ribeiro Filho".  
              Referências.

              1. Campo Magnético Externo. 2. Grafeno. 3. Equação de Dirac.  
              I. Passos, Eduardo Marcos Rodrigues dos. II. Ribeiro Filho, Lincoln  
              Rodrigues. III. Título.

CDU 53.084.88(043)

**DINÂMICA ELETRÔNICA EM GRAFENO  
NA PRESENÇA DE UM CAMPO MAGNÉTICO EXTERNO**

por

RENAN DE OLIVEIRA ALVES

**Banca Examinadora:**

---

Prof. Dr. Eduardo Marcos Rodrigues dos Passos - (Orientador) - UAF/UFCG

---

Prof. Dr. Lincoln Rodrigues Ribeiro Filho - (Co-orientador) - UAF/UFCG

---

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras - (Membro interno) - UAF/UFCG

---

Prof. Dra. Morgana Ligia de Farias Freire - (Membro externo)- DF/UEPB

CAMPINA GRANDE

- 2015 -

*"Quando nada parece dar certo, vou ver o cortador de pedras martelando sua rocha, cem vezes, sem que uma única rachadura apareça. Mas na centésima primeira martelada a pedra se abre em duas, e eu sei que não foi aquela que conseguiu isso, mas todas as que vieram antes." (Jacob A. Riis).*

*A minha mãe, avó e meu irmão. . . .*

## AGRADECIMENTOS

-Ao Prof. Eduardo Marcos R. dos Passos, pela orientação, sugestão, estímulo e competência com que conduziu este trabalho.

Ao Prof. Lincoln R. Ribeiro, pela co-orientação, sugestão e colaboração para este trabalho.

-A todos os professores da Unidade Acadêmica de Física que contribuíram com a minha formação.

-Aos minha mãe Maria Lúcia de O. Alves e meu irmão Higor de O. Alves pelo apoio, confiança e incentivo.

- A todos meus amigos que me ajudaram direta ou indiretamente: Alex de Albuquerque, Zoroastro Vilar, Franklin Correia, Érika Correia, Fernando da Silva e Kécia Ribeiro.

-Aos colegas de pós-graduação e funcionários da Unidade Acadêmica de Física pela grata convivência durante a minha permanência nesta Unidade.

-A CAPES pelo suporte financeiro.

-A todos que direta ou indiretamente possibilitaram a conclusão deste trabalho.

## RESUMO

O grafeno é um cristal bidimensional que consiste de uma rede hexagonal de átomos carbono. Suas propriedades eletrônicas surgem como consequência da linearidade na relação de dispersão dos portadores de carga em torno dos pontos de Dirac. Sua estrutura de banda para baixa energia é descrito pela equação de Dirac sem massa em  $(2 + 1)$  dimensões. Esta semelhança entre as excitações no grafeno e os férmions de Dirac possibilitou a identificação de propriedades peculiares diferentes daquelas encontradas em semicondutores usuais de baixa dimensão. Neste trabalho estudamos uma descrição do grafeno sobre o efeito de um campo magnético externo. O tratamento consiste de uma equação de Dirac para férmions sem massa e um acoplamento mínimo ao potencial vetor. Depois de uma revisão de suas principais propriedades, estudamos os níveis de energia de Landau, os quais representam um fenômeno fortemente dependente da relação de dispersão linear do grafeno. Além disso, usamos tal configuração para estudar o seu impacto sobre algumas propriedades do efeito Hall quântico. Finalmente, tratamos do efeito Aharonov-Bohm que é um tema importante para a investigação de interferência quântica no grafeno.

**Palavras-chave:** Grafeno, campo magnético externo, equação de Dirac.

## ABSTRACT

Graphene is a two-dimensional crystal consists of a hexagonal lattice of carbon atoms. Their electronic properties arise as a consequence of the linearity of the dispersion relation of the charge carriers around the Dirac points. His band structure for low energy is described by the Dirac equation without mass (2 + 1) dimensions. This similarity between the excitations in graphene and Dirac fermions enabled the identification of different peculiar properties from those of usual semiconductor low-dimensional. In this work we study a description of graphene on the effect of an external magnetic field. The treatment consists of an equation of massless Dirac fermions to a minimum and coupling to the vector potential. After a review of their main properties, we studied the Landau energy levels , which represent a strongly dependent phenomenon of the linear dispersion relation of graphene. Furthermore, such a configuration used for this study has an impact on certain properties of the quantum Hall effect. We briefly review the Aharonov-Bohm effect which is an important topic to investigate quantum interference behavior in graphene.

**Keywords:** Graphene, external magnetic field, Dirac equation.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Estrutura Eletrônica do Grafeno</b>	<b>4</b>
2.1	O Átomo de Carbono . . . . .	4
2.2	O Modelo Tight-Binding . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Estudo da Equação de Dirac</b>	<b>17</b>
3.1	Equação de Dirac em quatro dimensões . . . . .	17
3.2	Equação de Dirac em duas dimensões . . . . .	21
3.3	Equação de Dirac Sem Massa em Grafeno . . . . .	23
<b>4</b>	<b>O Grafeno sobre a Ação de um Campo Magnético</b>	<b>25</b>
4.1	Férmions de Dirac na Presença de um Campo Magnético . . . . .	25
4.2	Níveis de Landau . . . . .	30
4.3	Efeito Hall . . . . .	36
4.4	O Efeito Aharonov-Bohm . . . . .	41
<b>5</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>47</b>
	<b>Referências bibliográficas</b>	<b>65</b>

# Lista de Figuras

2.1	Estrutura do grafeno, grafite, nanotubo de carbono e fulereno [13]. . . . .	5
2.2	(a) Representação do orbital $sp^2$ (lobo largo apontando uma direção e lobo menor apontando para 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) Representação da localização dos orbitais $sp^2$ no plano e do orbital $2p$ vazio perpendicular ao plano [35]. . . . .	6
2.3	a) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo $sp^2$ de dois átomos de carbono formando uma ligação $\sigma$ ; (b) Representação da sobreposição de dois orbitais $2p$ de dois átomos de carbono perpendiculares ao plano formando uma ligação $\pi$ . [35]. . . . .	7
2.4	(a) Ilustração de esfoliação de HOPG usando fita adesiva, (b) Foto de microscopia óptica de uma amostra de $4\mu$ de Grafeno [17]. . . . .	7
2.5	Rede de Bravais a duas dimensões, definida pelos vetores base $\vec{a}$ e $\vec{b}$ . Todos os pontos da rede são definidos por combinações lineares destes vetores, com coeficientes inteiros [27]. . . . .	10
2.6	a) Esquema da estrutura hexagonal do grafeno indicando os vetores das Sub-redes A e B. [13]. . . . .	11
2.7	a) A estrutura da rede de uma única camada de grafeno. A célula unitária, indicado pelo pontilhado hexágono, que inclui dois átomos de carbono, cada um dos quais pertence à sub-rede A ou B. (b) estrutura de banda eletrônica de camada única grafeno [28]. . . . .	12
2.8	A energia $E(\vec{k})$ expressa a simetria entre a banda de condução e de valência através da introdução dos pontos de alta simetria, isto é, $M$ , $\Gamma$ e $K$ [30]. . . . .	12
4.1	São ilustrados os níveis de Landau $n \in [0; 10]$ para grafeno ( $E_0 = 0$ ) à esquerda e para níveis de Landau convencional ( $E_0 \neq 0$ ) de semicondutores no lado direito. . . . .	32

4.2	A condutividade Hall é representada pela linha em vermelho e a resistência longitudinal pela linha em azul. Nas medições da condutividade Hall no grafeno obtidos por K.S. Novoselov, A.K. Geim, et al, pode-se ver que a escada como condutividade Hall exhibe platôs em múltiplos semi-inteiros da condutância quântica $4e^2/h$ [13]. . . . .	39
4.3	Esquema do experimento de interferência de duas fendas. . . . .	41
4.4	Esquema de um experimento de fenda dupla na presença de um solenóide [47]. . . . .	42
4.5	Esquema de efeito Aharonov-Bohm em anel de grafeno [54]. . . . .	44
4.6	(a) Trajetórias de elétrons correspondentes ao primeiro ( $N = 1$ ) e segundo harmônicos ( $N = 2$ ). (b) Elétrons faz uma meia revolução no primeiro harmônico e um ciclo no segundo harmônico. . . . .	45
4.7	Esquema do efeito Aharonov-Bohm sobre um anel de grafeno com suas dimensões. Adaptado de [50]. . . . .	46

# Capítulo 1

## Introdução

Acreditava-se que os cristais bidimensionais não poderia ser estável à temperatura ambiente, pois isso violaria o teorema Mermin-Wagner, que estipula que simetrias contínuas não pode ser quebrada espontaneamente em temperaturas ambiente em sistemas 2D [1]. No entanto, o grafeno é um cristal de carbono bidimensional intrinsecamente estável que foi obtido pela primeira vez em 2004, pelos cientistas Andre K. Geim e Konstantin S. Novoselov, através de um método simples chamado clivagem micromecânica a partir do grafite. O cristal permanece intacto por causa do acoplamento anarmônico entre a sua flexão e modos de estiramento responsáveis pela flexibilidade do grafeno.

A natureza contorna o teorema Mermin-Wagner, formando relativamente ondulações estáticas ao longo da superfície do cristal, de modo que, quando ele é colocado sobre um substrato ou suspenso por suportes torna-se estável [2].

A análise teórica já vinha sendo realizada desde 1947, por J.C. Wallace que previu a estrutura eletrônica e observou a relação de dispersão linear em um plano de grafite. Em seu artigo, a estrutura de banda de grafite foi calculada utilizando um modelo chamado tight-binding (ligações fortes). Para uma primeira aproximação ele assumiu que o acoplamento intercalar era insignificante, e consistia no cálculo da estrutura de bandas do grafite baseado em aproximações a partir da estrutura do grafeno [3].

Após a descoberta do grafeno, o interesse neste campo de investigação cresceu substancialmente devido ao seu grande potencial de aplicação como a eletrônica e outras áreas. Duas grandes características são responsáveis pelo grande interesse no grafeno. Em primeiro lugar, apesar de ser apenas de espessura de um átomo e sem

proteção do meio ambiente, o cristal de grafeno apresenta alta qualidade e transporte balísticos a distâncias submicrométricas [4, 5]. Em segundo lugar, no grafeno as quasi-partículas se comportam como férmions de Dirac sem massa e suas propriedades eletrônicas são regidas pela física da eletrodinâmica quântica, em vez da física padrão em metais que tem como base a equação de Schrödinger [5, 6]. Além disso, ainda possui propriedades excepcionais como: resistência mecânica, extrema flexibilidade, altíssima mobilidade eletrônica e boa condutividade térmica. Suas propriedades eletrônicas surgem como consequência da linearidade na relação de dispersão dos portadores de carga nos dos pontos de Dirac.

Devido à sua incomum dispersão de energia eletrônica, o grafeno levou ao surgimento de conceito de partículas relativísticas em matéria condensada. Na Física da Matéria Condensada, a equação de Schrödinger era suficiente para descrever as propriedades eletrônicas de materiais. O grafeno é uma exceção - os seus portadores de carga se comportam como partículas relativísticas. Os portadores de carga, no limite contínuo em baixas energias, apresentam um alto grau de mobilidade e pode ser descrita pela equação de Dirac (2D). Esta semelhança entre as excitações no grafeno e os férmions de Dirac possibilitou a identificação de propriedades peculiares tais como: o efeito Hall quântico, o efeito Hall quântico fracionário, a ausência de localização por barreiras de potenciais, o semicondutor de "gap" nulo, entre outros.

Este trabalho apresenta alguns dos métodos mais utilizados para a produção de grafeno e suas propriedades. Sendo assim o objetivo foi investigar a dinâmica eletrônica no grafeno via um modelo de teoria de campos. Mais particularmente, examinamos o seu conteúdo energético e obtendo assim, alguns fenômenos particulares que surgem como os níveis de Landau e seus efeitos coletivo direcionando nossas análises ao estudo do efeito Hall.

Esta questão tem sido estudada extensivamente na literatura e ainda continua sendo um tópico de investigação da comunidade científica. Esta dissertação é organizada da seguinte maneira: No Capítulo 2, revisamos alguns aspectos da estrutura eletrônica do grafeno, tais como a descrição cristalina do átomo de carbono, o modelo Tight-Binding (Método das ligações fortes) e principalmente detalhes da equação de Dirac em (2+1) dimensões. No Capítulo 3, realizamos o estudo anterior agora para férmions de Dirac sem massa para quantização dos campos fermiônicos. Em seguida estudamos os conceitos associados ao modelo do grafeno na presença de uma configuração do campo magnético externo constante via o acoplamento

mínimo do potencial vetor. No capítulo 4, estudamos as aplicações do modelo para problemas relacionados, tais como a quantização de Landau e o efeito Hall quântico. Encontramos os níveis de Landau e espectro de energia do Efeito Hall quando resolvemos a equação de Dirac. Aqui acrescentamos de um termo de calibre, devido ao campo magnético perpendicular aplicado ao plano de grafeno e obtemos a energia do sistema. Finalmente, o Capítulo 5, resumimos nossas principais conclusões e ao mesmo tempo, apontamos futura perspectivas de aplicações das técnicas estudadas durante a elaboração do presente trabalho.

# Capítulo 2

## Estrutura Eletrônica do Grafeno

### 2.1 O Átomo de Carbono

A tendência por dispositivos optoeletrônicos em escala micro leva a limites físicos fundamentais dos materiais convencionais à base de silício. A busca por novos conceitos mudou nanoestruturas de baixa dimensões de carbono para o foco de pesquisa atual que são representadas por uma variedade de materiais metálicos e semicondutores com propriedades ópticas, eletrônicas e mecânicas únicas [7]. Elas são representadas por uma variedade de materiais metálicos e diferentes materiais semicondutores com propriedades ópticas, eletrônicas e mecânicas únicas [8]. O carbono é o constituinte fundamental do grafeno e grafite, sendo considerado um dos elementos mais abundantes no universo, encontrado em todas as formas conhecidas de vida. O carbono é o primeiro elemento da coluna 14 (IV-A) da tabela periódica, com dois elétrons fortemente ligados no nível ( $1s^2$ ) e quatro elétrons na banda de valência ( $2s^2$  e  $2p^2$ ). Dos elementos da coluna 14, somente o carbono pode ter configurações  $sp^1$ ,  $sp^2$  e  $sp^3$  e isto se deve ao fato deste ser o único átomo deste grupo que não contém elétrons internos tipo  $p$ .

O principal material que contém o carbono é o grafite que é constituído por múltiplas camadas planas de átomos de carbono com hibridização  $sp^2$  arranjados em uma estrutura hexagonal [3]. Enquanto as ligações  $\sigma$  entre os átomos de carbono são muito fortes, o acoplamento de Van der Waals entre as diferentes camadas é bastante fraco e pode ser facilmente quebrado.

Em 1985, uma nova estrutura de carbono nomeado de fulereno foi descoberto e sua forma mais comum é o  $C_{60}$ , uma molécula de carbono esférica com um diâmetro médio de 0,68 nm [9]. Uma vez que os portadores de carga são espacialmente confinado em todas direções, fulerenos são nanoestruturas de carbono de zero dimensão (0D). Por sua descoberta, Richard Smalley, Robert Curl e James Heath obteve o Prêmio Nobel em Química em 1996.

Já os Nanotubos de Carbono (CNT) representam outra nanoestrutura de carbono unidimensional (1D), que foi encontrado pela primeira vez em 1991 por Iijima [10, 11], e tem atraído grande interesse científico e tecnológico.

Os nanotubos são minúsculos cilindros ocios construídos por uma única camada de grafite com diâmetros na faixa de um nanômetro, enquanto seu comprimento pode atingir vários micrômetros. Cada nanotubo é caracterizado pelo vetor quiral que corresponde à direção de enrolamento da folha bidimensional de grafeno. Decorrente de uma geometria específica de confinamento quântico, que pode ser metálico ou semicondutor com um "gap" ajustável que faz com que estes sejam excelentes materiais para várias aplicações tecnológicas.

Em 2004, foi descoberto o grafeno - uma nanoestrutura de carbono bidimensional perfeita que consiste em uma monocamada de átomos de carbono [12]. A figura 2.1 mostra diferentes nanoestruturas baseadas em estruturas de carbono.

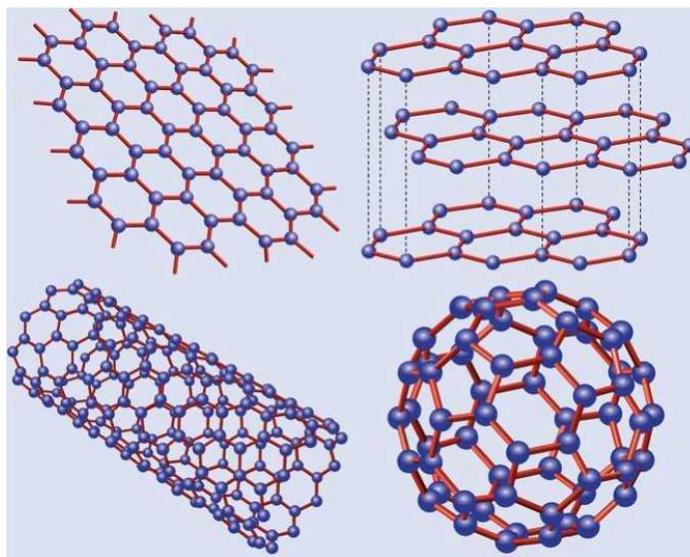


Figura 2.1: Estrutura do grafeno,grafite, nanotubo de carbono e fulereno [13].

O grafeno é uma estrutura favo de mel de átomos de carbono. Já o grafite pode ser visto como uma pilha de camadas de grafeno. O nanotubo de carbono são en-

rolamentos de camada de grafeno em forma de cilindros. O fulereno são moléculas esféricas pela introdução de pentágonos na rede hexagonal de grafeno. Para entender a estrutura atômica do grafeno é necessário saber qual o tipo de hibridização eletrônica existente nesse material. Neste caso, observa-se que sua hibridização é do tipo  $sp^2$ , na qual ocorre a combinação de um orbital  $2s$  e dois orbitais  $2p$  formando três orbitais equivalentes, orbitais híbridos do tipo  $sp^2$ . Cada orbital  $sp^2$  é representado por um lobo largo apontando para uma direção e outro menor apontando para a direção oposta, como mostrado na Figura 2.2: Os eixos dos três orbitais híbridos  $sp^2$

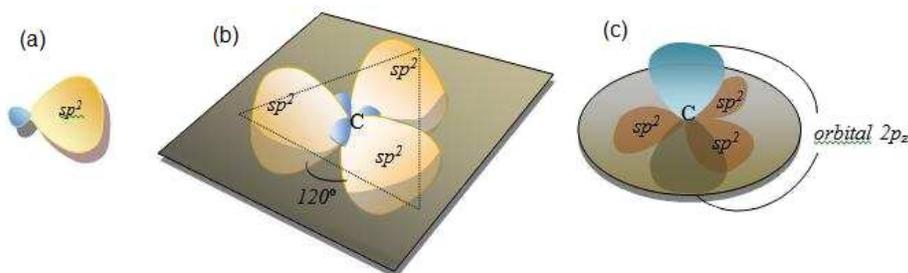


Figura 2.2: (a) Representação do orbital  $sp^2$  (lobo largo apontando uma direção e lobo menor apontando para direção oposta); (b) Três orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  de um átomo de carbono ligados entre si e separados por um ângulo de  $120^\circ$ ; (c) Representação da localização dos orbitais  $sp^2$  no plano e do orbital  $2p$  vazio perpendicular ao plano [35].

estão sobre o mesmo plano e estão apontados em direção aos vértices de um triângulo equilátero. O orbital atômico  $2p_z$  não se envolve na hibridização e consiste de dois lobos situados no plano perpendicular ao plano dos orbitais híbridos  $sp^2$ . Uma ligação tipo sigma é formada pela sobreposição de dois orbitais híbridos  $sp^2$  sobre um eixo comum, conforme mostrado na Figura 2.3, que é o caso das três ligações simples que o carbono faz no mesmo plano, o que resulta em uma estrutura hexagonal, de forma que os orbitais estão dispostos em uma estrutura planar formando ângulos entre si de aproximadamente  $120^\circ$ .

Até sua descoberta, o grafeno foi considerado como material conceitual que não poderia existir na realidade, devido à instabilidades termodinâmica de estruturas bidimensionais numa escala nanométrica. No entanto, Konstantin Novoselov e Andre Geim da Universidade de Manchester conseguiu esfoliar mecanicamente para uma única camada de grafite e revelou uma nova estrutura com propriedades excepcionais. Desde então, tem atraído enorme interesse em várias pesquisas e em escala industrial [14, 15].

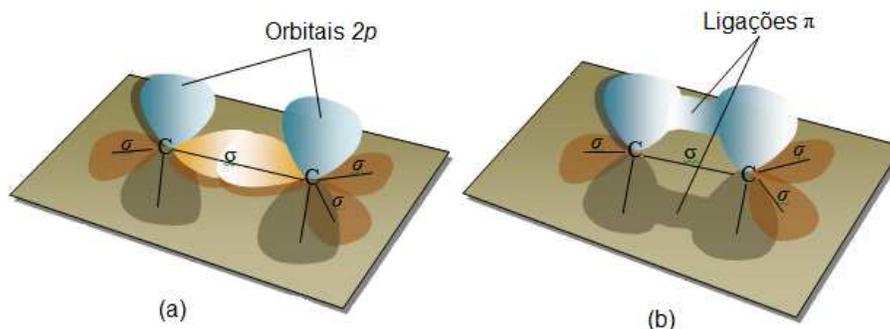


Figura 2.3: a) Representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo  $sp^2$  de dois átomos de carbono formando uma ligação  $\sigma$ ; (b) Representação da sobreposição de dois orbitais  $2p$  de dois átomos de carbono perpendiculares ao plano formando uma ligação  $\pi$ . [35].

Há outros métodos de produção de grafeno, porém o Método de Esfoliação Pirolítica de Grafite Altamente Orientado (HOPG) e Superfície de Conversão de Carboneto de Silício (SiC) têm se mostrado mais eficazes [16].

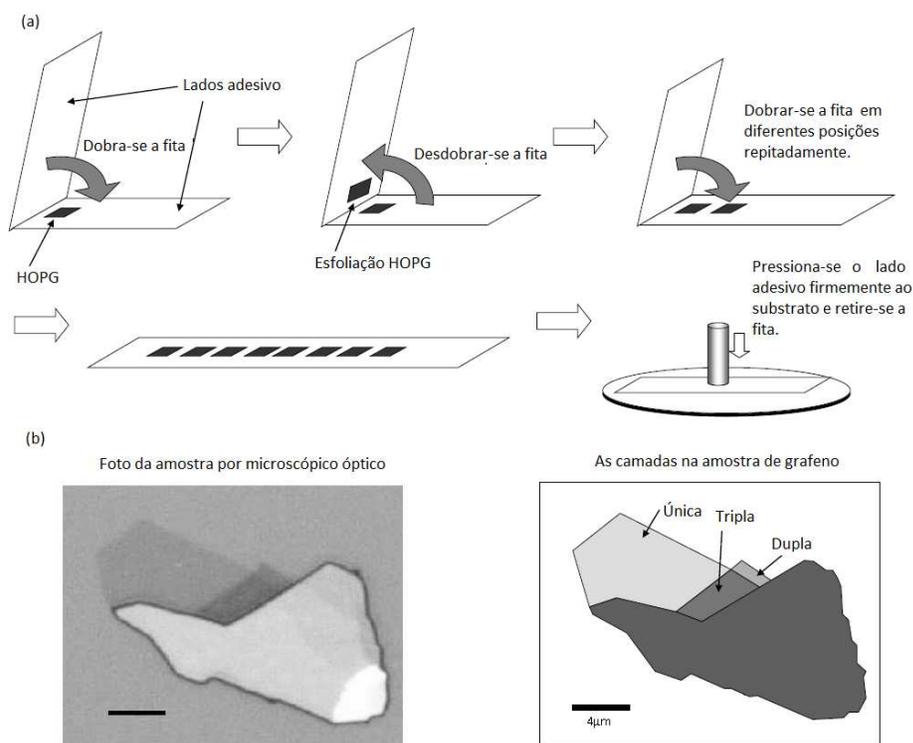


Figura 2.4: (a) Ilustração de esfoliação de HOPG usando fita adesiva, (b) Foto de microscopia óptica de uma amostra de  $4\mu$  de Grafeno [17].

O grafeno tem uma estrutura de banda excepcional exibindo pontos de passagem entre a valência e a banda de condução aos seis cantos da zona de Brillouin [3, 18].

Em torno destes pontos, chamados pontos de Dirac, a dispersão de energia é linear dando origem as propriedades ópticas e eletrônicas únicas [19, 13]. As ligações do tipo  $sp^2$  entre os átomos de carbono dispostos em forma hexagonal, lhe concede o título de uma das estruturas mais fortes que se conhece [20]. Além disso, é um excelente condutor de eletricidade e calor, pois os portadores de carga que podem se mover livremente sem dispersão à temperatura ambiente. Além disso, o grafeno é flexível e quase transparente na faixa de frequência óptica [21, 22].

Para a obtenção do grafeno, Novoselov e Geim usou uma fita adesiva comum num processo repetitivo em cristais de grafite dividindo em flocos cada vez menores até encontrar uma única camada. A camada de grafeno só existe sobre um substrato, neste caso o substrato era a fita adesiva. O grafeno é constituído por átomos de carbono dispostos em uma rede hexagonal, que pode ser visto como uma estrutura triangular com uma base de dois átomos de carbonos não equivalentes identificados nas sub-redes A e B como veremos mais adiante. Trata-se de uma amostra de espessura de um átomo de grafite.

Em 1947, Wallace publicou sua investigação sobre monocamada de grafite, onde demonstrou que a dispersão pode ser linearizada perto de dois pontos de Dirac devido à estrutura específica da banda de energia. Quase quarenta anos depois, Semenoff mostrou que a aproximação linear leva a um termo cinético de Dirac [6].

O grafeno é o material mais forte já demonstrado, e a sua resistência à tração é 130 GPa, que é a maior medida até o momento. Além dessas propriedades mecânicas excepcionais o grafeno é impermeável a gases, mesmo em hélio [23]. As fortes ligações covalentes entre os átomos de carbono no grafeno são responsáveis pela sua alta condutividade térmica. Para amostras suspensas de grafeno os valores da condutividade térmica atinge 5.000 W/mK à temperatura ambiente, ou seja, 2,5 vezes maior do que a do diamante com 1.000 W/mK [24, 25]. Para uma única camada de grafeno, apoiada sobre um substrato que é a configuração mais provável de ser encontrada em aplicações, a condutividade térmica à temperatura ambiente é cerca 600 W/mK; ainda, assim, é duas vezes maior que a do cobre e 50 vezes maior que a do silício. Sua transparência óptica e alta condutividade elétrica torná-o um bom candidato para a fabricação de eletrodos transparentes, dispositivos como telas de cristal líquido, células orgânicas fotoelétricas, transistores e diodos emissores orgânicos de luz. A sua flexibilidade e também uma elevada resistência mecânica são vantajosas em comparação com outros materiais utilizados na microeletrônica.

## 2.2 O Modelo Tight-Binding

O modelo Tight-Binding (ligações fortes) é uma das formas mais simples para descrições microscópicas de elétrons em um cristal. Neste caso, consideramos que o elétron está fortemente ligado ao átomo, com isso a função de onda do cristal pode ser expandida em termos das funções de onda de átomos isolados. Os elétrons podem saltar apenas para os vizinhos mais próximos, nos orbitais  $\pi$  que são responsáveis pelas propriedades de estado sólido do grafeno quando se trata de excitações de baixa energia [26].

A estrutura eletrônica do grafeno pode ser obtido usando esse modelo e tal aproximação é válida porque as ligações de carbono no grafeno tem 3 dos seus 4 elétrons de valência fortemente ligados a seus vizinhos em ligações do tipo  $\sigma$  e um elétron livre com ligação fraca do tipo  $\pi$ . Três ingredientes entram para produzir as propriedades eletrônicas incomuns de grafeno: a sua estrutura 2D, a célula e o fato de que todos os sítios em sua célula serem ocupados pelos mesmos átomos [30]. Quanto menor for o tamanho da célula escolhida na rede, melhor será a aproximação para o limite contínuo. A unidade estrutural menor que se pode conceber, e que se repete periodicamente, preenchendo todo o espaço, tem o nome de célula primitiva.

A célula primitiva é a célula unitária de menor volume e contém apenas um ponto da rede de Bravais. Uma rede de Bravais é um arranjo infinito de pontos discretos, no espaço (um por cada célula primitiva), com simetria translacional. Por conveniência, pode optar-se por uma célula unitária convencional, escolhida de modo a ser mais intuitiva e evidenciar melhor as simetrias. Essa célula pode ser maior do que a célula primitiva, e conter portanto mais do que um ponto (nó) da rede de Bravais. Essa célula tem o nome de célula de Wigner-Seitz [27]. Pode construir-se do seguinte modo: i) Traçar os segmentos de reta, que partindo de um ponto da rede, o ligam a todos os seus vizinhos próximos; ii) Desenhar os planos perpendiculares bissetores desses segmentos de reta; iii) O volume circunscrito por esses planos, e que contem o nó da rede, é a célula de Wigner-Seitz. No caso do grafeno podemos observar que contém dois nós que são muito importantes para o estudo deste material. A célula de Wigner-Seitz da rede recíproca chama-se primeira zona de Brillouin ou simplesmente zona de Brillouin. Os vetores da rede recíproca é calculado através dos seguintes:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}, \quad \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \quad (2.2.1)$$

em que se toma como definição  $\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = V_c$ , em que  $V_c$  é o volume da célula unitária. Das equações anteriores, tem-se que:

$$\vec{b}_1(\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{8\pi^3}{V_c}. \quad (2.2.2)$$

Os pontos da rede de Bravais podem ser definidos por vetores de translação,  $\vec{T}$ , da forma

$$\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}, \quad (2.2.3)$$

em que  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ , chamados vetores base que definem uma célula que se pode tomar como célula unitária, e  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  são números inteiros. O vetor  $\vec{T}$  representa uma translação, tal que quaisquer dois pontos,  $\vec{r}$  e  $\vec{r}'$ , estão relacionados por uma expressão da forma  $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{T}$ .

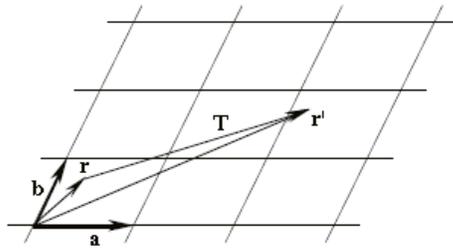


Figura 2.5: Rede de Bravais a duas dimensões, definida pelos vetores base  $\vec{a}$  e  $\vec{b}$ . Todos os pontos da rede são definidos por combinações lineares destes vetores, com coeficientes inteiros [27].

Os vetores primitivos (vetores no espaço real) em uma folha de grafeno perfeita (sem defeitos) podem ser escritos em coordenadas cartesianas como [27]:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{x} + \hat{y}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{x} + \hat{y}), \quad (2.2.4)$$

onde  $a \approx 1.42$  nm é a distância de carbono-carbono. Os vetores da rede recíproca são representados [1]:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{\sqrt{3}}{3}k\hat{x} + k\hat{y}\right), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}k\hat{x} + k\hat{y}\right). \quad (2.2.5)$$

A direção dos vetores de  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$  são deslocados de  $30^\circ$  em relação aos vetores  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$ . A célula unitária do grafeno é representada na Figura 2.6. A primeira zona de

Brillouin do grafeno é um hexágono e possui três pontos de simetria: o centro  $\Gamma=(0;0)$ , um vértice de um hexágono  $\mathbf{K}$  e o centro da aresta  $\mathbf{M}$ .

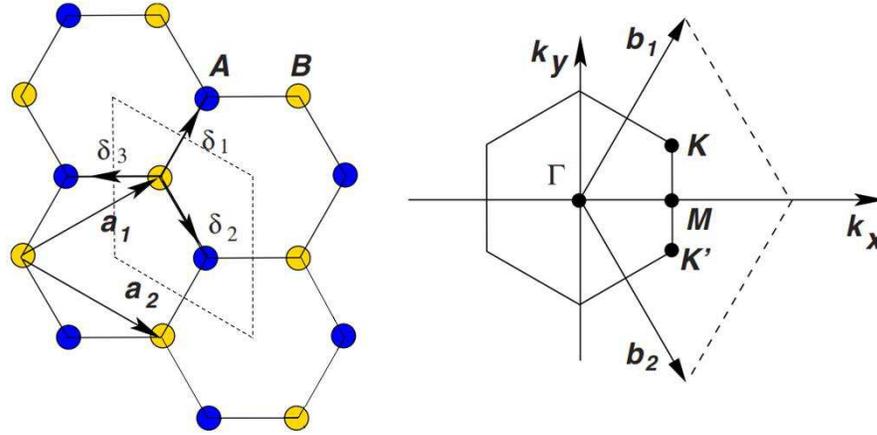


Figura 2.6: a) Esquema da estrutura hexagonal do grafeno indicando os vetores das Sub-redes A e B. [13].

Os  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  são vetores da base da rede cristalina; os vetores dos primeiros vizinhos:  $\delta_i$ ,  $i=1,2,3$  e a célula unitária (losango em linhas tracejadas). (b) Rede recíproca do grafeno, onde o hexágono representa a primeira zona de Brillouin. Os vetores rede recíproca são  $\vec{b}_1$  e  $\vec{b}_2$ , onde  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  são os pontos de Dirac. Os pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  da primeira de Brillouin são muito importante para a física do grafeno. Nesses pontos, as bandas de valência e de condução se tocam em suas imediações, e a dispersão de energia do grafeno é cônica.

Na mecânica clássica (equações de Newton) e na mecânica quântica (equações de Schrödinger) em baixas velocidades, a relação energia/momento é parabólica. Mas, quando os objetos se movem a velocidades próximas da velocidade da luz (mecânica quântica relativística) as propriedades são regidas pela equação de Dirac e a relação entre energia/momento não é mais parabólica, e sim linear. Portanto, a física de baixa energia do grafeno é regido pela equação de Dirac sem massa, e os pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  não são equivalentes [28]. As coordenadas do pontos de Dirac são dadas por

$$\mathbf{K} = \left( \frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \mathbf{K}' = \left( \frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right) \quad (2.2.6)$$

Os três vetores vizinho mais próximo no espaço real são dado por:

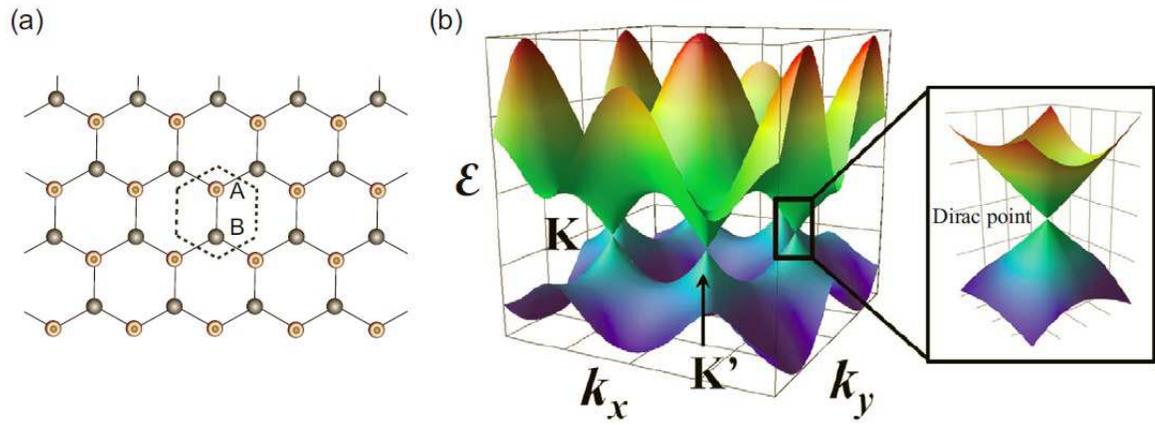


Figura 2.7: a) A estrutura da rede de uma única camada de grafeno. A célula unitária, indicado pelo pontilhado hexágono, que inclui dois átomos de carbono, cada um dos quais pertence à sub-rede A ou B. (b) estrutura de banda eletrônica de camada única grafeno [28].

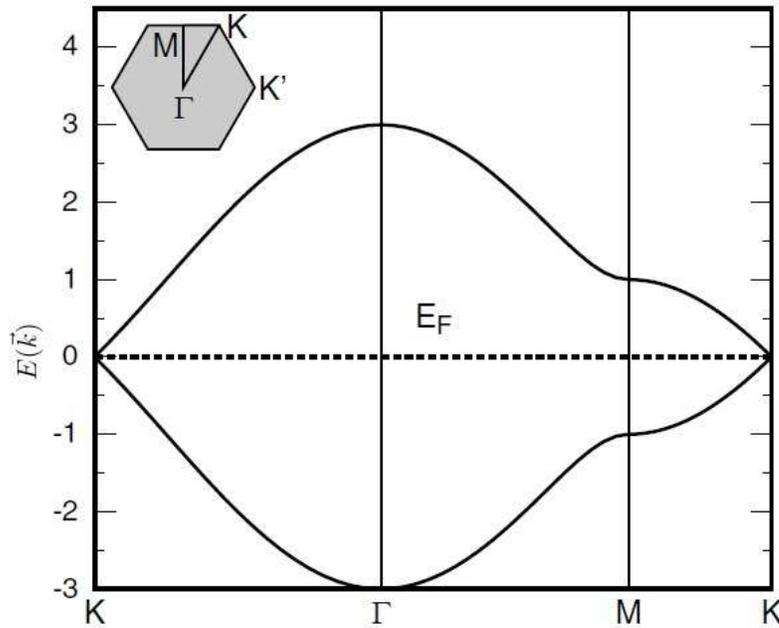


Figura 2.8: A energia  $E(\vec{k})$  expressa a simetria entre a banda de condução e de valência através da introdução dos pontos de alta simetria, isto é,  $M$ ,  $\Gamma$  e  $K$  [30].

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}) \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad \vec{\delta}_3 = -a(1, 0) \quad (2.2.7)$$

Iremos calcular a estrutura da banda para os orbitais  $\pi$  com aproximação de ligação forte, dos vizinhos mais próximos para uma folha de grafeno.

Como enunciamos anteriormente, o modelo Tight-Binding (TB) é uma abordagem para o cálculo de banda da estrutura eletrônica usando um conjunto aproximado de

funções de onda com base em suas sobreposições para átomos isolados localizados em cada sítio atômico. Este modelo descreve as propriedades de elétrons fortemente ligados ao átomo a que pertencem e devem ter uma interação limitada com estados e potenciais em átomos circundantes do sólido. Modelos TB são aplicados a uma ampla variedade de sólidos e dá bons resultados qualitativos em muitos casos. A primeira descrição de ligação forte de grafeno foi dada por Wallace em 1947 [3]. Ele considerou a interação dos vizinhos mais próximo para os orbitais  $p_z$ , mas desconsiderou a sobreposição entre as funções de onda centrados em átomos diferentes. A outra, hoje em dia mais conhecida como aproximação de ligação forte foi bem descrita por Saito et al. [26, 29]. Ele considera a sobreposição não finita entre as funções de base, mas inclui apenas as interações entre vizinhos mais próximos dentro da folha de grafeno.

A estrutura eletrônica do grafeno pode ser entendida usando um modelo teórico aproximado TB, considerando apenas os elétrons do tipo  $\pi$ . A descrição dos elétrons na rede hexagonal de átomos de carbono que forma o grafeno é feita por meio do formalismo de segunda quantização que pode ser obtido pelo modelo TB dado pelo Hamiltoniano:

$$H_{TB} = -t \sum_i \sum_{i=1,2,3} [\hat{a}^\dagger(\vec{r})\hat{b}(\vec{r} + \vec{s}_i) + \hat{b}^\dagger(\vec{r} + \vec{s}_i)\hat{a}(\vec{r})]. \quad (2.2.8)$$

Este hamiltoniano descreve o salto (hooping) de um elétron entre diferentes sub-redes, com uma constante de salto uniforme de aproximadamente  $t \approx 2,8$  eV. Os operadores fermiônicos  $\hat{a}(\hat{a}^\dagger)$  aniquila (cria) um elétron e  $\hat{a}(\hat{a}^\dagger)$  atuam sobre os pontos das sub-redes A e B e obedecem a álgebra dos anti-comutadores, ou seja:

$$\{\hat{a}(\vec{r}_A), \hat{a}^\dagger(\vec{r}_A)\} = 1, \quad \{\hat{b}(\vec{r}_B), \hat{b}^\dagger(\vec{r}_B)\} = 1. \quad (2.2.9)$$

Para simplificar fazemos  $\vec{r} = \vec{r}_A$  e  $\vec{r}_B = \vec{r}_A + \vec{s}_i$ .  $H_0$  é a diagonal no espaço dos momentos e obtemos usando as transformadas de Fourier dos operadores de aniquilação das sub-rede A e B definidas como

$$\begin{Bmatrix} \hat{a}(\vec{r}_A) \\ \hat{b}(\vec{r}_B) \end{Bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \begin{Bmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_A} \hat{a}(\vec{k}) \\ e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_B} \hat{b}(\vec{k}) \end{Bmatrix}, \quad (2.2.10)$$

onde  $\vec{k}$  é o vetor de onda em torno dos pontos  $\mathbf{K}$  ou  $\mathbf{K}'$ . Para uma rede infinita temos:

$$H_{TB} = \sum_k [\phi(\vec{k})a^\dagger(\vec{k})b(\vec{k}) + \phi^*(\vec{k})b^\dagger(\vec{k})a(\vec{k})]. \quad (2.2.11)$$

As bandas de energia obtidas desta Hamiltoniana foram investigadas pela primeira vez em 1947 por P. R. Wallace [3], por sua vez pode ser dadas por:

$$E_\pm(\vec{k}) = \pm\tau\sqrt{3 + \phi(\vec{k})} - \tau'(\vec{k}), \quad (2.2.12)$$

onde o fator de estrutura  $\phi(\vec{k})$  é dado por:

$$\phi(\vec{k}) = 2\cos(\sqrt{3}k_x a) + 4\cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_y a\right). \quad (2.2.13)$$

O espectro de energia  $E(\vec{k}) = \pm|\phi(\vec{k})|$  contém os dois pontos de Dirac com energia zero, posicionados no espaço recíproco em

$$\vec{k} = \mathbf{K} = \mathbf{K}' = \pm\left(\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right), \quad f(\mathbf{K}) = f(\mathbf{K}') = 0. \quad (2.2.14)$$

Em coordenadas cartesianas podem ser escritos como:

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k\vec{x} + k\vec{y}\right), \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{-\sqrt{3}}{3}k\vec{x} + k\vec{y}\right). \quad (2.2.15)$$

Na rede recíproca os dois pontos, chamados de  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$ , são independentes, os demais sendo equivalentes a estes por operações de simetria da rede, e são de extrema importância na descrição do grafeno.

Expandindo a relação de dispersão em torno desses pontos, é preciso uma aproximação de primeira ordem de uma relação linear, o que, para pequenas energias, dá origem aos chamados cones de Dirac. Então expandindo a Equação (2.2.12) em série de Taylor (ver apêndice A), teremos

$$E_\pm(\vec{k}) = \pm v_F |\vec{q}| + \vartheta\left(\frac{q}{K^2}\right), \quad (2.2.16)$$

onde  $\vec{k} = \mathbf{K} + \vec{q} = \mathbf{K}' + \vec{q}$  e  $\vec{q} = \vec{p} \rightarrow i\hbar\vec{\nabla}$ . Desprezando termos de segunda ordem no

limite de baixas energias, o espectro de energia é quase linear, ou seja

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm v_F |\vec{q}|. \quad (2.2.17)$$

No grafeno existem portadores de cargas que se propagam como se fossem férmios sem massa, ou seja, com velocidade de Fermi  $v_f = 3\tau a/2 = 10^6 m/s$ , que consiste na velocidade dos elétrons próximo dos pontos de Dirac. Podemos notar que dispersão de energia linear dada pela equação (2.2.17) é semelhante a dispersão de energia de partículas relativísticas, ou seja:

$$E^2 = (c\sigma^x p_x + c\sigma^y p_y + \hat{\beta}mc^2)^2. \quad (2.2.18)$$

Com  $m = 0$  e a velocidade de Fermi substituindo a velocidade da luz  $c$ , os portadores de carga no grafeno são descritos por funções de onda de duas componentes, onde cada componente está relacionada com contribuição de cada uma das sub-redes (A e B) da estrutura do grafeno e não ao spin das partículas. Então, o Hamiltoniano que descreve os portadores de carga no grafeno é da pela equação de Dirac sem massa em 2+1 dimensões:

$$E\Psi = \hat{H}_D\Psi = v_F(\sigma^x p_x + \sigma^y p_y)\Psi, \quad (2.2.19)$$

onde  $\sigma^x$  são as matrizes de Pauli com  $i = x; y; z$ , e  $p_j$  é a componente do operador momento  $\vec{p} \rightarrow i\hbar\vec{\nabla}$  com  $j = x; y$ . Tendo em vista os estados estacionários é possível fazer a substituição  $\Psi(r, t) = \psi(r)e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$  que transforma-se num problema de autovalor, ou seja:

$$E\psi(r) = v_F(\sigma^x p_x + \sigma^y p_y)\psi(r). \quad (2.2.20)$$

Logo o Hamiltoniano que descreve os portadores de carga pode ser escrito da seguinte forma:

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \quad (2.2.21)$$

Os pontos K e K' correspondente as bandas de valência e de condução. Na expansão do Hamiltoniano perto desses pontos encontra-se:

$$H_{K'}(\vec{q}) \approx \frac{3a\tau}{2} \begin{pmatrix} 0 & \alpha(q_x + iq_y) \\ \alpha^*(q_x - iq_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.22)$$

e

$$H_K(\vec{q}) \approx \frac{3a\tau}{2} \begin{pmatrix} 0 & \alpha^*(q_x - iq_y) \\ \alpha(q_x + iq_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.23)$$

Onde  $\alpha = e^{5i\pi/6}$ , com  $\vec{q} = \vec{k} - \mathbf{K}$  e  $\vec{q} = \vec{k} - \mathbf{K}'$ , respectivamente. A fase  $5\pi/6$  pode ser eliminada por uma transformação unitária das funções de base. Assim, o Hamiltonianos efetivos perto os pontos  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  assumem a forma:

$$H_K(\vec{q}) = \hbar v \begin{pmatrix} 0 & (q_x \mp iq_y) \\ (q_x \pm iq_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.2.24)$$

O Hamiltoniano que descreve os estados em torno dos pontos de  $\mathbf{K}$  da zona de Brillouin na forma matricial é:

$$H_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k}. \quad (2.2.25)$$

A descrição por funções de onda com duas componentes é semelhante à usada para escrever funções de onda de spin. Porém, as duas componentes da função de onda estão relacionadas a cada uma das sub-redes da estrutura do grafeno e não ao spin das partículas. Dessa forma, os portadores de carga no grafeno têm associado a eles um pseudo-spin,  $\sigma$ . O pseudospin está relacionado à contribuição de cada uma das sub-redes para a função de onda dos portadores de carga, assim, elétrons e buracos cujos pseudo-spins apontam em uma mesma direção podem ser imaginados como tendo origem em uma mesma sub-rede [13].

Para o caso de energias acima do zero os portadores de carga são elétrons. Entretanto, para energias negativas, caso a banda de valência não esteja totalmente preenchida, os seus estados eletrônicos desocupados comportam se como quase-partículas carregadas positivamente (buracos) que são vistas como um equivalente, da matéria condensada, do pósitron. Em matéria condensada os elétrons e buracos são descritos por equações de Shrodinger desacopladas com respectivas massas diferentes [30].

# Capítulo 3

## Estudo da Equação de Dirac

Paul Dirac em 1928 propôs uma equação de onda relativística que descreve partículas de spin  $\frac{1}{2}$  [31], e procurou resolver o problema da equação de Klein-Gordon considerando uma equação de primeira ordem tanto na derivada temporal quanto espacial, com a existência de um operador Hamiltoniano  $H$  para partículas relativísticas e percebeu mais adiante que este deveria ser linear ao se tratar das componentes de momento. Neste capítulo, faremos um estudo das equações de Dirac em quatro e duas dimensões, em duas dimensões sem massa adaptada para o grafeno. Para trabalhos futuros escreveremos a equação de Dirac na forma espinorial que se encontra no apêndice B.

### 3.1 Equação de Dirac em quatro dimensões

Escrevendo a equação de Dirac na notação Feynman e no sistema de unidades naturais ( $c = \hbar = 1$ ), temos:

$$(i\rlap{-}\not{\partial} - m)\Psi = 0. \quad (3.1.1)$$

onde  $m$  é a massa do campo fermiônico. Deixando as constantes  $\hbar$  e  $c$  de forma explícitas na equação de Dirac teremos outra versão da Equação (3.1.1) que é dada da seguinte forma [31]:

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc^2)\Psi = 0. \quad (3.1.2)$$

A quantidade  $\gamma^\mu$  representa as matrizes de Dirac  $4 \times 4$  com  $\mu = 0, 1, 2, 3$ . Tais matrizes podem ser reescritas em termos das matrizes de Pauli, a matriz identidade e

a matriz nula, ou seja:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.1.3)$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.4)$$

Ou de forma mais compacta:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ -\sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ -\sigma_y & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ -\sigma_z & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.1.5)$$

onde  $\mathbb{1}$  é a matriz identidade e  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  e  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  são as matrizes de Pauli representadas da seguinte forma:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.1.6)$$

Note que em qualquer dimensão as matrizes Gamas  $\gamma^\mu$  satisfazem a álgebra de Clifford [32]:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}, \quad (3.1.7)$$

com  $\gamma^0\gamma^0 = \gamma^0(\gamma^0)^\dagger = \mathbb{1}$  e  $\gamma^i\gamma^i = \gamma^i(\gamma^i)^\dagger = \mathbb{1}$ . Por outro lado, as componentes da matrizes Gamas espacial e temporal anti-comutam entre si, pois

$$\gamma^i\gamma^j = -\gamma^j\gamma^i, \quad i \neq j. \quad (3.1.8)$$

Aqui, temos que:

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ -\sigma & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.9)$$

Agora, consideramos a identidade:

$$\vec{\alpha} = \gamma^0 \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\beta} = \gamma^0 \quad e \quad \vec{\gamma} = \hat{\beta} \vec{\alpha}, \quad (3.1.10)$$

podemos reescrever a Equação (3.1.2) em outro formato ao multiplicarmos a mesma por  $\gamma^0$  pela esquerda e admitindo que  $\partial_i = \partial/\partial_{x,y,z} = \vec{\nabla}$ . Assim, obtemos:

$$(i\hbar\partial_0 + i\hbar c\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - \hat{\beta}mc^2)\Psi = 0. \quad (3.1.11)$$

Sabendo-se que  $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$  e  $\partial_0 = \partial/\partial_t$ , a partir da Equação (3.1.11) é possível escrever a seguinte equação de autovalores:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}_D\Psi, \quad (3.1.12)$$

onde  $\hat{H}_D$  corresponde ao Hamiltoniano relativístico de Dirac cujo a sua forma explicita é dada primeiro como:

$$\hat{H}_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \hat{\beta}mc^2 \quad (3.1.13)$$

. e depois a sua forma matricial:

$$\hat{H}_D = \begin{pmatrix} mc^2 & c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ c\vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -mc^2 \end{pmatrix}. \quad (3.1.14)$$

Assim, podemos usar o fato em que a energia do sistema tenha a como relação  $E = i\hbar\partial/\partial t$ , a Equação de autovalores (3.1.12) pode ser reescrita como:

$$(E\hat{1} - \hat{H}_D)\Psi = 0. \quad (3.1.15)$$

Por outro lado, temos que a relação de dispersão associada e Equação (3.1.15) que pode ser obtida ao aplicarmos o operador conjugado:  $(E\hat{1} + \hat{H}_D)$  pelo lado esquerdo. Desta forma, obtemos:

$$E^2 = c^2(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 + m^2c^4. \quad (3.1.16)$$

Note que a relação de dispersão da Equação(3.1.16) prevê estados de energia negativa e positiva para a dinâmica de partículas fermiônicas.

## 3.2 Equação de Dirac em duas dimensões

Agora vamos trabalhar com a versão bi-dimensional da equação de Dirac compatível com a relação de dispersão relativística (3.1.16) obtida na seção anterior. Primeiro considere a versão bi-dimensional da expressão (3.1.13):

$$E = \hat{H}_D = c\alpha^x p_x + c\alpha^y p_y + \hat{\beta}mc^2. \quad (3.2.17)$$

Agora, para que a Equação (3.2.17) tenha sentido, o quadrado da energia deve satisfazer a seguinte equação relativística:

$$E^2 = (c\sigma^x p_x + c\sigma^y p_y + \hat{\beta}mc^2)^2. \quad (3.2.18)$$

Ao desenvolvermos o quadrado na Equação (3.2.18) devemos considerar as identidades:

$$(\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) = (\alpha_x \hat{\beta} + \hat{\beta} \alpha_x) = (\alpha_y \hat{\beta} + \hat{\beta} \alpha_y) = 0, \quad (3.2.19)$$

se  $\alpha_x = \sigma_x$ ,  $\alpha_y = \sigma_y$  devemos encontrar:

$$E^2 = c^2(p_x^2 + p_y^2 + m^2c^2), \quad (3.2.20)$$

que corresponde com uma relação de dispersão relativística.

Um outro caminho de se obter a Equação (3.2.20) é o de reescrever o Hamiltoniano de Dirac (3.2.17) como operadores de propriedades quirais. Isto pode ser feito se considerarmos o seguinte ansatz<sup>1</sup> para o operador de quiralidade negativa escrito como:

$$A_- = \begin{pmatrix} mc^2 & c(p_x - ip_y) \\ c(p_x + ip_y) & -mc^2 \end{pmatrix}, \quad (3.2.21)$$

de tal forma que estabelecemos a seguinte identidade:

$$A_-^2 = E^2 = c^2(p_x^2 + p_y^2 + m^2c^2), \quad (3.2.22)$$

---

<sup>1</sup>A escolha de diferentes subespaços levam a diferentes aproximações e o processo de escolha do subespaço com melhor aproximação é chamado de ansatz.

compatível com a relação de dispersão relativística (3.2.20) que obtemos anteriormente.

O operador de quiralidade positiva pode ser obtido da equação (3.2.17) como segue:

$$E\hat{1} = A_+ = \begin{pmatrix} mc^2 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & -mc^2 \end{pmatrix}, \quad (3.2.23)$$

de tal forma que devemos obter:

$$A_+^2 = E^2 = (p_x^2 + p_y^2 + m^2c^2), \quad (3.2.24)$$

compatível com relação de dispersão relativística. As matrizes  $A_-$  e  $A_+$ , descrevem partículas com quiralidades opostas relacionadas aos seu respectivos spins e as direções do momento. Em física, um fenômeno quiral é aquele que não é idêntico a sua imagem no espelho. O spin de uma partícula pode ser usada para definir uma quiralidade, ou helicidade, que para o caso de uma partícula sem massa são iguais.

### 3.3 Equação de Dirac Sem Massa em Grafeno

Para excitações de baixa energia do grafeno se comporta como partículas relativísticas sem massa que se movem através da estrutura em "favo de mel" com uma velocidade de Fermi  $v_F$ . Aqui, a velocidade de Fermi desempenha o papel da velocidade da luz  $c$ , que é no entanto cerca de 300 vezes maior,  $c \approx 300v_F$  [33]. Então o Hamiltoniano em torno do ponto  $K$  de Dirac se reduz a:

$$H_D \Psi = (v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \Psi = E \Psi. \quad (3.3.25)$$

No caso do grafeno,  $\Psi$  representa a função de onda que descreve os estados de elétrons em torno dos pontos de Dirac  $K$  e  $K'$ . Portanto, a versão sem massa da Equação matricial (3.1.13) é dada na forma:

$$H_D = v_F \begin{pmatrix} 0 & \sigma \cdot \vec{p} \\ \sigma \cdot \vec{p} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3.26)$$

Assim, o Hamiltoniano em torno do ponto de Dirac  $\mathbf{K}$  no espaço dos momentos espaço escreve-se[13] como:

$$H_K = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3.27)$$

E em torno de  $\mathbf{K}'$  como:

$$H_{K'} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.3.28)$$

É necessário que tenhamos  $\sigma_y \rightarrow \sigma_y^*$ . A função de onda  $\Psi$  é composta por duas componentes, uma descrevendo o ponto  $K$  e a outra  $K'$ . Assim temos:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi^K \\ \Psi^{K'} \end{pmatrix}, \quad (3.3.29)$$

onde  $\Psi^K$  e  $\Psi^{K'}$  são autoestados de duas dimensão, ou seja:

$$\Psi^K = \begin{pmatrix} \phi^A \\ \phi^{B'} \end{pmatrix}, \quad \Psi^{K'} = \begin{pmatrix} \phi^A \\ \phi^{B'} \end{pmatrix}. \quad (3.3.30)$$

Para obter a relação de dispersão da energia temos que resolver as equações de autovalores para cada ponto de Dirac

$$H_K \Psi^K = E_K \Psi^K, \quad H_{K'} \Psi^{K'} = E_{K'} \Psi^{K'} \quad (3.3.31)$$

de modo que é possível calcular os autovetores compatíveis aos dos obtidos via a equação de Tight-Binding (2.2.17). Então na representação dos momentos devemos ter

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{k}) \Psi^K(\vec{k}) = \pm \Psi^K(\vec{k}) \quad (3.3.32)$$

e

$$(\vec{\sigma}^* \cdot \vec{k}) \Psi^{K'}(\vec{k}) = \pm \Psi^{K'}(\vec{k}), \quad (3.3.33)$$

onde  $\sigma^* = (\sigma_x, -\sigma_y, \sigma_z)$ . Estes autovetores no espaço dos momentos são escritos na forma:

$$\Psi^K(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi_k/2} \\ \pm e^{i\varphi_k/2} \end{pmatrix}, \quad \Psi^{K'}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\varphi_k/2} \\ \pm e^{-i\varphi_k/2} \end{pmatrix}. \quad (3.3.34)$$

Sendo  $\varphi_k$  é o ângulo polar do vetor  $\vec{k}$  no espaço dos momentos. Os sinais  $\pm$  correspondem aos autovalores do espectro de energia para cada ponto de Dirac. A existência de simetria quiral nos autovetores, permite a observação do efeito Hall quântico que é uma característica marcante do grafeno, em vez dos níveis de Landau usuais para um semicondutor, este apresenta um fator de degenerescência devido o nível de energia fundamental ter dois vales [34].

# Capítulo 4

## O Grafeno sobre a Ação de um Campo Magnético

### 4.1 Férmions de Dirac na Presença de um Campo Magnético

Agora vamos estudar o grafeno em um campo magnético e resolver o Hamiltoniano efetivo (A equação de Dirac em 2D) em um campo magnético constante e analisar o espectro de energia. Vamos considerar um campo magnético uniforme externo  $B$  aplicado perpendicularmente em uma camada de grafeno. Consideramos o calibre de Landau  $\vec{A} = B(-y, 0, 0)$ . Sabendo que para o grafeno com partículas sem massa que se movem com uma velocidade de Fermi  $v_F \approx 10^6 m s^{-1}$  através de uma estrutura tipo "favo de mel", descrito pelo Hamiltoniano:

$$H_D \Psi = (v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \Psi = E \Psi. \quad (4.1.1)$$

Incluindo a interação campo pelo acoplamento mínimo do potencial vetor, temos:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}/c. \quad (4.1.2)$$

Com o calibre escolhido temos que:

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} - eBy/c. \quad (4.1.3)$$

A Equação (4.1.1) com o acoplamento mínimo resulta em:

$$v_F[\vec{\sigma} \cdot (-i\hbar\vec{\nabla} - eBy/c)]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (4.1.4)$$

onde  $e$  é a carga do elétron. Primeiramente vamos procurar as soluções da equação de autovalor  $H_K\Psi = E\Psi$  em torno do ponto  $K$ . A solução genérica para a função de onda tem a forma  $\Psi(x, y) = e^{ikx}\phi(y)$ , e inserindo na na equação de autovalor de  $H_K$ , obtemos:

$$v_F \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{i}\partial_x + \hbar\partial_y - \frac{eB}{c}y \\ \frac{\hbar}{i}\partial_x - \hbar\partial_y - \frac{eB}{c}y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^A \\ \phi^B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi^A \\ \phi^B \end{pmatrix}. \quad (4.1.5)$$

Com objetivo de simplificar a expressão introduz-se o chamado comprimento magnético  $l_B = \sqrt{\frac{c\hbar}{eB}}$  [13] na Equação(4.1.5), obtemos que:

$$v_F \begin{pmatrix} 0 & l_B k + l_B \partial_y - \frac{y}{l_B} \\ l_B k - l_B \partial_y - \frac{y}{l_B} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi^A \\ \phi^B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi^A \\ \phi^B \end{pmatrix}. \quad (4.1.6)$$

Redefinindo as variáveis como:

$$\tilde{y} = l_B k - \frac{y}{l_B}, \quad \partial_{\tilde{y}} = l_B \partial_y, \quad (4.1.7)$$

que podem ser escritas como duas equações diferenciais lineares, ou seja:

$$\frac{v_F \hbar}{l_B} (\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}}) \phi^B = E \phi^A \quad (4.1.8)$$

e

$$\frac{v_F \hbar}{l_B} (\tilde{y} - \partial_{\tilde{y}}) \phi^A = E \phi^B. \quad (4.1.9)$$

Isolando  $\phi^B$  da Equação (4.1.9) e substituindo na Equação (4.1.8), temos:

$$\left(\frac{v_F \hbar}{l_B}\right)^2 (\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}})(\tilde{y} - \partial_{\tilde{y}})\phi^A = E^2 \phi^A. \quad (4.1.10)$$

Podemos observar que a Equação (4.1.10) tem sua forma análoga a uma equação de autovalores de um oscilador harmônico unidimensional na mecânica quântica ao referir-se ao Anexo D. Esta equação pode ser resolvida usando o conjunto de operadores de aniquilação e criação como:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}}) \quad (4.1.11)$$

e

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{y} - \partial_{\tilde{y}}). \quad (4.1.12)$$

Assim, a Equação (4.1.10) pode ser reescrita em termos dos operadores como:

$$2 \left(\frac{v_F \hbar}{l_B}\right)^2 (\hat{a}\hat{a}^\dagger)\phi^A = E^2 \phi^A. \quad (4.1.13)$$

Por definição temos os operadores esquerdo e direito

$$N_e = \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad e \quad N_d = \hat{a} \hat{a}^\dagger. \quad (4.1.14)$$

Suponhamos que  $\psi^A = \psi^A(n_e, n_d)$ , então o espectro de energia para o ponto  $K$  de Dirac é dada por:

$$E_K = \pm \sqrt{2} \frac{v_F \hbar}{l_B} \sqrt{n_e} \quad (4.1.15)$$

Agora vamos considerar uma camada de grafeno em um campo magnético constante externo,  $\vec{B} = B\vec{e}_z$ . Em nossas unidades  $c = 1$ . Novamente introduzindo o campo  $\vec{B}$  através do acoplamento mínimo para o potencial vetor de (4.1.2), tal que  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ . Vamos especificar o calibre simétrico:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r} = \frac{B}{2}(-y, x, 0) \quad (4.1.16)$$

Assim, para os dois pontos de Dirac  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$  os Hamiltonianos são dados por:

$$H_K = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y + \frac{eB}{2}(y + ix) \\ p_x + ip_y + \frac{eB}{2}(y - ix) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.1.17)$$

e

$$H_K = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y + \frac{eB}{2}(y - ix) \\ p_x - ip_y + \frac{eB}{2}(y + ix) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1.18)$$

A equação de autovalor de energia no ponto  $\mathbf{K}$  de Dirac, é então:

$$\frac{\hbar v_F}{\xi} \left[ -i \left( \xi \partial_x - \frac{x}{\xi} \right) + \left( -\xi \partial_y + \frac{y}{\xi} \right) \right] \psi^B = E_K \phi^A \quad (4.1.19)$$

e

$$\frac{\hbar v_F}{\xi} \left[ -i \left( \xi \partial_x + \frac{x}{\xi} \right) + \left( \xi \partial_y + \frac{y}{\xi} \right) \right] \psi^A = E_K \phi^B. \quad (4.1.20)$$

onde  $\xi = \sqrt{\frac{2\hbar}{eB}} = \sqrt{2l_B}$  é uma variável auxiliar e  $l_B$  é o assim chamado comprimento magnético [13]. Redefinindo as variáveis como:

$$\partial_{\tilde{x}} = \xi \partial_x, \quad \partial_{\tilde{y}} = \xi \partial_y, \quad \tilde{x} = \frac{x}{\xi} \quad e \quad \tilde{y} = \frac{y}{\xi}. \quad (4.1.21)$$

Substituindo as variáveis redefinidas temos:

$$\frac{\hbar v_F}{\xi} [-i (\partial_{\tilde{x}} - \tilde{x}) + (-\partial_{\tilde{y}} + \tilde{y})] \psi^B = E_K \phi^A \quad (4.1.22)$$

e

$$\frac{\hbar v_F}{\xi} [-i (\partial_{\tilde{x}} + \tilde{x}) + (\partial_{\tilde{y}} + \tilde{y})] \psi^A = E_K \phi^B. \quad (4.1.23)$$

Isolando  $\phi^B$  da Equação (4.1.23) e substituindo na Equação (4.1.22), temos:

$$\left( \frac{\hbar v_F}{\xi} \right)^2 [-i (\partial_{\tilde{x}} - \tilde{x}) + (-\partial_{\tilde{y}} + \tilde{y})] [-i (\partial_{\tilde{x}} + \tilde{x}) + (\partial_{\tilde{y}} + \tilde{y})] \psi^A = E_K^2 \phi^A, \quad (4.1.24)$$

que é uma equação de segunda ordem análoga à equação de autovalores da energia para o oscilador harmônico quântico em duas dimensões que pode ser resolvida usando o conjunto de operadores de aniquilação e criação:

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{y} + \partial_{\tilde{y}}), \quad a_y^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{y} - \partial_{\tilde{y}}) \quad (4.1.25)$$

e

$$a_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} + \partial_{\tilde{x}}), \quad a_x^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} - \partial_{\tilde{x}}). \quad (4.1.26)$$

Para simplificar os cálculos representamos os operadores como esquerda/direita como:

$$\hat{a}_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y), \quad \hat{a}_d^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x^\dagger + ia_y^\dagger) \quad (4.1.27)$$

$$\hat{a}_e = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y), \quad \hat{a}_e^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_x^\dagger - ia_y^\dagger). \quad (4.1.28)$$

Assim, a Equação (4.1.24) pode agora ser reescrita em termos de estes operadores esquerda/direita:

$$4 \left( \frac{\hbar v_F}{\xi} \right)^2 (\hat{a}_e^\dagger \hat{a}_e) \psi^A = E_K^2 \phi^A. \quad (4.1.29)$$

Observa-se que o Hamiltoniano depende apenas das operadoras de esquerda. Por definição temos os operadores esquerdo e direito:

$$N_e = \hat{a}_e^\dagger \hat{a}_e, \quad N_d = \hat{a}_d^\dagger \hat{a}_d. \quad (4.1.30)$$

Suponhamos que  $\psi^A = \psi^A(n_e, n_d)$ , então o espectro de energia para o ponto  $\mathbf{K}$  de Dirac é dada por:

$$E_K = \pm \sqrt{2} \frac{v_F \hbar}{l_B} \sqrt{n_e}. \quad (4.1.31)$$

O cálculo do espectro de energia em torno do ponto  $\mathbf{K}'$  é análogo ao do ponto  $\mathbf{K}$ .

## 4.2 Níveis de Landau

A teoria de Landau é um dos problemas mais simples possíveis da mecânica quântica, e consiste de uma partícula carregada em duas dimensões sob a influência de um campo magnético constante aplicado perpendicularmente ao plano do movimento. Em mecânica quântica, a quantização de Landau é a quantização das órbitas ciclotônicas de partículas carregadas na presença de campos eletromagnéticos. Como resultado, as partículas carregadas podem ocupar apenas órbitas com valores discretos de energia, denominados níveis de Landau. Os níveis de Landau são degenerados, com o número de elétrons por nível diretamente proporcional a intensidade do campo magnético aplicado.

Os surgimento níveis de Landau é um dos fenômenos que mostram dependências devido a dispersão de energia incomum do grafeno. Em comparação com quantização Landau em um gás de elétrons 2D ou semicondutor 2D, o grafeno representa um caso especial. Então vamos primeiramente discutir brevemente a quantização Landau convencional para elétrons livres em um campo magnético, de modo que podemos comparar isso com resultados obtidos em uma camada de grafeno. No caso de quantização Landau convencional, os elétrons que interagem são não-relativísticos, que chamaremos de férmions de Schrödinger.

Neste caso consideramos um semicondutor que tem relação de dispersão quase semelhante ao grafeno, ou seja, ele é composto por duas bandas de energia que se tocam em zero de energia. Vamos orientar o campo magnético na direção  $z$ , onde potencial vetor  $\vec{A} = \vec{\nabla} \times \vec{B}$  tem apenas componentes perpendiculares a  $\vec{B}$ . O Hamiltoniano pode ser escrito da forma:

$$H = \frac{1}{2m}(\vec{p}_x^2 + \vec{p}_y^2 + \vec{p}_z^2). \quad (4.2.32)$$

O termo  $\vec{p}_z^2$  corresponde a um movimento livre na direção  $z$  e contribui para que a energia cinética permaneça a mesma para a partícula livre. Vamos trabalhar com o calibre de Landau, onde  $\vec{A} = (-By, 0, 0)$ . Como o Hamiltoniano não é dependente das coordenadas  $x$  e  $z$  temos as relações de comutações:

$$[H, p_x] = [H, p_z] = 0. \quad (4.2.33)$$

Agora vamos encontrar os autovalores de energia  $E$  para a equação estacionária  $H = E$ , usando  $\Psi$  é autofunção de  $p_x$  e  $p_z$ , então temos:

$$E\Psi = \frac{1}{2m}(\vec{p}_x^2 + \vec{p}_y^2 + \vec{p}_z^2)\Psi, \quad (4.2.34)$$

onde  $\Psi(x, y, z) = e^{ik_z z} e^{ik_x x} \chi(y)$ . Para descrever elétrons livres em um campo magnético, é preciso substituir o momento por sua forma invariante de gauge. Aplicando o acoplamento mínimo (4.1.2) em (4.2.34), temos:

$$E\Psi = \frac{1}{2m} \left[ \left( p_x - \frac{e}{c} B \vec{y} \right)^2 + \vec{p}_y^2 + p_z^2 \right], \quad (4.2.35)$$

redefinindo a variável para  $y_0 = \frac{cp_x}{eB}$  com  $e = e_0$  e aplicando a autofunção, teremos:

$$E e^{ik_z z} e^{ik_x x} \chi(y) = \frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{e_0^2 B^2 y_0}{c^2} - 2 \frac{e_0^2 B^2 y_0 \vec{y}}{c^2} + \frac{e^2 B^2 \vec{y}^2}{c^2} \right) + \vec{p}_y^2 + p_z^2 \right] e^{ik_z z} e^{ik_x x} \chi(y). \quad (4.2.36)$$

Reajustando a equação teremos:

$$(E - E_z) \chi(y) e^{ik_z z} e^{ik_x x} = \left[ \left( \frac{1}{2} \frac{e_0^2 B^2}{mc^2} (\vec{y} - y_0)^2 \right) + \frac{\vec{p}_y^2}{m} \right] \chi(y) e^{ik_z z} e^{ik_x x}. \quad (4.2.37)$$

Podemos observar que o lado direito da equação tem forma do Hamiltoniano para oscilador harmônico, oscilando em torno de  $y_0$ . O termo  $\chi(y)$  é autofunção para um oscilador 1D com autovalores iguais a  $\hbar w_c (n + \frac{1}{2})$ . Os níveis de energia de um elétron no campo magnético são, então:

$$E_n = E_z + \hbar w_c (n + \frac{1}{2}), \quad \text{com} \quad w_c = \frac{e_0 B}{mc}. \quad (4.2.38)$$

Estes são conhecidos como níveis de Landau, onde  $w_c$  é chamada frequência de ciclotrônica devido os elétrons descreverem um caminho em espiral ao longo do eixo  $z$  enquanto se move através do campo magnético externo  $\vec{B} = B_z$ . Os níveis de Landau para elétrons de Dirac são diferentes dos níveis de Landau para elétrons de Schrödinger como podemos ver na Figura 4.1. Essa diferença na relação de dispersão tem consequências para o Efeito Hall Quântico que discutiremos a seguir.

Vamos agora discutir os níveis de Landau para a monocamada de grafeno. Lembrando que, para um gás de elétrons convencional (não-relativísticos) a quantização de Landau produz níveis de energia equidistantes devido à lei parabólica dispersão

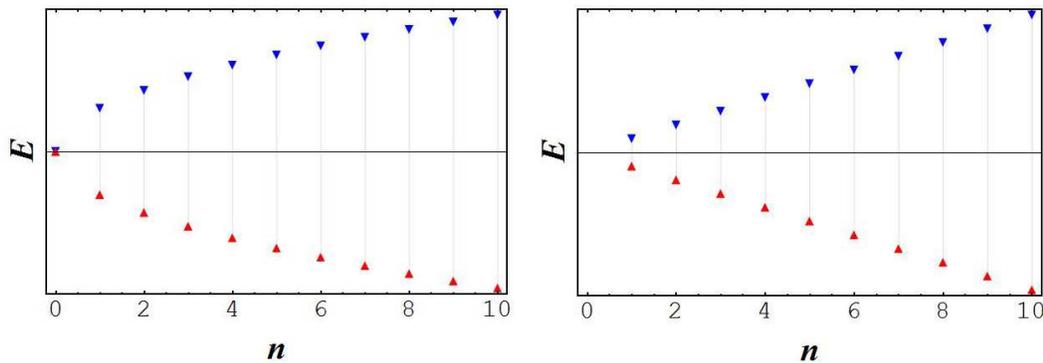


Figura 4.1: São ilustrados os níveis de Landau  $n \in [0; 10]$  para grafeno ( $E_0 = 0$ ) à esquerda e para níveis de Landau convencionais ( $E_0 \neq 0$ ) de semicondutores no lado direito.

de elétrons livres. No grafeno os elétrons têm lei de dispersão linear relativística, que modifica fortemente a quantização de Landau da energia e da posição dos níveis. Através da aplicação de um campo magnético externo perpendicular à folha de grafeno, o espectro de energia torna-se discreto [35].

Para um campo magnético perpendicular à camada de grafeno, o potencial vetor pode ser escolhido em gauge de Landau como  $A_i = B(-y, 0)$ . Podemos utilizar outros gauge para um campo magnético uniforme aplicado na direção  $z$ . Usamos o calibre de Landau por ser mais simples e apropriado para uma simetria em torno do eixo  $y$  tornando o sistema independente desta coordenada. Outra possibilidade é o chamado calibre simétrico  $\vec{A} = \frac{B}{2}(y, -x)$ , sendo  $B$  um campo magnético uniforme, necessário para escrever funções de onda do efeito Hall fracionário, e sistemas com simetria rotacional. Para descrever elétrons livres em um campo magnético precisamos substituir o momento por sua forma invariante de calibre através do acoplamento mínimo (4.1.2), em que o potencial vetor  $\vec{A}$  gera o campo magnético  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ . Este momento invariante de calibre é proporcional a velocidade do elétron  $v$ , que deverá naturalmente ser de invariante de calibre, por ser uma grandeza física. Como o hamiltoniano de Dirac é dado por:

$$H = v_f \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.39)$$

Onde a função de onda de quatro componentes:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_B^{K'} \\ \Psi_A^{K'} \\ \Psi_B^K \\ \Psi_A^K \end{pmatrix}. \quad (4.2.40)$$

Vamos primeiro obter as soluções para o vale  $K$ , resolvendo o sistema

$$\begin{cases} v_f(p_x - ip_y)\Psi_B = E\Psi_B^K \\ v_f(p_x + ip_y)\Psi_A = E\Psi_A^K \end{cases}$$

o qual pode ser inserida uma equação na outra ainda desacoplada, ou seja:

$$v_f^2(p_x - ip_y)(p_x + ip_y)\Psi_A = E^2\Psi_A^K \quad (4.2.41)$$

e

$$v_f^2(p_x + ip_y)(p_x - ip_y)\Psi_B = E^2\Psi_B^K. \quad (4.2.42)$$

Vamos encontrar os níveis de energia  $E$  para o  $\Psi_B^K$ , usando  $[H, p_x] = 0$  e que para elétrons  $e = -e_0$ :

$$\left[ \left( p_x + \frac{e}{c} B \vec{y} \right) + ip_y \right] \left[ \left( p_x + \frac{e}{c} B \vec{y} \right) - ip_y \right] \Psi_B = \frac{E^2}{v_f^2} \Psi_B^K \quad (4.2.43)$$

e

$$\left[ \left( p_x + \frac{eB}{c} \vec{y} \right)^2 - i \left[ p_x + \frac{eB}{c} \vec{y}, p_y \right] + p_y^2 \right] \Psi_B^K = \frac{E^2}{v_f^2} \Psi_B^K. \quad (4.2.44)$$

Pelas relações de comutações:

$$[p_x, p_y] = \frac{i\hbar eB}{c}. \quad (4.2.45)$$

Então teremos:

$$\left[ \left( p_x + \frac{eB}{c} \vec{y} \right)^2 + \frac{\hbar eB}{c} + p_y^2 \right] \Psi_B^K = \frac{E^2}{v_f^2} \Psi_B^K. \quad (4.2.46)$$

Multiplicando ambos os lados por  $\frac{1}{2m}$ , teremos:

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( p_x + \frac{eB}{c} \vec{y} \right)^2 + \frac{\hbar e B}{c} + p_y^2 \right] \Psi_B^K = \frac{1}{2m} \frac{E^2}{v_f^2} \Psi_B^K, \quad (4.2.47)$$

redefinindo a variável  $y_0 = \frac{cp_x}{eB}$  com  $\tilde{k} = \frac{e_0 B}{c\sqrt{m}}$

$$\frac{1}{2m} \left( \frac{E^2}{v_f^2} + \frac{\hbar e B}{c} \right) \Psi_B^K = \left( \frac{\tilde{k}}{2} (\vec{y} - y_0)^2 + \frac{p_y^2}{2m} \right) \Psi_B^K. \quad (4.2.48)$$

O lado direito da equação tem a forma de Hamiltoniano para o oscilador harmônico, oscilando em torno de  $y_0$ . Se  $\Psi_B^K$  é autofunção desse Hamiltoniano, os seus autovalores serão  $\hbar\omega_c(n + \frac{1}{2})$ , onde para a quantização Landau padrão  $\omega_c = \sqrt{\tilde{k}m} = \frac{eB}{mc}$ . Conseqüentemente, os valores de energia para os níveis de Landau em monocamada de grafeno deve satisfazer a:

$$\frac{\hbar e B}{c} (2n + 1 - 1), \quad (4.2.49)$$

em que  $n = 0, 1, 2, \dots$ , correspondem os mesmos valores que para o oscilador de harmônico. Desde que tenha raízes positivas e negativas, podemos estender o domínio de  $n$  para valores inteiros e escrever as autoenergias dos elétrons de Dirac sem massa num campo uniforme como:

$$E^\pm = \pm \sqrt{\frac{2|e|B\hbar v_f^2 n}{c}}. \quad (4.2.50)$$

Esses valores são conhecidos como os níveis quânticos de Landau para o grafeno que determinam o comportamento dos elétrons, onde o número de elétrons em cada nível é proporcional à força do campo magnético aplicado. A quantização de Landau é a quantização do movimento orbital de partículas carregadas em um campo magnético, como consequência a partícula carregada pode ocupar apenas órbitas com valores de energia discretas, que são os níveis de Landau. O índice do nível de Landau,  $n$ , positivo corresponde aos elétrons (banda de condução), enquanto que os valores negativos correspondem aos furos (banda de valência). Além disso, eles não estão equidistantes como no caso convencional e a maior separação entre a energia é zero e o primeiro nível de Landau. Esta grande lacuna permite observar o efeito Hall quântico no grafeno, mesmo à temperatura ambiente [35]. Em física da matéria condensada ,

este espectro foi obtido pela primeira vez por McClure (1956), em sua teoria da de diamagnetismo do grafite.

Para obter as relações entre espectros de Landau relativísticos e não-relativísticos, vamos elevar o Hamiltoniano da Equação(4.2.41) ao quadrado, levando em conta as relações de comutações:

$$[p_x, p_y] = \frac{i\hbar eB}{c}. \quad (4.2.51)$$

Então temos:

$$H^2 = v^2(\vec{\sigma}\vec{p})^2 = v^2\vec{p}^2 + iv^2\vec{\sigma}(\vec{p} \times \vec{p}) = v^2\vec{p}^2 - \frac{v^2\hbar|e|B}{c}\sigma^z. \quad (4.2.52)$$

O espectro do operador (4.2.52) pode ser encontrada a partir da solução do problema não-relativística (ver apêndice E) colocando  $m = l/(2v^2)$ . Em seguida, temos:

$$E_n^2 = \frac{2|e|B\hbar v_f^2}{c} \left( n + \frac{1}{2} \right) \mp \frac{v^2\hbar|e|B}{c} = \frac{2|e|B\hbar v_f^2}{c} \left( n + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right). \quad (4.2.53)$$

onde  $\pm 1$  são autoestados do operador  $\sigma^z$ . O último termo na Equação (4.2.53), vemos como o efeito Zeeman, e a existência de nível zero de Landau neste, resulta de um cancelamento exato da energia ciclotron e a energia Zeeman.[35].

O efeito Zeeman consiste no deslocamento das linhas espectrais de um sistema (átomos, moléculas, defeito, impurezas em cristais, etc.) em vários componentes pela ação de um campo magnético. Esse efeito, descoberto pelo físico holandês Pieter Zeeman, em 1896, é utilizado principalmente na determinação da multiplicidade dos termos espectrais (números quânticos dos níveis de energia).

## 4.3 Efeito Hall

O efeito Hall clássico, descoberto por E.H. Hall em 1879, se refere a diferença de potencial, que surge entre lados opostos de um condutor pelo qual passa uma corrente elétrica, criada por um campo magnético aplicado perpendicularmente à corrente [36]. A resistividade Hall é classicamente uma função linear da componente perpendicular do campo magnético para valores fixos da densidade. A resistividade depende sensivelmente de detalhes da amostra como sua composição, geometria e impurezas. A descoberta do efeito Hall quântico foi uma conquista extraordinária na física da matéria condensada. Esse efeito é observado em elétrons bi-dimensionais a temperaturas muito baixas e campos magnéticos intensos.

As observações do fenômeno Hall quântico em 1980 e do efeito Hall quântico fracionário em 1982 estão entre as mais importantes descobertas físicas na segunda metade do século XX. A quantização precisa da resistência elétrica no Efeito Hall Quântico levou à nova definição do padrão de resistência e teve grande impacto em toda a ciência e tecnologia [37].

O Efeito Hall Quântico é um exemplo de um fenômeno quântico que ocorre em uma escala macroscópica sendo exclusivo para os metais bidimensionais (2D) e geralmente requer baixas temperaturas, tipicamente abaixo do ponto de ebulição do hélio líquido.

No grafeno, pode ser observado mesmo à temperatura ambiente devido à natureza altamente incomum dos portadores de carga, que se comportam como partículas relativísticas sem massa (férmions de Dirac) e se movem com pouca dispersão em condições ambientais [38, 39]. À temperatura ambiente, a sua condutividade Hall,  $\sigma_{xy}$ , revela platos de  $2e^2/h$  para ambos os elétrons e buracos, enquanto a condutividade longitudinal,  $\rho_{xx}$ , se aproxima de zero ( $<10$  ohms) exibindo uma energia de ativação  $\Delta E \approx 600K$ .

O Efeito Hall Quântico no grafeno é verificada experimentalmente pelo espaçamento entre os platôs de  $4e^2/h$  nas medidas da condutividade Hall  $\sigma_{xy}$  e das oscilações no valor da resistência longitudinal,  $\rho_{xx}$ , em função do campo magnético perpendicular  $B$  ou da tensão de gate  $V_g$  aplicado. Quando um campo magnético elevado,  $\vec{B}$ , perpendicular ao plano do sistema, é aplicado a um material de 2D, obtemos um espectro de energia discreta conhecido como níveis de Landau, ou seja, a energia do elétron é quantizada [40].

Para o caso de férmions de Dirac na presença de campo o espectro é obtido através

do hamiltoniano:

$$H = v_f \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.3.54)$$

A interação com um campo eletromagnético externo é obtida através do acoplamento mínimo [41] considerando o calibre de Landau  $\vec{A} = B(-y, 0, 0)$ . É necessário resolver a equação de autovalores:

$$H\Psi(x, y) = E\Psi(x, y), \quad (4.3.55)$$

onde o espinor é dado por:

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} \Psi_B(x, y) \\ \Psi_A(x, y) \end{pmatrix}. \quad (4.3.56)$$

Então temos:

$$v_f \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_B(x, y) \\ \Psi_A(x, y) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \Psi_B(x, y) \\ \Psi_A(x, y) \end{pmatrix}. \quad (4.3.57)$$

Escrevendo as equações para  $\Psi_A(x, y)$  e  $\Psi_B(x, y)$  obtemos explicitamente as duas equações acopladas, ou seja:

$$v_f(p_x + ip_y)\Psi_B(x, y) = E\Psi_A(x, y), \quad (4.3.58)$$

e

$$v_f(p_x - ip_y)\Psi_A(x, y) = E\Psi_B(x, y). \quad (4.3.59)$$

Para o desacoplamento multiplicamos (4.3.58) por  $v_f(p_x - ip_y)$  e (4.3.59) por  $v_f(p_x + ip_y)$  e usamos o comutador [42]:

$$[p_x, p_y] = -i\frac{\hbar e B}{c}. \quad (4.3.60)$$

Então obtém-se a seguinte equação para o spinorial  $(x, y)$ ,

$$\left[ v_f^2(p_x^2 + p_y^2) - \frac{\hbar e B v_f^2}{c} \sigma_z \right] \Psi(x, y) = E^2 \Psi(x, y), \quad (4.3.61)$$

podemos reescrever da seguinte forma:

$$v_f^2 \left[ \vec{p}^2 + \frac{e^2 B^2}{c^2} y^2 - \frac{2eB}{c} \left( \frac{1}{2} \hbar \sigma_z - p_x y \right) \right] \Psi(x, y) = E^2 \Psi(x, y). \quad (4.3.62)$$

Tomando uma solução do tipo:

$$\Psi(x, y) = \psi(y) e^{ip_x x / \hbar}, \quad (4.3.63)$$

podemos escrever a seguinte equação para  $\psi(y)$  como:

$$v_f^2 \left[ -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \left( \frac{eBy}{c} + p_x \right)^2 \right] \psi(y) = \left( E^2 + \frac{2eBv_f^2}{c} \left[ \frac{1}{2} \hbar \sigma_z \right] \right) \psi(y) \quad (4.3.64)$$

dividindo por  $\hbar e B v_f^2 / c$ , obtemos:

$$\left[ -\frac{\hbar c}{eB} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{eB}{\hbar c} \left( y + \frac{cp_x}{eB} \right)^2 \right] \psi(y) = E' \psi(y) \quad (4.3.65)$$

Definindo:

$$E' = \frac{E^2 + 2eBv_f^2/c(\frac{1}{2}\hbar\sigma_z)}{\hbar e B v_f^2/c}, \quad (4.3.66)$$

e fazendo a mudança de variável, obtemos:

$$\xi = \sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} \left( y + \frac{cp_x}{eB} \right). \quad (4.3.67)$$

Considerando  $\hbar = 1$  chegamos na equação que é a de um oscilador harmônico com frequência  $\omega = 2$ . ou seja:

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right) \psi(\xi) = E' \psi(\xi), \quad (4.3.68)$$

As funções de onda do oscilador harmônico e suas energias são:

$$\psi(\xi) = N H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (4.3.69)$$

e

$$E'_n = 2(n + 1/2) \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.3.70)$$

no qual  $N$  é o fator de normalização nas funções de onda e  $H$  é o polinômio de Hermite [43]. Com as Equações (4.3.66) e (4.3.70) obtemos finalmente o espectro de energia:

$$E = \sqrt{2|e|B\hbar v_f^2/c(n + 1/2 \pm 1/2)}. \quad (4.3.71)$$

Podemos observar três tipos de comportamento do Efeito Hall Quântico no grafeno. O primeiro é um análogo do QHE relativístico inteiro e característica de camada única de grafeno. Ele aparece na forma de escada de passos equidistantes em condutividade Hall  $\sigma_{xy}$  que persiste através do ponto de neutralidade (Dirac), onde portadores de carga mudam de elétrons para buracos. A sequência é deslocada em relação ao spin  $1/2$  do Efeito Hall Quântico padrão, de modo que  $\sigma_{xy} = \pm 4e^2/h(N + \frac{1}{2})$ , onde  $N$  é o nível de Landau e o índice de fator 4 aparece devido o duplo vale e a dupla degeneração do spin [15, 19].

Uma peculiaridade importante para os níveis de Landau, no caso de férmions de

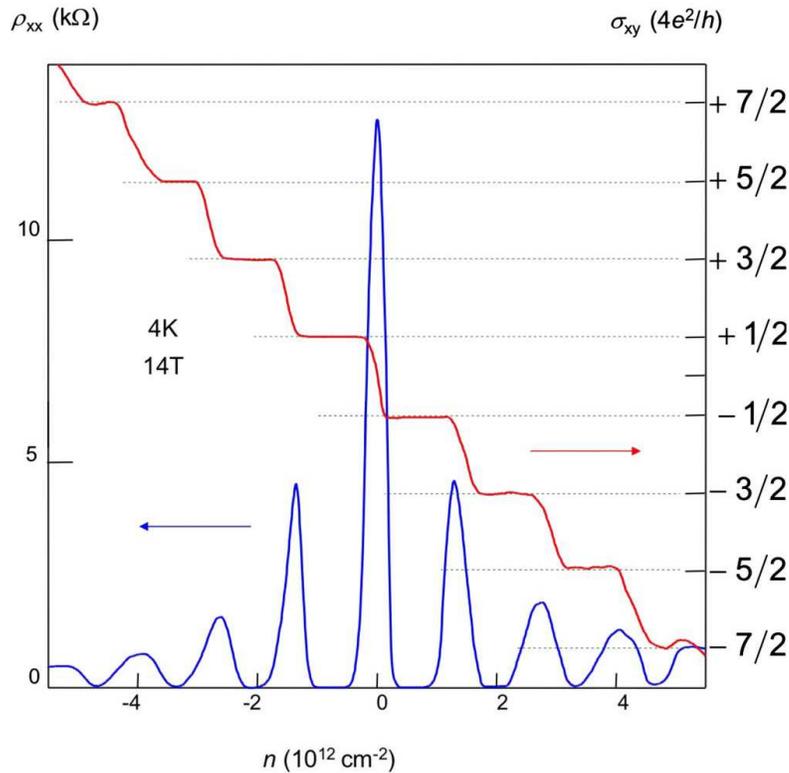


Figura 4.2: A condutividade Hall é representada pela linha em vermelho e a resistência longitudinal pela linha em azul. Nas medições da condutividade Hall no grafeno obtidos por K.S. Novoselov, A.K. Geim, et al, pode-se ver que a escada como condutividade Hall exibe platôs em múltiplos semi-inteiros da condutância quântica  $4e^2/h$  [13].

Dirac sem massa é a existência de estados de energia de zero com  $n = 0$  e o sinal

negativo na Equação (4.3.71). Com  $\nu = 0$  a Equação (4.3.71) se reduz a:

$$E = v_f \sqrt{2|e|B\hbar/c}. \quad (4.3.72)$$

A existência deste nível de Landau com estado de energia zero leva a ter um efeito de quântico Hall anômalo.

## 4.4 O Efeito Aharonov-Bohm

Em 1959, Aharonov e Bohm (AB) mostraram que, ao contrário das conclusões da mecânica clássica, existem efeitos potenciais sobre partículas carregadas, mesmo na região onde todos os campos desaparecem [44]. Primeiramente vamos considerar um experimento padrão de dupla fenda por onde passa um feixe de elétrons com  $\lambda = 2\pi/k$ :

A diferença de fase no ponto P entre os dois caminhos é [45]:

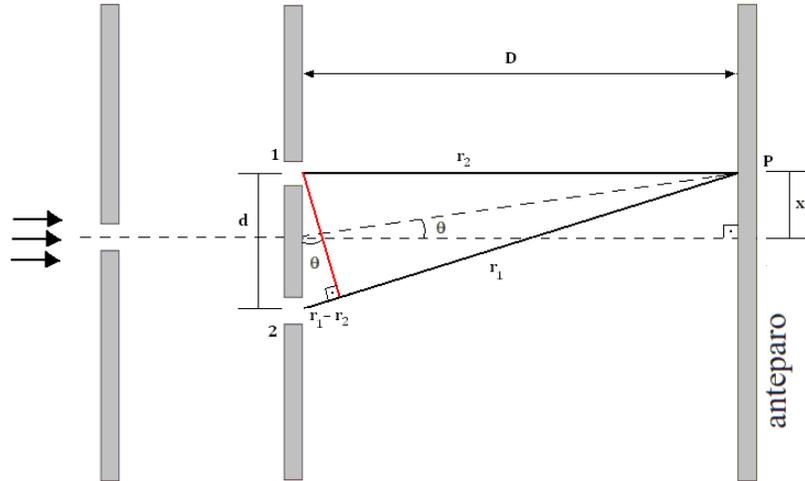


Figura 4.3: Esquema do experimento de interferência de duas fendas.

$$\delta = kr_1 - kr_2 = \frac{2\pi}{\lambda}(r_1 - r_2). \quad (4.4.73)$$

Analisando a figura 4.3, temos:

$$r_1 - r_2 = d \sin \theta, \quad (4.4.74)$$

$2n\pi$  indica interferência destrutiva e  $(2n + 1)\pi$ , interferência construtiva.

Se  $x \ll D$ , temos:

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{xd}{D}. \quad (4.4.75)$$

Então:

$$x = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{\delta D}{d}. \quad (4.4.76)$$

A ideia (AB) foi introduzir um solenóide longo e fino atrás da parede entre as duas

fendas como na Figura 4.4

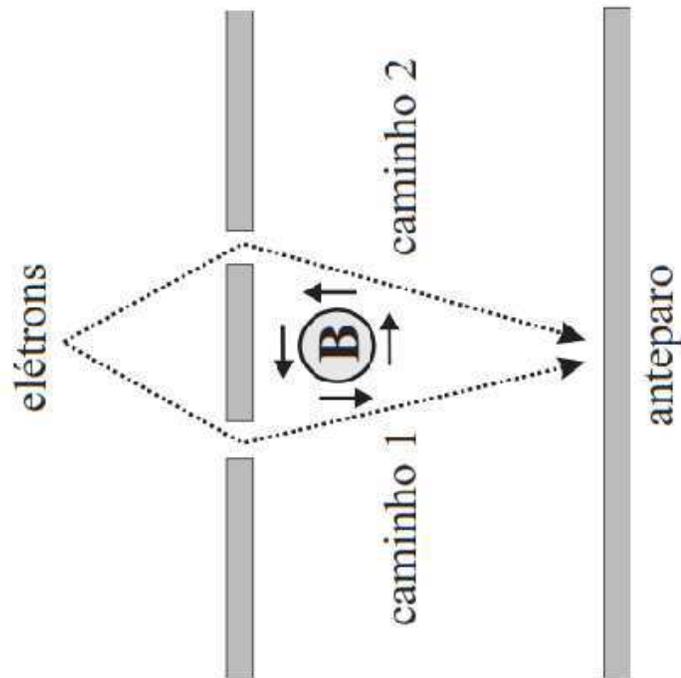


Figura 4.4: Esquema de um experimento de fenda dupla na presença de um solenóide [47].

### O Potencial Vetor

Para o vetor potencial [46]:

$$\text{Dentro do solenóide} \begin{cases} A_r = A_z = 0 \\ A_\phi = \frac{B\rho}{2} \end{cases}$$

$$\text{e Fora do solenóide} \begin{cases} A_r = A_z = 0 \\ A_\phi = \frac{BR^2}{2\rho} \end{cases}$$

Para campo magnético:

$$\text{Dentro do solenóide} \begin{cases} B_r = B_\phi = 0 \\ B_z = B_0 \end{cases}$$

$$\text{e Fora do solenóide} \begin{cases} \vec{B} = 0. \end{cases}$$

Veremos agora como o potencial vetor pode afetar a trajetória de um elétron.

Partindo da função de onda de um elétron em um espaço livre:

$$\psi = |\psi|e^{(i\vec{p}\cdot\vec{r})} = |\psi|e^{(i\alpha)}. \quad (4.4.77)$$

O efeito da presença de um potencial é mudar  $\vec{p}$  para:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}. \quad (4.4.78)$$

A fase  $\alpha$  da função de onda muda de acordo:

$$\alpha \rightarrow \alpha - e\vec{A} \cdot \vec{r}, \quad (4.4.79)$$

O que leva a mudança de fase da trajetória completa, então:

$$\Delta\alpha = -e \oint_t \vec{A} \cdot d\vec{r}. \quad (4.4.80)$$

A mudança na diferença de fase  $\delta$  entre as duas funções fica:

$$\Delta\delta = \Delta\alpha_2 - \Delta\alpha_1 = e \oint_{2-1} \vec{A} \cdot d\vec{r} = e \int_s (\nabla \times \vec{A}) \cdot ds = e \int_s \vec{B} \cdot ds = e\Phi_B. \quad (4.4.81)$$

Finalmente fazendo  $x + \Delta x$  e usando o resultado de (4.4.76) as posições dos novos máximos, são:

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{D}{d} e\Phi_B. \quad (4.4.82)$$

### O Efeito Aharonov-Bohm em Anéis de Grafeno

Quando os elétrons passam através de uma estrutura de anel mesoscópico (anel em escala micro), eles são divididos em dois caminhos correspondentes. Em estruturas mesoscópicas as propriedades físicas são alteradas pelo tamanho e depende muito do material em particular. Na presença de um campo magnético externo ( $B$ ) perpendicular ao anel, as duas ondas eletrônicas tem uma diferença de fase  $\Delta\phi$ :

$$\Delta\phi = \frac{e}{\hbar} \int_2 \vec{A} \cdot d\vec{r} - \frac{e}{\hbar} \int_1 \vec{A} \cdot d\vec{r}, \quad (4.4.83)$$

onde  $\vec{A}$  é o potencial vetor,  $e$  é a carga do elétron e  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida ( $\hbar = h/2\pi$ ). A primeira integral corresponde a ligação superior e a segunda ligação inferior. Como temos uma superfície fechada, podemos ainda escrever como:

$$\Delta\phi = \frac{e}{\hbar} \oint_t \vec{A} \cdot d\vec{r}, \quad (4.4.84)$$

$$\Delta\phi = \frac{e}{\hbar} \oint_{2-1} \vec{A} \cdot d\vec{r} = \frac{e}{\hbar} \int_s (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{s} = \frac{e}{\hbar} BS. \quad (4.4.85)$$

Onde  $S$  é a área do anel. A diferença de fase depende do campo magnético e da área do anel que provoca fenômenos de interferência [47].

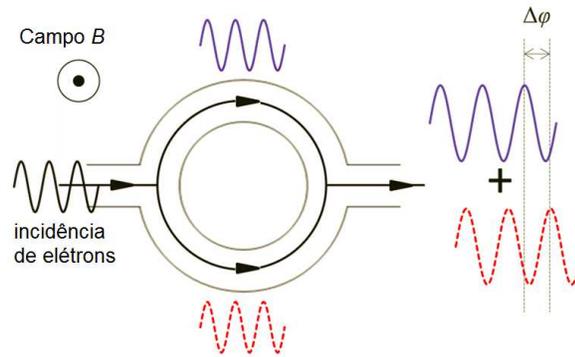


Figura 4.5: Esquema de efeito Aharonov-Bohm em anel de grafeno [54].

A diferença de fase ( $\Delta\phi$ ) entre ondas eletrônicas superior e inferior é determinada pelo tamanho do anel e do campo magnético. O efeito AB pode ser verificado na experiência, observando-se as oscilações de resistência em relação ao campo magnético aplicado. Lembrando que a constante de Planck é representada por  $h$ , e seu valor é de aproximadamente  $h = 4,13566743 \times 10^{-15} eV.s$ . A periodicidade da oscilação corresponde ao caso, sempre que a diferença de fase é um múltiplo de  $2\pi$ , que é análogo ao efeito de interferência na experiência de dupla fenda. A frequência das oscilações AB é calculado por:

$$\Delta B = NeS/h, \quad N = 1, 2, \dots, \quad (4.4.86)$$

A Figura 4.6 apresenta as trajetórias de elétrons, onde cada elétron que entra em uma ligação faz uma meia volta no primeiro harmônico e uma volta completa no segundo harmônico [54].

Portanto, a diferença de fase  $\Delta\phi$  é duplicada devido à diferença no número de

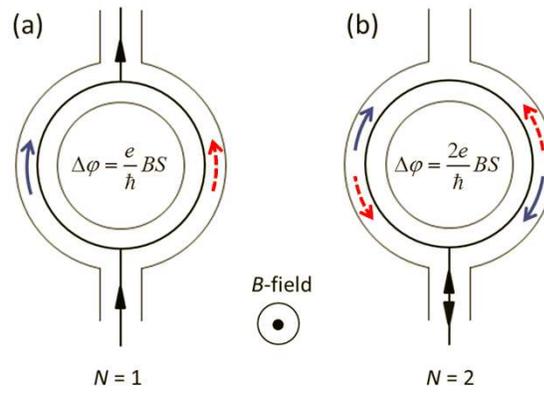


Figura 4.6: (a) Trajetórias de elétrons correspondentes ao primeiro ( $N = 1$ ) e segundo harmônicos ( $N = 2$ ). (b) Elétrons faz uma meia revolução no primeiro harmônico e um ciclo no segundo harmônico.

revoluções dentro do anel e rende duas vezes maior frequência de oscilação no segundo harmônico. Para apresentar o efeito de interferência, a informação de fase de elétrons tem de ser conservado durante a passagem através dos anéis. A distância máxima que um elétron mantém a sua informação de fase é conhecido como o comprimento de coerência de fase  $l_\phi$ . Enquanto a fase  $l_\phi$  é comparável ao tamanho característico do anel, o efeito Aharonov-Bohm pode ser visto. Caso a coerência de fase seja maior do que o tamanho do anel, harmônicas de ordem superior adicionais correspondentes a  $NeS/h$  ( $N = 3, 4, \dots$ ) se tornam observáveis [48]. Em geral, o efeito AB é apenas observável no campo magnético baixo, onde o raio ciclotron ( $r_c = \hbar k_F / eB$ ) é maior do que a escala característica do anel.

Porque no regime de alto campo magnético (isto é, quando  $r_c$  é menor do que a largura do anel  $W$ ) canais com limites de Hall quântico são desenvolvidos e as descrições acima da trajetória de elétrons não são aplicáveis. Em 2004, Junichiro Kono, mostra que o efeito Aharonov-Bohm era capaz de mudar as propriedades elétricas de certos nanotubos de carbono (NTC)[49].

De fato, existem oscilações de Aharonov-Bohm afetando o valor da resistividade do nanotubo de carbono. Geralmente, esse fenômeno se produz quando um elétron quântico descreve um círculo na parede de um condutor metálico ou semiconductor cilíndrico cujo eixo é paralelo a um campo magnético. A fase da onda de matéria associada ao elétron é modificada e a resistência oscila em função do valor do fluxo magnético através do cilindro. Eles observaram que um campo magnético paralelo a um SWNT (Single Wall Nanotubes) semiconductor modifica sua lacuna de energia. Os NTCs são folhas de grafeno enroladas e podem existir sob diferentes versões. Uma

grande classe reagrupa nanotubos de carbono constituídos de uma única parede, os SWNT. No interior dessa classe, o modo como a folha de grafeno é enrolada dá lugar a diferentes tipos de nanotubos.

O efeito Aharonov-Bohm é importante para a investigação de interferência quântica comportamento no grafeno [47], porque mostra diretamente os efeitos de interferência por oscilações de resistência de um anel como uma função do campo magnético. As oscilações surgem a partir da diferença de fase entre os elétrons que passam através dos dois diferentes ligações do anel. Normalmente as frequências experimentalmente

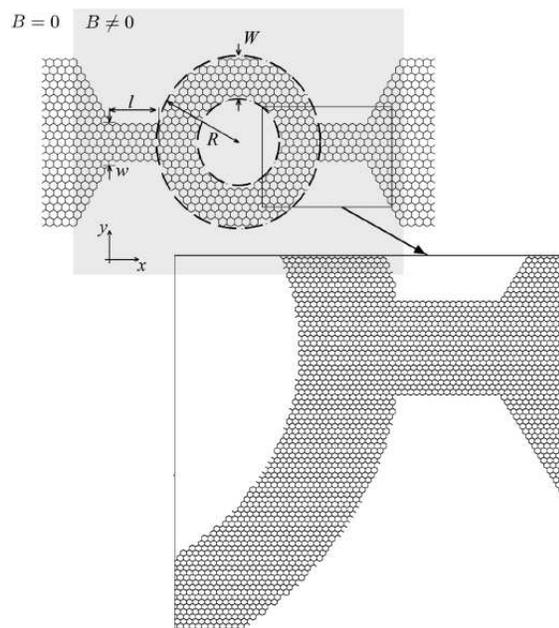


Figura 4.7: Esquema do efeito Aharonov-Bohm sobre um anel de grafeno com suas dimensões. Adaptado de [50].

observáveis das oscilações Aharonov-Bohm são o primeiro ( $N = 1$ ) e o segundo ( $N = 2$ ) harmônico, onde o  $N$  é associado ao número de revoluções dos elétrons dentro do anel [51].

A princípio, a quantidade pelo qual a distância máxima que um elétron mantém a sua informação de fase (fase comprimento de coerência,  $\phi$ ) é maior do que o tamanho do anel, a ordem mais elevada dos harmônicos ( $N = 3, 4, \dots$ ) tornam-se disponíveis [48]. Um grande número de cientistas já relataram sobre o experimento Aharonov-Bohm com grafeno, no entanto o sinal de oscilação AB encontrado foi fraco e apareceu até duas harmônicas [48]. Um método para aumentar a visibilidade do efeito Aharonov-Bohm é utilizar supercondutor ou espelhos metálicos [52, 53, 54].

# Capítulo 5

## Considerações Finais

Neste trabalho realizamos um estudo teórico das propriedades eletrônicas básicas de monocamada de grafeno e alguns fenômenos particulares que surgem quando este é submetido a ação de um campo magnético externo.

Apesar do grafeno apresentar propriedades excepcionais como: resistência mecânica, extrema flexibilidade e boa condutividade térmica, demos ênfase as propriedades eletrônicas que surgem como consequência da linearidade na relação de dispersão dos portadores de carga em torno dos pontos de Dirac. Descrevemos os efeitos que surgem quando aplicamos um campo magnético externo na monocamada do grafeno. Introduzimos uma variante de gauge de Landau e depois o calibre simétrico e encontramos os níveis de energia de Landau, devido ao acoplamento do campo com o movimento orbital dos férmions. Vimos que os portadores de carga, no limite contínuo em baixas energias, apresentam um alto grau de mobilidade e pode ser descrita pela equação de Dirac (2D). Esta semelhança entre as excitações no grafeno e os férmions de Dirac possibilitou a identificação de propriedades peculiares tais como: o efeito Hall quântico, efeito Hall quântico fracionário e o efeito Aharonov-Bohm.

Para perspectivas futuras pretendemos trabalhar um caso particularmente interessante do grafeno considerando uma descrição não-comutativa. Esta descrição é constituída por uma equação de Dirac para férmions de Dirac sem massa na presença de um campo magnético externo com correções não-comutativas. É interessante estudar a não comutatividade no grafeno para obter correções nos níveis de energia do grafeno, mas esta não comutatividade não afeta a condutividade Hall. Bastos et al., considera apenas a não comutatividade dos momentos, já que no problema geral de Dirac, a configuração de espaço leva à quebra de simetria de calibre, uma simetria preservada

na rede grafeno. A introdução da não comutatividade dos momentos determina uma correção do espectro de energia do grafeno na presença de um campo magnético[55]. Isso mostra que os rendimentos não comutatividade dos momentos também acontece em física baixas energias e que as suas implicações não são restritas a cosmologia quântica e os buracos negros física. Em perspectivas futuras pretende-se trabalhar com a não comutatividade em grafeno sem fixar o parâmetro relativo a configuração de espaço. Como neste trabalho consideramos apenas a monocamada de grafeno, trataremos também para o caso de bicamadas e com modelo Tight-Binding na forma microscópica.

# Apêndice A

## Aproximação para baixas energias

Para uma aproximação com baixas energias expandimos o fator de estrutura  $\phi(k)$ , nas vizinhanças dos pontos de Dirac  $\mathbf{K}$  e  $\mathbf{K}'$

$$\phi(\vec{k})_{\mathbf{k}} = (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3}).e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_3} \quad (0.0.1)$$

$$\phi(\vec{k})_{\mathbf{k}} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{q} = (1 + e^{\pm i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}_2 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{\pm i\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}_3 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3}).e^{\pm i\mathbf{K}\cdot\delta_3 + \mathbf{q}\cdot\delta_3} \quad (0.0.2)$$

Substituindo os parâmetros  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$ ,  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{K}'$  e  $\delta_3$  em (0.0.1) teremos

$$\phi(\vec{k})_{\mathbf{k}} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{q} = (1 + e^{\pm i\frac{2\pi}{3}}.e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{\mp i\frac{2\pi}{3}}.e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3}).e^{\mathbf{q}\cdot\delta_3} \quad (0.0.3)$$

Expandindo em series de potência  $e^{ix} = 1 + ix - \frac{x^2}{2!} + \dots$

$$\begin{aligned} \phi(\vec{k})_{\mathbf{k}} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{q} \approx \{ & 1 + e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} [1 + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2 - \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2)^2}{2}] + \\ & e^{\mp i\frac{2\pi}{3}} [1 + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3 - \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3)^2}{2}] \}.e^{\mathbf{q}\cdot\delta_3} \end{aligned} \quad (0.0.4)$$

usando apenas os termos a primeiro ordem em  $\mathbf{q}$  e considerando que

$$e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} = \frac{1}{2}(-1 \mp i\sqrt{3}), \quad e^{\mp i\frac{2\pi}{3}} = \frac{1}{2}(-1 \pm i\sqrt{3})$$

então

$$\phi(\vec{k})_{\mathbf{k}} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{q} = (i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2 e^{\pm i\frac{2\pi}{3}} + i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3 e^{\mp i\frac{2\pi}{3}}).e^{\mathbf{q}\cdot\delta_3} \quad (0.0.5)$$

$$= i\left[\frac{\sqrt{3}a}{4}(q_x + \sqrt{3}q_y)\right] \cdot (-1 \mp i\sqrt{3}) + \left[\frac{\sqrt{3}a}{4}(q_x + \sqrt{3}q_y)\right] \cdot (-1 \pm i\sqrt{3})$$

$$\phi(\vec{k})_{\mathbf{k}} = \pm \mathbf{K} + \mathbf{q} = \pm \frac{3a}{2}(q_x \pm iq_y) \quad (0.0.6)$$

Onde o sinal positivo (+) indica o ponto  $\mathbf{K}$  e o sinal negativo (-) o ponto  $\mathbf{K}'$ .

# Apêndice B

## Equação de Dirac Forma Espinorial

Escrevendo então a equação de Dirac usando a equação da energia relativista, temos

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 - p^2 = (mc)^2 \quad (0.0.7)$$

A idéia é substituir  $\vec{p}$  por  $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ , então temos

$$\left(\frac{E}{c} - \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right) \left(\frac{E}{c} + \vec{\sigma} \cdot \vec{p}\right) = (mc)^2 \quad (0.0.8)$$

Sabendo que  $\vec{p} \rightarrow i\hbar\vec{\nabla}$  e  $E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ , em coordenadas do tempo

$$\left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \left(\frac{i\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - i\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \phi = (mc)^2 \phi \quad (0.0.9)$$

Em coordenadas da posição

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} - i\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \phi = (mc)^2 \phi \quad (0.0.10)$$

É fácil notar que a derivada temporal recai numa derivada de segunda ordem. Podemos tentar escrever uma equação de primeira ordem, estendendo esta equação para quatro componentes. Definindo a componente spinorial  $\phi$  como

$$\phi^{(L)} = \phi, \quad (0.0.11)$$

$$\phi^{(R)} = \frac{1}{mc} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} - i\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \phi^{(L)} \quad (0.0.12)$$

Incluindo as duas componentes  $\phi^{(L)}$  e  $\phi^{(R)}$  em (0.0.10), temos

$$\begin{aligned} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} - i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \phi^{(L)} &= (mc)^2 \phi^{(L)} \\ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) mc \phi^{(R)} &= (mc)^2 \phi^{(L)} \\ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \phi^{(R)} &= mc \phi^{(L)} \end{aligned} \quad (0.0.13)$$

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} - i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \right) \phi^{(L)} = mc \phi^{(R)} \quad (0.0.14)$$

Ambas as equações acima são de primeira ordem da derivada do tempo. Podemos reescrever as equações em uma única equação em termos de uma função de onda 4 componentes, então teremos

$$i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} (\phi^{(L)} - \phi^{(R)}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) + mc(\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) = 0 \quad (0.0.15)$$

$$i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} (\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^{(L)} - \phi^{(R)}) + mc(\phi^{(R)} - \phi^{(L)}) = 0 \quad (0.0.16)$$

Reescrevendo em termos de  $\psi_A = \phi^{(R)} + \phi^{(L)}$  e  $\psi_B = \phi^{(R)} - \phi^{(L)}$ , obtemos

$$-i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} (\phi^{(R)} - \phi^{(L)}) - i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) + mc(\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) = 0 \quad (0.0.17)$$

$$i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} (\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^{(R)} - \phi^{(L)}) + mc(\phi^{(R)} - \phi^{(L)}) = 0 \quad (0.0.18)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) - i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} (\phi^{(R)} - \phi^{(L)}) + mc(\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) = 0 \quad (0.0.19)$$

$$i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} (\phi^{(R)} + \phi^{(L)}) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} (\phi^{(R)} - \phi^{(L)}) + mc(\phi^{(R)} - \phi^{(L)}) = 0 \quad (0.0.20)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} \psi_A - i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \psi_B + mc \psi_A = 0 \quad (0.0.21)$$

$$i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \psi_A + i\hbar \frac{\partial}{\partial x_0} \psi_B + mc \psi_B = 0 \quad (0.0.22)$$

Que são equações matriciais, onde  $\psi_A$  e  $\psi_B$  são dois spinors. As matrizes de Pauli é verificada pela relação:

$$\sigma_i \sigma_j = \sigma_{ij} - i \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (0.0.23)$$

Matrizes de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (0.0.24)$$

# Apêndice C

## Projeção de operadores

Podemos definir a projeção dos operadores como

$$P_{\pm} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma^5); \quad P_{\mp}^2 = P_{\mp}; \quad P_+P_- = P_-P_+ = 0; \quad P_+ + P_- = 1 \quad (0.0.25)$$

Qualquer spinor pode ser escrito em termos de seus estados quirais, ou seja

$$\Psi = (P_+ + P_-)\Psi = \Psi P_+ + \Psi P_- = \Psi_+ + \Psi_- \quad (0.0.26)$$

Decompondo  $\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi$  em estados quirais e usando as propriedades da matriz gama  $\gamma^{5\dagger} = \gamma^5$  e  $\gamma^5\gamma^0 = -\gamma^0\gamma^5$ , teremos

$$\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi = \bar{\Psi}_-\gamma^\mu\Psi_- + \bar{\Psi}_-\gamma^\mu\Psi_+ + \bar{\Psi}_+\gamma^\mu\Psi_- + \bar{\Psi}_+\gamma^\mu\Psi_+ \quad (0.0.27)$$

Agora calculando  $\bar{\Psi}_{\pm}$

$$\bar{\Psi}_- = \Psi_-^\dagger\gamma^0 = \Psi^\dagger\frac{1}{2}(1 - \gamma^5)\gamma^0 = \Psi^\dagger\gamma^0\frac{1}{2}(1 + \gamma^5) = \bar{\Psi}\frac{1}{2}(1 + \gamma^5) = \bar{\Psi}P_+ \quad (0.0.28)$$

De forma similar para  $\bar{\Psi}P_-$ , então temos

$$\bar{\Psi}_{\pm} = \bar{\Psi}P_{\mp} \quad (0.0.29)$$

Decompondo agora  $\bar{\Psi}_-\gamma^\mu\Psi_+$

$$\bar{\Psi}_-\gamma^\mu\Psi_+ = \bar{\Psi}_+\gamma^\mu P_+\Psi \quad (0.0.30)$$

$$\bar{\Psi}_- \gamma^\mu \Psi_+ = \bar{\Psi}_- \frac{1}{2} (1 + \gamma^5) \gamma^\mu \frac{1}{2} (1 + \gamma^5) \Psi \quad (0.0.31)$$

$$\bar{\Psi}_- \gamma^\mu \Psi_+ = \bar{\Psi}_- \frac{1}{4} (1 + \gamma^5) (\gamma^\mu + \gamma^\mu \gamma^5) \Psi \quad (0.0.32)$$

$$\bar{\Psi}_- \gamma^\mu \Psi_+ = \bar{\Psi}_- \frac{1}{4} (1 + \gamma^5) (\gamma^\mu - \gamma^5 \gamma^\mu) \Psi \quad (0.0.33)$$

$$\bar{\Psi}_- \gamma^\mu \Psi_+ = \bar{\Psi}_- \frac{1}{4} (1 + \gamma^5) (1 - \gamma^5) \gamma^\mu \Psi \quad (0.0.34)$$

$$\bar{\Psi}_- \gamma^\mu \Psi_+ = \bar{\Psi}_- \frac{1}{4} (1 + \gamma^5 - \gamma^5 - (\gamma^5)^2) \gamma^\mu \Psi \quad (0.0.35)$$

$$\bar{\Psi}_- \gamma^\mu \Psi_+ = 0 \quad (0.0.36)$$

Similarmente para  $\bar{\Psi}_+ \gamma^\mu \Psi_-$

$$\bar{\Psi}_+ \gamma^\mu \Psi_- = 0 \quad (0.0.37)$$

# Apêndice D

## Oscilador Harmônico Quântico

Na Eq.(4.1.9), observamos uma certa analogia com a equação de autovalor de um oscilador harmônico na mecânica quântica. Para verificar esta hipótese, recordaremos rapidamente alguns conhecimentos básicos de um oscilador harmônico unidimensional. O oscilador harmônico quântico detém uma importância especial na mecânica quântica tanto em aproximações quanto em soluções exatas de vários problemas. O oscilador harmônico linear é descrita pela equação de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi(x, t) = H\psi(x, t) \quad (0.0.38)$$

O oscilador harmônico linear descreve vibrações nas moléculas e os seus homólogos sólidos, os fônons. O papel mais eminente deste oscilador é a sua ligação com os bósons de Higgs, um dos blocos de construção conceitual da física microscópica. Os bósons descrevem os modos do campo eletromagnético, fornecendo a base para a sua quantização. A razão mais provável para esta conexão com propriedades fundamentais da matéria é que o hamiltoniano do oscilador harmônico (0.0.39) é simétrico em movimento e posição, tendo ambos os operadores aparecendo como termos quadrático. Usando equação de Schrödinger independente do tempo, o Hamiltoniano contendo o potencial oscilador harmônico é caracterizada por [56]

$$H\psi = \left[ -\frac{\hbar}{2m}\partial_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right] \psi = E\psi \quad (0.0.39)$$

Reescrendo a equação (0.0.39),temos

$$H\psi = \frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\hbar}{i}\partial_x \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \psi = E\psi \quad (0.0.40)$$

e definindo o novo operador  $\bar{x} = m\omega x$  teremos

$$H\psi = \frac{1}{2m}[p^2 + \bar{x}^2]\psi = E\psi \quad (0.0.41)$$

Vamos expressar essa equação como do quadrado de algum operador

$$p^2 + \bar{x}^2 = (\bar{x} + ip)(\bar{x} - ip) = p^2 + \bar{x}^2 + i(p\bar{x} - \bar{x}p) \quad (0.0.42)$$

A equação (0.0.42) sugere fatorar nosso Hamiltoniano, definindo novos operadores  $a$  (aniquilação) e  $\hat{a}^\dagger$  (criação) como:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x + ip), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}(m\omega x - ip) \quad (0.0.43)$$

Estes operadores criar/aniquilar um quantum de energia  $E = \hbar\omega$ . Os operadores posição e momento são expressos por  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$  é como

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad p = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (0.0.44)$$

pela relações de comutações

$$[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0 \quad (0.0.45)$$

Para encontrar o comutador de  $a$  com  $a^\dagger$  primeiro calculamos  $aa^\dagger$  bem como  $a^\dagger a$

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{1}{2m\omega\hbar} [(m\omega x)^2 + im\omega[p, x] + p^2] \quad (0.0.46)$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{1}{2m\omega\hbar} [(m\omega x)^2 - im\omega[p, x] + p^2] \quad (0.0.47)$$

Uma vez que sabemos  $[p, x] = i\hbar$ , temos

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{1}{2m\omega\hbar} [(m\omega x)^2 + m\omega\hbar + p^2] \quad (0.0.48)$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{1}{2m\omega\hbar} [(m\omega x)^2 - im\omega\hbar + p^2] \quad (0.0.49)$$

É fácil ver que

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \quad (0.0.50)$$

Considerando o Hamiltoniano da equação (0.0.41, e usando as expressões (0.0.48) e (0.0.49) podemos reescreve-lo como

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2] = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) \quad (0.0.51)$$

Usando  $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$  da relação de comutação (0.0.50) para simplificar o Hamiltoniano, então

$$H = \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (0.0.52)$$

Que pode ser escrito da seguinte forma

$$H\psi = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi \quad (0.0.53)$$

onde o operador é definido como  $N = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ . Este operador tem os autovalores  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ . O cálculo dos autovalores envolvem conhecimento dos polinômios de Hermite, álgebra linear e integrais Gaussianas que se tornar tedioso e deixa em aberto a possibilidade de erro algébrico. Um método alternativo, desenvolvido por Dirac, em que a hamiltoniana "fatorada" é usada para levantar e abaixar os operadores para adquirir os diferentes autoestados do Hamiltoniano. E os autovetores são

$$\psi_0 = \left( \frac{\hbar}{\pi m\omega} \right)^{1/4}, \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \phi_0 \quad (0.0.54)$$

Ao considerar um único operador aniquilação ou criação, respectivamente, que atuam em uma função de onda, obtemos as seguintes regras:

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \quad \hat{a}^\dagger\phi_n = \sqrt{n+1}\phi_{n+1}, \quad a\phi_0 = 0 \quad (0.0.55)$$

e os autovetores correspondentes na equação (0.0.54) levam a

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad (0.0.56)$$

onde as funções  $H_n$  são os chamados polinômios de Hermite, e são dadas por

$$H_n(x) = (-1)^n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} (\exp(-x^2)) \quad (0.0.57)$$

# Apêndice E

## Acoplamento do Spin Com o Campo Magnético

O hamiltoniano de uma partícula de spin 1/2 pode

$$H = \frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V(\vec{r}) \quad (0.0.58)$$

onde  $V(\vec{r})$  é a energia potencial e carga  $e$ . Temos que

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = \vec{p} \cdot \vec{p} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{p}) = \vec{p} \cdot \vec{p} \quad (0.0.59)$$

então o hamiltoniano 0.0.58 pode também ser escrito

$$H = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})}{2m} + V(\vec{r}) \quad (0.0.60)$$

Com o acoplamento mínimo  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$ , onde  $\vec{A}$  é o potencial vetor do campo eletromagnético que age sobre a partícula. Como estamos interessados no campo magnético, vamos ignorar o último termo, e hamiltoniano então fica

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \left[ \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right] \cdot \left[ \vec{\sigma} \cdot \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) \right] \right\} \quad (0.0.61)$$

Abrindo a equação temos

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) - \frac{e}{c} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) - \frac{e}{c} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2}{c^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) \right\} \quad (0.0.62)$$

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{p}^2 - \frac{e}{c} \left( \vec{p} \cdot \vec{A} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} \times \vec{A}) \right) - \frac{e}{c} \left( \vec{A} \cdot \vec{p} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{p}) \right) + \frac{e^2}{c^2} \vec{A} \cdot \vec{A} \right\} \quad (0.0.63)$$

Pela propriedade de operadores e calculando os termos da equação 0.0.63 separadamente, temos

$$[\vec{p}, \vec{A}] = [(\vec{p} \cdot \vec{A}) + (\vec{A} \cdot \vec{p})] \psi = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot (\vec{A} \psi) - i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi \quad (0.0.64)$$

Como  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ , temos

$$[(\vec{p} \cdot \vec{A}) + (\vec{A} \cdot \vec{p})] \psi = -2i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \psi \quad (0.0.65)$$

ou ainda

$$[(\vec{p} \cdot \vec{A}) + (\vec{A} \cdot \vec{p})] = 2\vec{A} \cdot \vec{p} \quad (0.0.66)$$

Agora a outra parcela da equação 0.0.63 Temos ainda

$$\vec{\sigma} \cdot [\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p}] \psi = \vec{\sigma} \cdot [-i\hbar \vec{\nabla} \times (\vec{A} \psi) + \vec{A} \times (-i\hbar \vec{\nabla} \psi)] \quad (0.0.67)$$

$$\vec{\sigma} \cdot [\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p}] \psi = -i\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \psi \quad (0.0.68)$$

Substituindo as equações 0.0.66 e 0.0.69 em 0.0.63, temos

$$H = \frac{1}{2m} \left\{ \vec{p} - 2\frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{p} - \frac{e\hbar}{c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{e^2}{c^2} \vec{A}^2 \right\} \quad (0.0.69)$$

## Referências Bibliográficas

- [1] MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or anti ferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*, vol. 17, no. 22, p. 1133, 1966.
- [2] MEYER, J. C.; GEIM, A. K.; KATSNELSON, M. I. *et al.* The structure of suspended graphene sheets. *Nature*, vol. 446, no. 7131, pp. 60-63, 2007.
- [3] WALLACE, P. R. The band theory of graphite. *Physical Review*. vol. 71, no 9, pp. 622-634, 1947.
- [4] NOVOSELOV, K. S.; JIANG, D.; SCHEDIN, F. *et al.* Two-dimensional atomic crystal. *Proceedings of the National Academy of Sciences of USA*. vol. 102, no 30, pp. 10451-10453, 2005.
- [5] ZHANG, Y.; WU, Y. *et al.* Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in grapheme. *Nature*, vol. 438, no. 7065, pp. 201-204, 2005.
- [6] SEMENOFF, G. W. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly. *Physical Review Letters*, vol. 53, no. 26, pp. 2449-2452, 1984.
- [7] REICH, S.; THOMSEN, MAULTZSCH, J. Carbon nanotubes: basic concepts and physical properties. *John Wiley e Sons*, 2008.
- [8] MALIC, E.; KNORR A. Graphene and carbon nanotubes: ultrafast optics and relaxation dynamics. *John Wiley e Sons*, 2013.
- [9] KROTO, H. W.; HEATH, J. R. *et al.* C 60: buckminsterfullerene. *Nature*, vol. 318, no. 6042, pp. 162-163, 1985.
- [10] IJIMA S. *et al.* Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, vol. 354, no. 6348, pp. 56-58, 1991.

- [11] IJIMA S.; ICHIHASHI, T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *Nature*, vol. 363, pp, 603-605, 1993.
- [12] NOVOSELOV, K. S.; GEIN, A. K.; MOROSOV, D. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*. vol. 306, no 5296, pp. 666-669, 2004.
- [13] NETO, A. H.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S.; GEIN, A. K. The electronic properties of grapheme. *Reviews of Modern Physics*, vol. 81, no 1, pp. 109-162, 2009.
- [14] NOVOSELOV, K. S.; Graphene: Materials in the at land. *Reviews of Modern Physics*, vol. 83, no. 3, p. 837, 2011.
- [15] GEIM, A. K. Random walk to grapheme. *Reviews of Modern Physics*, vol. 83, no. 3, p. 851, 2011.
- [16] IYECHIKA, Y. Application of graphene to high-speed transistors: expectations and challenges. *Sci. Technol. Trends*, vol. 37, pp. 76-92, 2010.
- [17] MIYAZAKI, Hisao. *et al.* Band gap engineering of bilayer graphene induced by electric field. *Physical review letters*, no. 98, p. 206805, 2009.
- [18] SLONCZEWSKY J.; WEISS, P. Band structure of graphite. *Physical Review*, vol. 109, no. 2, p. 272, 1958.
- [19] GEIN, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. *Nature Materials*. vol. 6, no 3, pp. 183-191, 2007.
- [20] LEE, C.; WEI, X.; KYSAR, J. W., *et al.* Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*. vol. 321, no 5887, pp. 385-388, 2008.
- [21] MARK, K. F.; SFEI, M. Y.; WU, Y. *et al.* Measurement of the optical conductivity of grapheme. *Physical review letters*, vol. 101, no. 19, p. 196405, 2008.
- [22] KUZMENKO, A.; VAN HEUMEN, F. *et al.* Universal optical conductance of graphite. *Physical review letters*, vol. 100, no. 11, p. 117401, 2008.

- [23] BUNCH, J. S.; VAN DER ZANDE, A. M. *et al.* Electromechanical resonators from graphene sheets. *Science*, vol. 315, no. 5811, pp. 490-493, 2007.
- [24] BALANDIN, A. A.; GHOSH, S. *et al.* Superior thermal conductivity of single-layer grapheme. *Nano Letters*, vol. 8, no. 3, pp. 902-907, 2008.
- [25] LIDE, D. R.; Handbook of chemistry and physic. *CRC press*, 2004.
- [26] SAITO, R.; DRESSELHAUS, G.; DRESSELHAUS, M. S. *et al.* Physical properties of carbon nanotubes. *World Scientific*, vol. 4, 1998.
- [27] KITTEL, C; MCEUEN, P. Introduction to solid state physics. *Wiley New York*, vol. 8, 1976.
- [28] NOVOSELOV, K. S.; GEIN, A.K.; MOROSOV, S. V., *et al.* Two dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*. vol. 438, no 10, pp. 197-200, 2005.
- [29] CORTIJO, A.; VOZMEDIANO, M. A. Electronic properties of curved grapheme sheets. *Europhysics Letters*, vol. 77, no. 4, p. 47002, 2007.
- [30] KATSNELSON, M.; NOVOSELOV, K.; GEIM, A. Chiral tunnelling and the klein paradox in grapheme. *Nature Physics*, vol. 2, no. 9, pp. 620-625, 2006.
- [31] GREINER, W. Quantum mechanics: an introduction. *Springer*, vol. 1, 2001.
- [32] HESTENES, D.; SOBCZYK, G. Clifford algebra to geometric calculus: A unified language for mathematics and physics. *Springer*, vol. 5, 1987.
- [33] ENOKI, T.; ANDO, T. Physics and chemistry of graphene: graphene to nanographene. *CRC Press*, 2013.
- [34] NOVOSELOV, K.; MCCANN, E.; MOROZOV, S. *et al.* Unconventional quantum hall effect and Berry's phase of 2D in bilayer grapheme. *Nature physics*, vol. 2, no. 3, pp. 177-180, 2006.
- [35] KATSNELSON, M. I. Graphene: carbon in two dimensions. *Cambridge University Press*, 2012.

[36] HALL, E. H. On a new action of the magnet on electric currents. *American Journal of Mathematics*, vol. 2, no. 3, pp. 287-292, 1879.

[37] DAS SARMA, S.; PINCZUK, A. Perspectives in quantum hall effects: Novel quantum liquids in low-dimensional semiconductor structures. *Wiley ISBN*, vol. 1, pp. 446, 1996.

[38] NOVOSELOV, K. S.; JIANG, Z.; ZHANG, Y. *et al.* Room temperature quantum hall effect in grapheme. *Science*, vol. 315, no. 5817, pp. 1379-1379, 2007.

[39] GEIM, A.; KIM, P. Room temperature quantum hall effect in grapheme. *In APS Meeting Abstracts*, vol. 1, p. 40002, 2007.

[40] NETO, A. H.; GUINEA, F.; PERES, N. M. R. Edge and surface states in the quantum hall effect in grapheme. *Physical Review B*, vol. 73, no. 20, p. 205408, 2006.

[41] ITZYKSON, C.; ZUBER, J. B. Quantum field theory. *Courier Dover Publications*, 2005.

[42] SAKURAI, J. J.; TUAN S. F. Modern quantum mechanics, vol. 1. *Addison-Wesley Reading, Massachusetts*, 1985.

[43] ARFKEN, G. B.; WEBER H. J. Mathematical methods for physicists international student edition. *Academic press*, 2005.

[44] AHARANOV, Y.; BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Physical Review*, vol. 115, no. 3, p. 485, 1959.

[45] ALONSO, M.; FINN, E. J. GUIMARÃES, M. A. Física: um curso universitário: mecânica, 1972.

[46] MACHADO, K. D. Teoria do eletromagnetismo. *UEPG*, 2007.

[47] WASHBURN, S.; WEBBE, R. A. Aharonov-bohm effect in normal metal quantum coherence and transport. *Advances in Physics*, vol. 35, no. 4, pp. 375-422, 1986.

[48] HANSEN, A. E.; KRISTENSEN, A. *et al.* Mesoscopic decoherence in aharonov-bohm rings. *Physical Review B*, vol. 64, no. 4, p. 045327, 2001.

[49] SEARLES, T.; IMANAKA, Y. Large magnetic susceptibility anisotropy of metallic carbon nanotubes. *Phys Rev Lett*, vol. 105, 2010.

[50] RYCERZ, A. Aharonov-bohm effect and valley polarization in nanoscopic grapheme rings. *A General Physics*, vol. 115, no. 1, p. 322, 2009.

[51] KRAMER, B.; HAUG, R. *Advances in solid state physics. Springer*, 2003.

[52] BEENAKKER, C.; VAN HOUTEN H. Quantum transport in semiconductor nanostructures. *Solid State Physics*, vol. 44, no. 1, p. 228, 1991.

[53] PETRASHOV, V.; ANTONOV, V. *et al.* Phase memory effects in mesoscopic rings with superconducting mirrors. *Physical review letters*, vol. 70, no. 3, p. 347, 1993.

[54] PETRASHOV, V.; ANTONOV, V.; SHAIKHAI DAROV, R. S. *et al.* Giant aharonov-bohm effect in mesoscopic silver rings with bismuth electrodes. *Europhysics Letters*, vol. 34, no. 8, pp. 593-598, 1996.

[55] BASTOS, C.; BERTOLAMI, O. *et al.* Noncommutative grapheme. *International Journal of Modern Physics A*, vol. 28, no. 16, 2013.

[56] GRIFFITHS, D. J.; HARRIS, E. G. *Introduction to quantum mechanics. Hall New Jersey Prentice*, vol. 2. 1995.