



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAIS**

NEWTON PIONÓRIO NOGUEIRA

**TRANSPORTE DE CARGAS EM GRAFENOS VIA TUNELAMENTO
QUÂNTICO**

Juazeiro-BA
2012

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO VALE DO SÃO FRANCISCO CURSO
DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA DOS MATERIAIS**

NEWTON PIONÓRIO NOGUEIRA

Transporte de cargas em grafenos via tunelamento quântico

Dissertação apresentada a Universidade Federal do Vale do São Francisco - UNIVASF, Campus Juazeiro, como requisito da obtenção do título de mestre em Ciência dos Materiais.

Orientador: Prof. Dr. Têlio Nobre Leite

Juazeiro-BA
2012

Este trabalho é dedicado ao meu pai pelo caráter, exemplo, irreverência e devoção à natureza.

AGRADECIMENTOS

Ao universo por existir e a ciência por me fazer procurar entendê-lo.

Aos meus pais Inácio e Elza pelo carinho, exemplo e por ter me dado meus irmãos.

A minha irmã Patrícia pela sensibilidade e ao meu irmão Rômelo pela autenticidade.

As minhas tias queridas Júlia, Anatista, Helena e Sônia pelo carinho que sempre tiveram comigo. A minha tia Milinha pela alegria e simplicidade em duas décadas de convivência.

Ao meu querido amigo Aldemir por me ensinar o valor de uma amizade.

Aos meus amigos Gilson pelo respeito, Marcelo Yube pela dedicação, Flavinho e Geraldo pelas conversas depois das aulas, Vavá pela natureza tranqüila e André por ser o cara certo nas horas certas.

Ao compadre Marcelo Vieira, camarada na busca de uma sociedade mais libertária.

Aos amigos Mestre dos Magos e Neto pelo carinho que sempre demonstraram comigo.

As minhas queridas amigas Jaqueline, Aline e Moema pela amizade e pelo apoio nas horas difíceis.

Ao Dr. Luis Mário e ao pessoal da ala infantil, por terem lutado para que eu permanecesse vivo.

Aos professores Alberto, Paulo, Pedro, Márcio e Mônica pelos ensinamentos e laços de amizade.

Ao professor Helinando pelo humanismo, exemplo e paixão pela ciência.

Ao professor Joatan pela convivência, aprendizado e amizade.

Ao professor Télio pela oportunidade de realizar este trabalho e por ter paciência comigo.

Aos meus amigos Ericleiton, Cícero, Jaderson, Francisco Miguel, Francisco Matias, Danilo e Jorge Maurício meus irmãos nesta idéia louca de ser físico.

Ao primo Cícero pelas conversas ao pé do cajueiro.

Ao “mau colega” Cícero Antônio por ser um exemplo de bondade, pureza e simplicidade.

A Josely pela natureza iluminada e benevolente.

A minha Norma Érica por ser meu amor, por tornar minha vida mais cheia de significado e por me acompanhar nesta jornada.

“Viver é conhecer o que nos cerca, a maior virtude de um ser humano e transpor as adversidades despreendendo o mínimo de energia.”

O Dezertíqola

RESUMO

Recentemente, grande interesse foi despertado em pesquisas sobre as propriedades físicas e as possíveis aplicações tecnológicas do grafeno, pois este material poderá ser um excelente substituto dos semicondutores inorgânicos na fabricação de dispositivos eletrônicos menores e mais rápidos como também possibilita o estudo de propriedades físicas interessantes devido as várias analogias entre os fenômenos de transporte em grafeno e fenômenos estudados pela eletrodinâmica quântica como, por exemplo, o tunelamento Klein.

Neste trabalho exploramos o tunelamento Klein através de uma solução numérica- utilizando matriz de transferência para os casos de transmissão, analisada em função do ângulo de incidência e do perfil da barreira- em casos de barreiras de potenciais retangulares e lineares. Em sistemas de uma única barreira, retangular ou linear, o caso linear de um modo geral apresenta um túnel “mais largo” em torno da normal e um deslocamento angular dos outros túneis. Já os gráficos para sistemas de duas barreiras lineares, quando os potenciais são elevados seus gráficos se assemelham aos mesmos encontrados em barreiras retangulares, entretanto para baixos potenciais as barreiras lineares apresentam um túnel “mais largo” em torno da normal e um deslocamento angular dos demais. Logo a alteração no perfil da barreira permite aumentar o intervalo de ângulos próximos a zero e manipular outros ângulos em que o dispositivo também é transparente.

Assim o comportamento diferente das propriedades dos portadores de carga, do grafeno monocamada, em sistemas de barreiras lineares pode ser explorado tanto do ponto de vista da física básica quanto da sua aplicabilidade tecnológica.

ABSTRACT

The development of new technologies based on graphene has been attracted increasing attention in the literature if considering its excellent electrical and mechanical properties, allowing the production of smaller and faster electronic devices. On the other side, the study of physical properties due to several analogies with quantum phenomena described by quantum electrodynamics theory (Klein tunneling) represents another interesting source of knowledge to be explored from these materials.

In this work, Klein tunneling is analyzed through a numeric solution – by the use of a transference matrix applied in the study of transmission and analyzed in terms of incident angle and barrier profile – rectangular and linear potential barrier. Regarding to the systems characterized by single barrier (rectangular or linear) the response is dominated by a broad tunnel behavior, and an angular displacement of the other tunnels. Regarding to the response of two linear barriers, with raising potentials, the results become similar to those at rectangular barriers, however to low potential the linear barriers present a broad tunnel response and an angular displacement from the others. Thus, the alteration in the barrier profile allows to raise the interval of angles next to zero, and manipulates other angles in which the device is also transparent.

In this direction, we can see that charge carrier transport in monolayer graphene, in systems of linear barriers, can be conveniently explored both in the point of view of the basic and applied science.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	09
1 GRAFENO E SUAS APLICABILIDADES	Erro! Indicador não definido. 2
1.1 HISTÓRICO	12
1.2 APLICABILIDADES	13
1.3 CONCLUSÃO.....	19
2 DESCRIÇÃO DO TRANSPORTE DE CARGA EM GRAFENO.....	19
2.2 GRAFENO.....	20
2.3 MÉTODOS DE OBTENÇÃO	28
2.3.1 Esfoliação Mecânica.....	28
2.3.2 Sublimação de carbetos.....	29
2.3.3 Deposição química na fase vapor (CVD)	30
2.4 DISPOSITIVOS DE GRAFENO.....	31
2.5 ESTUDOS EXPERIMENTAIS DE TRANSPORTE ELÉTRICO EM GRAFENO..	36
2.5 CONCLUSÃO.....	39
3 TUNELAMENTO KLEIN EM BARREIRAS	40
3.1 PARADOXOS KLEIN	40
3.2 TUNELAMENTO PARA UMA BARREIRA RETANGULAR.....	42
3.3 TUNELAMENTO PARA DUAS BARREIRAS RETANGULARES.....	48
3.4 TUNELAMENTO PARA UMA BARREIRAS LINEARES	51
3.5 TUNELAMENTO PARA DUAS BARREIRAS LINEARES	62
3.6 CONCLUSÃO.....	70
4 RESULTADOS E PERSPECTIVAS	72
PRODUÇÕES CIENTÍFICAS DECORRENTES DA DISSERTAÇÃO.....	74
ANEXOS.....	75
REFERÊNCIAS.....	112

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1.1 Cristal de grafeno sob uma lâmina de óxido de silício	13
Figura 1.2.1 Grafeno como ponto de partida para fulereno, nanotubos e grafite	15
Figura 1.2.2 Circuito integrado formado por um único transistor de grafeno.....	17
Figura 1.2.3 Figura ilustrativa da estrutura do grafano.....	18
Figura 2.2.1 Figura ilustrativa dos orbitais hibridizados sp^2	190
Figura 2.2.2 Representação das ligações π e σ	191
Figura 2.2.3 Sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo sp^2 de átomos de carbono formando ligações σ	21
Figura 2.2.4 Representação dos orbitais p^z não hibridizados vazios	22
Figura 2.2.5 Arranjo hexagonal de átomos de carbono e sua rede recíproca.....	23
Figura 2.2.6: Dispersão de energia das bandas de condução do grafeno	25
Figura 2.2.7 Esquema da dispersão de energia para férmions de Shrodinger, partículas relativísticas sem massa e para férmions de Dirac.....	27
Figura 2.3.1.1 Imagem de microscópio óptico de grafeno transferido para um substrato de silício.....	28
Figura 2.3.3.1 Imagem de grafeno produzido pelo método CVD	30
Figura 2.4.1 Dispositivo de grafeno na forma de uma ponte Hall construído em um substrato de Si	31
Figura 2.4.2: Curva da resistividade em função da tensão de gate para uma amostra de grafeno	33
Figura 2.4.3: Representação da densidade de estados dos níveis de Landau para grafeno monocamada, bicamada e semicondutor convencional.....	35
Figura 2.5.1 Esquema da Junção npn em grafeno e do perfil do potencial eletrostático	37
Figura 3.1.1 Figura ilustrativa do Tunelamento em grafeno e em semicondutores convencionais.....	42

Figura 3.1.2 Esquema representativo do espectro das quasipartículas em grafeno monocamada no entorno de uma barreira de potencial retangular	43
Figura 3.2.2 Ilustração do elétron no entorno de uma barreira retangular	44
Figura 3.2.3 Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ para o caso de uma barreira de potencial retangular	48
Figura 3.3.1 Esquema representativo de elétron no entorno de duas barreiras de potenciais retangulares	49
Figura 3.3.2 Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ para o caso de duas barreiras de potenciais retangulares.....	51
Figura 3.4.1 Esquema representativo do elétron no entorno de uma barreira linear.	52
Figura 3.4.2 Esquema representativo do elétron no entorno de duas barreiras retangulares acopladas	54
Figura 3.4.3 Esquema representativo do elétron no entorno de três barreiras retangulares acopladas	57
Figura 3.4.4 Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ para barreiras lineares.....	59
Figura 3.4.5 Comparação, para o caso de uma barreira, da transmissão entre potenciais lineares e retangulares	61
Figura 3.5.1 Esquema representativo de elétron no entorno de duas duplas de barreiras retangulares	63
Figura 3.5.2 Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ , para o caso de duas barreiras de potenciais lineares	67
Figura 3.5.3 Comparação, para o caso de duas barreiras, da transmissão entre potenciais lineares e retangulares	69

Prefácio

Materiais formados por carbono e seus alótropos sempre foram alvo de pesquisa básica e aplicada. As variações tridimensionais, grafite e diamante, já são bem conhecidos e estudados há muitos anos. A descoberta na década de 90 das variações zero dimensionais, fulerenos, e unidimensionais, nanotubos, potencializaram ainda mais a pesquisa no gênero. Entretanto, sua variante bidimensional, o grafeno, só foi isolado experimentalmente em 2005 [1,2].

A estrutura do grafeno é o ponto de partida para o estudo do grafite, dos nanotubos e dos fulerenos. Assim sendo, muito antes de sua descoberta experimental já havia vários estudos teóricos explorando o grafeno e revelando propriedades interessantes que vêm sendo comprovadas experimentalmente. Além disso, ele é um material de natureza bidimensional e que apresenta um espectro de energia peculiar, o que lhe confere lugar privilegiado na pesquisa de física básica.

O grafeno é um material com grandes perspectivas de aplicação tecnológica principalmente na eletrônica, já que suas propriedades de condução podem ser controladas pela ação de campos elétricos e pelo fato de ser um filme estável e com espessura de ordem atômica.

O estudo experimental de propriedades de transporte em grafeno é um desafio, pois o desenvolvimento e aperfeiçoamento das técnicas de produção e de processamento de amostras consomem muito tempo e é um desafio tecnológico considerável. No entanto, devido ao fato de o grafeno ser um tema de pesquisa recente, existe muitas propriedades a serem exploradas.

Este trabalho está estruturado em quatro capítulos. No primeiro é focado ao potencial de aplicabilidades do grafeno justificando o fato de ser um tema bastante explorado atualmente. No segundo é descrito o transporte de carga em grafeno, os métodos de produção mais relevantes, um típico dispositivo de grafeno e apresentamos um apanhado de trabalhos experimentais sobre transporte elétrico em grafeno. O terceiro capítulo é dedicado ao estudo da transmissão de carga em sistemas de barreiras de potenciais lineares em grafeno monocamada, via cálculo numérico utilizando Fortran, com destaque ao tunelamento quântico. Onde observamos diferenças entre sistemas de barreiras de potenciais lineares e retangulares tanto no que diz respeito ao alargamento do túnel centrado na normal

quanto ao deslocamento e ou desaparecimento dos demais tuneis. Por último focamos os principais resultados deste trabalho.

1 GRAFENO E SUAS APLICABILIDADES

1.1 HISTÓRICO

O carbono desempenha importante papel na natureza, formando uma série de alótropos tais como: grafite e diamante, conhecidos desde a antiguidade, nanotubos [3, 4, 5] e fulerenos [6, 7], décadas de 80 e 90, e recentemente trabalhos experimentais conseguiram isolar o grafeno. O grafeno é um arranjo hexagonal de átomos de carbono e é o ponto de partida para o estudo de nanotubos, fulerenos e grafite. Por este motivo já havia vários estudos teóricos sobre o grafeno, muito antes de sua descoberta experimental, revelando propriedades surpreendentes que vêm sendo experimentalmente verificadas desde sua descoberta. Os primeiros estudos do grafeno foram feitos por P. R. Wallace [8] em 1947 para calcular a estrutura de bandas do grafite.

Em 2004 Andre Geim e Kostya Novoselov, liderando um grupo de físicos da Universidade de Manchester, promoveram uma revolução nesta área ao produzir flocos de grafeno. Eles partiram do grafite tridimensional, extraíram uma única folha dele através de uma técnica chamada dissociação micromecânica (ou método da fita adesiva ou esfoliação mecânica), que consiste basicamente no uso de uma fita adesiva para destacar flocos de grafeno da estrutura do grafite- que pode ser visto como um empilhamento de folhas de grafeno. Esta abordagem permitiu a produção de amostras de alta qualidade e tamanho considerável, desencadeando uma intensa atividade tanto experimental, na busca de suas aplicações tecnológicas quanto teóricas, visando explorar a descrição física exótica dos seus portadores de carga [1, 9, 10, 11, 12,13]. Vale salientar que tal técnica foi também utilizada para produzir cristais bidimensionais de $NbSe_2$ e MoS_2 [14].

O grafeno é um cristal bidimensional e a descrição dos seus portadores de carga, é essencialmente diferente de tudo que era conhecido antes. Por isto é considerado como um forte candidato para dispositivos eletrônicos mais eficientes [15]. Mais ainda, estudos demonstraram que o grafeno pode ser cortado em

tamanhos e formatos diversos, abrindo as portas para a fabricação de nanodispositivos tais como: anéis quânticos [16], pontos quânticos [17,18] e nanofitas [19, 20,21].



Figura 1.1.1: (a) cristal de grafeno sob uma lâmina de óxido de silício. (b) grafeno impresso em plástico [14]

As propriedades eletrônicas de condução dos nanodispositivos de grafeno são fortemente influenciadas pelo tamanho e pela estrutura da borda do dispositivo e podem ser controladas pela ação de campos elétricos aplicados através de Gates. Nanofitas com bordas *zigzag* são sempre metálicas e nanofitas com bordas *armchair*, dependendo da largura das bordas, podem ser metálicas ou semicondutoras [22, 23].

1.2 APLICABILIDADES

O grafeno é um material muito versátil de modo que pode ser manipulado de várias maneiras, como uma folha de papel, enrolado formando um tubo (nanotubo), cortado e enrolado formando uma esfera (fulereno) e se empilharmos muitas dessas folhas teremos o grafite tridimensional [24].

Do ponto de vista tecnológico, o grafeno é atualmente um dos mais promissores nanomateriais em estudo, devido às suas excelentes propriedades térmicas, ópticas e elétricas. O grafeno conduz muito bem, como um metal, mas suas cargas podem ser controladas como num semicondutor. No grafeno a mobilidade dos seus portadores de carga é cerca de 500 vezes maior que a do silício, para o caso de estar suspenso e para baixas temperaturas. Entretanto, mesmo em temperatura ambiente e apoiado em um substrato de óxido de silício sua

mobilidade ainda é 20 vezes maior que no silício. Mais ainda, é maior que em qualquer outro semicondutor conhecido [13].

Outro fato interessante é que em semicondutores convencionais, como o silício, os elétrons podem se comportar como se tivessem massa maior ou menor do que a que eles têm quando livres no vácuo, devido à influência da rede cristalina. Enquanto que, no grafeno eles estranhamente se comportam como se não tivessem massa, ou melhor, como se fossem partículas relativísticas sem massa (férmions de Dirac). Apresentando-se como um “parque de diversões” para os físicos, permitindo testar teorias e explorar fenômenos da mecânica quântica relativística num laboratório de matéria condensada [1]. Deste modo é um material altamente estratégico tanto do ponto de vista militar quanto para as suas futuras aplicações na indústria da nanoeletrônica, da nanomecânica, de fotosensores, de sensores de gás, descobrindo-se a cada dia novas possibilidades tecnológicas para seu uso.

Segundo estudo da prospecção tecnológica em grafenos apresentado em 2011 no VII Congresso Nacional de Excelência em Gestão, as duas grandes potências econômicas, China e os Estados Unidos, destacam-se no que se refere ao investimento pesado em pesquisa no gênero. No tocante ao Brasil identificam-se 12 grupos com linhas de pesquisa em grafeno. Evidenciando também sua importância tecnológica, as corporações empresariais apresentam grande destaque no que se refere a patentes, seguida pelas universidades e pelos institutos de pesquisa. Sendo que a área da nanoeletrônica é a que mais desenvolve estudos de aplicação para o uso do grafeno, logo os primeiros dispositivos a aparecerem no mercado deverão vir desta área.

Entretanto os métodos atuais de síntese, tanto no que se refere à qualidade quanto à escala, ainda estão em fase de desenvolvimento [25, 26]. Além disso, a maioria dos métodos de caracterização atual necessita da transferência de grafeno a um substrato específico que diminui consideravelmente sua eficiência eletrônica. Deste modo os estudos de novos métodos de síntese mais eficiente ainda devem aparecer, sendo também uma área bastante explorada.

O grafeno conduz muito bem e sobre a forma de folhas relativamente grandes, pode ser utilizado como condutor. Ele também é transparente podendo sobre a forma de filmes ser utilizado para telas de LCD e *touchscreen*, em células solares e etc. Generalizando, ele é um potencial candidato a ser utilizado em

dispositivos que necessitam de um contato elétrico que seja transparente e que conduza bem. Vale também salientar que atualmente as telas *touchscreen* são feitas a base de Índio, que é um elemento raro e de difícil reciclagem. Assim seu uso em tais telas, nos próximos anos, além de ser mais limpa poderá baratear a produção.

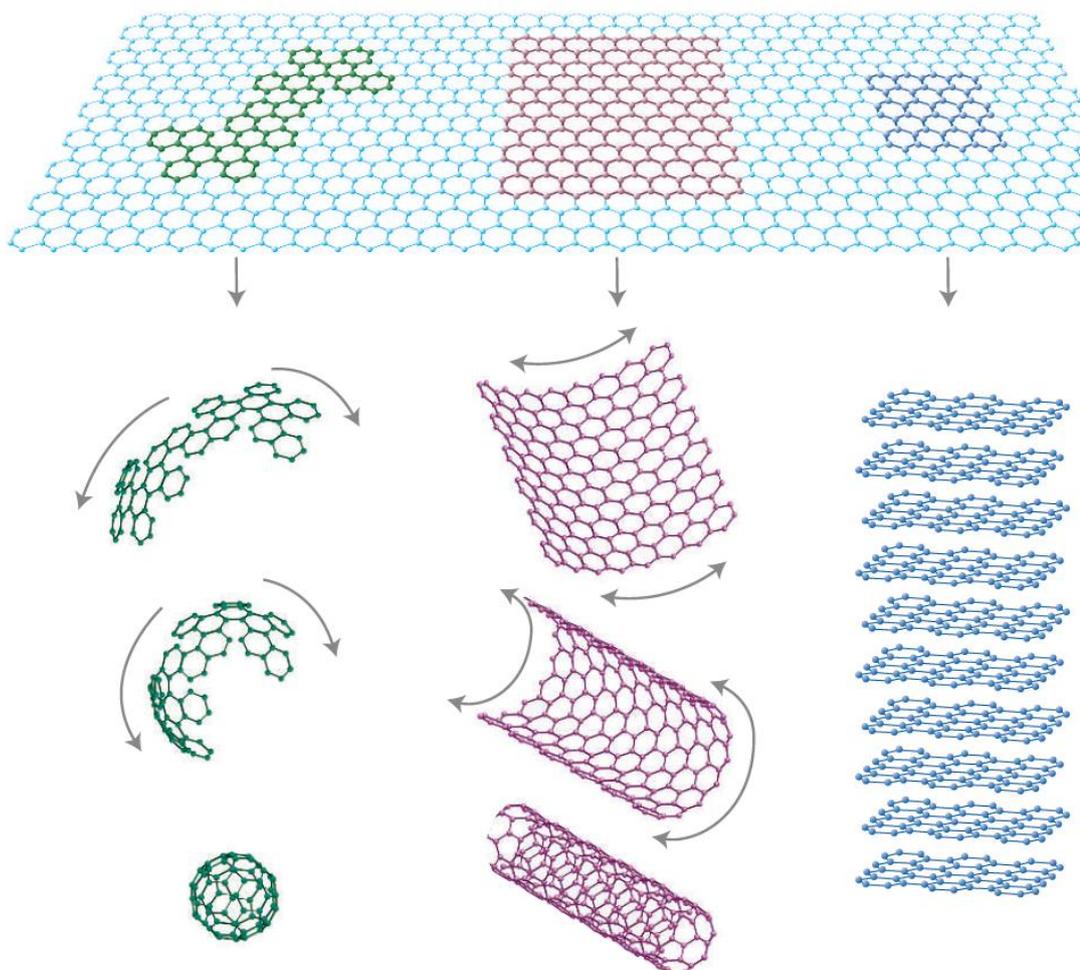


Figura 1.2.1: O grafeno possui estrutura bidimensional e serve para construir materiais de carbono de todas as outras dimensionalidades. Ele pode ser embrulhado (fulereno 0D), enrolado (nanotubos 1D) ou empilhado (grafite 3D). Figura extraída da referência [11]

A velocidade de operação de um transistor é determinada tanto pela velocidade de deslocamento dos seus elétrons quanto pelo tamanho do componente. A grande vantagem do grafeno neste caso é justamente a altíssima velocidade de deslocamento com que os elétrons conseguem passar por ele. Também foi descoberto que à medida que se diminui o tamanho do transistor de grafeno sua frequência de operação aumenta consideravelmente. De modo que em 2008 pesquisadores da IBM alcançaram, para transistores cujos eletrodos medem $150\mu m$, frequência de corte de $26 GHz$, ou seja, cinco vezes maior do que em

Newton Pionório Nogueira

transistores a base de silício [27]. Avanços recentes permitiram a fabricação de transistores de grafeno que operam com uma frequência de corte de até 300 *GHz*, ou seja, comparável à velocidade dos melhores transistores do momento, feitos de arseneto de gálio ou fosfeto de índio. Entretanto como o grafeno apresenta destacadamente a maior mobilidade de carga entre os materiais semicondutores conhecidos, ainda há muito espaço para sua otimização. Espera-se que quando se fabricarem transistores de grafeno na faixa de 50 μm nanômetros eles poderão funcionar na casa dos Terahertz, ou seja, superando de longe qualquer perspectiva otimista da otimização dos transistores semicondutores atuais [28].

Assim sendo, não há mais dúvida do potencial do grafeno para revolucionar a eletrônica. Basta ver que esse material já foi utilizado para confeccionar os melhores transistores já fabricados, aí incluídos o menor, o mais fino e agora o mais rápido. Recentemente, Yu Ming Lin e outros cientistas do Centro de Nanotecnologia da IBM, em Zurique, desenvolveram um chip completo baseado no grafeno [29]. Contudo, ainda há desafios para que o silício possa ser finalmente substituído por estes transistores de carbono, dentre eles está o fato de ser extremamente complicado fabricar e manipular folhas com apenas um átomo de espessura [29].

Vale citar que utilizando grafeno, sintetizado através da técnica de litografia de feixe de elétrons, fabricou-se o menor transistor do mundo (um átomo de espessura por dez átomos de comprimento), os resultados obtidos são expressivos, mas dificilmente concebíveis em grande escala [30].

A fabricação de sensores de gás baseados em grafeno de tamanho micrométrico, os quais são capazes de detectar efeitos individuais quando uma molécula de gás é absorvida ou liberada da superfície do grafeno são bem promissoras. O princípio de operação destes sensores pode ser explicado através da mudança na resistividade Hall, de modo que quando o gás entra em contato com o grafeno suas moléculas absorvidas atuam como doadoras ou aceitadoras de carga. De modo que resultados obtidos por diversos grupos de pesquisa mostraram que, sensores de gás baseados em grafeno são capazes de detectar gases tóxicos de uma maneira mais rápida e eficiente que os sensores de gás convencionais [31]. Considerando estes avanços, espera-se que num futuro próximo a fabricação destes

sensores em grandes quantidades possa chegar ao mercado, o que significaria um grande avanço tecnológico na área

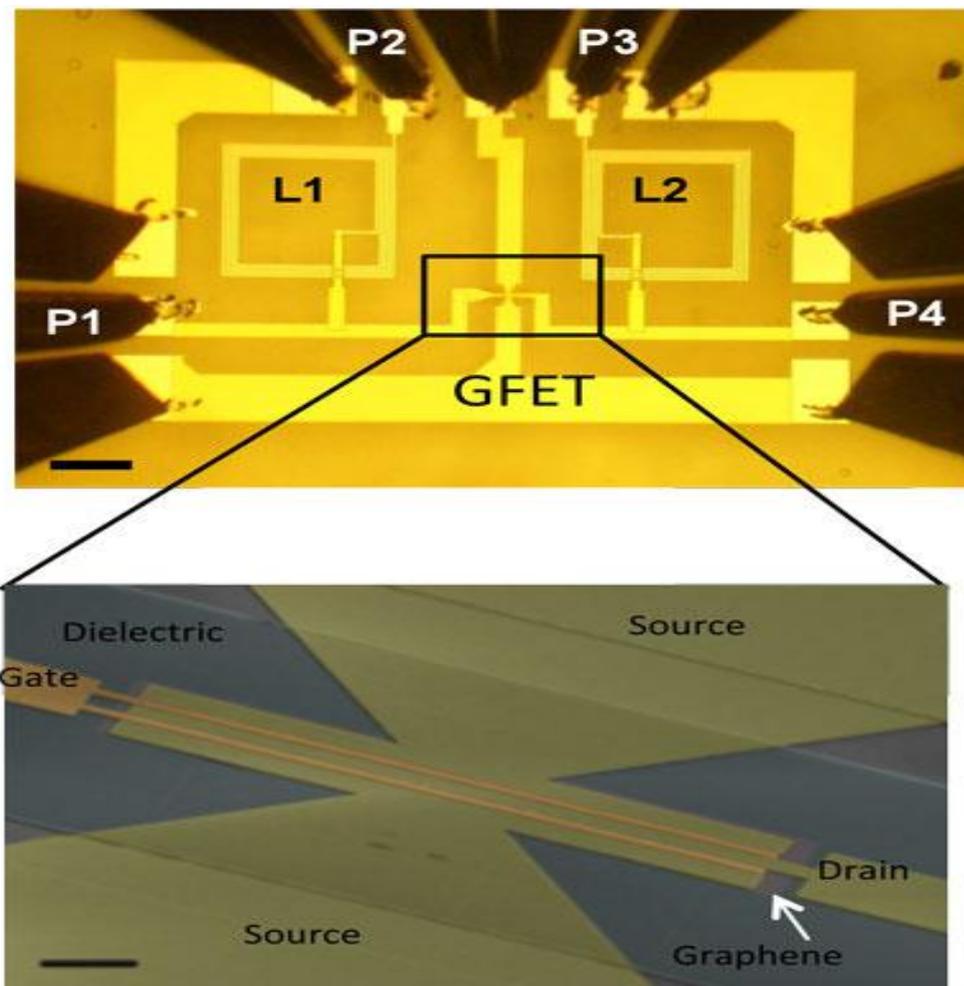


Figura 1.2.2 Imagem óptica de um circuito integrado formado por um único transistor de grafeno, um par de bobinas (L1 e L2) e as sondas para testar o circuito (P1-P4), construídos sobre uma pastilha de carbeto de silício. Embora seja muito simples é um passo importante na transição do grafeno da categoria de material promissor para material útil. A barra da escala é $100 \mu m$ [32]

O grafeno também tem suas propriedades eletrônicas modificadas pela presença da luz, de modo que a viabilidade de seu uso como fotodetector está sendo explorado. Outra possibilidade de aplicação é o uso do pó do grafeno em baterias elétricas, que é um dos principais segmentos do mercado para o grafite. A razão de superfície por volume e a alta condutividade do grafeno podem levar a significativas melhorias na eficiência de baterias [33].

Atualmente a maneira mais segura, menos quente e com maior durabilidade, de se armazenar energia elétrica é através de ultracapacitores. Descobriu-se uma maneira de armazenar cargas elétricas em ultracapacitores feitos

de grafeno- descoberta esta que pode revolucionar a industrial de energia renovável- acredita-se que o uso do grafeno na confecção de ultracapacitores poderia até dobrar a capacidade dos atuais. Isto poderia impulsionar às indústrias de energia solar e eólica, cujo maior desafio esta no armazenamento de energia quando o sol não está a pino e o vento não está soprando. Mais ainda, os ultracapacitores de grafeno poderiam até mesmo melhorar a eficiência de todos os dispositivos elétricos – carros, ônibus, trens, qualquer coisa [34].

Da adição de átomos de hidrogênio ao grafeno surge o grafano que apresenta propriedades altamente isolantes. Abrindo as portas para o uso da química para a derivação de novos compostos que apresentem os estados intermediários entre condutor e isolante, típicos dos semicondutores [34]. Outra aplicação interessante nasce da ligação do flúor com folhas de grafeno formando o fluorografeno. Sintetizado recentemente supera largamente os compósitos sintéticos mais resistentes disponíveis hoje no mercado apresentando ainda estabilidade térmica. É uma versão plana e cristalina do conhecido Teflon, sendo mecanicamente tão forte quanto o grafeno. O fluorografeno também é isolante, não reage com outros compostos químicos comuns e é resistente a altas temperaturas ($400^{\circ}C$) [35].

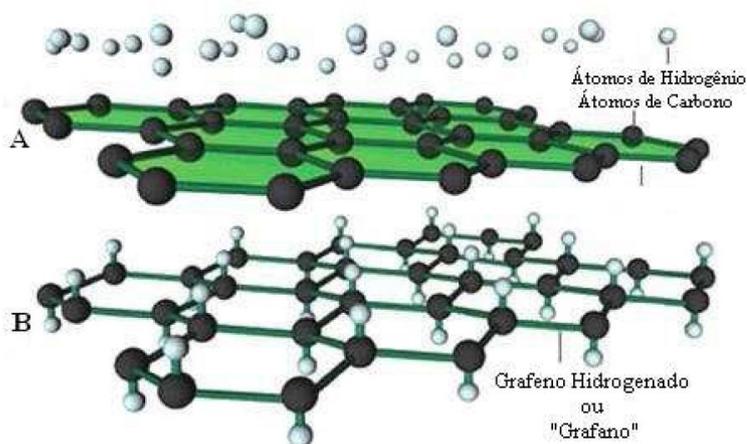


Figura 1.2.3 ilustração da estrutura do grafano. Extraído da referencia [34].

Outra descoberta impressionante possibilita controlar as suas propriedades magnéticas, permitindo seu uso para memória de acesso aleatório (RAM) ou para o armazenamento magnético de dados em discos rígidos. Isso devido ao fato das vacâncias na rede do grafeno funcionarem como minúsculos

imãs, deste modo se organizadas de maneira correta isto poderá gerar ferromagnetismo. Assim os momentos magnéticos individuais poderão ser acoplados. Tal controle das suas propriedades magnéticas quando aliada as impressionantes propriedades elétricas poderá ter interessantes aplicações na spintrônica [36].

1.3 CONCLUSÃO

O grande interesse em se explorar dispositivos de grafeno se justifica devido à riqueza de novos fenômenos apresentados por estes sistemas e ao grande potencial para aplicações tecnológicas nas mais diversas áreas. Tais como: sensores ultrasensíveis, células solares, transistores de efeito de campo, dispositivos de memória, dispositivos spintrônicos e materiais compostos. Vale salientar que grande parte destes dispositivos é baseada em nanofitas de grafeno.

Além disso, ele é um material intrinsecamente bidimensional apresentando espectro de energia peculiar, o que lhe rende lugar privilegiado na pesquisa de física básica. O estudo experimental das propriedades de transporte em grafeno é um desafio, pois o desenvolvimento e aperfeiçoamento das técnicas de produção e de processamento de amostras envolvem muitas variáveis, consomem muito tempo e é um desafio tecnológico considerável. Entretanto, devido ao fato de o grafeno ser um tema de pesquisa recente, existe muitas propriedades a serem exploradas. Isto posto, o entendimento básico da descrição tanto da natureza física dos portadores de carga quanto da confecção de dispositivos baseados em grafeno monocamada se faz necessário, conforme abordaremos no capítulo 2.

2 DESCRIÇÃO DO TRANSPORTE DE CARGA EM GRAFENO

Neste capítulo faremos uma breve descrição das propriedades físicas do grafeno que lhe renderam certo destaque na pesquisa em física da matéria condensada. Abordaremos sua estrutura e espectro de energia, seguiremos apresentando a equação de Dirac, importante na descrição de seus portadores de carga, (maiores informações ver anexo 1) e por último iremos descrever os dispositivos de grafeno e apresentar um apanhado dos estudos experimentais existentes sobre o transporte elétrico em grafeno.

2.2 GRAFENO

O grafeno é a monocamada atômica de carbono na estrutura chamada de favos de mel, apresentando extraordinárias características. Todas essas características podem ser descritas a partir da estrutura eletrônica do carbono e das suas ligações. Cada átomo de carbono tem seis elétrons arranjados na configuração eletrônica $1s^2, 2s^2$ e $2p^2$. O orbital $1s^2$ possui dois elétrons fortemente ligados, elétrons de caroço. Os outros quatro elétrons ocupam os orbitais $2s^2$ e $2p^2$, elétrons de valência. Para o carbono temos três hibridações possíveis: sp , sp^2 e sp^3 [37]:

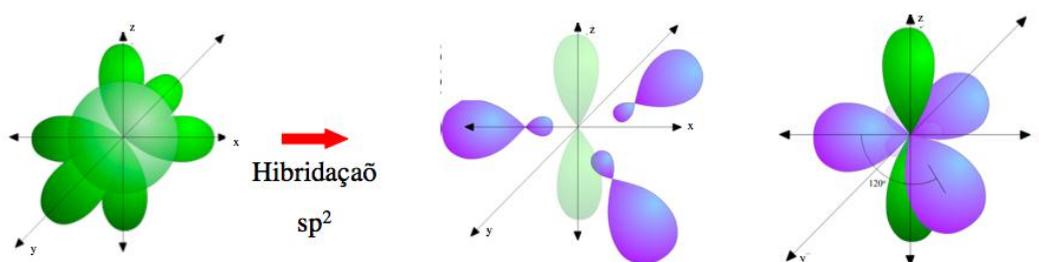


Figura 2.2.1 Orbitais sp^2 . Modificado de [38]

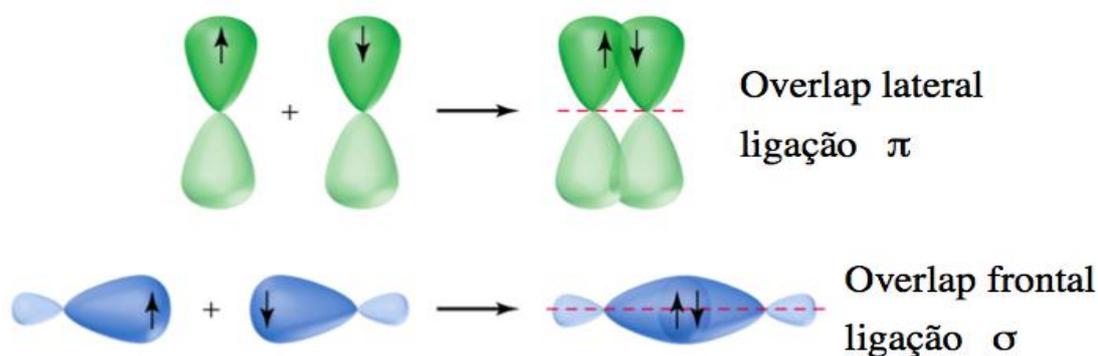


Figura 2.2.2 Representação das ligações π e σ . Modificado de [38]

Quando dois átomos estão próximos produz-se a hibridação entre os orbitais dos diferentes átomos e em termos da orientação podem acontecer ligações σ quanto acontece um *overlapping* frontal dos orbitais ou ligações π para um *overlapping* lateral, figura 2.2.2.

O grafeno apresenta três ligações fortes σ no plano da folha, em hibridização sp^2 e uma ligação fraca π associada ao orbital $2p_z$ perpendicular ao plano. Com relação às propriedades elétricas, assim como no grafite e nanotubos, é suficiente, em primeira aproximação, considerar somente as bandas de energia π . Isso se deve ao fato que em materiais compostos de carbono, exceto diamante, os elétrons de valência π são os mais relevantes para os fenômenos de transporte e na definição das demais propriedades físicas [8].

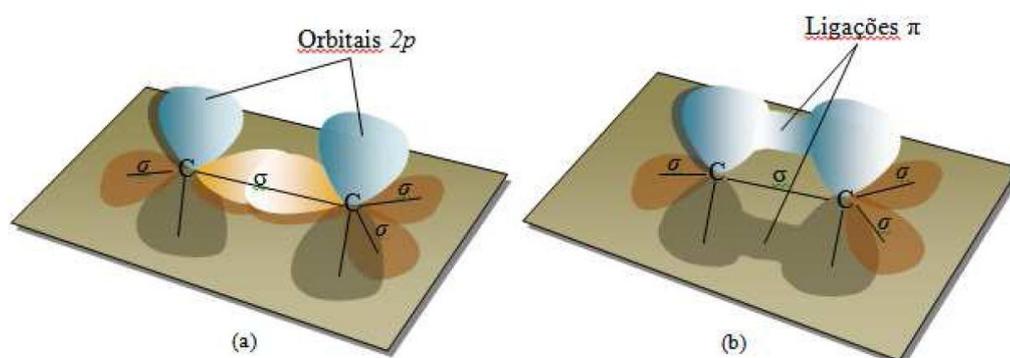


Figura 2.2.3 (a) representação da sobreposição de dois orbitais híbridos do tipo sp^2 de átomos de carbono formando ligações σ . (b) representação da sobreposição de dois orbitais $2p_z$ de dois átomos de carbono perpendiculares ao plano formando uma ligação π . Extraído referencia [39]

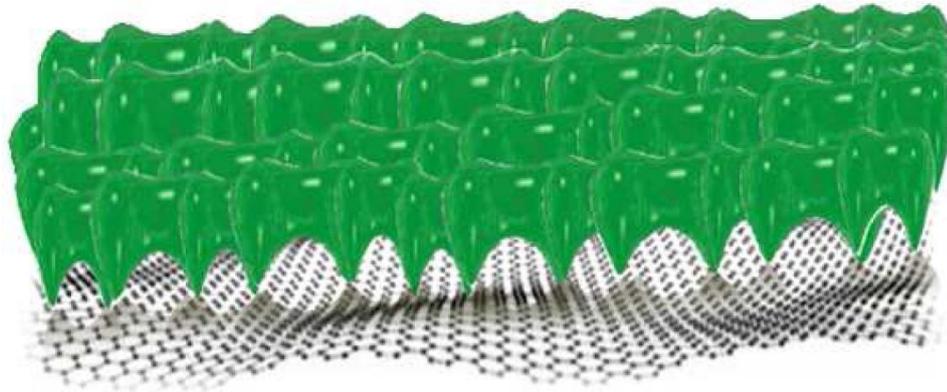


Figura 2.2.4 Representação das ligações entre os orbitais $2p_z$ não hibridizados perpendiculares ao plano do grafeno [39]

A geometria da rede do grafeno monocamada é um arranjo hexagonal de átomos de carbono conhecida como estrutura em “favo de mel”. Na figura 2.2.5(a) é mostrada a célula unitária como um losango verde com os vetores da rede dados por:

$$\vec{a}_1 = a\hat{x} + b\hat{y} \quad (2.2.1.a)$$

$$\vec{a}_2 = a\hat{x} - b\hat{y} \quad (2.2.1.b)$$

Onde $a = 3a_0/2$ e $b = \sqrt{3}a_0/2$, com $a_0 = 0,142nm$ sendo o comprimento da ligação entre os carbonos.

Na figura 2.2.5(a) para cada ponto da rede, as propriedades de transporte de carga, são dadas em função das contribuições de dois átomos de carbono, A (em vermelho) e B (em azul), separados de uma distância a_0 ao longo da direção $\vec{a}_1 + \vec{a}_2$. Assim, a rede hexagonal do grafeno pode ser vista como duas subredes equivalentes, A e B, que estão deslocadas uma em relação à outra.

A rede recíproca tem como vetores unitários:

$$\vec{b}_1 = \frac{\pi}{a}\hat{x} + \frac{\pi}{b}\hat{y}, \quad (2.2.2.a)$$

$$\vec{b}_2 = \frac{\pi}{a}\hat{x} - \frac{\pi}{b}\hat{y} \quad (2.2.2.b)$$

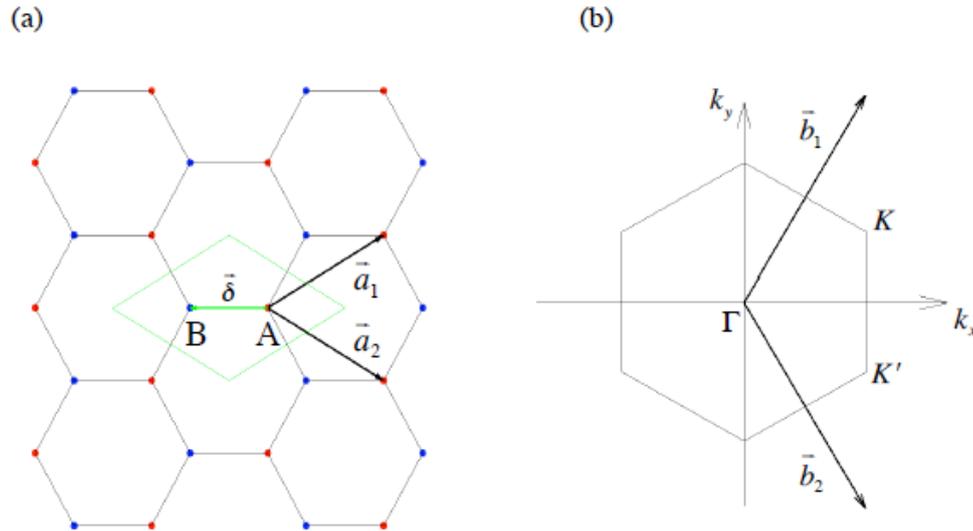


Figura 2.2.5 (a) Arranjo hexagonal de átomos de carbono formando uma folha de grafeno. Esta estrutura é uma rede com dois átomos de carbono por célula unitária (losango verde). Pode-se pensar na estrutura como duas redes equivalentes que se interpenetram: rede A, pontos vermelhos, e rede B, pontos azuis. (b) representação da rede recíproca mostrada em (a). Onde \vec{b}_1 e \vec{b}_2 são os vetores primitivos da rede recíproca. A área em cinza é a primeira zona de Brillouin e os pontos K e K' são os pontos onde as bandas de valência e de condução se tocam, como mostra figura 2.2.6(a). Figura extraída da referência [39].

E a primeira zona de Brillouin é um hexágono com vértices dados pelas coordenadas $(0, \pm 2\pi/3b)$ e $(\pm \pi/a, \pm \pi/3b)$. Os pontos de alta simetria da zona de Brillouin são definidos por Γ, K e M , respectivamente, centro, vértice e centro de aresta. Figura 2.2.5.b.

Para descrever as relações de energia de dispersão ao longo da zona de Brillouin podem ser calculados por vários métodos, como por exemplo, o método das ligações fortes “*tight-binding*” que permite o *hopping* dos elétrons de um átomo para seu vizinho mais próximo, e com o Hamiltoniano do sistema descrito por:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (|\varphi_i^A\rangle\langle\varphi_j^B| + |\varphi_j^B\rangle\langle\varphi_i^A|) \quad (2.2.3)$$

Onde $\langle\vec{r}|\varphi_i^{A/B}\rangle = \varphi(\vec{r} - \vec{R}_{A/B})$ é orbital $2p_z$ para os átomos das sub-redes A ou B, $t \approx 2,7 \text{ eV}$ [13] é a energia de hopping sendo o somatório feito sobre os primeiros vizinhos.

Para o calculo “*tight-binding*” assumimos que os orbitais $2p_z$ estão centrados nos dois átomos da célula unitária com o mesmo fator de fase, conforme adotado na maioria dos trabalhos na área [5, 8, 11]. Então a função de onda fica:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \{ \alpha(\vec{k}) |\alpha_n^A\rangle + \beta(\vec{k}) |\alpha_n^B\rangle \} \quad (2.2.4)$$

Onde N é o número de células unitárias, $\vec{R}_n = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ é a posição da célula unitária, que por conveniência vai ser também a posição do átomo da subrede A. Logo o átomo da subrede B está na posição $\vec{R}_n^B = \vec{R}_n + \vec{\delta}$ e $\alpha(\vec{k}), \beta(\vec{k})$ são constantes que dependem de \vec{k} . Assim constroem se $\langle \varphi_j^A | H | \psi \rangle$ e $\langle \varphi_j^B | H | \psi \rangle$ para obter as equações [40]:

$$E\alpha(\vec{k}) = -t \left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right) \beta(\vec{k}) \quad (2.2.5.a)$$

$$E\beta(\vec{k}) = -t \left(1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right) \alpha(\vec{k}) \quad (2.2.5.b)$$

Que pode ser reescrita como:

$$E \begin{pmatrix} \alpha(\vec{k}) \\ \beta(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & f(\vec{k}) \\ f^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha(\vec{k}) \\ \beta(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (2.2.6)$$

Com $f(\vec{k}) = -t \left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right)$. E assim obter a equação para as auto-energias:

$$E = \pm t \sqrt{1 + 4\cos(ak_x) \cos(bk_y) + 4\cos^2(bk_y)} \quad (2.2.7)$$

Onde os sinais (+) e (-) geram as bandas π^* e π do grafeno, respectivamente. Na figura (2.2.6 .a) podemos ver a dispersão de energia do grafeno dada pela equação (2.2.7). Como há dois elétrons π por célula unitária, a banda π está completamente ocupada e a energia de Fermi passa pelo topo dessa banda nos pontos K e K', nas

bordas da zona de Brillouin. Em torno dos três pontos K e dos três pontos K' formam-se os vales nas bandas de condução, π^* , e de valência, π .

Para o caso de energias em torno da energia de Fermi e para vetores de onda k em torno dos pontos K ou K', a equação (2.2.7) pode ser aproximada para a seguinte expressão [41]:

$$E = \pm \hbar k v_F, \quad (2.2.8)$$

Onde $v_F = 3ta_0/2\hbar \approx 1 \times 10^6 \text{ m/s}$ é a velocidade de Fermi.

De fato a relação de dispersão é linear, que é própria de partículas relativísticas. Por isso estes pontos são chamados de pontos de Dirac e são muito importantes na descrição das propriedades eletrônicas no grafeno

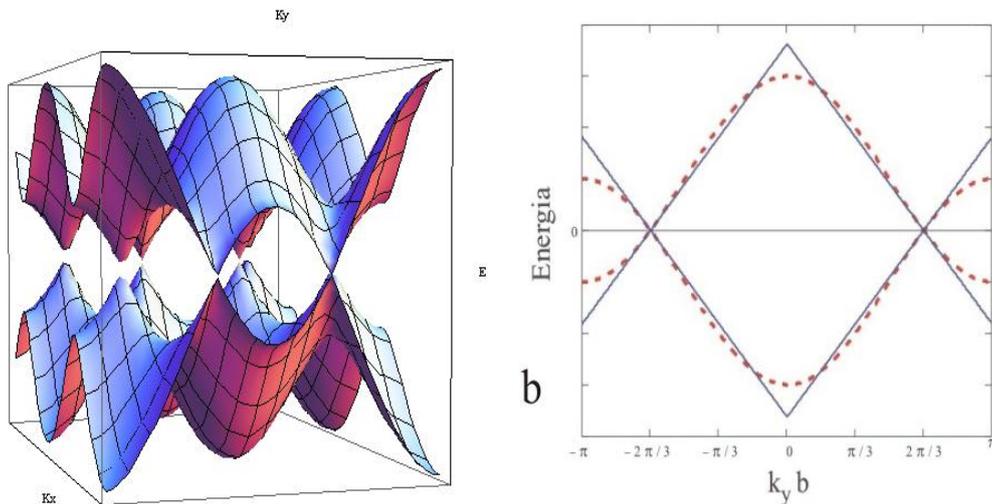


Figura 2.2.6 (a) Dispersão de energia das bandas π e π^* do grafeno, dadas pela equação 2.2.7. A região compreendida entre os pontos de intersecção representa a primeira zona de Brillouin. (b) Dispersão planar da energia para o caso $k_x = 0$, onde o traço pontilhado representa a banda para a equação 2.2.7, e o traço cheio mostra a aproximação dada pela equação 2.2.8, *Mathemática*.

É interessante notar que a dispersão de energia linear dada pela equação (2.2.8) é semelhante á dispersão de energia de partículas relativísticas $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ para $m_0 = 0$, com a velocidade de Fermi v_F substituindo a velocidade da luz c . Por isso, os portadores de carga no grafeno podem ser vistos como partículas relativísticas, sem massa. Outro fato que chama a atenção diz respeito à descrição dos portadores de carga. Como a rede pode ser vista como duas subredes equivalentes deslocadas uma em relação à outra, e como temos dois átomos por célula unitária, os portadores de carga no grafeno são descritos por funções de onda

de duas componentes, onde cada componente esta relacionada à contribuição de cada uma das sub-redes. Dessa forma, o hamiltoniano que descreve os portadores de carga no grafeno é do tipo de Dirac, anexo 1, e escrito da seguinte forma [12]:

$$\hat{H} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k} \quad (2.2.9)$$

Com $\vec{\sigma}$ sendo composto pelas matrizes de Pauli σ_x e σ_y , $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, e \vec{k} é o vetor de onda em torno dos pontos K ou K' (pontos de Dirac).

A descrição por funções de onda com duas componentes é semelhante à usada para escrever funções de onda de spin. No entanto, 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*, $\vec{\sigma}$. 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 [41].

Devido ao fato do espectro linear de energia e da descrição dos portadores de carga por uma equação do tipo de Dirac varias analogias com fenômenos estudados pela eletrodinâmica quântica são encontrados [42]. Nesse sentido seus portadores de carga são chamados de partículas *quirais* sem massa ou de férmions de Dirac e atribui-se aos portadores de carga do grafeno uma quiralidade que sucintamente falando, esta relacionada à projeção do *pseudo-spin* na direção do movimento dos portadores, sendo positiva para elétrons e negativa para buracos.

O salto entre as sub-redes *A* e *B* leva à formação de duas bandas de energias que se interceptam perto das bordas da primeira zona de Brillouin, figura 2.2.5(a) e produz o espectro de energia cônico no entorno dos pontos K e K', figura 2.2.6, como resultado as quase-partículas no grafeno exibem dispersão linear de energia como se fossem partículas relativísticas sem massa (por exemplo, fótons), entretanto a velocidade de Fermi assume o papel da velocidade da luz. Devido ao espectro linear de energia as quase-partículas do grafeno comportam-se diferentes

dos portadores de carga em metais e semicondutores convencionais, onde o espectro de energia apresenta uma relação de dispersão parabólica.

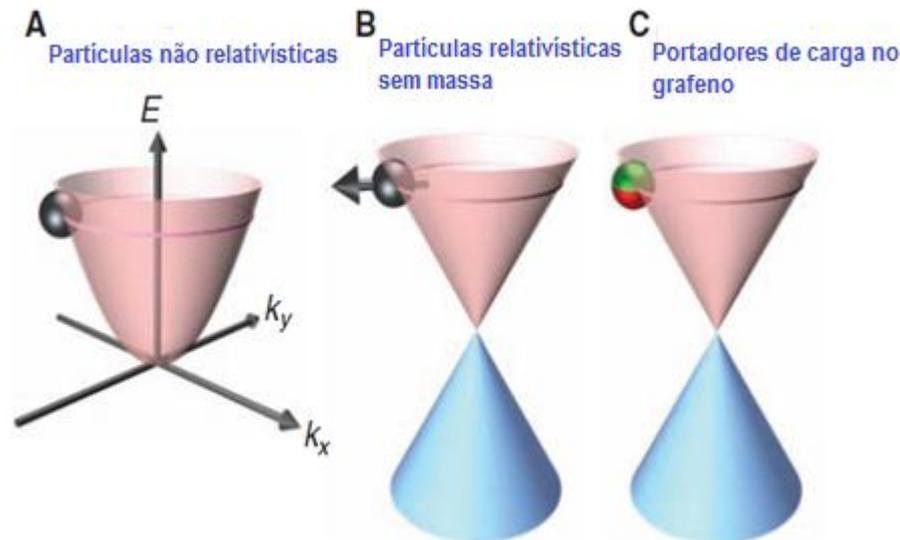


Figura 2.2.7 (a) Os portadores de carga em física da matéria condensada são geralmente descritos pela equação de Shrodinger, com massa efetiva diferente da massa de repouso do elétron e \hat{p} sendo o operador momento. (b) Para partículas relativísticas sem massa o hamiltoniano é do tipo de Dirac, em que c é a velocidade da luz e $\vec{\sigma}$ é a matriz de Pauli. (c) Portadores de carga no grafeno (férmions sem massa de Dirac) são descritos por um análogo $2D$ da equação de Dirac, com a velocidade de Fermi V_F fazendo o papel da velocidade da luz e o pseudospin é um índice que indica em qual das subredes as quase-partículas se situam. Ele pode ser indicado pela cor (por exemplo, vermelho e verde). Figura extraída da referência [13].

Outra característica essencial que sustenta a descrição do transporte de carga em grafeno por uma equação do tipo Dirac diz respeito mais uma vez ao comportamento dos seus portadores de carga. 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. Entretanto em matéria condensada elétrons e buracos são descritos por equações de Shrodinger desacopladas [43] com respectivas massas diferentes. Em contraste, no grafeno estas equações são interligadas exibindo propriedades análogas as da simetria carga-conjugado [44, 45,46]. Esta característica é resultante da simetria do cristal, pois as funções de onda das quase-partículas do grafeno, como já abordado,

são descritas por dois componentes relativos à contribuição das sub-redes A e B . Esta descrição é muito semelhante à função de onda *spinor* usado em eletrodinâmica quântica para descrever a rotação real de elétrons.

Uma constatação interessante é a observação de tunelamento Klein- que devido ao fato de apresentar um aumento da mobilidade eletrônica, é de grande interesse na nanoeletrônica- apresentado pelos portadores de carga do grafeno quando submetidos a um campo elétrico [11,12].

O tunelamento, de forma sucinta, diz respeito ao fato de haver transmissão de partículas através de uma barreira de potencial para o caso da energia cinética das partículas serem menor que o potencial da barreira [41]. Por outro lado, em mecânica quântica, elétrons podem tunelar a partir da banda de condução para dentro da banda de valência, tal fato é chamado de paradoxo Klein [44]. O grafeno, entretanto, apresenta tanto correspondência entre as funções de onda de elétrons e buracos quanto para obstáculos elevados à barreira torna-se praticamente transparente $T = 1$ para certos ângulos de incidência. Esta característica ficou conhecida como *tunelamento Klein* [42].

2.3 MÉTODOS DE OBTENÇÃO

Nesta sessão iremos descrever brevemente os métodos de obtenção de grafeno mais utilizados atualmente. Entretanto, a busca continua por métodos mais eficientes tanto do ponto de vista do tamanho quanto da qualidade da folha de grafeno permanece, de modo que outras técnicas mais precisas deverão aparecer num futuro próximo.

2.3.1 Esfoliação Mecânica

Nesse processo o grafite de alta pureza é esfoliado com uma fita adesiva, e em seguida a fita adesiva é grudada em um substrato de Si com $100nm$ ou $300nm$

de óxido de silício. Para transferir o grafeno da fita para o substrato pressiona-se a fita com uma pinça de plástico por alguns segundos para que o grafeno fique bem aderido no silício. Com o uso de um microscópio óptico é possível identificar grafenos e grafites de poucas camadas, devido à diferença de contraste entre a amostra e o substrato [12]. Esse contraste é causado pela diferença de caminho óptico entre a região com e sem grafeno, isto também se aplica a um número diferente de camadas de grafeno na amostra como mostra a figura abaixo.

Na figura (2.3.1.1) podemos observar grafenos de camada única (*monolayer*), figura mais clara, e de bicamada (*bilayer*), figura mais escura. Trabalhos utilizando a técnica da esfoliação mecânica têm mostrado que os resíduos de cola podem ser retirados com acetona, aquecendo a amostra em vácuo ou em atmosfera de argônio e hidrogênio [12]. Esse método não é muito reprodutivo em larga escala uma vez que a obtenção de grafeno é ao acaso.

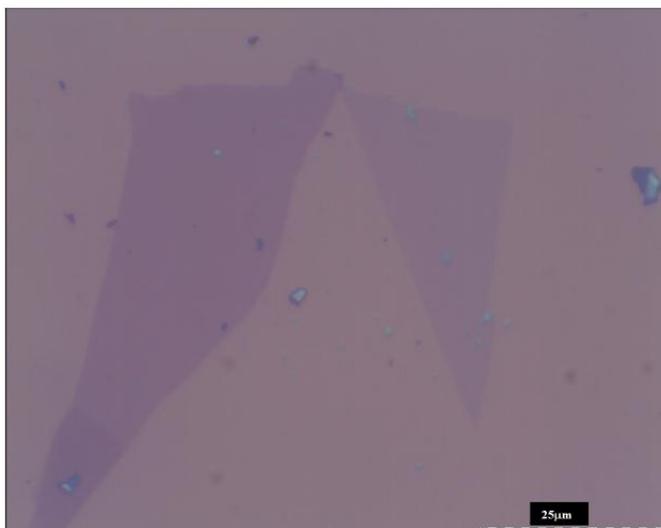


Figura 2.3.1.1 Imagem de microscópio óptico de grafeno esfoliado mecanicamente e transferido para um substrato de silício. Extraída da referencia [14]

2.3.2 Sublimação de carbetos

Aqui o grafeno é sintetizado pela sublimação de um elemento químico do carvão, exceto o carbono. Assim, o carbono que sobra se reorganiza em estruturas

hexagonais formando o grafeno. O carbeto de silício (*SiC*) é o carbeto mais utilizado e a produção de grafeno é feita em vácuo [41].

A obtenção de grafeno a partir de um substrato possibilita sua aplicação na nanoeletrônica, e a grande vantagem desse método é que o carbeto de silício já serve como substrato, ou seja, elimina-se uma etapa de transferência, como no caso do crescimento por deposição química de carbetos (CVD).

2.3.3 Deposição química na fase vapor (CVD)

Método bastante utilizado para produzir filmes de grafeno. Inicialmente uma superfície metálica ou um substrato de *Si*, recoberto por uma camada de aproximadamente 300nm de SiO_2 e por outra de metal, é colocada dentro de um tubo de quartzo e o conjunto dentro de um forno CVD. Em seqüência um tratamento térmico é realizado para que os grãos do metal catalisador aumentem seu tamanho proporcionando uma deposição mais uniforme. [52]

Sobre uma atmosfera de argônio e hidrogênio ou vácuo o crescimento é realizado. O metal mais utilizado é o cobre devido ao seu baixo custo e a baixa solubilidade de carbono, o que o torna o material ideal para se estudar a cinética de crescimento. É então injetado um gás (por exemplo, etileno, metano, álcool, entre outros) no sistema de modo que a certa temperatura há quebra da molécula do gás e fixação no substrato. Por último resfria-se o tubo de quartzo. Essa técnica é mais eficiente para produção de grafeno em maior escala, produzindo filmes de grafeno com alguns centímetros e de alta qualidade.

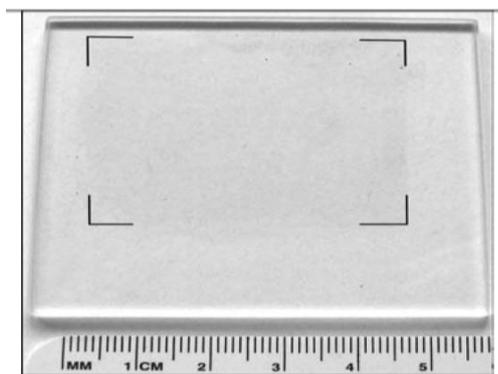


Figura 2.3.3.1 Produção pelo método CVD de folha de grafeno de $4,5 \times 4,5 \text{ cm}^2$. Referência [52]

2.4 DISPOSITIVOS DE GRAFENO

Os dispositivos de grafeno usados para investigar suas propriedades elétricas geralmente são feitos depositando-se sobre um substrato de silício altamente dopado, e recoberto por uma fina camada de óxido de silício, flocos de grafeno.

O silício altamente dopado, devido a suas multicamadas, apresenta um funcionamento de contato metálico. O óxido de silício, servindo de isolante, e o grafeno, semicondutor de *gap zero*, o dispositivo apresenta um funcionamento de efeito de campo que permite controlar a densidade de carga no grafeno através da aplicação de uma diferença de potencial entre o grafeno e o silício altamente dopado.

Os dispositivos mais básicos de grafeno são confeccionados através de técnicas de litografia, contactando eletricamente o grafeno e correndo-o na forma de uma ponte Hall, para realização de medidas elétricas. Um exemplo desse tipo de dispositivo é mostrado na figura (2.4.1).

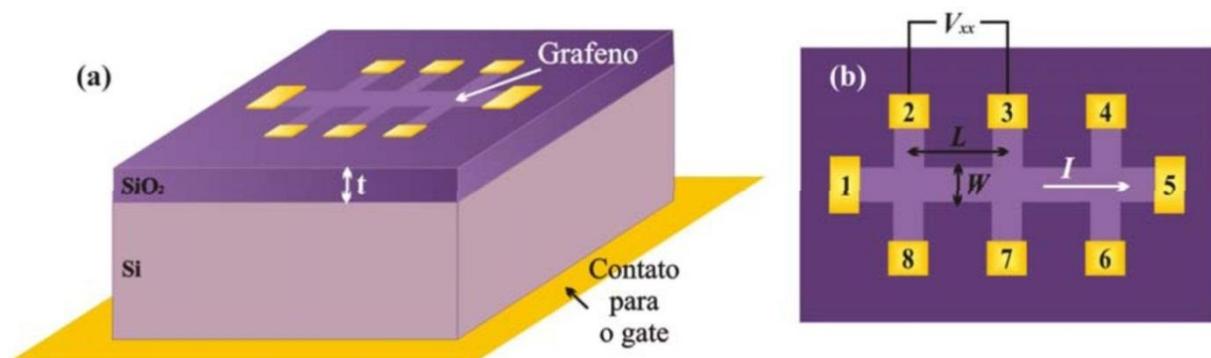


Figura 2.4.1 (a) Dispositivo de grafeno na forma de uma ponte Hall construído em um substrato de Si altamente dopado coberto por uma fina camada de espessura t de SiO_2 . (b) Vista superior do dispositivo. Figura extraída da referência [47].

Para controlar a densidade de carga no grafeno é aplicada uma tensão (*tensão de gate*) ao silício altamente dopado que funciona como contato *gate*. Por outro lado para dispositivos na forma de ponte Hall obtêm-se a resistência longitudinal R através da aplicação de uma corrente I ao longo do canal de

condução e posteriormente medindo a diferença de potencial V_{xx} entre dois contatos ao longo do canal de condução. Logo podemos escrever $R = V_{xx} / I$ que expressa em termos da condutividade fica:

$$R = \frac{L}{W\sigma} \quad (2.4.1)$$

Onde L é o comprimento do canal de condução entre os terminais de medida de V_{xx} e W a largura do canal de condução. Por outro lado, escrevendo a condutividade em termos da mobilidade μ e da densidade n dos portadores de carga:

$$\sigma = en\mu \quad (2.4.2)$$

com e sendo o módulo da carga do elétron. Por outro lado, para L e W bem maiores que a espessura t do óxido de silício (fato que ocorre para dispositivos de grafeno na forma de ponte Hall) a relação entre a densidade de carga e a tensão de *gate* pode ser aproximada pela capacitância de um capacitor de placas paralelas, com o grafeno e o silício agindo como placas. Assim relacionando a tensão de *gate* à densidade de portadores, fica:

$$n = n_0 - \frac{cV_g}{e} \quad (2.4.3)$$

com n_0 sendo a densidade de portadores no grafeno em equilíbrio. É interessante notar que para grafeno intrínseco n_0 deveria ser zero, pois a energia de Fermi neste caso encontra-se no ponto de Dirac (densidade de portadores é nula). Entretanto os dispositivos de grafeno geralmente apresentam um efeito de dopagem causada por resíduos na fabricação ou pela absorção de moléculas da atmosfera. Essa dopagem ora acrescenta ora remove elétrons do grafeno. Quando o grafeno perde elétrons a sua energia de Fermi está na banda de valência e os buracos da banda de valência semi preenchidas são responsáveis pelo transporte. Quando o grafeno ganha elétrons, sua energia de Fermi está na banda de condução, os portadores de carga neste caso são os elétrons da banda de condução.

Relacionando a resistência do grafeno com a tensão de *gate* aplicada, temos:

$$R = \left| \frac{L}{W\mu(en_0 - CV_g)} \right| \quad (2.4.4)$$

que descreve uma curva, em função de V_g , que cresce enquanto $en_0 > CV_g$ (potencial químico na banda de valência) tem um pico quando $en_0 = CV_g$ (potencial químico no ponto de Dirac) e decresce quando $en_0 < CV_g$ (potencial químico na banda de condução).

Um fato curioso é que para $en_0 = CV_g$ deveríamos observar um singularidade, no entanto observa-se um pico de resistência finita. Que é atribuído ao fato do grafeno não ser completamente homogêneo, formando-se poços de elétrons e buracos que conduzem corrente para $en_0 \approx CV_g$, mas que, na média, têm uma carga total nula [48]. Assim a região do pico de resistência é chamada de ponto de neutralidade de carga do grafeno naquele dispositivo, e a tensão para a qual ocorre o pico também é associada ao ponto de neutralidade de carga, V_{gPN} . Assim, n_0 pode ser determinado pela relação:

$$en_0 = CV_{gPN} \quad (2.4.5)$$

Para o dispositivo da figura (2.4.1) o ponto de neutralidade de carga ocorre em uma tensão próxima de zero, indicando baixa dopagem. É interessante notar que se a tensão de *gate* é negativa a densidade de portadores diminui à medida que a tensão de *gate* aumenta (os portadores de carga são os buracos da camada de valência) e quando a tensão de *gate* se aproxima de zero, o potencial químico do grafeno se aproxima do ponto de neutralidade onde se encontra o pico de resistividade. Já quando a tensão é maior que o ponto de neutralidade o potencial químico do grafeno se desloca para a banda de condução, o transporte é realizado por elétrons sendo que a inclinação da curva é negativa, o que indica que o número de portadores está aumentando à medida que a tensão de *gate* aumenta.

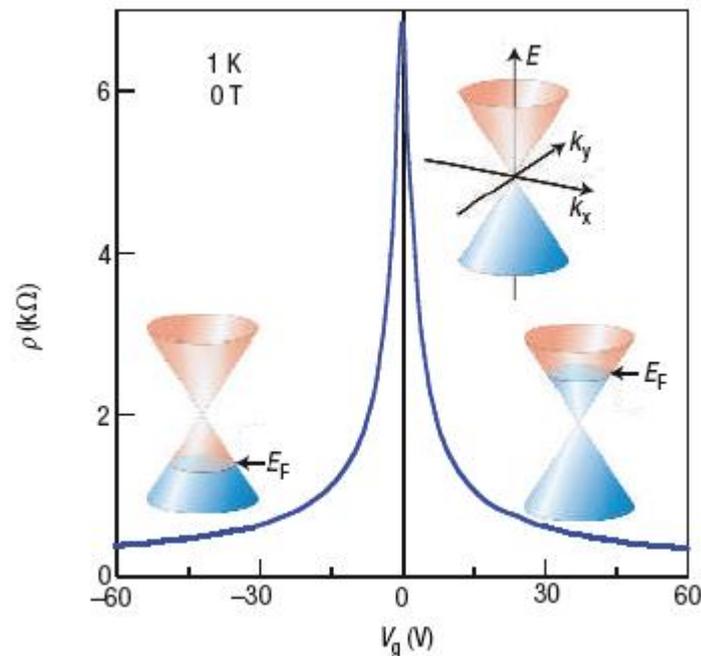


Figura 2.4.2: Curva da resistividade em função da tensão de gate para uma amostra de grafeno. O pico ocorre quando o potencial químico do grafeno passa pelo ponto de neutralidade de carga. Figura reproduzida da referência [12].

Outra propriedade física que caracteriza um dispositivo de grafeno é o efeito Hall quântico. Sob ação de um campo magnético intenso perpendicular ao plano onde se movem os portadores de carga, a dispersão de energia de um sistema bidimensional se desdobra em níveis discretos, conhecidos como níveis de Landau.

Considerando a corrente elétrica na direção x e o sistema bidimensional no plano xy , o efeito Hall quântico é caracterizado por: platôs nas medidas da condutividade Hall $G_H = G_{xy}$ e oscilações no valor da condutividade longitudinal G_{xx} em função do campo magnético aplicado B ou da tensão aplicada V_g . Os platôs em G_{xy} são acompanhados por valores de G_{xx} que tendem a zero e ocorrem quando o potencial químico se encontra entre os níveis de Landau [47].

Em um dispositivo típico de grafeno onde o canal de condução apresenta uma corrente I constante, a condutância Hall é obtida por $G_H = I/V_{xy}$, onde V_{xy} é a tensão Hall – medida entre os terminais 3 e 7 do dispositivo na figura 2.4.1. A condutância longitudinal é dada por $G_{xx} = I/V_{xx}$.

Por outro lado, para semicondutores tradicionais tais como, *Si*, *GaAs*, a dispersão de energia se desdobra em níveis de Landau com energias dadas por [49,50].

$$E = \frac{e\hbar B}{m} \left(N + \frac{1}{2}\right) \quad (2.4.6)$$

Onde e é a carga do elétron, \hbar é a constante de Planck dividida por 2π , B é o campo magnético, m é a massa efetiva dos portadores no material e $N = 0, 1, 2, 3, \dots$. Todos os níveis de Landau para os semicondutores tradicionais têm a mesma degenerescência, figura 2.4.3(c). Os valores esperados para os degraus nos valores da condutância Hall são dados por:

$$G_{xy} = g \frac{e^2}{h} N \quad (2.4.7)$$

Onde o fator g correspondendo à degenerescência de spin e de vale dos estados na banda de condução do material. No entanto, na monocamada de grafeno, os níveis de Landau são dados por [12]:

$$E_N = \pm v_F \sqrt{2e\hbar B N}. \quad (2.4.8)$$

Note que o nível de Landau com $N = 0$ acomoda tanto buracos quanto elétrons. Assim, para cada tipo de portador ele tem metade da degenerescência dos demais, figura 2.4.3(a), logo o valor esperado para os degraus nos valores da condutância Hall, são:

$$G_{xy} = \pm 4 \frac{e^2}{h} \left(N + \frac{1}{2}\right) \quad (2.4.9)$$

Onde o fator 4 corresponde à degenerescência de duplo vale e de spin do grafeno. Como os platôs na condutância Hall no grafeno ocorrem em valores semi-inteiros do seu quantum de condutância ($4e^2/h$) o efeito Hall no grafeno é dito anômalo. Os níveis de Landau e os platôs de condutância Hall para um semiconductor tradicional, grafeno monocamada e bicamada é mostrado na figura 2.4.3.

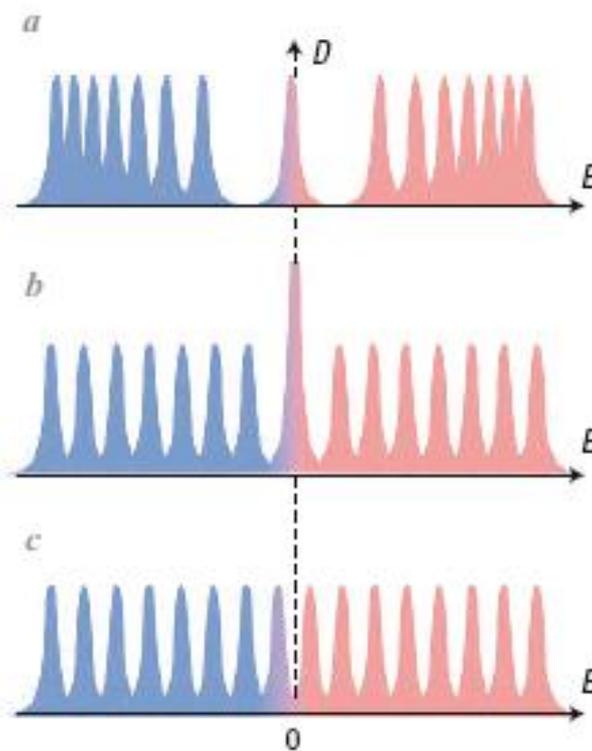


Figura 2.4.3: Representação da densidade de estados dos níveis de Landau para monocamada (a) bicamada (b) e um semiconductor bidimensional convencional (c). Figura extraída da referência [12]

2.5 ESTUDOS EXPERIMENTAIS DE TRANSPORTE ELÉTRICO EM GRAFENO

Desde a descoberta do grafeno em 2005 um volume substancial de trabalhos explorando este material surgiu, apresentaremos um apanhado de trabalhos experimentais que foram desenvolvidos até hoje explorando o transporte elétrico em grafeno com o intuito de mostrar o progresso da pesquisa em grafeno.

Os primeiros trabalhos com transporte elétrico em grafeno monocamada apresentaram medidas de efeito Hall quântico anômalo [1,2]. Um fato interessante é que para campos magnéticos da ordem de $30T$ foi observado efeito Hall quântico em amostras de grafeno à temperatura ambiente [10]. Campos magnéticos elevados também foram usados para levantar as degenerescências de spin e de vale dos

Newton Pionório Nogueira

primeiros níveis de Landau em medidas de efeito Hall quântico em monocamadas [52,53] e bicamadas [54] de grafeno. A influência de *gates* laterais em amostras no regime Hall quântico foi estudada [55].

As várias fontes de espalhamento dos portadores de carga em amostras e os seus efeitos sobre o espalhamento no mínimo de condutividade das amostras foram abordados em vários trabalhos [56, 57, 58, 59, 60]. Há trabalhos que investigaram tanto a influência da superfície do SiO_2 nas suas propriedades elétricas [61, 62, 63, 64, 65], quanto dos contatos metálicos feitos ao grafeno [66, 67, 68, 69]. Trabalhos investigando a distribuição de carga na superfície do grafeno, na região do ponto de neutralidade de carga, revelaram que esta distribuição é bastante não homogênea resultando na formação de poças de buracos e elétrons ao longo do grafeno [48, 70, 71].

Também há alguns trabalhos que estudaram a deposição do grafeno em diferentes substratos, tais como, mica [72], nitreto de boro [73, 74]. Bem como a influência de impurezas ionizadas, soluções iônicas, sobre o grafeno [75]. O efeito do ambiente dielétrico sobre suas propriedades foram estudadas através da deposição de sólidos e líquidos de constantes dielétricas diversas [76].

As maiores mobilidades observadas ocorreram em amostras de grafeno suspenso [77, 78, 79]. Para construir dispositivos de grafeno suspenso: a amostra do grafeno é depositada sobre o substrato de SiO_2 , contatos metálicos são feitos no grafeno e em seguida o substrato é corroído na região em baixo do grafeno. Deste modo, o grafeno fica suspenso sustentado tão somente pelos contatos metálicos. Como consequência da alta mobilidade, foi possível observar o efeito Hall quântico fracionário [80, 81, 82].

O uso de *Gates* superiores, em conjunto com o *gate* do substrato, possibilitou o estudo de várias propriedades de junção *pn* em flocos de grafeno. Com o *top gate* controlando localmente a densidade de carga no grafeno é possível alternar regiões com densidades de carga diferentes que podem ser de mesmo tipo, *pp*, *nn*, ou de tipos diferentes, *pn*, apresentando propriedades interessantes [83, 84, 85, 86, 87]. Outra propriedade interessante que foi medida através do *top gate* foi à capacitância quântica em amostras de monocamada [88]. Um fenômeno bastante interessante que ocorre em junções *pn* de grafeno, devido ao fato de os portadores

de carga no grafeno serem quase-partículas quirais sem massa, é o tunelamento de Klein [89, 90].

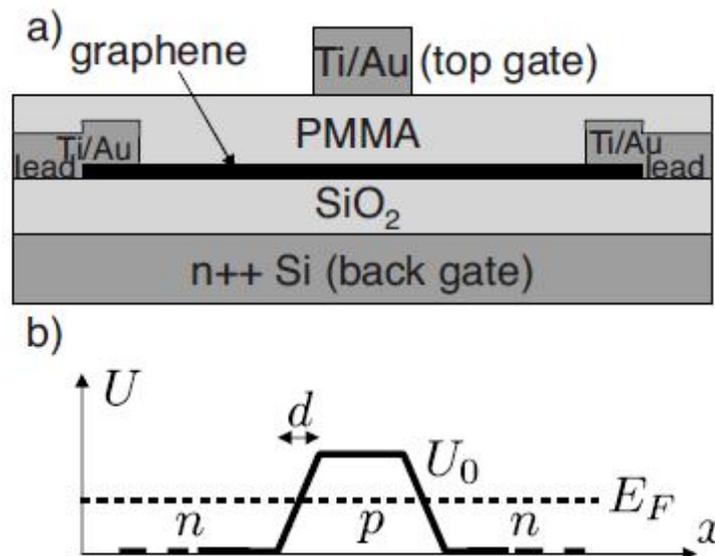


Figura 2.5.1: Junção *npn* em grafeno; (a) vista em corte transversal do dispositivo. (b) perfil do potencial eletrostático $U(x)$ ao longo da seção transversal. A combinação de uma tensão positiva *back gate* e uma tensão negativa *top gate* produz regiões *npn*. Modificada [90]

Um dispositivo em especial, nanofita de grafeno, tem atraído grande interesse. O fato de o grafeno ser um semicondutor de *gap nulo* é um obstáculo na sua utilização como transistor de boa relação ligado/desligado. Entretanto as nanofitas de grafeno devido ao confinamento lateral podem apresentar um gap de energia e assim são boas candidatas para o uso na construção de transistores de grafeno. Há trabalhos que estudam o transporte de carga nas nanofitas de grafeno construídas a partir de técnicas de litografia de feixe de elétrons [19, 91, 92, 93,94]. Entretanto as nanofitas construídas por tal técnica apresentam o inconveniente de não terem as bordas bem definidas comprometendo significativamente o seu comportamento elétrico.

Entretanto como as nanofitas parecerem tão promissoras para aplicações futuras muitas tentativas tem sido feitas com o intuito de produzir nanofitas de grafeno com bordas bem definidas. Algumas técnicas tentam produzi-las através: de soluções químicas que produzem nanofitas a partir de flocos de grafeno [30, 95]; por meio de máscara de corrosão; por meio da combinação da litografia de feixe de

elétrons com a corrosão química, buscando estreitar mais a nanofita [96] e por derivação de nanotubos de carbono [97].

Também modificações químicas através de: moléculas [98, 99], nanopartículas [100] e metais [101] foram realizados nos últimos anos com o intuito de explorar as modificações em suas propriedades elétricas, a citar o grafeno que apresenta propriedades isolantes [102].

2.5 CONCLUSÃO

A natureza peculiar da sua dispersão de energia, o tratamento exótico dos seus portadores de carga e sua estrutura bidimensional rende ao grafeno um lugar de destaque tanto em estudos de física básica quanto em pesquisas que visam seus inúmeros potenciais de aplicação tecnológicas.

Os primeiros dispositivos de grafeno, construídos na forma de pontes Hall, permitiram medidas de Efeito Hall Quântico fracionário. Posteriormente uma gama de outros dispositivos tais como nanofitas, grafeno suspenso, foram construídos bem como a influência da natureza do substrato e de impurezas ionizadas em suas propriedades elétricas estudadas. Isto posto, mostra o considerável avanço da pesquisa em transporte elétrico em grafeno nos últimos anos e possibilita que várias possibilidades de aplicabilidade, conforme abordado no capítulo 1, ainda estejam sendo exploradas e reveladas. Deste modo estudos teóricos explorando grafeno monocamada são de grande importância no entendimento das suas propriedades físicas exóticas permitindo que se possam fazer previsões sobre o seu comportamento em determinados meios e conseqüentemente facilita a construção de dispositivos baseados neste material dando então suporte a instrumentação experimental para mensuração da eficiência dos materiais advindos da utilização do grafeno.

Neste sentido, o estudo teórico do tunelamento Klein em barreiras de potenciais para grafeno monocamada, objeto de estudo do próximo capítulo, é de grande importância tanto para o entendimento do transporte de carga neste material quanto para a confecção de dispositivos.

3 TUNELAMENTO KLEIN EM BARREIRAS

Neste capítulo iremos abordar a transmissão de portadores de carga no grafeno para barreiras de potenciais e interpretá-lo através do tunelamento Klein, fenômeno típico da eletrodinâmica quântica. Será descrito a transmissão, em grafeno monocamada, para barreiras retangulares e barreiras triangulares de potencial. Para o caso retangular uma solução algébrica é apresentada, já para o caso triangular será exposta uma solução numérica através da utilização da matriz de transferência.

3.1 PARADOXOS KLEIN

Em 1927 Dirac considerou a função de onda de Schrödinger como operadores em vez de números. Com tal abordagem ele quantizou o campo magnético, o procedimento adotada, Teoria Quântica da Emissão e Absorção da Radiação, deu origem ao desenvolvimento da eletrodinâmica quântica. Um ano depois ele formulou a teoria relativística do elétron que ficou conhecida como Equação de Dirac.

Um resultado importante dado pela Equação de Dirac vem de sua solução para o elétron livre, pois além de descrever o elétron, ela também apresenta outra solução que descreve partículas idênticas aos elétrons, mas com carga positiva e energia negativa “buracos” e ocupam todos os estados de energia negativa “mar de Dirac”. [103] Ou seja, Elas poderiam existir em estados de energia negativa e contínua, variando de $-mc^2$ até $-\infty$. Este fato levantou a seguinte questão que ficou conhecida como paradoxo de Klein

Um elétron no estado fundamental pode emitir um fóton com energia maior que o dobro de sua energia de repouso e cair para um estado de energia negativa como havia sido proposto pela equação de Dirac. Uma vez nesse estado,

ele continuaria emitindo fótons já que não havia limite mínimo de energia negativa, isso, contudo, não é observado experimentalmente [35].

Dirac argumentou que, em condições normais, os estados de energia negativa estão todos ocupados por elétrons, o “mar de Dirac”. Assim, as transições previstas por Klein eram proibidas pelo Princípio da Exclusão de Pauli. Dirac afirmou que um desses elétrons pode absorver um fóton com energia maior do que o dobro de sua energia de repouso $-mc^2$ até $-\infty$ e tornar-se um estado de energia positiva; como resultado, um “buraco” é criado nesse “mar”.

Hoje em dia o fenômeno é mais estudado no contexto do tunelamento Klein, que se refere ao processo relativístico, e que vai de encontro com a intuição clássica, em que um elétron de entrada penetra através de uma barreira de potencial, caso a altura da barreira V_0 , exceder a energia de repouso do elétron, mc^2 [2]. Neste caso, a probabilidade de transmissão T , depende muito pouco da altura da barreira, e para obstáculos muito elevados a barreira é praticamente transparente $T = 1$ para ângulos de incidência próximos da normal. Isso contrasta com o caso não relativístico onde a transmissão decai com o aumento do potencial V_0 .

Este efeito interessante pode ser entendido devido ao fato de que um potencial sendo repulsivo para elétrons é atrativo para pósitrons [104] e como há correspondência entre as funções de onda de elétrons e pósitrons que são descritos pelo mesmo spinor, sendo que cada uma das duas componentes é responsável pela descrição de cada um dos portadores de carga. Isso posto leva a uma alta probabilidade de transmissão [105].

A característica essencial responsável pelo efeito é o fato de que os estados com energias positivas e negativas (elétrons e pósitrons, respectivamente) estão intimamente ligados, sendo descritos por diferentes componentes do mesmo spinor. Vale ressaltar que tal fenômeno só é relevante para situações exóticas tais como: produção de pósitrons em torno de núcleos super pesados, com $Z > 170$ [95] ou a geração de pares partículas-antipartículas nas proximidades da zona de evento de buracos negros [47]. Em contraste o grafeno abre caminho para investigar o paradoxo Klein em experimentos relativamente simples, enquanto que anteriormente era relacionado aos fenômenos exóticos citados acima.

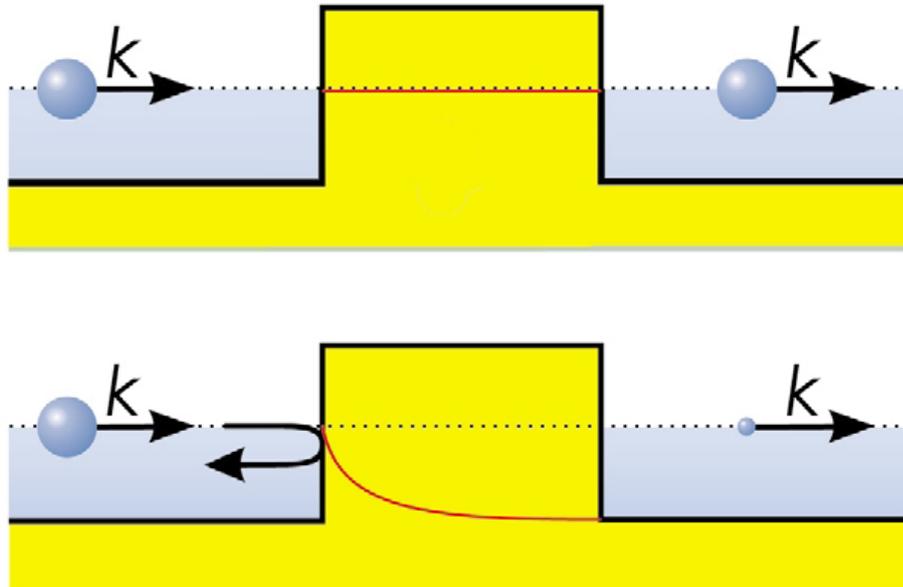


Figura 3.1.1 Tunelamento em grafeno (em cima) e em semicondutores convencionais (em baixo). A amplitude da função de onda dos elétrons (vermelho) permanece constante no grafeno enquanto decai exponencialmente em semicondutores convencionais. O tamanho da esfera indica a amplitude da onda incidente e transmitida. Referência [42]

3.2 TUNELAMENTOS EM GRAFENO PARA UMA BARREIRA RETANGULAR

A equação que descreve os portadores de carga em grafeno monocamada (ver anexo 1) envolve um hamiltoniano do tipo de Dirac:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} + V(x) \quad (3.2.1)$$

Onde v_F é a velocidade de Fermi e $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ são as matrizes de Pauli.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Por outro lado a função de onda que descreve os portadores de carga no grafeno é do tipo:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

Onde cada componente é responsável pela contribuição de cada subrede para a função de onda.

Na figura 3.1.2 destaca-se o tunelamento através de uma barreira de potencial retangular em grafeno monocamada, bem como o diagrama do espectro de energia dos portadores de carga, onde as curvas em vermelho e verde enfatizam a origem do espectro linear, que é o cruzamento das bandas de energias associadas às subredes A e B . Note que os três diagramas ilustram respectivamente as energias de Fermi E referente às três posições no entorno de uma barreira de potencial retangular de altura V_0 e comprimento D .

Vale observar que a energia de Fermi (linha pontilhada) situa-se na banda de condução, fora da barreira, e na banda de valência, dentro da barreira. Note também que o pseudo-spin σ é paralelo à direção do movimento do elétron e antiparalelo a direção do movimento dos buracos, significando que o pseudo-spin σ mantém uma direção fixa ao longo dos ramos, verde e vermelho, do espectro eletrônico.

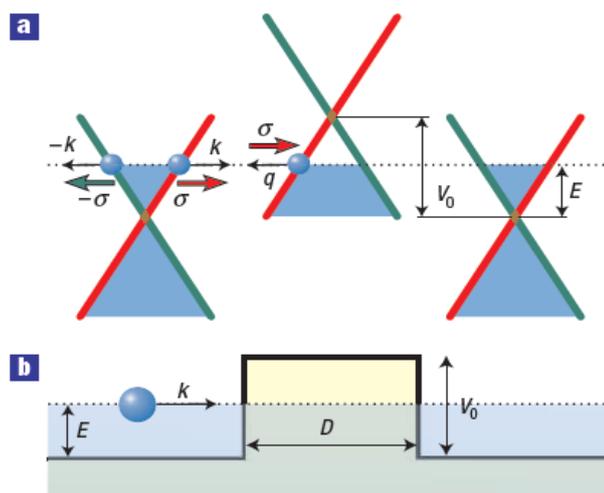


Figura 3.1.2 (a) esquema representativo do espectro das quase-partículas em grafeno. As curvas em vermelho e verde destacam a origem do espectro linear (b) diagrama das Partículas com vetor de onda K e energia E no entorno de uma barreira de potencial de altura V_0 e largura D . Figura extraída da referência [1].

Agora, consideremos o caso de um portador de carga com energia E se deslocando, com vetor de onda \vec{k} , e uma barreira de potencial retangular com altura V_0 e largura D . Do ponto de vista experimental, a barreira pode ser criada pelo efeito de um campo elétrico utilizando-se um gate superior sobre o grafeno monocamada, estando o mesmo sobre um substrato fino de isolante ou em suspensão, ou ainda por um dopante químico local [9,12,13].

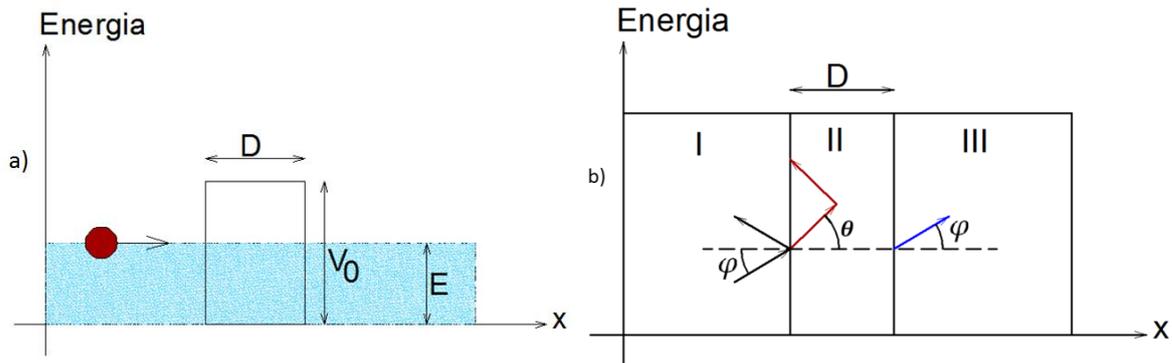


Figura 3.2.2 esquema representativo de (a)elétron no entorno de uma barreira retangular (b) definição dos ângulos de incidência φ e ângulo de refração θ . Autocad 2008.

A título de generalizarmos os resultados obtidos, vamos assumir que a função de onda do elétron se propague segundo um ângulo φ qualquer em relação ao eixo x e que a barreira de potencial tenha a forma:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x < D \\ 0, & \text{outros} \end{cases} \quad (3.2.2)$$

O hamiltoniano, então, assume a forma:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} V(x) & -i\hbar v_F(\partial_x - i\partial_y) \\ -i\hbar v_F(\partial_x + i\partial_y) & V(x) \end{bmatrix} \quad (3.2.3)$$

Então a equação da energia $\hat{H}\psi = E\psi$, fica:

$$\begin{bmatrix} -i\hbar v_F(\partial_x - i\partial_y)\psi_2 & V(x)\psi_1 \\ -i\hbar v_F(\partial_x + i\partial_y)\psi_1 & V(x)\psi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E\psi_1 \\ E\psi_2 \end{bmatrix} \quad (3.2.4)$$

Desacoplando as equações, temos:

$$-i\hbar v_F(\partial_x - i\partial_y)\psi_2 + V(x)\psi_1 = E\psi_1 \quad (3.2.5)$$

$$-i\hbar v_F(\partial_x + i\partial_y)\psi_1 + V(x)\psi_2 = E\psi_2 \quad (3.2.6)$$

Manipulando (3.2.5) e (3.2.6) para obter uma expressão envolvendo uma única componente, obtemos:

$$-\hbar^2 v_F^2((\partial_x - i\partial_y)((\partial_x + i\partial_y)\psi_1 = [E - V(x)]^2\psi_1 \quad (3.2.7)$$

Que para um potencial retangular, equação (3.2.2), assume a forma:

$$-\hbar^2 v_F^2((\partial_x - i\partial_y)((\partial_x + i\partial_y)\psi_1 = [E - V]^2\psi_1 \quad (3.2.8.a)$$

$$-\hbar^2 v_F^2((\partial_x - i\partial_y)((\partial_x + i\partial_y)\psi_1 = E^2\psi_1 \quad (3.2.8.b)$$

Supondo que a componente seja bem comportada, ou seja, $\psi_1 = X_1(x)Y_1(y)$. As equações (3.2.8.a) e (3.2.8.b) ficam:

$$[E - V]^2 + \hbar^2 v_F^2 \frac{X_1''}{X_1} = -\hbar^2 v_F^2 \frac{Y_1''}{Y_1} = \alpha^2 \quad (3.2.10.a)$$

$$E^2 + \hbar^2 v_F^2 \frac{X_1''}{X_1} = -\hbar^2 v_F^2 \frac{Y_1''}{Y_1} = \alpha^2 \quad (3.2.10.b)$$

Que podem ser reescritas como:

$$\begin{cases} X_1'' + q_x^2 X_1 = 0 \\ Y_1'' + k_y^2 Y_1 = 0 \end{cases} \quad (3.2.11.a)$$

$$\begin{cases} X_1'' + k_x^2 X_1 = 0 \\ Y_1'' + k_y^2 Y_1 = 0 \end{cases} \quad (3.2.11.b)$$

Onde

$$\begin{cases} q_x^2 = \frac{[(E-V)^2 - \alpha^2]}{\hbar^2 v_F^2} \\ k_y = k_F \sin(\varphi) \\ k_x = k_F \cos(\varphi) \end{cases} \quad (3.2.12)$$

Com o vetor de onda de Fermi dado por:

$$k_F = \frac{E}{\hbar v_F} \quad (3.2.13)$$

Resolvendo as equações (3.2.11.a) e (3.2.11.b) encontramos as expressões para a componente da função de onda ψ_1 . Realizando o mesmo procedimento e impondo as mesmas condições sobre o comportamento de ψ_2 , obtemos:

$$\psi_1 = \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ (a e^{iq_x x} + b e^{-iq_x x}) e^{ik_y y} & 0 < x < D \\ t e^{ik_x x} e^{ik_y y} & x > D \end{cases} \quad (3.2.14.a)$$

$$\psi_2 = \begin{cases} s(e^{ik_x x + i\varphi} + r e^{-ik_x x - i\varphi}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ s'(a e^{iq_x x + i\theta} + b e^{-iq_x x - i\theta}) e^{ik_y y} & 0 < x < D \\ s t e^{ik_x x + i\varphi} e^{ik_y y} & x > D \end{cases} \quad (3.2.14.b)$$

Onde $s = \text{sgn}E$, $s' = \text{sgn}(E - V)$, $\theta = \tan^{-1} k_y / q_x$ o ângulo de refração.

Da continuidade da função de onda aplicada nas equações acima encontramos a seguinte expressão para o coeficiente de reflexão:

$$r = \frac{2e^{i(qd + \theta + 2\varphi)} \sin qd (-2ss' \sin \theta + 2 \sin \varphi)}{e^{2i\varphi} (e^{2iqd} + e^{2i\theta})_{ss'} + (1 + e^{2i(qd + \theta)})_{ss'} - 2e^{i(\theta + \varphi)} (-1 + e^{2iqd})} \quad (3.2.15)$$

Para o caso de altas barreiras $|V| \gg |E|$ a probabilidade de transmissão $T = |t|^2 = 1 - |r|^2$ assume a seguinte forma:

$$T = \frac{\cos^2(\varphi)}{1 - \cos^2(q_x D) \sin^2(\varphi)} \quad (3.2.16)$$

Note que para $q_x D = 0, \pm 1 \dots$ a barreira torna se totalmente transparente, ou seja, $T = 1$. Evidenciando o tunelamento Klein para uma única barreira de potenciais em grafeno monocamada.

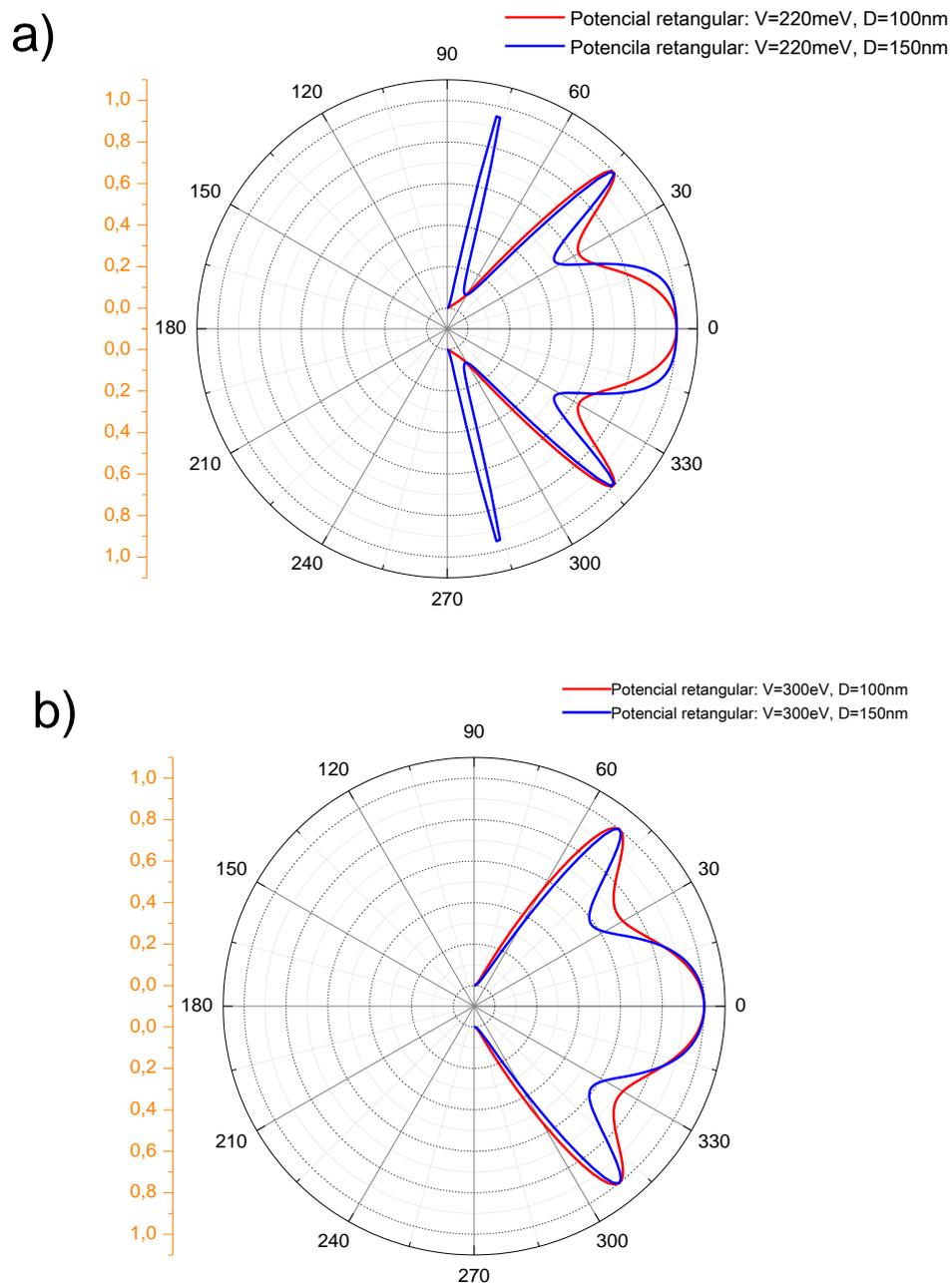


Figura 3.2.3 Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ e da largura D da barreira, equação (3.2.16), para o caso de uma barreira de potencial retangular. Origin 6.0.

Os gráficos acima foram plotados escolhendo se a largura D da barreira igual a $100\mu m$ e $150\mu m$. A concentração de elétrons n fora da barreira em torno de $0,5 \cdot 10^{12} cm^{-2}$ e a concentração dos buracos p dentro da barreira variando entre $1 \cdot 10^{12} cm^{-2}$ e $3 \cdot 10^{12} cm^{-2}$. Tais concentrações são típicas para experimentos realizados em grafeno monocamada [1]. Isto corresponde à energia de Fermi E dos elétrons incidentes em $83,5 meV$ e $\lambda = 50 nm$.

Mais significativo, no entanto, é observar que a transmissão em função do ângulo de incidência apresenta efeito túnel ora “mais largo” ora “mais discreto” para certos ângulos, figura 3.2.3. Este efeito túnel pode ser entendido em termos da conservação do pseudo-spin, sendo que esta característica é única de férmions sem massa de Dirac e é diretamente relacionado com o paradoxo Klein em eletrodinâmica quântica [1].

Outra observação importante diz respeito às mudanças apresentadas nos valores da transmissão em função das variações na largura da barreira. Para uma barreira de potencial de $220 meV$, Figura 3.2.3(a), uma barreira mais larga levou a um “túnel mais amplo” para ângulos próximos da normal, manteve praticamente inalterado o túnel em torno de 45° e ao surgimento de um túnel “discreto” para ângulos em torno de 75° . Já na figura 3.2.3(b), potencial maior que o caso anterior, o aumento na largura não é tão expressivo para o valor da transmissão, sendo que o túnel “largo” em torno da normal e o túnel “discreto” em torno de 50° praticamente não se alteram.

3.3 TUNELAMENTOS EM GRAFENO PARA DUAS BARREIRAS RETANGULARES

Agora consideremos o caso de um portador de carga, com energia E e ângulo de incidência φ , se deslocando com vetor de onda \vec{k} , no entorno de duas barreiras de potenciais quadrados ambas com altura V_0 e largura D separadas por uma distancia L . Conforme representado na figura 3.3.1

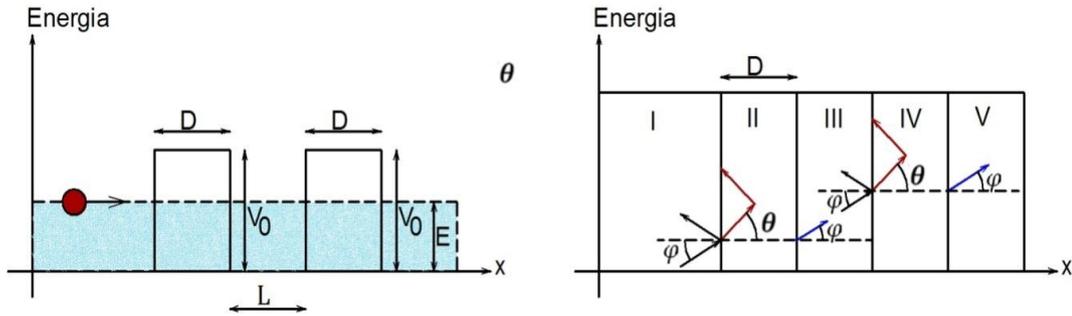


Figura 3.3.1 esquema representativo de (a)elétron no entorno de duas barreiras retangulares (b) definição dos ângulos de incidência φ e ângulo de refração θ . Autocad 2008.

Adotando o mesmo procedimento para uma única barreira retangular, encontramos as seguintes expressões para as componentes da função de onda:

$$\psi_1 = \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y}, & x < l_{(2i-1)} \\ (a_i e^{iq_x x} + b_i e^{-iq_x x}) e^{ik_y y} l_{(2i-1)} < x < l_{2i} & (3.3.1) \\ t e^{ik_x x} e^{ik_y y} & x > l_{2i} \end{cases}$$

$$\psi_2 = \begin{cases} s (e^{ik_x x + i\varphi} + r e^{-ik_x x - i\varphi}) e^{ik_y y}, & x < l_{(2i-1)} \\ s'_i (a_i e^{iq_x x + i\theta} + b_i e^{-iq_x x - i\theta}) e^{ik_y y} l_{(2i-1)} < x < l_{2i} & (3.3.2) \\ s t e^{ik_x x + i\varphi} e^{ik_y y} & x > l_{2i} \end{cases}$$

Onde:

a_i e b_i são as amplitudes de transmissão

$$s = \text{sgn}E,$$

$$s'_i = \text{sgn}(E-V),$$

$$q_x^2 = \frac{[(E - V)^2 - \alpha^2]}{\hbar^2 v_F^2} e$$

$\theta = \tan^{-1} k_y / q_x$ o ângulo de refração. Com $i = 1, 2$. Da continuidade da função de onda aplicada nas equações acima, encontramos a seguinte expressão para a probabilidade de transmissão T :

$$T = \frac{e^{-2iq_x D - k(D+l)} (1 + e^{2i\theta})^2 (1 + e^{2i\varphi})^2}{(A_1^2 + B_1^2)} \quad (3.3.3)$$

Com:

$$A_1 = e^{iq_x l} + e^{2i[\theta+q_x(D+l/2)]} + e^{2i[\varphi+q_x(D+l/2)]} + 2e^{i[\theta+\varphi+q_x(2D+l)]} + e^{2i[\theta+\varphi+q_x l/2]} - e^{i[\theta+\varphi+q_x l]} \quad (3.3.4)$$

e

$$B_1 = 4e^{i(\theta+\varphi+k_x l+q_x(D+l))} [\sin(\varphi) + \sin(\theta)] \sin(q_x D) \quad (3.3.5)$$

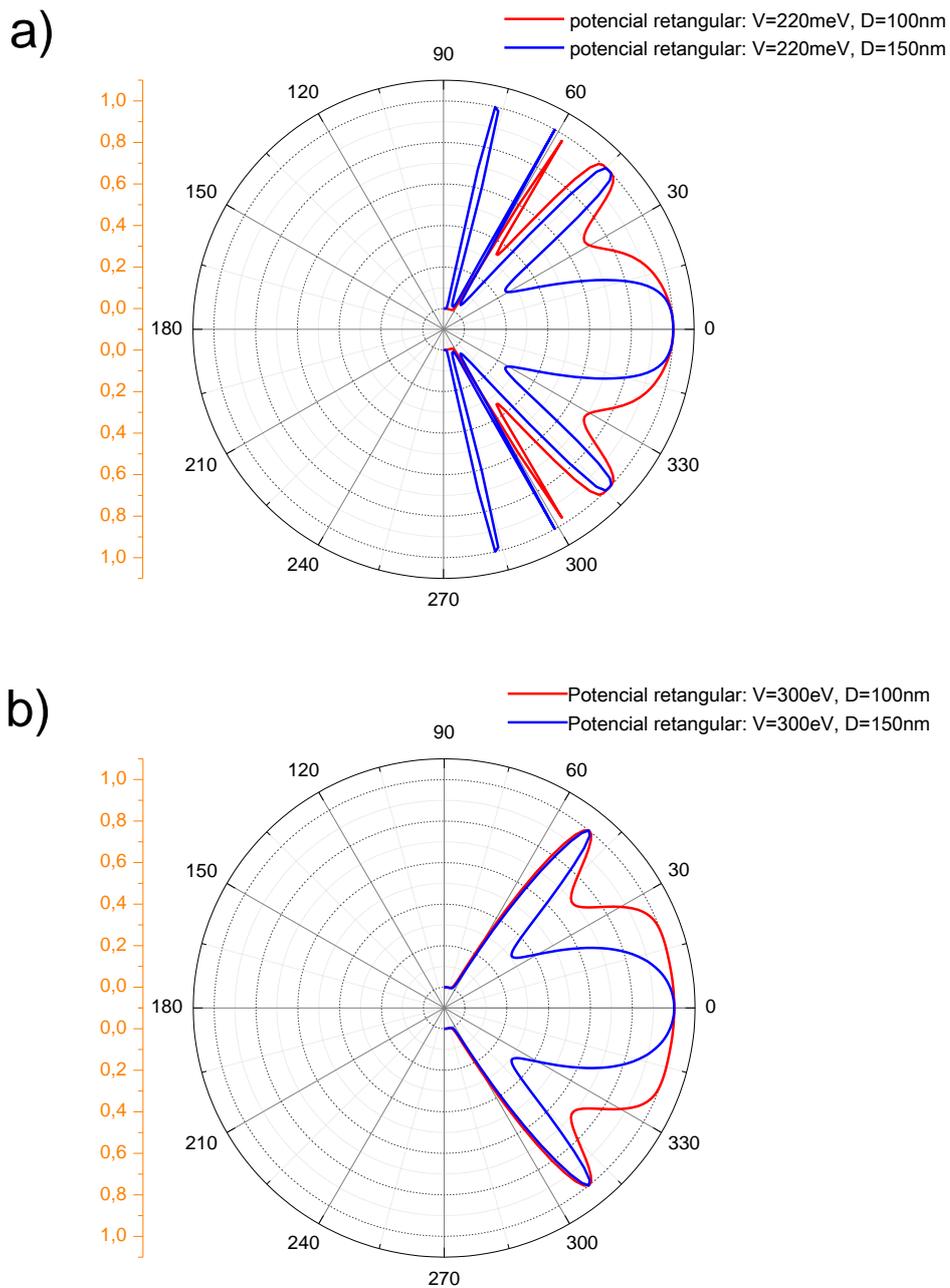


Figura 3.3.2 Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ e da largura D da barreira equação (3.3.3), para o caso de duas barreiras de potenciais retangulares. Origin 6.0.

Os gráficos acima foram plotados para os mesmos valores atribuídos ao caso de uma barreira de potencial retangular. Tais valores serão também utilizados para plotagem dos gráficos referentes às barreiras de potenciais lineares, facilitando a comparação entre ambas.

Note que o gráfico da transmissão, figura 3.3.2, deixa evidente que a dupla barreira de potencial retangular também apresenta tuneis. Em ambos, como no caso de uma única barreira de potencial retangular, apresentam-se perfeitamente transparentes para ângulos de incidência φ próximos de zero.

Outra observação importante diz respeito às mudanças apresentadas nos valores da transmissão em função das variações na largura da barreira. Para uma barreira de potencial de 220 meV , Figura 3.3.2(a), uma barreira menor, $100\ \mu\text{m}$, levou a um túnel “mais amplo” tanto para ângulos próximos da normal quanto para ângulos no entorno de 45° , a um pequeno deslocamento angular do túnel em torno de 60° e ao desaparecimento do túnel em torno de 77° . Já na figura 3.2.3(b), potencial maior que o caso anterior, $300\ \mu\text{m}$, a barreira de $100\ \mu\text{m}$ de largura apresenta um túnel “mais amplo” para ângulos próximos da normal e mantém praticamente inalterado o túnel em torno de 45°

3.4 TUNELAMENTOS EM GRAFENO PARA UMA BARREIRA LINEAR

Faremos inicialmente uma abordagem algébrica na tentativa de encontrar uma solução exata para o caso de barreiras lineares. Isto posto, considere o caso de um elétron com energia E se deslocando, com vetor de onda \vec{k} e uma barreira de potencial linear com largura D .

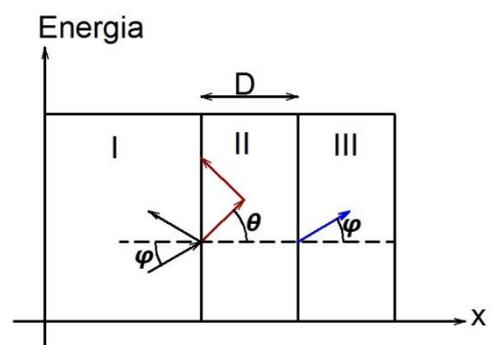
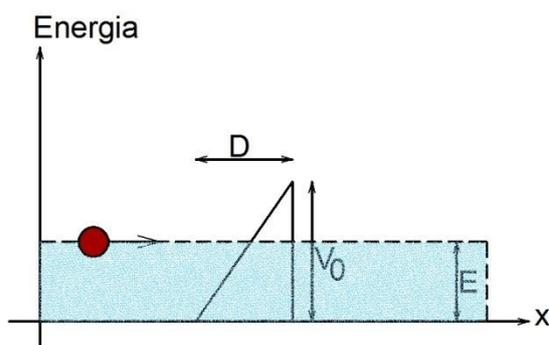


Figura 3.4.1 esquema representativo de (a)elétron no entorno de uma barreira triangular (b) definição dos ângulos de incidência φ e ângulo de refração θ . Autocad 2008.

Do ponto de vista experimental, assim como nos casos das barreiras retangulares, esta barreira também pode ser criada pelo efeito de um campo elétrico utilizando um isolante fino ou por um dopante químico local [9,12,13].

Para generalizar nossos resultados vamos assumir que a função de onda do elétron se propague segundo um ângulo φ qualquer em relação ao eixo x e que a barreira de potencial tenha a forma

$$V(x) = \begin{cases} \gamma x, & 0 < x < D \\ 0, & \text{outros} \end{cases} \quad (3.4.1)$$

Vamos por simplicidade definir:

$$\bar{\partial} = \partial_x + i\partial_y$$

$$\bar{\partial}^* = \partial_x - i\partial_y$$

Utilizando o hamiltoniano, equação (3.2.1), temos as seguintes equações desacopladas:

$$-i\hbar v_F \bar{\partial}^* \psi_2 + V(x)\psi_1 = E\psi_1 \quad (3.4.2.a)$$

$$-i\hbar v_F \bar{\partial} \psi_1 + V(x)\psi_2 = E\psi_2 \quad (3.4.3.a)$$

Da equação (3.4.1.a), temos:

$$\bar{\partial}^* \psi_2 = \frac{i}{\hbar v_F} [E - V(x)]\psi_1 \quad (3.4.2.b)$$

Aplicando o operador $\bar{\partial}^*$ na equação (3.4.3.a), obtemos:

$$-i\hbar v_F \bar{\partial}^* \bar{\partial} \psi_1 + \psi_2 \bar{\partial}^* V(x) = [E - V(x)] \bar{\partial}^* V(x) \quad (3.4.3.b)$$

Manipulando (3.4.2.b) e (3.4.3.b), fica:

$$-i\hbar v_F \overline{\partial^*} \partial \psi_1 + \psi_2 \overline{\partial^*} V(x) = \frac{i}{\hbar v_F} [E - V(x)]^2 \psi_1 \quad (3.4.4)$$

Aplicando a equação (3.4.4) na equação (3.4.2.a), temos:

$$\overline{\partial^*} \partial \psi_1 + \frac{\overline{\partial^*} V(x)}{[E - V(x)]} \overline{\partial} \psi_1 + \frac{[E - V(x)]^2}{\hbar^2 v_F^2} \psi_1 = 0 \quad (3.4.5)$$

Assumindo, como anteriormente, que $\psi_1 = X_1 Y_1$ a equação acima fica:

$$\frac{X_1''}{X_1} + \frac{V(x)'}{[E - V(x)]} \frac{X_1'}{X_1} + \frac{[E - V(x)]^2}{\hbar^2 v_F^2} + \frac{Y_1''}{Y_1} + i \frac{V(x)'}{[E - V(x)]} \frac{Y_1'}{Y_1} = 0 \quad (3.4.6)$$

E levando em conta a equação (3.4.1):

$$X_1'' + \frac{\gamma}{[E - V(x)]} X_1' + \left[\frac{[E - V(x)]^2}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{\gamma k_y}{[E - V(x)]} - k_y^2 \right] X_1 = 0 \quad (3.4.7)$$

Esta equação não nos forneceu uma solução algébrica satisfatória. Deste modo procuramos resolver o caso de uma barreira triangular utilizando calculo numérico aplicado à matriz de transferência. O procedimento adotado, que nos retornou uma solução satisfatória, será descrito a seguir:

Inicialmente vamos resolver o caso de transporte de carga no entorno de duas barreiras retangulares acopladas B_1 e B_2 com larguras d_1 e d_2 e respectivos potenciais V_1 e V_2 com $V_1 < V_2$, conforme figura abaixo:

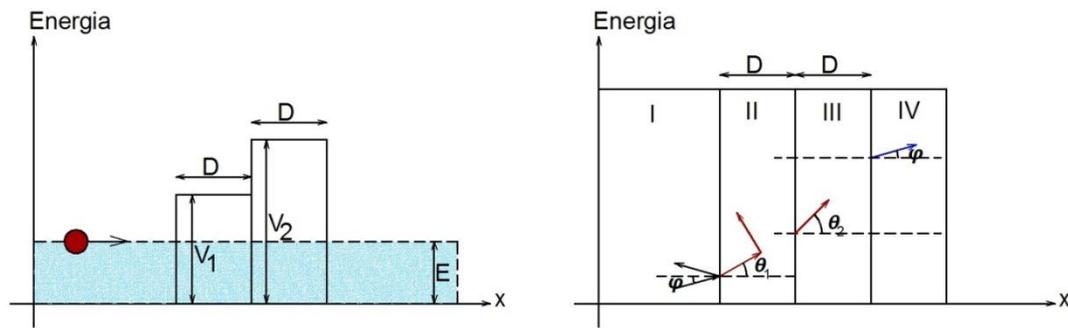


Figura 3.4.2 esquema representativo de (a) elétron no entorno de duas barreiras retangulares acopladas (b) definição dos ângulos de incidência φ e ângulo de refração θ . Autocad 2008.

Na região anterior à barreira B_1 as componentes da função de onda dos portadores de carga ficam:

$$\begin{cases} \psi_1 = (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s(e^{ik_x x + i\varphi} - r e^{-ik_x x - i\varphi}) e^{ik_y y} \end{cases}$$

No interior da barreira B_1 , temos:

$$\begin{cases} \psi_1 = (a_1 e^{iq_{1x} x} + b_1 e^{-iq_{1x} x}) e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s'_1(a_1 e^{iq_{1x} x + i\theta_1} - b_1 e^{-iq_{1x} x - i\theta_1}) e^{ik_y y} \end{cases}$$

No interior da barreira B_2 , temos:

$$\begin{cases} \psi_1 = (a_2 e^{iq_{2x} x} + b_2 e^{-iq_{2x} x}) e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s'_2(a_2 e^{iq_{2x} x + i\theta_2} - b_2 e^{-iq_{2x} x - i\theta_2}) e^{ik_y y} \end{cases}$$

Já região posterior à barreira B_2 :

$$\begin{cases} \psi_1 = t e^{ik_x x} e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s t e^{ik_x x + i\varphi} e^{ik_y y} \end{cases}$$

Então ψ_1 e ψ_2 , ficam:

$$\psi_1(x, y) = \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ (a_1 e^{iq_{1x} x} + b_1 e^{-iq_{1x} x}) e^{ik_y y}, & 0 < x < d_1 \\ (a_2 e^{iq_{2x} x} + b_2 e^{-iq_{2x} x}) e^{ik_y y}, & d_1 < x < d_1 + d_2 \\ t e^{ik_x x} e^{ik_y y}, & x > d_1 + d_2 \end{cases} \quad (3.4.8)$$

$$\psi_2(x, y) = \begin{cases} s(e^{ik_x x + i\varphi} - r e^{-ik_x x - i\varphi}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ s'_1(a_1 e^{iq_{1x} x + i\theta_1} - b_1 e^{-iq_{1x} x - i\theta_1}) e^{ik_y y}, & 0 < x < d_1 \\ s'_2(a_2 e^{iq_{2x} x + i\theta_2} - b_2 e^{-iq_{2x} x - i\theta_2}) e^{ik_y y}, & d_1 < x < d_1 + d_2 \\ s t e^{ik_x x + i\varphi} e^{ik_y y}, & x > d_1 + d_2 \end{cases} \quad (3.4.9)$$

Aplicando a condição de continuidade da função de onda em $x = 0, x = d_1$ e $x = d_1 + d_2$ para ψ_1 e ψ_2 e colocando na forma matricial, temos:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s e^{i\varphi} & -s e^{-i\varphi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s_1 e^{i\theta_1} & -s_1 e^{-i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{iq_{1x} d_1} & e^{-iq_{1x} d_1} \\ s_1 e^{iq_{1x} d_1 + i\theta_1} & -s_1 e^{-iq_{1x} d_1 - i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{iq_{2x} d_1} & e^{-iq_{2x} d_1} \\ s_2 e^{iq_{2x} d_1 + i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x} d_1 - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{iq_{2x}(d_1+d_2)} & e^{-iq_{2x}(d_1+d_2)} \\ s_2 e^{iq_{2x}(d_1+d_2) + i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x}(d_1+d_2) - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik(d_1+d_2)} & 1 \\ s e^{ik(d_1+d_2) + i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix}$$

Manipulando temos:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s e^{i\varphi} & -s e^{-i\varphi} \end{bmatrix}^{-1} \widehat{P}_2 \begin{bmatrix} e^{ik(d_1+d_2)} & 1 \\ s e^{ik(d_1+d_2) + i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.4.10)$$

Com:

$$\widehat{P}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s'_1 e^{i\theta_1} & -s'_1 e^{-i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{iq_{1x} d_1} & e^{-iq_{1x} d_1} \\ s'_1 e^{iq_{1x} d_1 + i\theta_1} & -s'_1 e^{-iq_{1x} d_1 - i\theta_1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{iq_{2x} d_1} & e^{-iq_{2x} d_1} \\ s'_2 e^{iq_{2x} d_1 + i\theta_2} & -s'_2 e^{-iq_{2x} d_1 - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{iq_{2x}(d_1+d_2)} & e^{-iq_{2x}(d_1+d_2)} \\ s'_2 e^{iq_{2x}(d_1+d_2) + i\theta_2} & -s'_2 e^{-iq_{2x}(d_1+d_2) - i\theta_2} \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.4.11)$$

Agora, resolveremos o caso de três barreiras retangulares acopladas B_1 , B_2 e B_3 com larguras d_1 , d_2 e d_3 e respectivos potenciais V_1 , V_2 e V_3 com $V_1 < V_2 < V_3$, conforme figura 3.4.3.

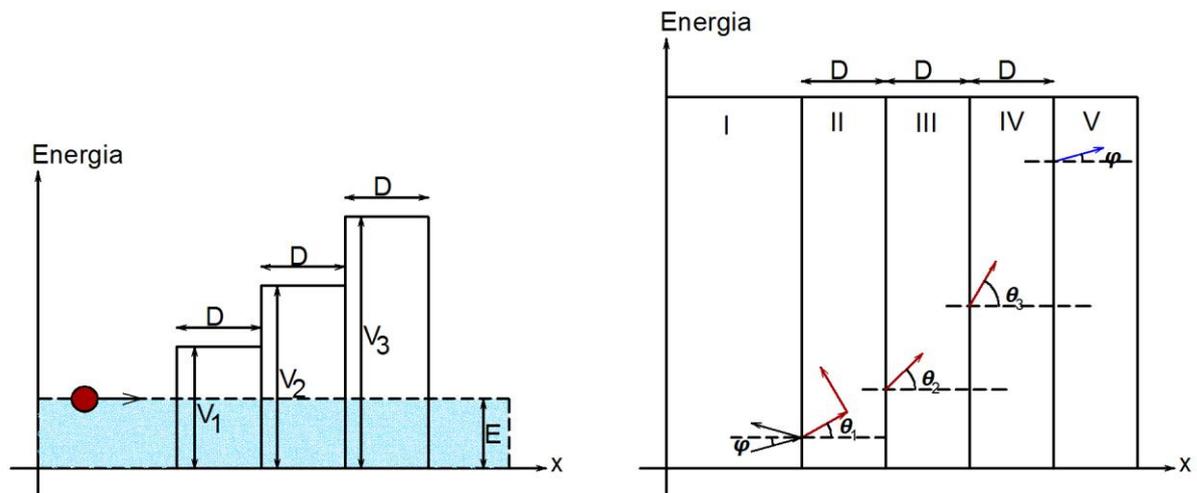


Figura 3.4.3 esquema representativo de (a) elétron no entorno de três barreiras retangulares acopladas. (b) definição dos ângulos de incidência φ e ângulo de refração θ . Autocad 2008.

Seguindo o mesmo procedimento adotado para o caso de duas barreiras acopladas, temos as seguintes expressões para as componentes da função de onda:

$$\psi_1(x, y) = \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ (a_1 e^{iq_{1x} x} + b_1 e^{-iq_{1x} x}) e^{ik_y y}, & 0 < x < d_1 \\ (a_2 e^{iq_{2x} x} + b_2 e^{-iq_{2x} x}) e^{ik_y y}, & d_1 < x < d_1 + d_2 \\ (a_3 e^{iq_{3x} x} + b_3 e^{-iq_{3x} x}) e^{ik_y y}, & d_1 + d_2 < x < d_1 + d_2 + d_3 \\ t e^{ik_x x} e^{ik_y y}, & x > d_1 + d_2 + d_3 \end{cases} \quad (3.4.12)$$

$$\psi_2(x, y) = \begin{cases} s(e^{ik_x x + i\varphi} - r e^{-ik_x x - i\varphi}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ s_1(a_1 e^{iq_{1x} x + i\theta_1} + b_1 e^{-iq_{1x} x - i\theta_1}) e^{ik_y y}, & 0 < x < d_1 \\ s_2(a_2 e^{iq_{2x} x + i\theta_2} + b_2 e^{-iq_{2x} x - i\theta_2}) e^{ik_y y}, & d_1 < x < d_1 + d_2 \\ s_3(a_3 e^{iq_{3x} x + i\theta_3} + b_3 e^{-iq_{3x} x - i\theta_3}) e^{ik_y y}, & d_1 + d_2 < x < d_1 + d_2 + d_3 \\ s t e^{ik_x x + i\varphi} e^{ik_y y}, & x > d_1 + d_2 + d_3 \end{cases} \quad (3.4.13)$$

Onde $s_i = \text{Sgn}(E - V_i)$, $\theta = \tan^{-1} k_y/q_x$. Aplicando a condição de continuidade da função de onda em $x = 0, x = d_1, x = d_1 + d_2$ e $x = d_1 + d_2 + d_3$ para ψ_1 e ψ_2 e colocando na forma matricial, obtemos:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s e^{i\varphi} & -s e^{-i\varphi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s_1 e^{i\theta_1} & -s_1 e^{-i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} e^{iq_1 x d_1} & e^{-iq_1 x d_1} \\ s_1 e^{iq_1 x d_1 + i\theta_1} & -s_1 e^{-iq_1 x d_1 - i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{iq_2 x d_1} & e^{-iq_2 x d_1} \\ s_2 e^{iq_2 x d_1 + i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_2 x d_1 - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} e^{iq_2 x (d_1 + d_2)} & e^{-iq_2 x (d_1 + d_2)} \\ s_2 e^{iq_2 x (d_1 + d_2) + i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_2 x (d_1 + d_2) - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_2 \\ b_2 \end{bmatrix} &= \\ = \begin{bmatrix} e^{iq_3 x (d_1 + d_2)} & e^{-iq_3 x (d_1 + d_2)} \\ s_3 e^{iq_3 x (d_1 + d_2) + i\theta_3} & -s_3 e^{-iq_3 x (d_1 + d_2) - i\theta_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} e^{iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3)} & e^{-iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3)} \\ s_2 e^{iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3) + i\theta_3} & -s_2 e^{-iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3) - i\theta_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{ik_x (d_1 + d_2 + d_3)} & 1 \\ s e^{ik_x (d_1 + d_2 + d_3) + i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Manipulando encontramos:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s e^{i\varphi} & -s e^{-i\varphi} \end{bmatrix}^{-1} \widehat{P}_3 \begin{bmatrix} e^{ik_x (d_1 + d_2 + d_3)} & 1 \\ s e^{ik_x (d_1 + d_2 + d_3) + i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.4.14)$$

Com:

$$\begin{aligned} \widehat{P}_3 &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s'_1 e^{i\theta_1} & -s'_1 e^{-i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{iq_1 x d_1} & e^{-iq_1 x d_1} \\ s'_1 e^{iq_1 x d_1 + i\theta_1} & -s'_1 e^{-iq_1 x d_1 - i\theta_1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{iq_2 x d_1} & e^{-iq_2 x d_1} \\ s'_2 e^{iq_2 x d_1 + i\theta_2} & -s'_2 e^{-iq_2 x d_1 - i\theta_2} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} e^{iq_2 x (d_1 + d_2)} & e^{-iq_2 x (d_1 + d_2)} \\ s'_2 e^{iq_2 x (d_1 + d_2) + i\theta_2} & -s'_2 e^{-iq_2 x (d_1 + d_2) - i\theta_2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} e^{iq_3 x (d_1 + d_2)} & e^{-iq_3 x (d_1 + d_2)} \\ s'_3 e^{iq_3 x (d_1 + d_2) + i\theta_3} & -s'_3 e^{-iq_3 x (d_1 + d_2) - i\theta_3} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} e^{iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3)} & e^{-iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3)} \\ s'_2 e^{iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3) + i\theta_3} & -s'_2 e^{-iq_3 x (d_1 + d_2 + d_3) - i\theta_3} \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.4.15) \end{aligned}$$

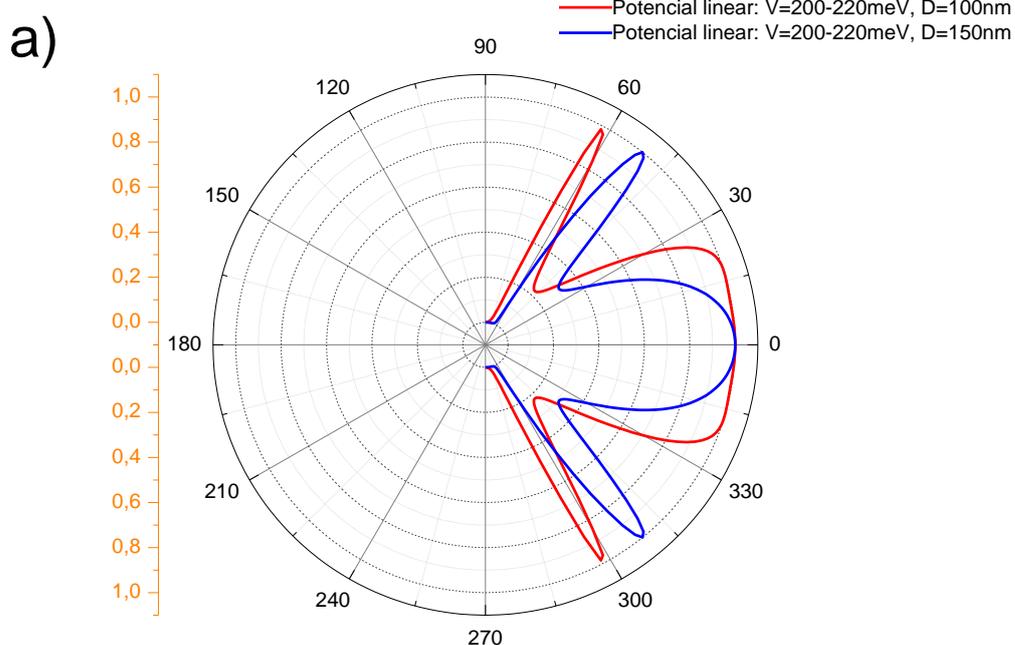
Podemos agora generalizar para o caso de n barreiras acopladas cada qual com potencial V_i , com $V_i < V_{i+1}$, $i = 1, 2, 3, \dots, n - 1$.

$$\begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ se^{i\varphi} & -se^{-i\varphi} \end{bmatrix}^{-1} \widehat{P}_n \begin{bmatrix} e^{ik_x(d_1+d_2+\dots+d_n)} & 1 \\ se^{ik_x(d_1+d_2+\dots+d_n)} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.4.16)$$

Com:

$$\widehat{P}_n = \prod_{j=0}^{n-1} \begin{bmatrix} e^{iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_k} & e^{-iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_k} \\ s_{j+1}e^{iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_k+i\theta_{j+1}} & -s_{j+1}e^{-iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_k-i\theta_{j+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_{k+1}} & e^{-iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_{k+1}} \\ s_{j+1}e^{iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_{k+1}+i\theta_{j+1}} & s_{j+1}e^{iq_{j+1}\sum_{k=0}^j d_{k+1}+i\theta_{j+1}} \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.4.17)$$

Deste modo encontramos um produtório de matrizes que nos fornece a transmissão para n barreiras acopladas cada qual com potencial V_i e mesma largura D que satisfaz nosso objetivo. Isto posto procuramos realizar cálculos numéricos para um numero de barreiras $n = 100$ e largura da barreira D muito pequena de modo que no limite se apresente como uma barreira linear de potencial. Então foram exploradas muitas variações dos extremos dos potenciais dentro dos valores habituais para o grafeno. Isto posto, os cálculos fornecem o seguinte gráfico para a probabilidade de transmissão em função do ângulo de incidência figura 3.4.4. Note que a transmissão, assim como nos casos anteriores de uma única barreira retangular e de duas barreiras retangulares apresenta um túnel em torno da normal e outro menor para certos ângulos.



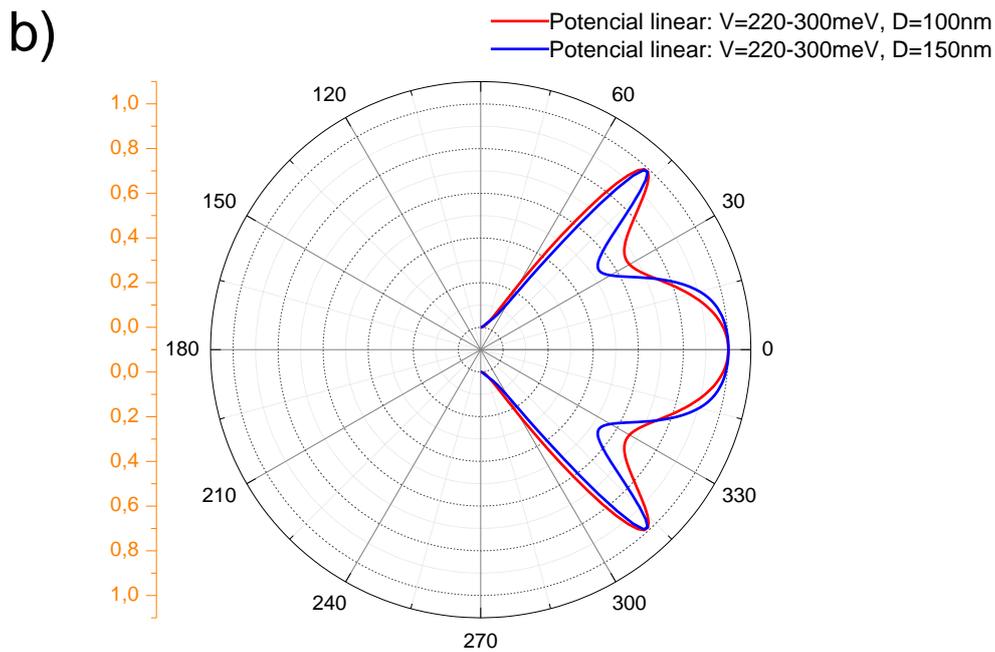
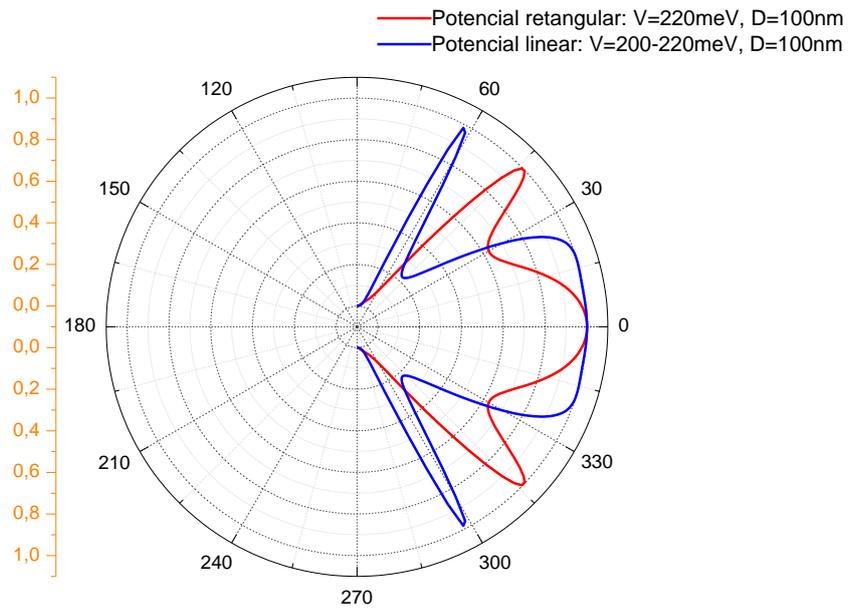


Figura 3.4.4 Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ e da largura D da barreira para o caso de barreiras lineares. *Origin 6.0.*

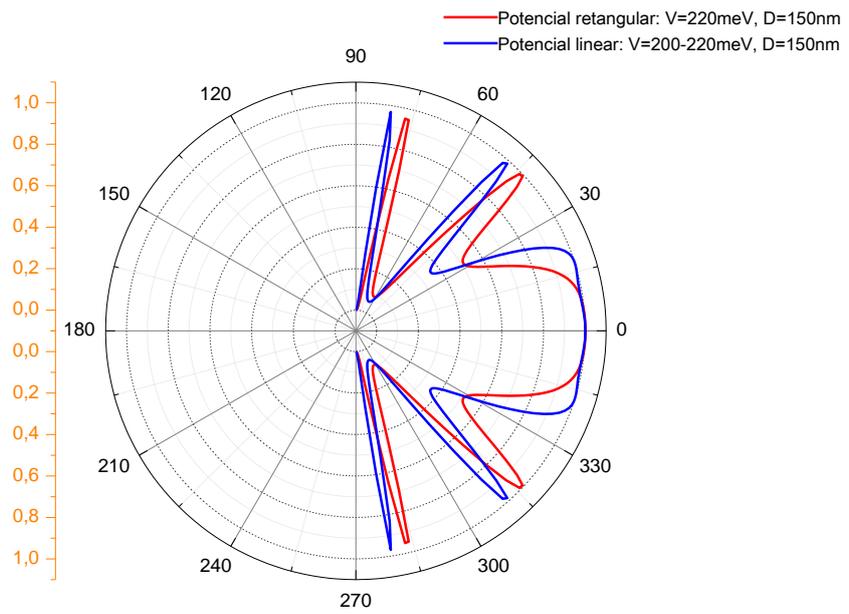
Para barreiras lineares $200 - 220\text{meV}$, figura 3.4.4(a), a largura da barreira é significativa para a transmissão. De modo que a barreira, $100\mu\text{m}$, é transparente para ângulos de incidência de até 25° e apresenta um deslocamento angular do túnel centrado em 47° . Já na figura 3.2.3(b), potencial maior que o caso anterior, o aumento na largura da barreira não é tão expressivo para o valor da transmissão, sendo observado um sensível alargamento do túnel “largo” em torno da normal e o túnel “discreto” em torno de 48° permanece praticamente inalterado.

Buscando analisar as diferenças entre a barreira retangular e a linear para os valores da transmissão, é feito um comparativo, figura 3.4.5, variando-se o potencial e mantendo fixo, em cada caso, a largura da barreira. Assim observa-se que para potenciais lineares $200 - 220\text{meV}$ quando comparado com potenciais retangulares de 200meV apresenta um alargamento expressivo do túnel próximo da normal e um deslocamento angular dos demais. Por outro lado barreiras lineares $220 - 300\text{meV}$ quando comparadas as barreiras retangulares 300meV não apresentam mudanças significativas de modo que os gráficos da transmissão apresentam um sensível aumento do túnel próximo à normal e um deslocamento angular dos demais túneis.

a)



b)



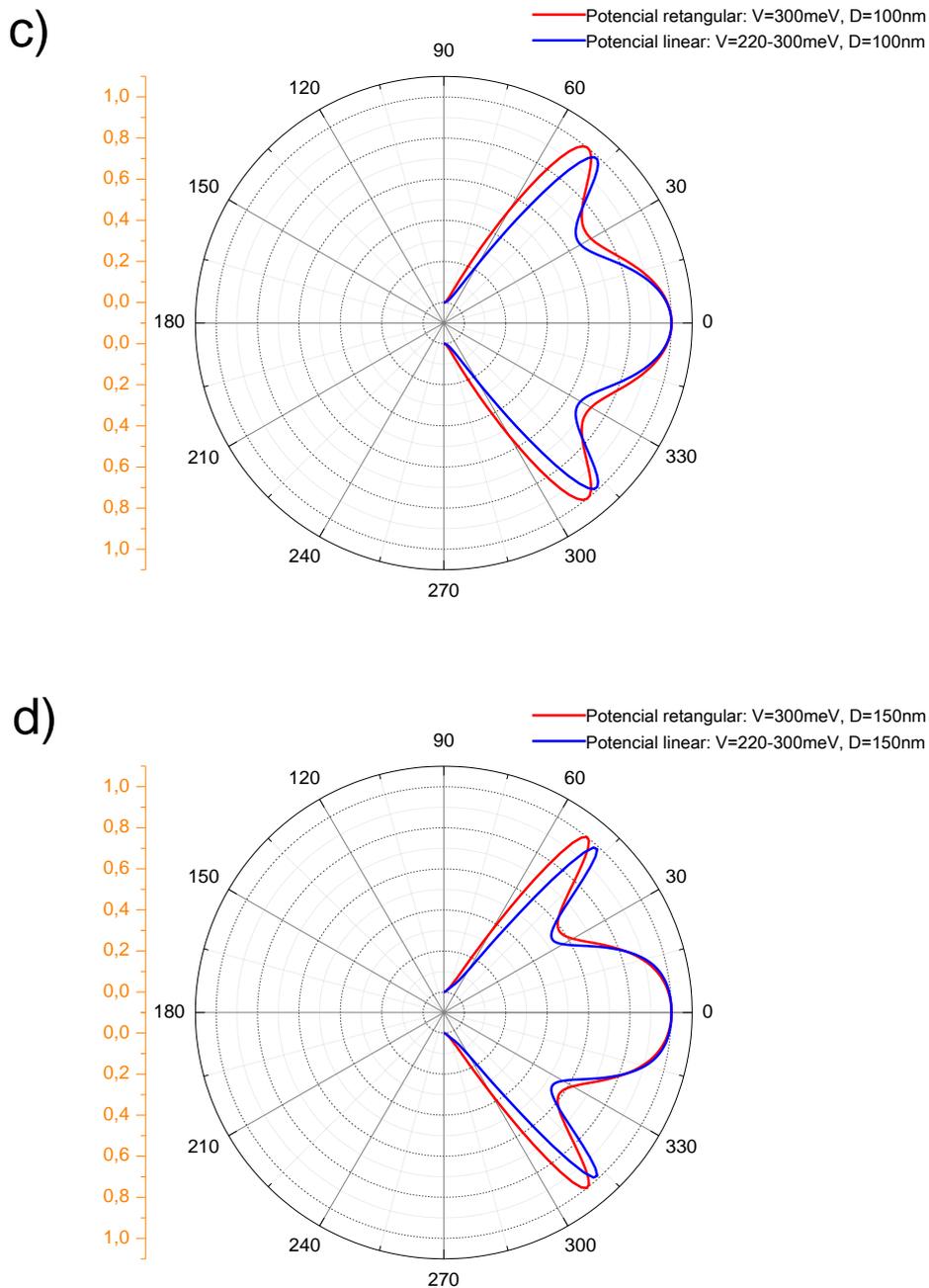


Figura 3.4.5 comparação, para o caso de uma barreira, da transmissão T em função do ângulo de incidência φ e da largura D da barreira, entre potenciais lineares e retangulares. *Origin 6.0.*

De um modo geral podemos observar que ao variar os valores do potencial e o comprimento da barreira manipula-se a largura do túnel próximo a normal, altera-se a localização angular dos demais túneis podendo em alguns casos ocorrer o desaparecimento do túnel.

3.5 TUNELAMENTOS EM GRAFENO PARA DUAS BARREIRAS LINEARES

Inicialmente, assim como anteriormente fizemos, vamos resolver o caso de transporte de carga no entorno de uma dupla de duas barreiras retangulares acopladas B_1 e B_2 com larguras d_1 e d_2 e respectivos potenciais V_1 e V_2 com $V_1 < V_2$ para o grafeno, conforme figura abaixo. Isto feito procuraremos generalizar o resultado para um número n qualquer de barreiras acopladas de modo que no limite devemos ter $V_{i+1} = \delta + V_i$ e $d_i = d_{i+1} = \Delta x$.

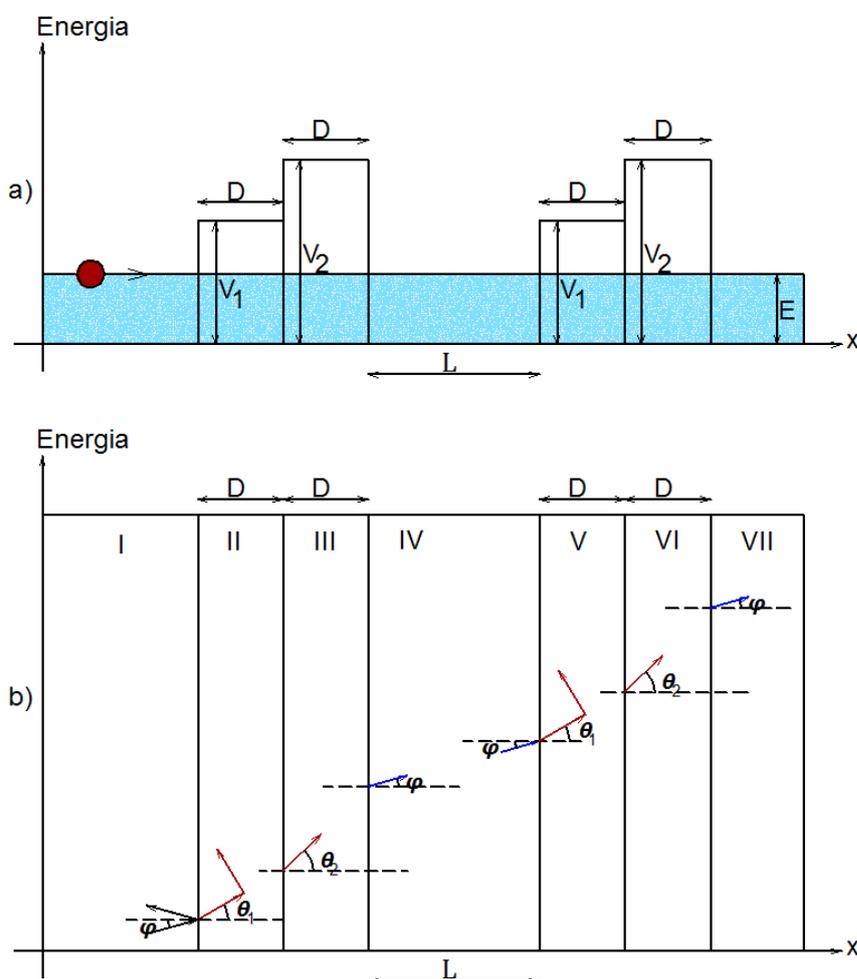


Figura 3.5.1. esquema representativo de (a)elétron no entorno de duas duplas de barreiras retangulares (b) definição dos ângulos de incidência φ e ângulo de refração θ . Autocad 2008.

Na região anterior a barreira B_1 as componentes da função de onda ficam:

$$\begin{cases} \psi_1 = (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s(e^{ik_x x + i\varphi} - r e^{-ik_x x - i\varphi}) e^{ik_y y} \end{cases}$$

No interior da primeira barreira B_1 , assumem a forma:

$$\begin{cases} \psi_1 = (a_{11}e^{iq_{1x}x} + b_{11}e^{-iq_{1x}x})e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s'_1(a_{11}e^{iq_{1x}x+i\theta_1} - b_{11}e^{-iq_{1x}x-i\theta_1})e^{ik_y y} \end{cases}$$

No interior da primeira barreira B_2 , ficam:

$$\begin{cases} \psi_1 = (a_{12}e^{iq_{2x}x} + b_{12}e^{-iq_{2x}x})e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s'_2(a_{12}e^{iq_{2x}x+i\theta_2} - b_{12}e^{-iq_{2x}x-i\theta_2})e^{ik_y y} \end{cases}$$

Já na região posterior a primeira barreira B_2 e anterior à segunda barreira B_1 , fica:

$$\begin{cases} \psi_1 = t_1 e^{ik_x x} e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s t_1 e^{ik_x x + i\varphi} e^{ik_y y} \end{cases}$$

No interior da segunda barreira B_1 , temos:

$$\begin{cases} \psi_1 = (a_{21}e^{iq_{1x}x} + b_{21}e^{-iq_{1x}x})e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s'_1(a_{21}e^{iq_{1x}x+i\theta_1} - b_{21}e^{-iq_{1x}x-i\theta_1})e^{ik_y y} \end{cases}$$

No interior da segunda barreira B_2 , assumem a forma:

$$\begin{cases} \psi_1 = (a_{22}e^{iq_{2x}x} + b_{22}e^{-iq_{2x}x})e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s_2(a_{22}e^{iq_{2x}x+i\theta_2} - b_{22}e^{-iq_{2x}x-i\theta_2})e^{ik_y y} \end{cases}$$

Já na região posterior a segunda barreira B_2 :

$$\begin{cases} \psi_1 = t_2 e^{ik_x x} e^{ik_y y} \\ \psi_2 = s t_2 e^{ik_x x + i\varphi} e^{ik_y y} \end{cases}$$

Então ψ_1 e ψ_2 , ficam:

$$\psi_1(x, y) = \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ (a_{11} e^{iq_{1x} x} + b_{11} e^{-iq_{1x} x}) e^{ik_y y}, & 0 < x < d_1 \\ (a_{12} e^{iq_{2x} x} + b_{12} e^{-iq_{2x} x}) e^{ik_y y}, & d_1 < x < d_1 + d_2 \\ t_1 e^{ik_x x} e^{ik_y y}, & d_1 + d_2 < x < d_1 + d_2 + L \\ (a_{21} e^{iq_{1x} x} + b_{21} e^{-iq_{1x} x}) e^{ik_y y}, & d_1 + d_2 + L < x < 2d_1 + d_2 + L \\ (a_{22} e^{iq_{2x} x} + b_{22} e^{-iq_{2x} x}) e^{ik_y y}, & 2d_1 + d_2 + L < x < 2d_1 + 2d_2 + L \\ t_2 e^{ik_x x} e^{ik_y y}, & 2d_1 + 2d_2 + L < x \end{cases} \quad (3.5.1)$$

$$\psi_2(x, y) = \begin{cases} s(e^{ik_x x + i\varphi} - r e^{-ik_x x - i\varphi}) e^{ik_y y}, & x < 0 \\ s_1(a_{11} e^{iq_{1x} x + i\theta_1} + b_{11} e^{-iq_{1x} x - i\theta_1}) e^{ik_y y}, & 0 < x < d_1 \\ s_2(a_{12} e^{iq_{2x} x + i\theta_2} + b_{12} e^{-iq_{2x} x - i\theta_2}) e^{ik_y y}, & d_1 < x < d_1 + d_2 \\ st_1 e^{ik_x x} e^{ik_y y}, & d_1 + d_2 < x < d_1 + d_2 + L \\ s_1(a_{21} e^{iq_{1x} x + i\theta_1} + b_{21} e^{-iq_{1x} x - i\theta_1}) e^{ik_y y}, & d_1 + d_2 + L < x < 2d_1 + d_2 + L \\ s_2(a_{22} e^{iq_{2x} x + i\theta_2} + b_{22} e^{-iq_{2x} x - i\theta_2}) e^{ik_y y}, & 2d_1 + d_2 + L < x < 2d_1 + 2d_2 + L \\ st_2 e^{ik_x x} e^{ik_y y}, & x > 2d_1 + 2d_2 + L \end{cases} \quad (3.5.2)$$

Da continuidade da função de onda - $x = 0, x = d_1, x = (d_1 + d_2), x = d_1 + d_2 + L, x = 2d_1 + d_2 + L$ e $x = 2d_1 + 2d_2 + L$ - para ψ_1 e ψ_2 e reagrupando as na forma matricial, temos:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s e^{i\varphi} & -s e^{-i\varphi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s_1 e^{i\theta_1} & -s_1 e^{-i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \\ b_{11} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{iq_{1x} d_1} & e^{-iq_{1x} d_1} \\ s_1 e^{iq_{1x} d_1 + i\theta_1} & -s_1 e^{-iq_{1x} d_1 - i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \\ b_{11} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{iq_{2x} d_1} & e^{-iq_{2x} d_1} \\ s_2 e^{iq_{2x} d_1 + i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x} d_1 - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{12} \\ b_{12} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{iq_{2x}(d_1 + d_2)} & e^{-iq_{2x}(d_1 + d_2)} \\ s_2 e^{iq_{2x}(d_1 + d_2) + i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x}(d_1 + d_2) - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{12} \\ b_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_x(d_1 + d_2)} & 1 \\ s e^{ik_x(d_1 + d_2) + i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{ik_x(d_1 + d_2 + L)} & 1 \\ s e^{ik_x(d_1 + d_2 + L) + i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{iq_{1x}(d_1 + d_2 + L)} & e^{-iq_{1x}(d_1 + d_2 + L)} \\ s_1 e^{iq_{1x}(d_1 + d_2 + L) + i\theta_1} & -s_1 e^{-iq_{1x}(d_1 + d_2 + L) - i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{21} \\ b_{21} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{iq_{1x}(2d_1 + d_2 + L)} & e^{-iq_{1x}(2d_1 + d_2 + L)} \\ s_1 e^{iq_{1x}(2d_1 + d_2 + L) + i\theta_1} & -s_1 e^{-iq_{1x}(2d_1 + d_2 + L) - i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{21} \\ b_{21} \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} e^{iq_{2x}(2d_1 + d_2 + L)} & e^{-iq_{2x}(2d_1 + d_2 + L)} \\ s_2 e^{iq_{2x}(2d_1 + d_2 + L) + i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x}(2d_1 + d_2 + L) - i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{22} \\ b_{22} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} e^{iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)} & e^{-iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)} \\ s_2 e^{iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)+i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)-i\theta_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{22} \\ b_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{ik_x(2d_1+2d_2+L)} & 1 \\ s_2 e^{ik_x(2d_1+2d_2+L)+i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_2 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Manipulando, temos:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s_2 e^{i\varphi} & -s_2 e^{-i\varphi} \end{bmatrix}^{-1} \widehat{P}_2 \begin{bmatrix} e^{ik(d_1+d_2)} & 1 \\ s_2 e^{ik(d_1+d_2)+i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ik_x(d_1+d_2+L)} & 1 \\ s_2 e^{ik_x(d_1+d_2+L)+i\varphi} & 1 \end{bmatrix}^{-1} \\ &\widehat{I}_2 \begin{bmatrix} e^{ik_x(2d_1+2d_2+L)} & 1 \\ s_2 e^{ik_x(2d_1+2d_2+L)+i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.5.3) \end{aligned}$$

Com \widehat{P}_2 dado pela equação (3.4.10) e \widehat{I}_2 dado por:

$$\begin{aligned} \widehat{I}_2 &= \begin{bmatrix} e^{iq_{1x}d_1} & e^{-iq_{1x}d_1} \\ s_1 e^{iq_{1x}d_1+i\theta_1} & -s_1 e^{-iq_{1x}d_1-i\theta_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{iq_{1x}(2d_1+d_2+L)} & e^{-iq_{1x}(2d_1+d_2+L)} \\ s_1 e^{iq_{1x}(2d_1+d_2+L)+i\theta_1} & -s_1 e^{-iq_{1x}(2d_1+d_2+L)-i\theta_1} \end{bmatrix}^{-1} \\ &\begin{bmatrix} e^{iq_{2x}(2d_1+d_2+L)} & e^{-iq_{2x}(2d_1+d_2+L)} \\ s_2 e^{iq_{2x}(2d_1+d_2+L)+i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x}(2d_1+d_2+L)-i\theta_2} \end{bmatrix} \\ &\begin{bmatrix} e^{iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)} & e^{-iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)} \\ s_2 e^{iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)+i\theta_2} & -s_2 e^{-iq_{2x}(2d_1+2d_2+L)-i\theta_2} \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.5.4) \end{aligned}$$

Podemos agora generalizar para o caso de n barreiras acopladas cada qual com potencial V_i , com $V_{i+1} = \delta + V_i, i = 1, 2, 3, \dots, n-1$.

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ s_2 e^{i\varphi} & -s_2 e^{-i\varphi} \end{bmatrix}^{-1} \widehat{P}_n \begin{bmatrix} e^{ik_x(d_1+d_2+\dots+d_n)} & 1 \\ s_2 e^{ik_x(d_1+d_2+\dots+d_n)+i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{ik_x(L+d_1+d_2+\dots+d_n)} & 1 \\ s_2 e^{ik_x(L+i\varphi+d_1+d_2+\dots+d_n)+i\varphi} & 1 \end{bmatrix}^{-1} \\ &\widehat{I}_n \begin{bmatrix} e^{ik_x(2d_1+2d_2+\dots+2d_n+L)} & 1 \\ s_2 e^{ik_x(2d_1+2d_2+\dots+2d_n+L)+i\varphi} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.5.5) \end{aligned}$$

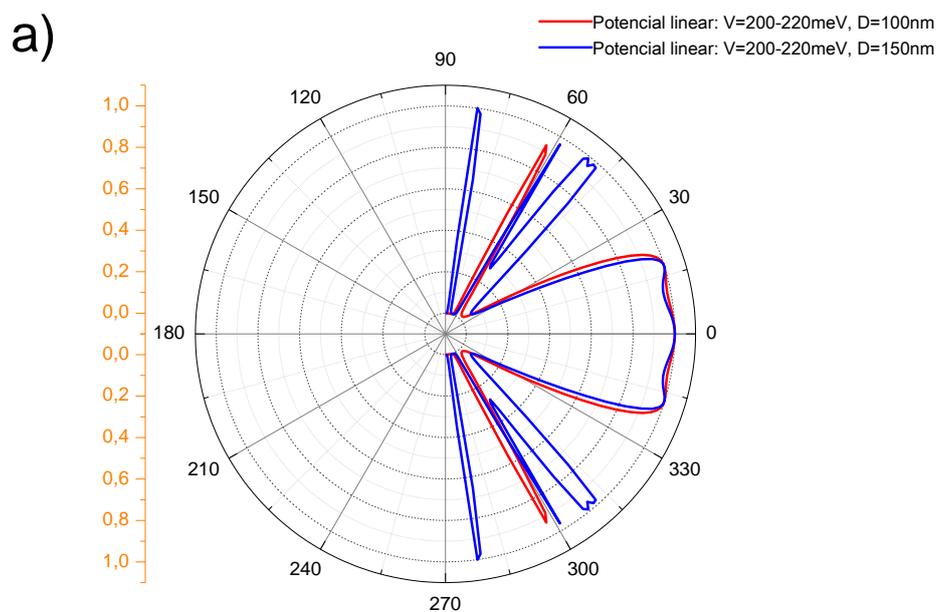
Com \widehat{P}_n dado pela equação (3.4.16) e \widehat{I}_n dado por:

$$\begin{aligned} \widehat{I}_n &= \prod_{j=0}^n \begin{bmatrix} e^{iq_j[L+\sum_{k=0}^{j-1} 2d_k+\sum_{k=j}^n d_k]} & e^{-iq_j[L+\sum_{k=0}^{j-1} 2d_k+\sum_{k=j}^n d_k]} \\ s_j e^{iq_j[L+\sum_{k=0}^{j-1} 2d_k+\sum_{k=j}^n d_k]+i\theta_j} & -s_j e^{-iq_j[L+\sum_{k=0}^{j-1} 2d_k+\sum_{k=j}^n d_k]-i\theta_j} \end{bmatrix} \\ &\begin{bmatrix} e^{iq_j[L+\sum_{k=0}^j 2d_k+\sum_{k=j+1}^n d_k]} & e^{-iq_j[L+\sum_{k=0}^j 2d_k+\sum_{k=j+1}^n d_k]} \\ s_j e^{iq_j[L+i\theta_j+\sum_{k=0}^j 2d_k+\sum_{k=j+1}^n d_k]} & s_j e^{-iq_j[L+i\theta_j+\sum_{k=0}^j 2d_k+\sum_{k=j+1}^n d_k]} \end{bmatrix}^{-1} \quad (3.5.6) \end{aligned}$$

Deste modo encontramos um produtório de matrizes que nos fornece a transmissão para n barreiras acopladas cada qual com potencial V_i e mesma largura D e comprimento L que satisfaz nosso objetivo.

Mais uma vez realizamos cálculos numéricos para um numero de barreiras $n = 100$ e largura da barreira D muito pequena de modo que no limite se apresentem como duas barreiras lineares de potencial.

Também foram exploradas muitas variações dos extremos dos potenciais dentro dos valores habituais para o grafeno. Isto posto, os cálculos fornecem os seguintes gráficos para a probabilidade de transmissão em função do ângulo de incidência φ e da largura da barreira D , figura 3.5.2.



,

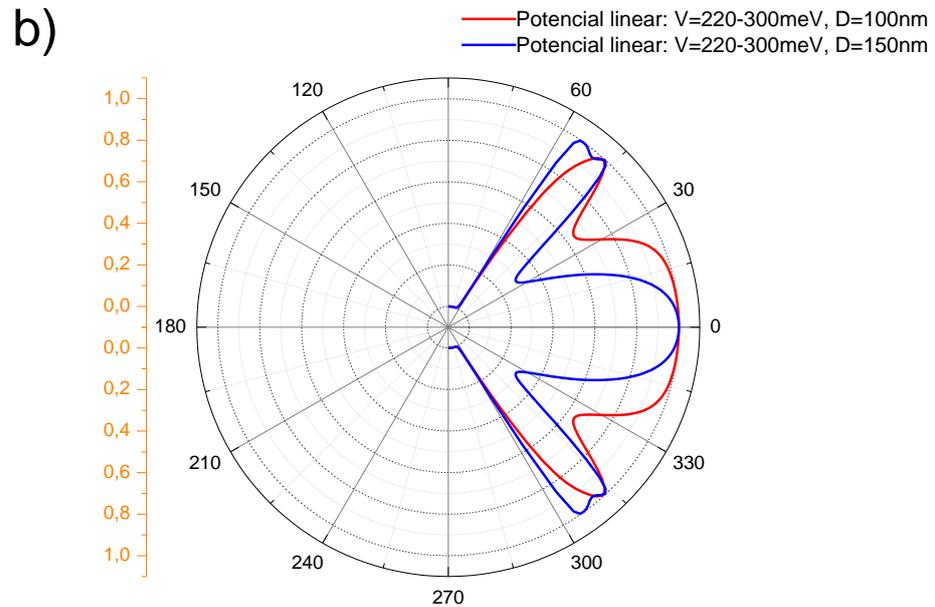


Figura 3.5.2: Probabilidade de transmissão T em função do ângulo de incidência φ e da largura D da barreira, para o caso de duas barreiras de potenciais lineares. Origin 6.0.

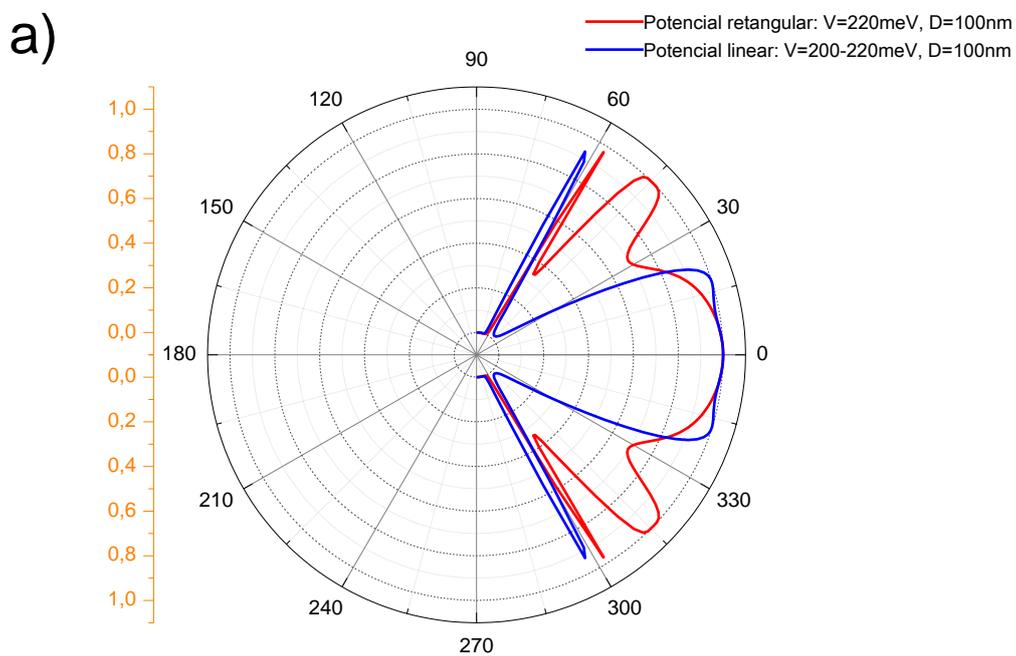
Note que para o caso de duas barreiras lineares de potencial, assim como para o caso de uma única barreira linear, o efeito túnel também é observado. Para barreiras lineares $200 - 220\text{meV}$, figura 3.5.2(a), a barreira, $150\mu\text{m}$, praticamente não apresenta modificações em relação ao túnel próximo à normal, entretanto surgem dois outros túneis mais discretos próximos à 50° e 80° quando comparada à barreira de largura $100\mu\text{m}$. Já na figura 3.2.3(b), potencial maior que o caso anterior, a barreira de comprimento de $100\mu\text{m}$, é transparente para ângulos de até 25° e também apresenta uma diminuição sensível e deslocamento angular do túnel em torno 47° em relação à barreira de comprimento $150\mu\text{m}$.

Assim como no caso de uma única barreira de potencial, buscamos analisar as diferenças entre a barreira retangular e a linear para os valores da transmissão, sendo feito um comparativo, figura 3.5.3, variando-se tanto o potencial quanto a largura da barreira.

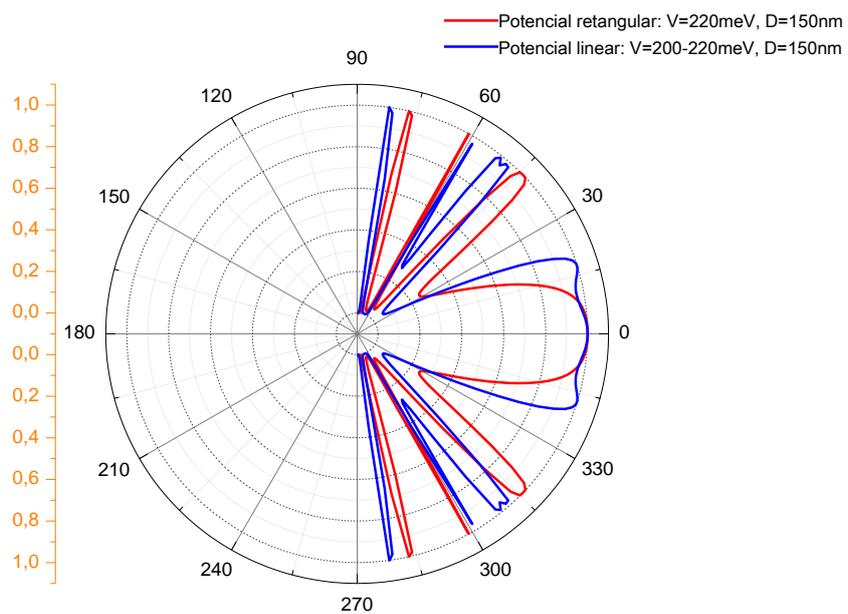
Barreiras com comprimento de $100\mu\text{m}$ e $150\mu\text{m}$ para potenciais lineares $200 - 220\text{meV}$, figura 3.5.3(a) e 3.5.3(b), apresentam de um modo geral um alargamento do túnel em torno da normal, um deslocamento angular do túnel em

torno de 60° e o desaparecimento do túnel no entorno de 45° , somente para $100\mu m$, quando comparadas as barreiras retangulares $220meV$.

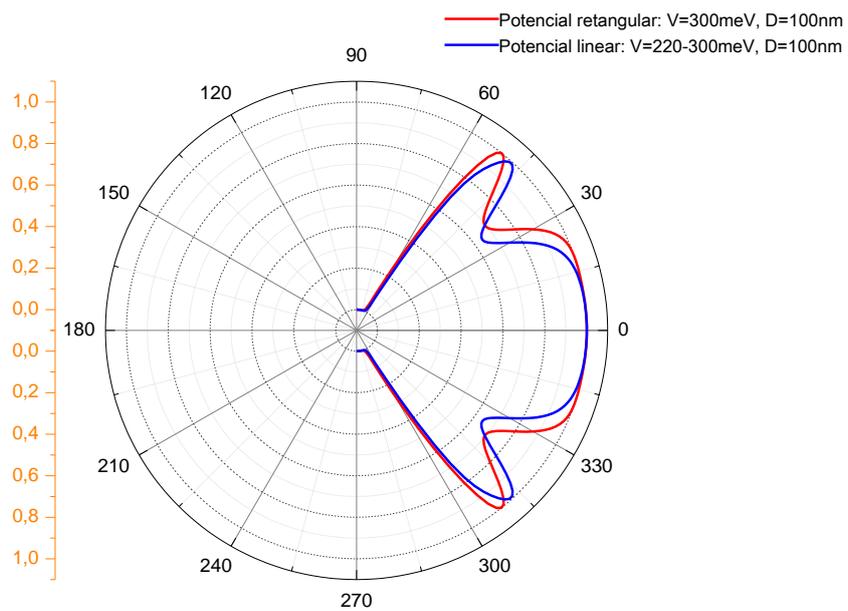
Por outro lado quando os potenciais lineares são de $220 - 300meV$, figura 3.5.3(c) e 3.5.3(d), não há mudanças significativas de modo que os gráficos da transmissão apresentam um sensível aumento do túnel próximo à normal e um deslocamento angular dos demais túneis, em relação às barreiras retangulares $300meV$



b)



c)



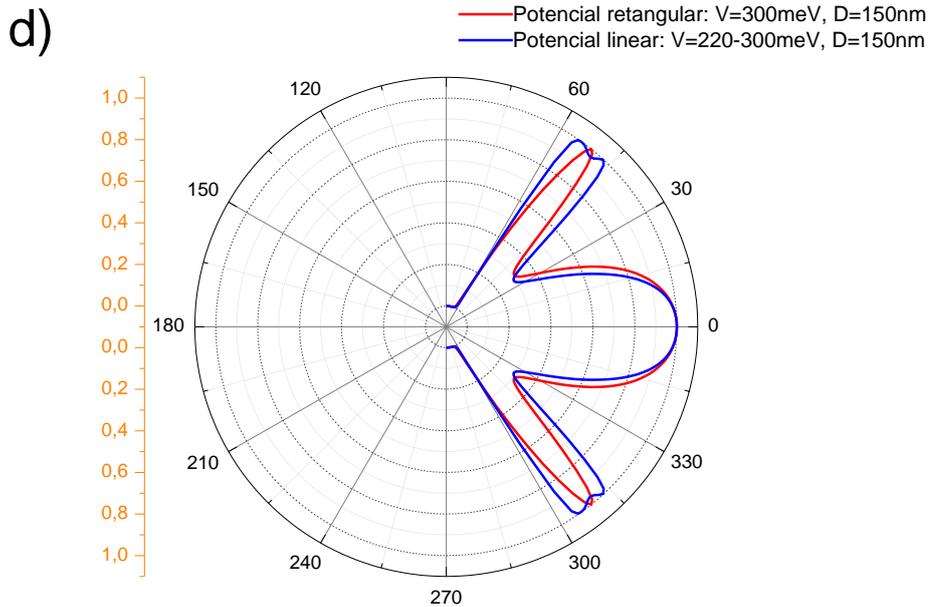


Figura 3.5.3: comparação, para o caso de duas barreiras, da transmissão T , em função do ângulo de incidência φ e da largura D da barreira, entre potenciais lineares e retangulares. Origin 6.0.

De um modo geral podemos observar que ao variar os valores do potencial e o comprimento da barreira manipula-se tanto a largura do túnel próximo a normal quanto altera a localização angular dos demais túneis.

3.6 CONCLUSÃO

No grafeno a descrição dos seus portadores de carga em sistemas de barreiras de potenciais permite observar que: possuem considerável probabilidade de transmissão para um amplo conjunto de ângulos de incidência como também apresentam efeito túnel, que possibilita o estudo do tunelamento Klein em laboratórios de física da matéria condensada. Tal efeito desempenha importante papel nas propriedades de transporte de carga em grafeno, especialmente no regime de baixas concentrações. Tendo um forte apelo tecnológico principalmente em nanoeletrônica. Esta observação contrasta com o caso dos portadores de carga em semicondutores convencionais onde a probabilidade de transmissão decai exponencialmente com o aumento da largura e da altura da barreira.

Por outro lado existem diferenças entre sistemas de barreiras retangulares e lineares. De um modo geral para uma ou duas barreiras de potenciais, observa-se que potenciais lineares $200 - 220\text{meV}$ quando comparados com potenciais retangulares de 200meV apresentam um alargamento expressivo do túnel próximo da normal e um deslocamento angular dos demais. Por outro lado barreiras lineares $220 - 300\text{meV}$ quando comparadas as barreiras retangulares 300meV não apresentam mudanças significativas em relação à transmissão de modo que os gráficos praticamente se sobrepõem.

Assim a alteração no perfil da barreira, que pode ser explorado experimentalmente, permite aumentar o intervalo de ângulos próximos a zero com probabilidade de transmissão $T = 1$ e manipular outros ângulos em que o dispositivo é transparente. Nesse sentido o comportamento diferente das propriedades dos portadores de carga, do grafeno monocamada, em sistemas de barreiras apresenta-se como mais uma propriedade exótica deste material. Que pode ser explorada tanto do ponto de vista da física envolvida quanto da sua utilização tecnológica em dispositivos mais eficientes no que diz respeito ao transporte de carga.

4 RESULTADOS E PERSPECTIVAS

Após dois anos de trabalho podemos fazer uma avaliação positiva do nosso esforço empreendido para desenvolver a pesquisa do transporte de carga, em grafeno monocamada, para sistemas de barreiras de potencial. Começamos os trabalhos nos familiarizando com artigos que tratavam tanto dos inúmeros potenciais de aplicações tecnológicas do grafeno quanto que exploravam o tunelamento Klein para sistemas de barreiras de potencial. Observamos que não havia trabalhos explorando o tunelamento Klein para sistemas de potencial linear em grafeno monocamada, objeto de nosso estudo. Várias tentativas foram empreendidas no intuito de encontrar uma solução algébrica para nosso problema, fato que nos possibilitou adquirir uma maior maturidade no uso de ferramentas matemáticas, entretanto não obtivemos uma solução que nos retornasse um resultado satisfatório. Buscamos então resolver o problema numericamente sendo recompensados com o sucesso.

O estudo do grafeno, embora seja ainda um tema relativamente novo, já evoluiu para um importante ramo da Física da matéria condensada. Espera-se que o fato de a barreira ser transparente para certos ângulos de incidência, efeito túnel, desempenhe papel importante nas propriedades de transporte de dispositivos de grafeno, especialmente no regime de baixas concentrações. É tanto o interesse nas suas incríveis propriedades eletrônicas e mecânicas, e as perspectivas de futuras aplicações tecnológicas nas mais diversas áreas, que explodiu em uma grande quantidade de pesquisas teóricas e experimentais mostrando o seu potencial tanto na observação de fenômenos exóticos em sistemas de baixa energia quanto das suas inúmeras possibilidades de aplicação em materiais mais resistentes, flexíveis e com maior condução. Culminando com o prêmio Nobel de 2010 para os seus descobridores.

Nesta dissertação, procuramos contribuir para este campo em rápido crescimento, através de uma abordagem numérica para modelar a probabilidade de transmissão dos portadores de carga em sistemas de barreiras de potencial linear. Dentro do nosso modelo numérico, fomos capazes de reproduzir os resultados

obtidos para sistemas de barreiras retangulares da literatura, fato que nos possibilitou ter confiança para resolver o caso linear.

Constatamos algumas diferenças entre sistemas de barreiras retangulares e lineares. Assim, de um modo geral para uma ou duas barreiras de potenciais, observa-se que os potenciais lineares $200 - 220\text{meV}$ quando comparados com potenciais retangulares de 200meV apresentam um alargamento expressivo do túnel próximo da normal e um deslocamento angular dos demais. Por outro lado barreiras lineares $220 - 300\text{meV}$ quando comparadas as barreiras retangulares 300meV não apresentam mudanças significativas de modo que os gráficos da transmissão praticamente se sobrepõem.

Isto posto, o comportamento diferente das propriedades dos portadores de carga, do grafeno monocamada, em sistemas de barreiras lineares apresenta se como mais uma propriedade exótica deste material que pode ser explorada tanto do ponto de vista da física envolvida quanto da sua utilização tecnológica em dispositivos mais eficientes no que diz respeito ao transporte de carga.

O passo posterior a este trabalho será o estudo do comportamento dos portadores de carga em sistemas de barreiras de potenciais lineares em nanofitas de grafeno, tanto *armchair* quanto *zigzag*, pois as nanofitas têm atraído grande interesse na construção de dispositivos de grafeno.

PRODUÇÃO CIENTÍFICA DECORRENTE DA DISSERTAÇÃO

CONGRESSOS

[1] Newton P. Nogueira, Geórgenes Marcelo Gil da Silva, Télió Nobre Leite. *Transmission in triangular barriers in graphene*. In: XXXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2012, Águas de Lindóia. Anais do XXXV Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, 2012.

[2] *Klein tunneling in graphene barriers to linear: numerical solution* (Artigo em preparação a ser submetido)

ANEXO 1

UMA BREVE INTRODUÇÃO À MECÂNICA QUÂNTICA

A Mecânica Quântica é a teoria física que obtém sucesso no estudo dos sistemas físicos cujas dimensões são da ordem da escala atômica, tais como moléculas, átomos, elétrons, prótons e de outras partículas subatômicas. A Mecânica Quântica é um ramo fundamental da física e a base de áreas tais como física de partículas, física da matéria condensada dentre outras. Apresentando vasta aplicação, sendo essencial para a eletrônica, tecnologia da informação, e nanotecnologia.

A teoria quântica fornece descrições precisas para muitos fenômenos previamente inexplicados tais como a radiação de corpo negro e as orbitas estáveis do elétron. A quantidade característica da teoria, que determina quando ela é necessária para a descrição de um fenômeno é a constante de Planck [107]. A Mecânica Quântica recebe esse nome por prever um fenômeno bastante conhecido dos físicos, a quantização. No caso dos estados ligados (por exemplo, um elétron orbitando em torno de um núcleo positivo) ela prevê que a energia (do elétron) deve ser quantizada. Este fenômeno é completamente alheio ao que prevê a teoria clássica [107].

Um grande sucesso da mecânica quântica em seu princípio foi à explicação da dualidade onda-partícula, ou seja, como em níveis subatômicos o que rotulamos de partículas subatômicas apresentam propriedades de ondas e o que era considerado onda tem propriedade corpuscular. Um experimento interessante é o da fenda dupla. Ele demonstra a dualidade onda-partícula, e ressalta diversas características da mecânica quântica. Fótons emitidos de um laser se comportam de maneira diferente dependendo da quantidade de fendas que estão em seu caminho. Quando apenas uma fenda esta presente, a luz observada na tela aparece como um padrão de difração estreito. Entretanto, quando se tem duas fendas o que chega à tela de detecção é uma superposição quântica de duas ondas. O mesmo experimento pode ser realizado atirando elétrons em uma fenda dupla. A natureza ondulatória da luz faz com que as ondas luminosas passando por ambas as fendas se interfiram, criando um padrão de interferência de faixas claras e escuras. Entretanto, na tela, a luz é sempre absorvida em partículas discretas, chamadas fótons. Se reduzirmos a fonte ao ponto de somente

um fóton ser emitido por vez ocorre que ele atravessa ambas as fendas como onda, e cria um padrão de onda que interfere consigo mesmo. Todavia ele é detectado como partícula na tela. Mas onde aparece na tela depende das probabilidades. Ainda que, a localização de onde atinge a tela, depende de um processo completamente aleatório, o resultado final esta de acordo com as probabilidades que podem ser calculadas [107].

Assim é impossível falar sobre mecânica quântica sem fazer alguns apontamentos matemáticos. Isso porque muitos fenômenos quânticos difíceis de imaginar concretamente podem ser representados com um pouco de abstração matemática. No formalismo da mecânica quântica, o estado de um sistema num dado instante de tempo pode ser representado por uma função complexa das posições ou dos momentos de cada partícula que compõe o sistema. Ou seja, sua função de onda. Este objeto matemático abstrato permite o calculo da probabilidade de se obter resultados específicos em um experimento concreto, como por exemplo, permite que se calcule a probabilidade de encontrar um elétron em uma região particular em torno do núcleo. É importante ter em mente que enquanto na mecânica clássica, o movimento de uma partícula é descrito com uma função *escalar* do tempo, na mecânica quântica grandezas como posição, momento linear, momento angular (de um modo geral de qualquer grandeza física observável) são representadas por operadores [108].

Em 1925 Erwin Shrodinger propôs à Equação de Schrödinger que descreve a evolução temporal de um estado quântico de um sistema físico. Essa equação tem grande importância para mecânica quântica. A função de onda guarda as probabilidades para os resultados de todas as possíveis medições aplicadas ao sistema. Em geral, o estado de um sistema varia no tempo e a função de onda é uma função do tempo. A equação de Shrodinger fornece uma descrição quantitativa da taxa de variação da função de onda, e é dada por [107]:

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1)$$

Na equação acima i é o numero imaginário, \hbar e a constante de Planck dividida por 2π e o Hamiltoniano \hat{H} é um operador atuando na função de onda. O Hamiltoniano representa a energia total do sistema, e assim como a força na segunda Lei de Newton, ele não é definido pela equação e deve ser determinado pelas propriedades físicas do sistema. No caso não relativístico o hamiltoniano assume a forma [107]:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x, t) \quad (2)$$

Que aplicado à equação (1) fica:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(x, t)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (3)$$

Onde ∇^2 é o laplaciano e m é a massa da partícula. Note que na equação (3) a derivada em relação às coordenadas espaciais é de segunda ordem enquanto que em relação ao tempo é de primeira ordem [108].

Entretanto para o caso de partículas relativísticas sem massa, objeto de nosso estudo, é necessário tratar variáveis temporais e espaciais de forma mais simétrica [103], deste modo o operador Hamiltoniano \hat{H} neste caso é dado por:

$$\hat{H} = -i\hbar c\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} + V(x, t) \quad (4)$$

Onde c é a velocidade da luz no vácuo e $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli. Aplicando a equação (4) na equação (1) temos:

$$-i\hbar c\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\psi + V(x, t)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (5)$$

Que é conhecida como equação de Dirac para partículas relativísticas sem massa. Esta expressão é semelhante á que descreve os portadores de carga em grafeno monocamada [1]:

$$-i\hbar v_F\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\psi + V(x, t)\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \quad (6)$$

Esta equação é do tipo de Dirac, com $v_F \approx 10^6 m/s$, velocidade de Fermi, assumindo aqui o papel da velocidade da luz.

ANEXO 2

CÁLCULO NUMÉRICO PARA UMA BARREIRA RETANGULAR

Segue abaixo o programa, em *Fortran*, utilizado para calcular a probabilidade de transmissão em função do ângulo de incidência e da largura da barreira para o caso de uma barreira de potencial retangular:

```

USE MSIMSLMD
! USE MSIMSLMS !PARA A ROTINA DE DATA
*****

COMPLEX*16
MINC(2,2),MOUT(2,2),MB1(2,2),MB2(2,2),M1(2,2),M2(2,2),
*MT(2,2),IC,M11,refm,refn,refd,ref
REAL*8 hbar,Lambda,D,Vf,Energy,V0,Kf,phi,theta,pi,fnm,kx,ky,
*fqx,qx,S,SL,T2T(2000),T2A(2000),dt1,dt2,phid,T2K(2000),phimin,
*phimax,deltaphi
*****

T
OPEN(UNIT=5,FILE='entrada.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=6,FILE='saida.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=8,FILE='auxiliar.out',STATUS='UNKNOWN')
*
read(5,*)
read(5,*)Lambda,D,Vf,Energy,V0
read(5,*)
read(5,*)phimin,phimax,deltaphi
*
WRITE(*,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"
WRITE(8,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"
*

```

```

WRITE(8,*)"DADOS"
WRITE(8,*)"Lambda(nm) D(nm) Vf (m/s) Energy(meV) V0(meV)"
WRITE(8,91) Lambda,D,Vf,Energy,V0
WRITE(8,*)"phi_min(degree) phi_max(degree) delta_phi"
WRITE(8,92)phimin,phimax,deltaphi
91  FORMAT(1X,F5.2,4X,F7.2,2X,E7.2,3X,F7.2,9X,F7.2)
92  FORMAT(1X,F7.2,10X,F7.2,10X,F7.2)
T
*
IC=(0.D0,1.D0)
pi=3.141592654
hbar=6.58211915d-16
fnm=1.d-9 !nm to m
Lambda=fnm*Lambda
D=fnm*D
write(*,*)D
write(*,*)Lambda
*
S=1.
SL=1.
IF(Energy.LT.0.) S=-1.
IF(Energy.LT.V0) SL=-1.
write(*,"(2F5.2)")S,SL
Energy=Energy*(0.001) !Energy in eV
V0=V0*(0.001) !V0 in eV
*T*
nphi=int((phimax-phimin)/deltaphi)
write(*,*) 'nphi= ',nphi
*  do i=1,181
do i=1,nphi+1
Kf=2*pi/Lambda
phid=phimin+(i-1)*deltaphi
*  phid=i-91 !phi in degrees

```

```

phi=phid*pi/180    !phi in rad
Kx=Kf*cos(phi)
Ky=Kf*sin(phi)
*
fqx=(Energy-V0)/(hbar*Vf)
qx=dsqrt(fqx*fqx-ky*ky)
theta=datan(ky/qx)
*   write(6,"(F7.2,2X,E10.4)") phi,theta
*
*
*   Zerando as matrizes
DO IN=1,2
DO JN=1,2
MINC(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
MOUT(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
MB1(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
MB2(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
END DO
END DO
*
* Definindo as MATRIZES
MINC(1,1)=1.
MINC(1,2)=1.
MINC(2,1)=S*CDEXP(IC*phi)
MINC(2,2)=-S*CDEXP(-IC*phi)
*
MOUT(1,1)=CDEXP(IC*Kx*D)
MOUT(1,2)=1.
MOUT(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*D)*CDEXP(IC*phi)
MOUT(2,2)=1.
*
MB1(1,1)=1.
MB1(1,2)=1.

```

```

MB1(2,1)=SL*CDEXP(IC*theta)
MB1(2,2)=-SL*CDEXP(-IC*theta)
*
MB2(1,1)=CDEXP(IC*qx*D)
MB2(1,2)=CDEXP(-IC*qx*D)
MB2(2,1)=SL*CDEXP(IC*qx*D)*CDEXP(IC*theta)
MB2(2,2)=-SL*CDEXP(-IC*qx*D)*CDEXP(-IC*theta)
*
* multiplicando as matrizes
*
CALL PROMATAINVB(MINC,MB1,M1)
CALL PROMATAINVB(MB2,MOU,M2)
*
CALL PROMATAB(M1,M2,MT)
*
fim do teste
M11=MT(1,1)
T2T(I)=1./(M11*DCONJG(M11))
*
*   APROXIMACAO PARA V0 MUITO MAIOR QUE ENERGY
dt1=COS(PHI)*COS(PHI)
dt2=1. - COS(qx*D)*COS(qx*D)*SIN(PHI)*SIN(PHI)
T2A(I)=dt1/dt2
*
*   Pela Eq. 3 da Nature do Katsnelson (2006)
refm=2.*IC*CDEXP(IC*phi)*sin(qx*D)
refn=sin(phi)-s*sl*sin(theta)
refd=CDEXP(-IC*qx*D)*cos(theta+phi)+CDEXP(IC*qx*D)*cos(phi-theta)
ref=refm*refn/(s*sl*refd -2.*IC*sin(qx*D))
T2K(I)=1.-ref*DCONJG(ref)
*
write(6,102)PHID,T2T(I)
*   write(6,101)PHID,T2T(I),T2K(I),T2A(I)

```

```

*101  format(F8.4,2X,F10.5,2X,F10.5,2X,F10.5)
102  format(F8.4,2X,F10.5)

***

end do
*T*
END
*****

SUBROUTINE PROMATAINVB(A,B,AINV)
COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AINV(2,2),DETA,DIVDET
COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22
*
A11=A(1,1)
A12=A(1,2)
A21=A(2,1)
A22=A(2,2)
B11=B(1,1)
B12=B(1,2)
B21=B(2,1)
B22=B(2,2)
*
DETA=A11*A22-A21*A12
DIVDET=1/DETA
*
AINV(1,1)=DIVDET*(A22*B11-A12*B21)
AINV(1,2)=DIVDET*(A22*B12-A12*B22)
AINV(2,1)=DIVDET*(A11*B21-A21*B11)
AINV(2,2)=DIVDET*(A11*B22-A21*B12)
*
RETURN
END
*****

SUBROUTINE PROMATAB(A,B,AB)

```

```
COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AB(2,2)
COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22
*
A11=A(1,1)
A12=A(1,2)
A21=A(2,1)
A22=A(2,2)
B11=B(1,1)
B12=B(1,2)
B21=B(2,1)
B22=B(2,2)
*
AB(1,1)=A11*B11+A12*B21
AB(1,2)=A11*B12+A12*B22
AB(2,1)=A21*B11+A22*B21
AB(2,2)=A21*B12+A22*B22
*
RETURN
END
```

ANEXO 3**CÁLCULO NUMÉRICO PARA DUAS BARREIRAS RETANGULARES**

Segue abaixo o programa, em *Fortran*, utilizado para calcular a probabilidade de transmissão em função do ângulo de incidência e da largura da barreira para o caso de duas barreiras de potenciais retangulares:

```

USE MSIMSLMD

! USE MSIMSLMS !PARA A ROTINA DE DATA

****

COMPLEX*16 M1X0(2,2),M2X0(2,2),M1X1(2,2),M2X1(2,2),M1X2(2,2),
*M2X2(2,2),M1X3(2,2),M2X3(2,2),PX0(2,2),PX1(2,2),PX2(2,2),PX3(2,2),
*PX01(2,2),PX23(2,2),MT(2,2),IC,M11

REAL *8 hbar,Lambda,D,LW,Vf,Energy,V0,Kf,phi,theta,pi,fnm,kx,ky,
*fqx,qx,S,SL,T2T(2000),phid,phimin,phimax,deltaphi,X0,X1,X2,X3

*****

T

OPEN(UNIT=5,FILE='entrada2b.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=6,FILE='saida2b.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=8,FILE='auxiliar2b.out',STATUS='UNKNOWN')

*

read(5,*)

```

```

read(5,*)Lambda,D,LW,Vf,Energy,V0

read(5,*)

read(5,*)phimin,phimax,deltaphi

*

WRITE(*,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"

WRITE(8,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"

*

WRITE(8,*)"DADOS"

WRITE(8,*)"Lambda(nm) D(nm) L(nm) Vf (m/s) Energy(meV)

    V0(meV)"

WRITE(8,91) Lambda,D,LW,Vf,Energy,V0

WRITE(8,*)"phi_min(degree)  phi_max(degree)  delta_phi"

WRITE(8,92)phimin,phimax,deltaphi

91    FORMAT(1X,F5.2,4X,F7.2,4X,F7.2,2X,E7.2,3X,F7.2,9X,F7.2)

92    FORMAT(1X,F7.2,10X,F7.2,10X,F7.2)

T

*

IC=(0.D0,1.D0)

pi=3.141592654

hbar=6.58211915d-16

fnm=1.d-9 !nm to m

Lambda=fnm*Lambda

```

```

D=fnm*D

LW=fnm*LW

write(*,*)D

write(*,*)Lambda

write(*,*)LW

*

S=1.

SL=1.

IF(Energy.LT.0.) S=-1.

IF(Energy.LT.V0) SL=-1.

write(*,"(2F5.2)")S,SL

Energy=Energy*(0.001) !Energy in eV

V0=V0*(0.001) !V0 in eV

*T*

nphi=int((phimax-phimin)/deltaphi)

write(*,*) 'nphi= ',nphi

*      do i=1,181

do i=1,nphi+1

Kf=2*pi/Lambda

phid=phimin+(i-1)*deltaphi

*      phid=i-91 !phi in degrees

phi=phid*pi/180    !phi in rad

```

$$K_x = K_f \cdot \cos(\phi)$$

$$K_y = K_f \cdot \sin(\phi)$$

*

$$f_{qx} = (\text{Energy} - V_0) / (\hbar \cdot v_f)$$

$$q_x = \sqrt{f_{qx}^2 - k_y^2}$$

$$\theta = \arctan(k_y / q_x)$$

* write(6, "(F7.2, 2X, E10.4)") phi, theta

*

*

*

$$X_0 = 0.$$

$$X_1 = D$$

$$\text{IF}(\text{LW}. \text{eq}. 0.) X_1 = 2. * D$$

$$X_2 = D + \text{LW}$$

$$X_3 = X_2 + D$$

* Definindo as MATRIZES

$$M_{1X_0}(1, 1) = \text{CDEXP}(iC \cdot K_x \cdot x_0)$$

$$M_{1X_0}(1, 2) = \text{CDEXP}(-iC \cdot K_x \cdot x_0)$$

$$M_{1X_0}(2, 1) = S \cdot \text{CDEXP}(iC \cdot K_x \cdot x_0) \cdot \text{CDEXP}(iC \cdot \phi)$$

$$M_{1X_0}(2, 2) = -S \cdot \text{CDEXP}(-iC \cdot K_x \cdot x_0) \cdot \text{CDEXP}(-iC \cdot \phi)$$

*

$$M_{2X_0}(1, 1) = \text{CDEXP}(iC \cdot q_x \cdot x_0)$$

$$M2X0(1,2)=CDEXP(-IC*qx*x0)$$

$$M2X0(2,1)=SL*CDEXP(IC*qx*x0)*CDEXP(IC*theta)$$

$$M2X0(2,2)=-SL*CDEXP(-IC*qx*x0)*CDEXP(-IC*theta)$$

*

$$M1X1(1,1)=CDEXP(IC*Kx*x1)$$

$$M1X1(1,2)=CDEXP(-IC*Kx*x1)$$

$$M1X1(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*x1)*CDEXP(IC*phi)$$

$$M1X1(2,2)=-S*CDEXP(-IC*Kx*x1)*CDEXP(-IC*phi)$$

*

$$M2X1(1,1)=CDEXP(IC*qx*x1)$$

$$M2X1(1,2)=CDEXP(-IC*qx*x1)$$

$$M2X1(2,1)=SL*CDEXP(IC*qx*x1)*CDEXP(IC*theta)$$

$$M2X1(2,2)=-SL*CDEXP(-IC*qx*x1)*CDEXP(-IC*theta)$$

*

$$M1X2(1,1)=CDEXP(IC*Kx*x2)$$

$$M1X2(1,2)=CDEXP(-IC*Kx*x2)$$

$$M1X2(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*x2)*CDEXP(IC*phi)$$

$$M1X2(2,2)=-S*CDEXP(-IC*Kx*x2)*CDEXP(-IC*phi)$$

*

$$M2X2(1,1)=CDEXP(IC*qx*x2)$$

$$M2X2(1,2)=CDEXP(-IC*qx*x2)$$

$$M2X2(2,1)=SL*CDEXP(IC*qx*x2)*CDEXP(IC*theta)$$

$M2X2(2,2) = -SL * CDEXP(-IC * qx * x2) * CDEXP(-IC * theta)$

*

$M1X3(1,1) = CDEXP(IC * Kx * x3)$

$M1X3(1,2) = CDEXP(-IC * Kx * x3)$

$M1X3(2,1) = S * CDEXP(IC * Kx * x3) * CDEXP(IC * phi)$

$M1X3(2,2) = -S * CDEXP(-IC * Kx * x3) * CDEXP(-IC * phi)$

*

$M2X3(1,1) = CDEXP(IC * qx * x3)$

$M2X3(1,2) = CDEXP(-IC * qx * x3)$

$M2X3(2,1) = SL * CDEXP(IC * qx * x3) * CDEXP(IC * theta)$

$M2X3(2,2) = -SL * CDEXP(-IC * qx * x3) * CDEXP(-IC * theta)$

**

CALL PROMATAINVB(M1X0,M2X0,PX0)

CALL PROMATAINVB(M2X1,M1X1,PX1)

CALL PROMATAINVB(M1X2,M2X2,PX2)

CALL PROMATAINVB(M2X3,M1X3,PX3)

*

IF(LW.eq.0.) then

CALL PROMATAB(PX0,PX1,MT)

else

CALL PROMATAB(PX0,PX1,PX01)

CALL PROMATAB(PX2,PX3,PX23)

```

CALL PROMATAB(PX01,PX23,MT)

end if

*

M11=MT(1,1)

T2T(I)=1./(M11*DCONJG(M11))

*

*

write(6,102)PHID,T2T(I)

102  format(F8.4,2X,F10.5)

***

end do

*T*

END

*****

SUBROUTINE PROMATAINVB(A,B,AINVB)

COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AINVB(2,2),DETA,DIVDET

COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22

*

A11=A(1,1)

A12=A(1,2)

A21=A(2,1)

A22=A(2,2)

```

B11=B(1,1)

B12=B(1,2)

B21=B(2,1)

B22=B(2,2)

*

DETA=A11*A22-A21*A12

DIVDET=1/DETA

*

AINVB(1,1)=DIVDET*(A22*B11-A12*B21)

AINVB(1,2)=DIVDET*(A22*B12-A12*B22)

AINVB(2,1)=DIVDET*(A11*B21-A21*B11)

AINVB(2,2)=DIVDET*(A11*B22-A21*B12)

*

RETURN

END

SUBROUTINE PROMATAB(A,B,AB)

COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AB(2,2)

COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22

*

A11=A(1,1)

A12=A(1,2)

A21=A(2,1)

A22=A(2,2)

B11=B(1,1)

B12=B(1,2)

B21=B(2,1)

B22=B(2,2)

*

AB(1,1)=A11*B11+A12*B21

AB(1,2)=A11*B12+A12*B22

AB(2,1)=A21*B11+A22*B21

AB(2,2)=A21*B12+A22*B22

*

RETURN

END

ANEXO 4

CÁLCULO NUMÉRICO PARA UMA BARREIRA LINEAR

Segue abaixo o Programa, em *Fortran*, utilizado para calcular a probabilidade de transmissão em função do ângulo de incidência e da largura da barreira para o caso de uma barreira de potencial linear:

```

USE MSIMSLMD
! USE MSIMSLMS !PARA A ROTINA DE DATA
*****

COMPLEX*16 MINC(2,2),MOUT(2,2),MB1(2,2),MB2(2,2),M1(2,2),MP(2,2),
*MT(2,2),IC,M11,refm,refn,refd,ref,PAUX(2,2),M12(2,2)
REAL *8 hbar,Lambda,D,Vf,Energy,V0,Kf,phi,theta,pi,fnm,kx,ky,
*fqx,qx,S,SL,T2T(2000),T2A(2000),dt1,dt2,phid,T2K(2000),phimin,
*phimax,deltaphi,x0,d0,d1,xn,detb,VINI,VFIN,DEV0
*****

T
OPEN(UNIT=5,FILE='entradanb.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=6,FILE='saidanb.dat',STATUS='UNKNOWN')
OPEN(UNIT=8,FILE='auxiliarnb.out',STATUS='UNKNOWN')
*
read(5,*)
read(5,*)NBAR,Lambda,D,Vf,Energy,VINI,VFIN
read(5,*)
read(5,*)phimin,phimax,deltaphi
*
WRITE(*,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"
WRITE(8,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"
*
WRITE(8,*)"DADOS"

```

Newton Pionório Nogueira

```

*      WRITE(8,89)
WRITE(8,*)"Lambda,D,Vf,Energy,VINI,VFIN"
WRITE(8,91) Lambda,D,Vf,Energy,VINI,VFIN
WRITE(8,*)"phi_min(degree)  phi_max(degree)  delta_phi"
WRITE(8,92)phimin,phimax,deltaphi
*89   FORMAT("Lambda(nm)",1X,"D(nm)",4X,"Vf (m/s)",3X,"Energy(meV)",3X,
*      *"VINI(meV)",3X,VFIN(meV)")
91   FORMAT(1X,F5.2,4X,F7.2,2X,E7.2,3X,F7.2,9X,F7.2,9X,F7.2)
92   FORMAT(1X,F7.2,10X,F7.2,10X,F7.2)
T
*
IC=(0.D0,1.D0)
pi=3.141592654
hbar=6.58211915d-16
fnm=1.d-9 !nm to m
Lambda=fnm*Lambda
D=fnm*D
Energy=Energy*(0.001) !Energy in eV
VINI=VINI*(0.001) !VINI in eV
VFIN=VFIN*(0.001) !VFIN in eV
*
DEV0=(VFIN-VINI)/(NBAR-1)
DEVX=D/NBAR
S=1.
IF(Energy.LT.0.) S=-1.
*
*T*
nphi=int((phimax-phimin)/deltaphi)
write(*,*) 'nphi= ',nphi
*      do i=1,181
do i=1,nphi+1
Kf=2*pi/Lambda
phid=phimin+(i-1)*deltaphi

```

```

*      phid=i-91 !phi in degrees
phi=phid*pi/180      !phi in rad
Kx=Kf*cos(phi)
Ky=Kf*sin(phi)
*
*      write(6,"(F7.2,2X,E10.4)" phi,theta
*
*
*      Zerando as matrizes
DO IN=1,2
DO JN=1,2
MINC(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
MOUT(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
MB1(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
MB2(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
MP(IN,JN)=(0.D0,0.D0)
END DO
END DO
*
x0=0.0
xn=D
* Definindo as MATRIZES
MINC(1,1)=CDEXP(IC*Kx*x0)
MINC(1,2)=CDEXP(-IC*Kx*x0)
MINC(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*x0)*CDEXP(IC*phi)
MINC(2,2)=-S*CDEXP(-IC*Kx*x0)*CDEXP(-IC*phi)
*
MOUT(1,1)=CDEXP(IC*Kx*xn)
MOUT(1,2)=1.
MOUT(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*xn)*CDEXP(IC*phi)
MOUT(2,2)=1.
* Iniciando produtório de matriz
PAUX(1,1)=(1.D0,0.D0)

```

```

PAUX(1,2)=(0.D0,0.D0)
PAUX(2,1)=(0.D0,0.D0)
PAUX(2,2)=(1.D0,0.D0)
*
DO J=1,NBAR
V0=VINI+(J-1)*DEV0
D0=X0+(J-1)*DEVX
D1=X0+J*DEVX
*   write(*,*)"V0  d0  d1"
*   write(*,"(3E10.4)") V0,d0,d1
fqx=(Energy-V0)/(hbar*Vf)
qx=dsqrt(fqx*fqx-ky*ky)
theta=datan(ky/qx)
SL=1.
IF(Energy.LT.V0) SL=-1.
*
MB1(1,1)=CDEXP(IC*qx*d0)
MB1(1,2)=CDEXP(-IC*qx*d0)
MB1(2,1)=SL*CDEXP(IC*qx*d0)*CDEXP(IC*theta)
MB1(2,2)=-SL*CDEXP(-IC*qx*d0)*CDEXP(-IC*theta)
*
detb=-2.*SL*cos(theta)
MB2(1,1)=-SL*CDEXP(-IC*qx*d1)*CDEXP(-IC*theta)/detb
MB2(1,2)=-CDEXP(-IC*qx*d1)/detb
MB2(2,1)=-SL*CDEXP(IC*qx*d1)*CDEXP(IC*theta)/detb
MB2(2,2)=CDEXP(IC*qx*d1)/detb
*
CALL PROMATAB(MB1,MB2,M12)
CALL PROMATAB(PAUX,M12,MP)
PAUX(1,1)=MP(1,1)
PAUX(1,2)=MP(1,2)
PAUX(2,1)=MP(2,1)
PAUX(2,2)=MP(2,2)

```

```

END DO
*
* multiplicando as matrizes
*
CALL PROMATAINVB(MINC,MP,M1)
CALL PROMATAB(M1,MOUT,MT)
*
fim do teste
M11=MT(1,1)
T2T(I)=1./(M11*DCONJG(M11))
*
*   APROXIMACAO PARA V0 MUITO MAIOR QUE ENERGY
dt1=COS(PHI)*COS(PHI)
dt2=1. - COS(qx*D)*COS(qx*D)*SIN(PHI)*SIN(PHI)
T2A(I)=dt1/dt2
*
*   Pela Eq. 3 da Nature do Katsnelson (2006)
refm=2.*IC*CDEXP(IC*phi)*sin(qx*D)
refn=sin(phi)-s*sl*sin(theta)
refd=CDEXP(-IC*qx*D)*cos(theta+phi)+CDEXP(IC*qx*D)*cos(phi-theta)
ref=refm*refn/(s*sl*refd -2.*IC*sin(qx*D))
T2K(I)=1.-ref*DCONJG(ref)
*
write(6,102)PHID,T2T(I)
*   write(6,101)PHID,T2T(I),T2K(I),T2A(I)
*101  format(F8.4,2X,F10.5,2X,F10.5,2X,F10.5)
102  format(F8.4,2X,F10.5)
***
end do
*T*
END
*****
SUBROUTINE PROMATAINVB(A,B,AINVB)

```

```

COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AINVB(2,2),DETA,DIVDET
COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22

```

```

*
```

```

A11=A(1,1)

```

```

A12=A(1,2)

```

```

A21=A(2,1)

```

```

A22=A(2,2)

```

```

B11=B(1,1)

```

```

B12=B(1,2)

```

```

B21=B(2,1)

```

```

B22=B(2,2)

```

```

*
```

```

DETA=A11*A22-A21*A12

```

```

DIVDET=1/DETA

```

```

*
```

```

AINVB(1,1)=DIVDET*(A22*B11-A12*B21)

```

```

AINVB(1,2)=DIVDET*(A22*B12-A12*B22)

```

```

AINVB(2,1)=DIVDET*(A11*B21-A21*B11)

```

```

AINVB(2,2)=DIVDET*(A11*B22-A21*B12)

```

```

*
```

```

RETURN

```

```

END

```

```

*****

```

```

SUBROUTINE PROMATAB(A,B,AB)

```

```

COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AB(2,2)

```

```

COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22

```

```

*
```

```

A11=A(1,1)

```

```

A12=A(1,2)

```

```

A21=A(2,1)

```

```

A22=A(2,2)

```

```

B11=B(1,1)

```

```

B12=B(1,2)

```

B21=B(2,1)

B22=B(2,2)

*

AB(1,1)=A11*B11+A12*B21

AB(1,2)=A11*B12+A12*B22

AB(2,1)=A21*B11+A22*B21

AB(2,2)=A21*B12+A22*B22

*

RETURN

END

ANEXO 5**CÁLCULO NUMÉRICO PARA DUAS BARREIRAS LINEARES**

Segue abaixo o programa, em *Fortran*, utilizado para calcular a probabilidade de transmissão em função do ângulo de incidência e da largura da barreira para o caso de duas barreiras de potenciais lineares:

```

USE MSIMSLMD

! USE MSIMSLMS !PARA A ROTINA DE DATA

*****

COMPLEX*16 M1X0(2,2),M1X1(2,2),M1X2(2,2),M1X3(2,2),MP1(2,2),
*MP2(2,2),PX0(2,2),PX1(2,2),PX2(2,2),PX3(2,2),PAUX(2,2),M12(2,2),
*MB1(2,2),MB2(2,2),MT(2,2),IC,M11

REAL *8 hbar,Lambda,D,LW,Vf,Energy,V0,Kf,phi,theta,pi,fnm,kx,ky,
*fqx,qx,S,SL,T2T(2000),phid,phimin,phimax,deltaphi,X0,X1,X2,X3

real*8 VINI,VFIN,DEV0,DEVX,D0,D1

*****

T

OPEN(UNIT=5,FILE='entrada2nb.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=6,FILE='saida2nb.dat',STATUS='UNKNOWN')

OPEN(UNIT=8,FILE='auxiliar2nb.out',STATUS='UNKNOWN')

*
```

```

read(5,*)

read(5,*)nbar,Lambda,D,LW,Vf,Energy,VINI,VFIN

read(5,*)

read(5,*)phimin,phimax,deltaphi

*

WRITE(*,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"

WRITE(*,*)"NBAR = ",NBAR

WRITE(8,*)"TUNELAMENTO KLEIN EM GRAFENO"

*

WRITE(8,*)"DADOS"

WRITE(8,*)"NBAR = ",NBAR

WRITE(8,*)"Lambda(nm) D(nm)   L(nm)  Vf(m/s)"

WRITE(8,91) Lambda,D,LW,Vf

WRITE(8,*) "Energy(meV)   VINI(meV)   VFIN(meV)"

WRITE(8,92) Energy,VINI,VFIN

WRITE(8,*)"phi_min(degree)  phi_max(degree)  delta_phi"

WRITE(8,92)phimin,phimax,deltaphi

91   FORMAT(1X,F5.2,4X,F7.2,4X,F7.2,2X,E7.2)

92   FORMAT(1X,F7.2,10X,F7.2,10X,F7.2)

T

*

IC=(0.D0,1.D0)

```

```

pi=3.141592654

hbar=6.58211915d-16

fnm=1.d-9 !nm to m

Lambda=fnm*Lambda

D=fnm*D

LW=fnm*LW

write(*,*)D

write(*,*)Lambda

write(*,*)LW

*

S=1.

IF(Energy.LT.0.) S=-1.

Energy=Energy*(0.001) !Energy in eV

VINI=VINI*(0.001) !VINI in eV

VFIN=VFIN*(0.001) !VFIN in eV

*

DEV0=(VFIN-VINI)/(NBAR-1)

DEVX=D/NBAR

*

X0=0.

X1=D

X2=D+LW

```

```

X3=X2+D

WRITE(*,*) "  V0      D0      D1"

WRITE(8,*) "  V0      D0      D1"

DO J=1,NBAR

V0=VINI+(J-1)*DEV0

D0=X0+(J-1)*DEVX

D1=X0+J*DEVX

WRITE(*,93) V0,D0,D1

WRITE(8,93) V0,D0,D1

END DO

93   FORMAT(1X,F10.4,4X,E10.4,4X,E10.4)

*T*

nphi=int((phimax-phimin)/deltaphi)

write(*,*) 'nphi= ',nphi

*   do i=1,181

do i=1,nphi+1

Kf=2*pi/Lambda

phid=phimin+(i-1)*deltaphi

*   phid=i-91 !phi in degrees

phi=phid*pi/180    !phi in rad

Kx=Kf*cos(phi)

Ky=Kf*sin(phi)

```

```

*

fqx=(Energy-V0)/(hbar*Vf)

qx=dsqrt(fqx*fqx-ky*ky)

theta=atan(ky/qx)

*   write(6,"(F7.2,2X,E10.4)") phi,theta

*

*

*

* Definindo as MATRIZES

M1X0(1,1)=CDEXP(IC*Kx*x0)

M1X0(1,2)=CDEXP(-IC*Kx*x0)

M1X0(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*x0)*CDEXP(IC*phi)

M1X0(2,2)=-S*CDEXP(-IC*Kx*x0)*CDEXP(-IC*phi)

*

M1X1(1,1)=CDEXP(IC*Kx*x1)

M1X1(1,2)=CDEXP(-IC*Kx*x1)

M1X1(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*x1)*CDEXP(IC*phi)

M1X1(2,2)=-S*CDEXP(-IC*Kx*x1)*CDEXP(-IC*phi)

*

M1X2(1,1)=CDEXP(IC*Kx*x2)

M1X2(1,2)=CDEXP(-IC*Kx*x2)

M1X2(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*x2)*CDEXP(IC*phi)

```

$M1X2(2,2)=-S*CDEXP(-IC*Kx*x2)*CDEXP(-IC*phi)$

*

$M1X3(1,1)=CDEXP(IC*Kx*x3)$

$M1X3(1,2)=CDEXP(-IC*Kx*x3)$

$M1X3(2,1)=S*CDEXP(IC*Kx*x3)*CDEXP(IC*phi)$

$M1X3(2,2)=-S*CDEXP(-IC*Kx*x3)*CDEXP(-IC*phi)$

*

* Iniciando produtório de matriz 1

$PAUX(1,1)=(1.D0,0.D0)$

$PAUX(1,2)=(0.D0,0.D0)$

$PAUX(2,1)=(0.D0,0.D0)$

$PAUX(2,2)=(1.D0,0.D0)$

*

DO J=1,NBAR

$V0=VINI+(J-1)*DEV0$

$D0=X0+(J-1)*DEVX$

$D1=X0+J*DEVX$

$fqx=(Energy-V0)/(hbar*Vf)$

$qx=dsqrt(fqx*fqx-ky*ky)$

$theta=datan(ky/qx)$

SL=1.

IF(Energy.LT.V0) SL=-1.

*

$$MB1(1,1)=CDEXP(IC*qx*d0)$$

$$MB1(1,2)=CDEXP(-IC*qx*d0)$$

$$MB1(2,1)=SL*CDEXP(IC*qx*d0)*CDEXP(IC*theta)$$

$$MB1(2,2)=-SL*CDEXP(-IC*qx*d0)*CDEXP(-IC*theta)$$

*

$$detb=-2.*SL*cos(theta)$$

$$MB2(1,1)=-SL*CDEXP(-IC*qx*d1)*CDEXP(-IC*theta)/detb$$

$$MB2(1,2)=-CDEXP(-IC*qx*d1)/detb$$

$$MB2(2,1)=-SL*CDEXP(IC*qx*d1)*CDEXP(IC*theta)/detb$$

$$MB2(2,2)=CDEXP(IC*qx*d1)/detb$$

*

CALL PROMATAB(MB1,MB2,M12)

CALL PROMATAB(PAUX,M12,MP1)

$$PAUX(1,1)=MP1(1,1)$$

$$PAUX(1,2)=MP1(1,2)$$

$$PAUX(2,1)=MP1(2,1)$$

$$PAUX(2,2)=MP1(2,2)$$

END DO

*

* Iniciando produtório de matriz 2

*

PAUX(1,1)=(1.D0,0.D0)

PAUX(1,2)=(0.D0,0.D0)

PAUX(2,1)=(0.D0,0.D0)

PAUX(2,2)=(1.D0,0.D0)

DO J=1,NBAR

V0=VINI+(J-1)*DEV0

D0=X2+(J-1)*DEVX

D1=X2+J*DEVX

fqx=(Energy-V0)/(hbar*Vf)

qx=dsqrt(fqx*fx-ky*ky)

theta=datan(ky/qx)

SL=1.

IF(Energy.LT.V0) SL=-1.

*

MB1(1,1)=CDEXP(IC*qx*d0)

MB1(1,2)=CDEXP(-IC*qx*d0)

MB1(2,1)=SL*CDEXP(IC*qx*d0)*CDEXP(IC*theta)

MB1(2,2)=-SL*CDEXP(-IC*qx*d0)*CDEXP(-IC*theta)

*

detb=-2.*SL*cos(theta)

MB2(1,1)=-SL*CDEXP(-IC*qx*d1)*CDEXP(-IC*theta)/detb

MB2(1,2)=-CDEXP(-IC*qx*d1)/detb

```
MB2(2,1)=-SL*CDEXP(IC*qx*d1)*CDEXP(IC*theta)/detb
```

```
MB2(2,2)=CDEXP(IC*qx*d1)/detb
```

```
*
```

```
CALL PROMATAB(MB1,MB2,M12)
```

```
CALL PROMATAB(PAUX,M12,MP2)
```

```
PAUX(1,1)=MP2(1,1)
```

```
PAUX(1,2)=MP2(1,2)
```

```
PAUX(2,1)=MP2(2,1)
```

```
PAUX(2,2)=MP2(2,2)
```

```
END DO
```

```
**
```

```
CALL PROMATAINVB(M1X0,MP1,PX0)
```

```
CALL PROMATAINVB(M1X2,MP2,PX2)
```

```
*
```

```
CALL PROMATAB(PX0,M1X1,PX1)
```

```
CALL PROMATAB(PX2,M1X3,PX3)
```

```
CALL PROMATAB(PX1,PX3,MT)
```

```
*
```

```
M11=MT(1,1)
```

```
T2T(I)=1./(M11*DCONJG(M11))
```

```
*
```

```
*
```

```
write(6,102)PHID,T2T(I)

102  format(F8.4,2X,F10.5)

***

end do

*T*

END

*****

SUBROUTINE PROMATAINVB(A,B,AINVB)

COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AINVB(2,2),DETA,DIVDET

COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22

*

A11=A(1,1)

A12=A(1,2)

A21=A(2,1)

A22=A(2,2)

B11=B(1,1)

B12=B(1,2)

B21=B(2,1)

B22=B(2,2)

*

DETA=A11*A22-A21*A12

DIVDET=1/DETA
```

*

AINVB(1,1)=DIVDET*(A22*B11-A12*B21)

AINVB(1,2)=DIVDET*(A22*B12-A12*B22)

AINVB(2,1)=DIVDET*(A11*B21-A21*B11)

AINVB(2,2)=DIVDET*(A11*B22-A21*B12)

*

RETURN

END

SUBROUTINE PROMATAB(A,B,AB)

COMPLEX*16 A(2,2),B(2,2),AB(2,2)

COMPLEX*16 A11,A12,A21,A22,B11,B12,B21,B22

*

A11=A(1,1)

A12=A(1,2)

A21=A(2,1)

A22=A(2,2)

B11=B(1,1)

B12=B(1,2)

B21=B(2,1)

B22=B(2,2)

*

$$AB(1,1)=A11*B11+A12*B21$$

$$AB(1,2)=A11*B12+A12*B22$$

$$AB(2,1)=A21*B11+A22*B21$$

$$AB(2,2)=A21*B12+A22*B22$$

*

RETURN

END

REFERÊNCIAS

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov. Two dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature* **438**, p197-200, 2005.
- [2] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H.L. Stormer, and P. Kim, Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature* **438**, 201-204.2005.
- [3] Sumio Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354, p 56-58 .1991.
- [4] T. Ando, Theory of electronic states and transport in carbon nanotubes. *J. Phys.Soc. Jpn.* 74, p 777-817, 2005.
- [5] R. Saito, G. Dresselhaus and M. Dresselhaus, Physical Properties of Carbon Nanotubes. *Imperial College Press*, p 125-135, 1999.
- [6] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl and R. E. Smalley. C60: Buckminster fullerene. *Nature* 318, p 162-163, 1985.
- [7] Harold Kroto. Symmetry, space, stars and C60. *Rev. Mod. Phys.* 79, p 703-725, 1997.
- [8] P. R. Wallace, The Band Theory of Graphite. *Phys. Rev* 71, p 622-634, 1947.
- [9] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva and A. A. Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science* 306. p 666-669, 2004.
- [10] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim and A. K. Geim. Room-Temperature Quantum Hall Effect in Graphene. *Science* 315, p 1379-1385, 2007.
- [11] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.* 81, p 109-162, 2009.
- [12] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Mater.* 6 , p 183-191, 2007.
- [13] A. K. Geim , Graphene: status and prospects. *Science* 324, p 1530-1534, 2009.
- [14] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *PNAS* 102, p 10451-10453,2005.
- [15] Franz Schwierz. Graphene transistors. *Nature Nanotechnology* 5, p 487-496, 2010.
- [16] S. Russo, J. B. Oostinga, D. Wehenkel, H. B. Heersche, S. S. Sobhani, L. M. K. Vandersypen and A. F. Morpurgo. Observation of Aharonov-Bohm conductance oscillations in a graphene ring. *Phys. Rev. B* 77, 085413, 2008.
- [17] L. A. Ponomarenko, F. Schedin, M. I. Katsnelson, R. Yang, E. W. Hill, K. S.

- Novolevov, and A. K. Geim. Chaotic Dirac Billiard in Graphene Quantum Dots. *Science* 320, p 356-358, 2008.
- [18] S. Schnez, F. Molitor, C. Stampfer, J. Guttinger, I. Shorubalko, T. Ihn, and K. Ensslin. Observation of excited states in a graphene quantum dot. *Appl. Phys. Lett.* 94, 012107, 2009.
- [19] F. Molitor, A. Jacobsen, C. Stampfer, J. Guttinger, T. Ihn, and K. Ensslin. Transport gap in side-gated graphene constrictions. *Phys. Rev. B* 79. p 7323–7363, 2009.
- [20] Xiaolin Li, Xinran Wang, Li Zhang, Sangwon Lee and Hongjie Dai. Chemically Derived, Ultrasooth Graphene Nanoribbon Semiconductors. *Science* 319, p 336-342, 2009.
- [21] Liying Jiao, Li Zhang, Xinran Wang, Georgi Diankov and Hongjie Dai. Narrow graphene nanoribbons from carbon nanotubes. *Nature* 458, p 877-880, 2009.
- [22] K. Nakada, M. Fujita, G. Dresselhaus and M. S. Dresselhaus. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size efect and edge shape dependence. *Phys. Rev. B* 54, p 710-712,1996.
- [23] M. Fujita, K. Wakabayashi, K. Nakada and K. Kasukabe. Peculiar Localized State at Zigzag Graphite Edge. *J. Phys. Soc. Jpn.* 65, p 1920-1925,1996.
- [24] BALUCH, Andrew S., WILSON, Bryan, MILLER, John C. Nonparabolic Band Structure Effect on Carrier Transport in Semiconducting Graphene Nanoribbons. *ICSE 2010 special session presentation*, 2010.
- [25] I.N. Kholmanov, E. Cavaliere, C. Cepek, L. Gavioli. Catalytic chemical vapor deposition of methane on graphite to produce graphene structures. *Carbon* 48. p 1619-1625, 2010.
- [26] DONG, Liang-Xu, CHEN Qiang. Properties, synthesis, and characterization of graphene. *Frontiers of Materials Science in China*, p 1-7, 2010.
- [27] Yu-Ming Lin, Keith A. Jenkins, Alberto Valdes-Garcia, Joshua P. Small, Damon B. Farmer and Phaedon Avouris. Operation of Graphene Transistors at Gigahertz Frequencies. *Nano Lett.* 9. p 422–426, 2009.
- [28] Lei Liao; Yung-Chen Lin; Mingqiang Bao; Rui Cheng; Jingwei Bai; Yuan Liu; Yongquan Qu; Kang L. Wang; Yu Huang; Xiangfeng Duan. High-speed graphene transistors with a self-aligned nanowire gate. *Nature* 467, p 305-308, 2010.
- [29] Y.M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H.-Y. Chiu, A. Grill and Ph. Avouris. 100-GHz Transistors from Wafer-Scale Epitaxial Graphene. *Science* 5, p 662-665, 2010.
- [30] X. Li, X. Wang, Li Zhang, S. Lee and H. Dai. Chemically Derived, Ultrasooth Graphene Nanoribbon Semiconductors. *Science* 319, p 1229-1232, 2008.

- [31] Schedin F, Geim AK, Morozov SV, Hill EW, Blake P, Katsnelson MI, Novoselov KS. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene. *Nature Materials* 6, p 652-655, 2007.
- [32] STANKOVICH, S. Graphene-based composite materials. *Nature* 442, p 282-286, 2006.
- [33] Meryl D. Stoller, Sungjin Park, Yanwu Zhu, Jinho An, and Rodney S. Ruoff. Graphene-Based Ultracapacitors, *Nanoletters*, p 3498–3502, 2008.
- [34] D.C. Elias, R.R. Nair, T.M.G. Mohiuddin, S.V. Morozov, P. Blake, M.P. Halsall, A.C. Ferrari, D.W. Boukhvalov, M.I. Katsnelson, A.K. Geim, and K.S. Novoselov. Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: evidence for graphane. *Science* **323**, p 610-613, 2009.
- [35] Rahul R. Nair, Wencai Ren, Rashid Jalil, Ibtisam Riaz, Vasyl G. Kravets, Liam Britnell, Peter Blake, Fredrik Schedin, Alexander S. Mayorov, Shengjun Yuan, Mikhail I. Katsnelson, Hui-Ming Cheng, Wlodek Strupinski, Lyubov G. Bulusheva, Alexander V. Okotrub, Irina V. Grigorieva, Alexander N. Grigorenko, Kostya S. Novoselov and Andre K. Geim. *Fluorographene: A Two-Dimensional Counterpart of Teflon*. *Small*, p 2877-2884, 2009.
- [36] Jian-Hao Chen, Liang Li, W. G. Cullen, E. D. Williams, and M. S. Fuhrer. Tunable Kondo Effect in Graphene with Defects, *Nature Physics* 7, p 535-538, 2011.
- [37] A. H. Castro Neto. Selected Topics in Graphene physics. *Condensed Matter arXiv:1004.3682v1*, 2010.
- [38] <http://www.learnerstv.com/animation/chemistry/hybrid.swf>
- [39] Grib, A. A., Mamayev, S. G. & Mostepanenko, V. M. *Vacuum Effects in Strong Fields*, Friedmann, St-Petersburg, 1994.
- [40] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, Solid State Physics. *Saunders College Publishing*. 1976.
- [41] A. Castro Neto, F. Guinea, N. Peres, K. Novoselov, and A. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys* **81**, p 109-155, 2009.
- [42] M. Katsnelson, and K. Novoselov, Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics. *Solid State Comm.* **143**, p 3-13, 2007.
- [43] Vonsovsky, S. V. & Katsnelson, M. I. Quantum Solid State Physics. *Nature Physics* **2**, p 620 – 625, 2006.
- [44]. Slonczewski, J. C. & Weiss, P. R. Band structure of graphite. *Phys. Rev* **109**, p272–279, 1958.
- [45]. Semenoff, G.W. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly. *Phys. Rev. Lett.* 53, p 2449–2452, 1984.

- [46] Haldane, F. D. M. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the parity anomaly. *Phys. Rev. Lett.* **61**, p2015–2018, 1988.
- [47] Page, D. N. Hawking . Radiation and black hole thermodynamics. *New J. Phys.* **7**, p203 -218, 2005.
- [48] J. Martin, N. Akerman, G. Ulbricht, T. Lohmann, J.H. Smet, K. von Klitzing, and A. Yacoby. Observation of electron–hole puddles in graphene using a scanning single-electron transistor. *Nat. Phys.* **4**, p 144-148, 2008.
- [49] S. Datta. Electronic transport in mesoscopic systems. *Cambridge University Press, Cambridge e New York*, 1995.
- [50] C.W.J. Beenakker and H. van Houten. Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures. *Solid State Phys* **44**, p 1-228, 1991.
- [51] K.S. Novoselov, E. McCann, S.V. Morozov, V.I. Fal’ko, M.I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, and A.K. Geim. Unconventional quantum Hall effect and Berry’s phase of 2π in bilayer graphene. *Nat. Phys.* **2**, p 177-180, 2006.
- [52] Y. Zhang, Z. Jiang, J. Small, M. Purewal, Y.-W. Tan, M. Fazlollahi, J. Chudow, J.Jaszczak, H. Stormer, and P. Kim. Landau-Level Splitting in Graphene in High Magnetic Fields. *Phys. Rev. Lett.* **96**, p 13-96, 2006.
- [53] Z. Jiang, Y. Zhang, H. Stormer, and P. Kim, Quantum Hall States near the Charge-Neutral Dirac Point in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **99**, p 106-110, 2007.
- [54] Y. Zhao, P. Cadden-Zimansky, Z. Jiang, and P. Kim. Symmetry Breaking in the Zero- Energy Landau Level in Bilayer Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 066801, 1010.
- [55] F. Molitor, J. Güttinger, C. Stampfer, D. Graf, T. Ihn, and K. Ensslin, Local gating of a graphene Hall bar by graphene side gates. *Phys. Rev. B* **76**, 245426, 2007.
- [56] Y.W. Tan, Y. Zhang, K. Bolotin, Y. Zhao, S. Adam, E. Hwang, S. Das Sarma, H. Stormer, and P. Kim. Measurement of Scattering Rate and Minimum Conductivity in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **99**, p 24-95, 2007.
- [57] J.-H. Chen, C. Jang, S. Adam, M.S. Fuhrer, E.D. Williams, and M. Ishigami, Charge dimpurity scattering in graphene. *Nat. Phys.* **4**, p 377-385, 2008.
- [58] W. Zhu, V. Perebeinos, M. Freitag, and P. Avouris. Carrier scattering, mobilities, and electrostatic potential in monolayer, bilayer, and trilayer graphene. *Phys. Rev. B* **80**, 235402, 2009.
- [59] M. Monteverde, C. Ojeda-Aristizabal, R. Weil, K. Bennaceur, M. Ferrier, S. Guéron, C. Glattli, H. Bouchiat, J.N. Fuchs, and D.L. Maslov. Transport and Elastic Scattering

Times as Probes of the Nature of Impurity Scattering in Single-Layer and Bilayer Graphene. *Phys. Rev.Lett.* 104, 126801, 2010.

[60] S.V. Morozov, K.S. Novoselov, M.I. Katsnelson, F. Schedin, D.C. Elias, J.A. Jaszczak, and A.K. Geim. Giant intrinsic carrier mobilities in graphene and its bilayer. *Phys. Rev. Lett.* 100, 16602, 2008.

[61] J.H. Chen, C. Jang, S. Xiao, M. Ishigami, and M.S. Fuhrer. Intrinsic and extrinsic performance limits of graphene devices on SiO₂. *Nature Nano.* **3**, p 206-209, 2008.

[62] J.-H. Chen, C. Jang, M. Ishigami, S. Xiao, W.G. Cullen, E.D. Williams, and M.S. Fuhrer, Diffusive charge transport in graphene on SiO₂. *Solid State Comm.* **149**, 1080, 2009.

[63] V. Geringer, M. Liebmann, T. Echtermeyer, S. Runte, M. Schmidt, R. Rückamp, M. Lemme, and M. Morgenstern, Intrinsic and extrinsic corrugation of monolayer graphene deposited on SiO₂. *Phys. Rev. Lett.* 102, 076102, 2009.

[64] Y. Shi, X. Dong, P. Chen, J. Wang, and L.-J. Li, Effective doping of single-layer graphene from underlying SiO₂ substrates. *Phys. Rev. B* **79**, 1154-1158, 2009.

[65] B. Huard, N. Stander, J. Sulpizio, and D. Goldhaber-Gordon, Evidence of the role of contacts on the observed electron-hole asymmetry in graphene. *Phys. Rev. B* **78**, p 1214-1218, 2008.

[66] E.J.H. Lee, K. Balasubramanian, R.T. Weitz, M. Burghard, and K. Kern. Contact and edge effects in graphene devices. *Nature Nano.* **3**, p 486-490, 2008.

[67] P. Blake, R. Yang, S.V. Morozov, F. Schedin, L.A. Ponomarenko, A.A. Zhukov, R.R. Nair, I.V. Grigorieva, K.S. Novoselov, and A.K. Geim. Influence of metal contacts and charge inhomogeneity on transport properties of graphene near the neutrality point. *Solid State Comm.* **149**, p 1068-1071, 2009.

[68] R.S. Sundaram, C. Gomez-Navarro, E.J.H. Lee, M. Burghard, and K. Kern, Noninvasive metal contacts in chemically derived graphene devices. *Appl. Phys. Lett.* **95**, p 2235-2242, 2009.

[69] A. Nourbakhsh, M. Cantoro, A. Hadipour, T. Vosch, M.H. van der Veen, M.M. Heyns, B.F. Sels, and S. De Gendt. Modified, semiconducting graphene in contact with a metal: Characterization of the Schottky diode. *Appl. Phys. Lett.* 97, p 1631-1635, 2010.

[70] S. Cho and M. Fuhrer, Charge transport and inhomogeneity near the minimum conductivity point in graphene. *Phys. Rev. B* **77**, 081402, 2008.

[71] Y. Zhang, V.W. Brar, C. Girit, A. Zettl, and M.F. Crommie. Origin of spatial charge inhomogeneity in graphene. *Nature Phys.* **5**, p 722-726, 2009.

- [72] C.H. Lui, L. Liu, K.F. Mak, G.W. Flynn, and T.F. Heinz, Ultraflat graphene. *Nature* **462**, p 339-341, 2009.
- [73] C.R. Dean, A.F. Young, I. Meric, C. Lee, L. Wang, S. Sorgenfrei, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, K.L. Shepard, and J. Hone. Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics. *Nature Nano.* **5**, p 722-726, 2010.
- [74] L. Ponomarenko, R. Yang, T. Mohiuddin, M. Katsnelson, K. Novoselov, S. Morozov, A. Zhukov, F. Schedin, E. Hill, and A. Geim. Effect of a High-k Environment on Charge Carrier Mobility in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **102**, p 2066-2070, 2009.
- [75] F. Chen, J. Xia, J. and N. Tao. Ionic screening of charged-impurity scattering in graphene. *Nano Lett.* **9**, p 1621-1625, 2009.
- [76] F. Chen, J. Xia, D.K. Ferry, and N. Tao. Dielectric screening enhanced performance in graphene FET. *Nano Lett.* **9**, p 2571-2574, 2009.
- [77] K. Bolotin, K. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, P. Kim, and H. Stormer. Ultrahigh electron mobility in suspended graphene. *Solid State Comm.* **146**, p 351-355, 2008.
- [78] K. Bolotin, K. Sikes, J. Hone, H. Stormer, and P. Kim, Temperature-Dependent Transport in Suspended Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 096802, 2008.
- [79] X. Du, I. Skachko, A. Barker, and E.Y. Andrei. Approaching ballistic transport in suspended graphene. *Nature Nano.* **3**, p 491-495, 2008.
- [80] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican, and E.Y. Andrei. Fractional quantum Hall effect and insulating phase of Dirac electrons in graphene. *Nature* **462**, p 192-195, 2009.
- [81] K.I. Bolotin, F. Ghahari, M.D. Shulman, H.L. Stormer, and P. Kim. Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene. *Nature* **462**, p 196-200, 2009.
- [82] F. Ghahari, Y. Zhao, P. Cadden-Zimansky, K. Bolotin, and P. Kim. Measurement of the $\nu = 1/3$ fractional quantum Hall energy gap in suspended graphene. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 046801, 2011.
- [83] B. Huard, J. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, and D. Goldhaber-Gordon. Transport Measurements Across a Tunable Potential Barrier in Graphene. *Phys. Rev. Lett.* **98**, p 2368-2372, 2007.
- [84] P. Jarillo-herrero, B. Özyilmaz, P. Jarillo-Herrero, D. Efetov, and P. Kim, Electronic transport in locally gated graphene nanoconstrictions. *Appl. Phys. Lett.* **91**, p 1921-1928, 2007.
- [85] J. Williams, L. DiCarlo, and C. Marcus. Quantum Hall effect in a gate-controlled pn junction of graphene. *Science* **317**, p 638-641, 2007.

- [86] B. Özyilmaz, P. Jarillo-Herrero, D. Efetov, D. Abanin, L. Levitov, and P. Kim. Electronic Transport and Quantum Hall Effect in Bipolar Graphene p–n–p Junctions. *Phys. Rev. Lett.* **99**, p 1668-1672, 2007.
- [87] J. Velasco, G. Liu, L. Jing, P. Kratz, H. Zhang, W. Bao, M. Bockrath, and C.N. Lau. Probing charging and localization in the quantum Hall regime by graphene p–n–p junctions. *Phys. Rev. B* **81**, p 1214-1221, 2010.
- [88] A.F. Young and P. Kim. Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions. *Nature Phys.* **5**, p 222-226, 2009.
- [89] S. Dröscher, P. Roulleau, F. Molitor, P. Studerus, C. Stampfer, K. Ensslin, and T. Ihn. Quantum capacitance and density of states of graphene. *Appl. Phys. Lett.* **96**, p 1521-1525, 2010.
- [90] N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon, Evidence for Klein Tunneling in Graphene p–n Junctions. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 026807, 2009.
- [91] Z. Chen, Y. Lin, M. Rooks, and P. Avouris. Graphene nanoribbon electronics. *Physica E* **40**, p 228-232, 2007.
- [92] M. Han, B. Özyilmaz, M.Y. Han, Y. Zhang, and P. Kim. Energy Band-Gap Engineering of Graphene Nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.* **98**, p 2068-2073, 2007.
- [93] Y.M. Lin, V. Perebeinos, Z. Chen, and P. Avouris. Electrical observation of subband formation in graphene nanoribbons. *Phys. Rev. B* **78**, p1614-1623, 2008.
- [94] C. Stampfer, J. Güttinger, S. Hellmüller, F. Molitor, K. Ensslin, and T. Ihn. Energy Gaps in Etched Graphene Nanoribbons. *Phys. Rev. Lett.* **102**, 056403, 2009.
- [95] X. Wang, Y. Ouyang, X. Li, H. Wang, J. Guo, and H. Dai, Room-Temperature All-Semiconducting Sub-10-nm Graphene Nanoribbon Field-Effect Transistors. *Phys. Rev. Lett.* **100**, p 2068-2071, 2008.
- [96] K.L. Wang. Low-noise submicron channel graphene nanoribbons. *Appl. Phys. Lett.* **97**, 073107, 2010.
- [97] D.V. Kosynkin, A.L. Higginbotham, A. Sinitskii, J.R. Lomeda, A. Dimiev, B.K. Price, and J.M. Tour. Longitudinal unzipping of carbon nanotubes to form graphene nanoribbons. *Nature* **458**, p 872-878, 2009.
- [98] T.O. Wehling, K.S. Novoselov, S.V. Morozov, E.E. Vdovin, M.I. Katsnelson, A.K. Geim, and A.I. Lichtenstein. Molecular doping of graphene. *Nano Lett.* **8**, p 173-177, 2008.
- [99] D.B. Farmer, R. Golizadeh-Mojarad, V. Perebeinos, Y.-M. Lin, G.S. Tulevski, J.C. Tsang, and P. Avouris. Chemical doping and electron-hole conduction asymmetry in graphene devices. *Nano Lett.* **9**, p 388-392, 2009.

- [100] D. Wang, X. Liu, L. He, Y. Yin, D. Wu, and J. Shi. Manipulating Graphene Mobility and Charge Neutral Point with Ligand-Bound Nanoparticles as Charge Reservoir. *Nano Lett.* **10**, p 4989-4993, 2010.
- [101] Y. Ren, S. Chen, W. Cai, Y. Zhu, C. Zhu, and R.S. Ruoff. Controlling the electrical transport properties of graphene by in situ metal deposition. *Appl. Phys. Lett.* **97**, p 5310-5317, 2010.
- [102] S. Ryu, M.Y. Han, J. Maultzsch, T.F. Heinz, P. Kim, M.L. Steigerwald, and L.E. Brus. Reversible basal plane hydrogenation of graphene. *Nano Lett.* **8**, p 4597-4602, 2008.
- [103] Greiner W. *Relativistic quantum mechanics*, Third Edition, Springer, 1987
- [104] Su, R. K., Siu, G. C. & Chou, X. Barrier penetration and Klein paradox. *J. Phys. A* **26**, p1001-1005, 1993.
- [105] Krekora, P., Su, Q. & Grobe, R. Klein paradox in spatial and temporal resolution. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 040406, 2004.
- [106]. Greiner,W., Mueller, B. & Rafelski, J. *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*,Springer, Third Edition , 1985.
- [107] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*, Third Edition, Springer, 1995.
- [108] A.R.F de Toledo Piza. *Mecânica Quântica*, Primeira Edição, Edusp, 2002.