



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Influência de um pseudo campo magnético variando
espacialmente em um gás de elétrons bidimensional
no grafeno**

Lázaro Genilson da Silva Leite

CAMPINA GRANDE

- Fevereiro 2015 -

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIDADE ACADÊMICA DE FÍSICA
COORDENAÇÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Influência de um pseudo campo magnético variando
espacialmente em um gás de elétrons bidimensional
no grafeno**

Lázaro Genilson da Silva Leite

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Campina Grande, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Física.

Área de Concentração: Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Cleverson Filgueiras.

Coorientador: Prof. Dr. Diego Alejandro Cogollo

Aponte

CAMPINA GRANDE

- Fevereiro 2015 -

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

- L533i Leite, Lázaro Genilson da Silva.
Influência de um pseudo campo magnético variando espacialmente em um gás de elétrons bidimensional no grafeno / Lázaro Genilson da Silva Leite. – Campina Grande, 2015.
50 f. : il. color.
- Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2015.
- "Orientação: Prof. Dr. Cleverson Filgueiras, Prof. Dr. Diego Alejandro Cogollo Aponte".
Referências.
1. Grafeno. 2. Níveis de Landau. 3. Pseudo Campo Magnético. 4. Condutividade Hall. I. Filgueiras, Cleverson. II. Aponte, Diego Alejandro Cogollo. III. Título.

CDU 537(043)

LÁZARO GENILSON DA SILVA LEITE

**INFLUÊNCIA DE UM PSEUDO CAMPO MAGNÉTICO VARIANDO
SPACIALMENTE EM UM GÁS DE ELÉTRONS BIDIMENSIONAL NO GRAFENO**

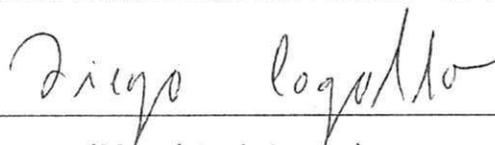
Dissertação aprovada em 27/02/2015

BANCA EXAMINADORA



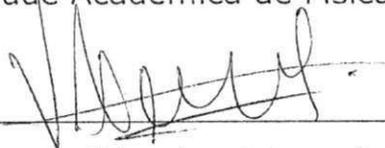
(Presidente)

Prof. Dr. Cleverton Filgueiras
Unidade Acadêmica de Física - UFCG



(Membro interno)

Prof. Dr. Diego Alejandro Cogollo Aponte
Unidade Acadêmica de Física - UFCG



(Membro interno)

Prof. Dr. Victor Ignacio Afonso
Unidade Acadêmica de Física - UFCG



(Membro externo)

Prof. Dr. Sérgio André Fontes Azevedo
Departamento de Física - UFPB

INFLUÊNCIA DE UM PSEUDO CAMPO MAGNÉTICO
VARIANDO ESPACIALMENTE EM UM GÁS DE ELÉTRONS
BIDIMENSIONAL NO GRAFENO

LÁZARO GENILSON DA SILVA LEITE

Aprovada em _____

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras
Orientador

Prof. Dr. Diego Alejandro Cogollo Aponte
Coorientador

Prof. Dr. Victor Ignacio Afonso
Examinador

Prof. Dr. Sérgio André Fontes Azevedo
Examinador

Dedicado à Lisa e Nathália.

Agradecimentos

De que outra forma começar estes agradecimentos se não pelos meus pais. São meus maiores exemplos. Fizeram o possível e o impossível para estarem ao meu lado me apoiando e incentivando na busca pelos meus sonhos. Ensinaram-me o respeito, a integridade, a honestidade, a importância da família e vários outros valores que fazem de mim uma pessoa melhor. Se a cada dia me torno um homem melhor, eu o faço seguindo seus passos.

Aos meus irmãos e amigos que sempre acreditaram em mim e no meu potencial.

Ao orientador Cleverson Filgueiras e coorientador Diego Alejandro Cogollo Aponte por propiciarem um ambiente único de trabalho no qual sempre me senti acolhido e motivado a fazer o meu melhor. Pelas ideias e discussões.

Há uma força motriz mais poderosa que o vapor,
a eletricidade e a energia atômica: a vontade.

Albert Einstein

Lista de Figuras

2.1	Diferentes estruturas de carbono geradas a partir do grafeno: fulerenos, nanotubos e grafite [1].	3
2.2	(a) Estrutura em favo de mel de uma monocamada de grafeno onde os círculos brancos (pretos) indicam átomos de carbono A (B). Os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são vetores primitivos da rede de Bravais. O losango sombreado é uma célula unitária contendo dois átomos, um A e um B. (b) As cruzes indicam pontos da rede de Bravais hexagonal. A estrutura em favo de mel em (a) compreende a rede de Bravais hexagonal representado em (b), com uma base de dois átomos, um A e um B, em cada ponto da rede [11].	5
2.3	A rede recíproca da monocamada de grafeno onde as cruzes indicam os pontos de rede recíproca, os vetores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 são vetores primitivos da rede recíproca. O hexágono sombreado indica a primeira zona de Brillouin com Γ indicando o centro, e K_- e K_+ mostrando dois pontos não equivalentes [11].	6
2.4	Representação dos orbitais atômicos do carbono.	6
2.5	A estrutura cristalina de uma monocamada de grafeno. Se consideramos o salto a partir de um sítio A (branco), existem três sítios adjacentes B (preto), rotulados por B_1 , B_2 e B_3 , com vetores de posicionamento δ_1 , δ_2 e δ_3 [11].	10
2.6	A estrutura de bandas de uma monocamada de grafeno a baixas energias [11].	12
3.1	Representação esquemática de um experimento Hall.	14
3.2	Gráfico da resistência Hall clássica versus o campo magnético [13].	15

3.3	Esboço do efeito Shubnikov-de Haas. Acima de um valor característico B_c , a resistência longitudinal (cinza) começa a oscilar; a resistência Hall (preto) continua linear em B [13].	20
3.4	Medida experimental evidenciando as características do Efeito Hall Quântico: os platôs na resistência Hall, coincidindo com os zeros na resistência longitudinal [16].	21
3.5	Densidade de estados em função da energia para valores crescentes do campo magnético [16].	22
3.6	Diagrama da densidade de estados alongada de um gás bidimensional de elétrons na presença de um campo magnético.	23
3.7	EHQ para férmions de Dirac sem massa. A condutividade Hall (em vermelho) e a resistência longitudinal (em verde)[19].	24
4.1	Nanobolha de grafeno vista através de um microscópio de efeito de túnel [5].	26
5.1	Este gráfico mostra que a função de onda diverge para $e\lambda < 0$ e para $e\lambda > 1$.	34
5.2	Este gráfico mostra que existe estados ligados para $-1/2 < e\lambda < 3/2$, desde que a probabilidade quântica não divirja neste intervalo.	34
5.3	Gráfico de $g(e\lambda) = (E_0^\lambda)^2/2ev_F^2 B_o $ versus $e\lambda$. A partir do gráfico, podemos ver que o modo zero não existe para certo $e\lambda$ (os valores próprios são imaginários nesta região).	36
5.4	(figura esquerda) gráfico da energia versus o parâmetro $e\lambda$. Como podemos ver, as energias positivas (buracos) diminuem e as energias negativas (elétrons) aumentam no intervalo $1/2 < e\lambda < 3/2$. Eles são inalterados quando $-1/2 < e\lambda < 1/2$. (figura direita) gráfico da energia versus $\sqrt{2 eB_o }$ para $n = 1, 2, 3$. As energias mudam para valores mais baixos para os buracos (curvas superiores) e valores mais elevados para os elétrons (curvas inferiores). O caso $e\lambda = 0$ corresponde aos níveis de Landau relativísticos para um único campo magnético constante ortogonal.	37

5.5	(figura esquerda) gráfico da frequência ciclotron ω_c versus $e\lambda$. ω_c aumenta à medida que aumenta o parâmetro $e\lambda \in (1/2, 3/2)$. Isso não muda quando $-1/2 < e\lambda \leq 1/2$. Este efeito é mais forte para menores valores de n ; (figura direita) gráfico de ω_c versus $v_F\sqrt{2 eB_o }$ para alguns valores de $e\lambda$ e para $n = 1$	38
A.1	Célula unitária do grafeno.	41
B.1	Rede do grafeno.	44

Sumário

Agradecimentos	v
Lista de Figuras	ix
Resumo	xii
Abstract	xiii
1 Introdução	1
2 Grafeno	3
2.1 Histórico	3
2.2 Estrutura Cristalina	4
2.3 Estrutura Eletrônica	6
2.3.1 Modelo Tight-Binding	7
2.3.2 Limite de Baixa Energia: Férmions de Dirac	11
3 Efeito Hall	14
3.1 Efeito Hall Clássico	14
3.2 Efeito Hall Quântico Inteiro	18
3.2.1 Níveis de Landau	18
3.2.2 Efeito Hall Quântico Inteiro em um gás de elétrons bidimensional (GE2D)	20
3.3 Efeito Hall Quântico Inteiro no Grafeno	23
4 Pseudo Campo Magnético no Grafeno	25
4.1 Introdução	25
4.2 Pseudo campo magnético induzido por deformações	26

5 Grafeno na presença de um pseudo campo magnético variável com a posição	29
5.1 Introdução	29
5.2 Níveis de Landau Relativísticos	30
6 Conclusões e perspectivas futuras	39
A Modificando os parâmetros de salto	41
B Relacionando as modificações dos parâmetros de salto com as deformações da rede	44
Referências Bibliográficas	47

Resumo

Esse trabalho é dedicado ao estudo de transporte eletrônico em sistemas quânticos de baixa dimensionalidade. Em particular estudamos o grafeno, que é um material formado por uma única camada de átomos de carbono no estado de hibridização sp^2 , que se apresenta em uma estrutura na forma de hexágonos ou também chamado de “favos de mel”. Os portadores de carga no grafeno se comportam como partículas relativísticas sem massa, obedecendo ao hamiltoniano de Dirac, porém com a velocidade da luz substituída pela velocidade de Fermi ($v_f \approx 10^6 m/s$). A partir deste contexto, introduzimos na equação de Dirac o pseudo campo magnético, sendo este gerado por deformação mecânica, alterando o comprimento das ligações entre átomos e afetando a forma como os elétrons se movem de uns para os outros. Investigamos a influência de um pseudo campo magnético variando espacialmente em um gás de elétrons 2D no grafeno, analisando como este modifica os níveis de Landau relativísticos e qual a influência no efeito Hall Quântico inteiro no grafeno.

Palavras-chave: Grafeno; Níveis de Landau; Pseudo Campo Magnético; Condutividade Hall.

Abstract

This work is devoted to the study of electronic transport in low-dimensional quantum systems. We studied the graphene which is a material formed by a single layer of carbon atoms in hybridization state sp^2 , and shows a structure in the form of hexagons, also called “Honeycomb lattice”. The charge carriers in graphene behave as massless relativistic particles, obeying the Dirac Hamiltonian. However, the light velocity is replaced by Fermi velocity ($v_f \approx 10^6 m/s$). In this context, we introduce the pseudomagnetic field at Dirac equation, where this field is generated by mechanic strain, which changes the length of the bonds between atoms and affects the way electrons move in relation to others. We investigated the influence of a spatially varying pseudo magnetic field in a 2D electron gas in graphene, analyzing how this field modifies the relativistic Landau levels and what is its influence on the Quantum Hall Effect in the whole graphene.

Keywords: Graphene; Landau levels; Pseudomagnetic Field; Hall conductivity.

Capítulo 1

Introdução

O grafeno é um material que vem sendo amplamente investigado tanto do ponto de vista teórico, quanto a partir de observações experimentais. Consiste basicamente de uma rede bidimensional hexagonal, constituída apenas por átomos de carbono nos vértices dos hexágonos que formam a rede. Este material possui características peculiares, que o torna um forte candidato para substituir o silício. Pode-se ter um maior entendimento dos nanotubos e fulerenos a partir do estudo do grafeno.

A descoberta experimental deste é recente [1]. No entanto, ele já era conhecido teoricamente há bastante tempo [2]. O desinteresse em obtê-lo em laboratório se deve, em partes, as teorias que afirmavam a impossibilidade de obter cristais bidimensionais isolados. Com a demonstração experimental de que era possível obtê-lo, o grafeno despertou o interesse da comunidade científica. Hoje, um grande número de cientistas estão com a atenção voltada para este material. Os próximos parágrafos referem-se à organização da dissertação.

No capítulo 2, será apresentada a estrutura cristalina do grafeno para o qual foi feita uma revisão do cálculo do espectro de energia para os orbitais π a partir do modelo “tight binding” (modelo das ligações fortes), onde foi verificada a relação de dispersão linear próximo aos pontos de Dirac. Com base nesta observação foi apresentada a semelhança formal entre as excitações presentes no grafeno e os férmions de Dirac. Assim, o sistema é descrito através da equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com $(2 + 1)$ dimensões.

No capítulo 3, revisamos o Efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI), que desde a sua descoberta, em 1980 [3], até os dias de hoje, tem sido cenário de discussão de muita física nova e interessante. O conhecimento disponível em 1980 sobre mecânica quântica e sobre

a física de sistemas eletrônicos confinados em duas dimensões (gases de elétrons bidimensionais) já era bem consolidado, entretanto a quantização da resistência Hall não havia sido prevista e sua observação experimental foi uma surpresa. O EHQI ocorre quando elétrons confinados em duas dimensões são submetidos a um forte campo magnético perpendicular ao plano do seu movimento e a um campo elétrico transversal ao campo magnético. As órbitas dos elétrons são quantizadas nos chamados níveis de Landau. A relevância da descoberta valeu a Klaus von Klitzing o prêmio Nobel de física do ano de 1985 [4]. Muito se avançou nos últimos anos sobre o entendimento do EHQI, mas o assunto ainda tem gerado novas questões de interesse fundamentais e intenso debate dentro da física da matéria condensada.

O capítulo 4, é destinado ao pseudo campo magnético, que desde a sua descoberta experimental em 2010 [5] tem chamado a atenção de muitos pesquisadores. A equipe de cientistas demonstrou que, quando uma camada de grafeno é deformada de maneira a formar nanobolhas sobre um substrato de platina, os elétrons da mesma comportam-se como se estivessem sujeitos a campos magnéticos de mais de 300 teslas sem lhes ser aplicado nenhum. Este é um efeito físico completamente novo sem qualquer correspondência em qualquer outro sistema de matéria condensada. Isto deve-se ao fato da alteração da tensão mecânica alterar o comprimento das ligações entre átomos, afetando a forma como os elétrons se movem de uns para os outros.

No capítulo 5, foi investigado a influência de um pseudo campo magnético variando espacialmente em gás de elétrons 2D no grafeno, que cai com o inverso do quadrado ($1/x^2$), onde também está presente um campo magnético constante. Resolvemos a equação de Dirac de segunda ordem e mostramos que, entre as possíveis opções para a função de onda, a correta é a que diverge na origem do sistema de coordenadas, compatível com o fato de que a nossa equação diferencial também diverge na origem. Observamos que o estado de energia zero, existente nos níveis de Landau relativísticos apenas quando o campo magnético constante ortogonal está presente, não aparece para um intervalo específico do parâmetro que caracteriza o campo magnético variável.

O capítulo 6, é destinado às conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 2

Grafeno

2.1 Histórico

O grafeno despertou grande interesse na comunidade científica mundial nos últimos anos por diversas razões. Primeiro, partindo da ideia de que vários materiais baseados em carbono tais como o fulereno descoberto por Kroto (1985)[6], os nanotubos descoberto por Iijima (1991)[7], a grafite, são derivados do grafeno, ele pode ser considerado como uma espécie de “bloco” fundamental para a construção de materiais gráfiticos de todas as outras dimensionalidades. Estas configurações podem ser observadas na Figura 2.1.

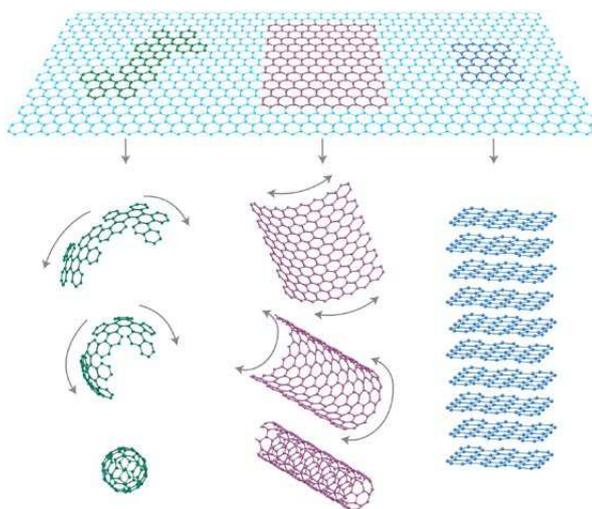


Figura 2.1: Diferentes estruturas de carbono geradas a partir do grafeno: fulerenos, nanotubos e grafite [1].

Adicionalmente, ele apresenta propriedades estruturais (tem a maior resistência mecânica entre os materiais [8]), e de transporte únicas na natureza, podendo ser consi-

derado como o único sistema realmente bidimensional. Desta forma, o grafeno ganhou o status de material de grande potencial para o desenvolvimento de novas aplicações tecnológicas, principalmente como dispositivos eletrônicos.

A estrutura do grafeno foi concebida teoricamente há mais de 60 anos, desde o estudo da grafite por cristalografia de raio-X [2]. Entretanto, foi somente em 2004 que o grupo de cientistas liderado pelo professor Andre K. Geim da *Manchester University*, Inglaterra, desenvolveu um método para isolar planos de grafeno individuais sobre uma superfície de óxido de silício (SiO_2) [9]. Eles tiveram sucesso em isolar o grafeno através de um processo de esfoliação mecânica da grafite com uma espécie de fita adesiva, obtendo desta forma flocos de grafeno com propriedades eletrônicas de alta qualidade. Vários cientistas acreditavam que não seria possível isolar uma camada de grafeno experimentalmente pois seria termodinamicamente instável. Posteriormente essa argumentação foi refutada [10] com base em fortes argumentos experimentais.

O que diferencia o grafeno de todos os materiais descobertos até o momento é que nos planos do grafeno, os elétrons se movimentam a velocidades extremamente altas, próximas da velocidade da luz, e se comportam como se fossem partículas com massa nula, sendo por este motivo chamados de férmions de Dirac sem massa.

2.2 Estrutura Cristalina

O grafeno, uma forma alotrópica do carbono, é uma folha constituída por átomos de carbono em uma estrutura hexagonal planar bidimensional (2D), formando uma rede do tipo favo de mel (*honeycomb lattice*) Figura 2.2(a).

Os átomos do grafeno estão dispostos em uma rede hexagonal, que é usualmente tratada como duas sub-redes A e B superpostas com uma base de dois átomos por célula unitária Figura 2.2(b). Os vetores primitivos da rede de Bravais (ou rede direta) são dados por \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , que podem ser escritos em coordenadas cartesianas como

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}a}{2} \right) \quad \text{e} \quad \mathbf{a}_2 = \left(\frac{a}{2}, -\frac{\sqrt{3}a}{2} \right), \quad (2.1)$$

onde $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = 2.46 \text{ angstrom}$ é a distância entre células unitárias (parâmetro de rede). Note que o parâmetro de rede é diferente do comprimento da ligação carbono-carbono $a_{cc} = a/\sqrt{3} = 1.42 \text{ angstrom}$.

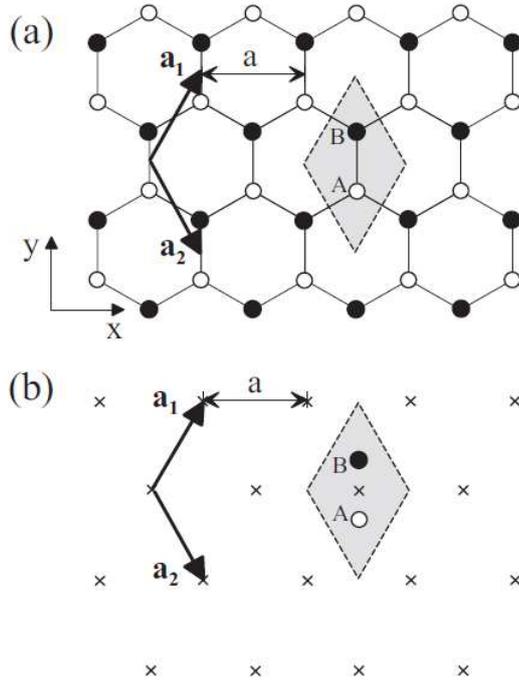


Figura 2.2: (a) Estrutura em favo de mel de uma monocamada de grafeno onde os círculos brancos (pretos) indicam átomos de carbono A (B). Os vetores \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são vetores primitivos da rede de Bravais. O losango sombreado é uma célula unitária contendo dois átomos, um A e um B. (b) As cruces indicam pontos da rede de Bravais hexagonal. A estrutura em favo de mel em (a) compreende a rede de Bravais hexagonal representado em (b), com uma base de dois átomos, um A e um B, em cada ponto da rede [11].

Os vetores primitivos da rede recíproca \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 Figura 2.3, são facilmente obtidos pela relação $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$, e são dados por:

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{a}, \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right) \quad \text{e} \quad \mathbf{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{a}, -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \right). \quad (2.2)$$

A rede recíproca resultante é mostrada na Figura 2.3, que é uma rede de Bravais hexagonal. A primeira zona de Brillouin é hexagonal, como indicado pela região sombreada na Figura 2.3.

No grafeno, os átomos de carbono apresentam hibridização do tipo sp^2 . Ou seja, ocorre devido a interação entre um orbital $2s$ com dois orbitais $2p$, que resulta em três orbitais híbridos do tipo sp^2 , restando apenas o orbital $2p_z$ não hibridizado. Os orbitais híbridos serão os responsáveis pelas ligações do tipo σ . O elétron que se encontra no orbital $2p_z$ irá ligar-se a outros por meio de ligações π . As ligações σ estão no plano do grafeno, já as ligações π são perpendiculares a ele. A Figura 2.4 ilustra esta representação.

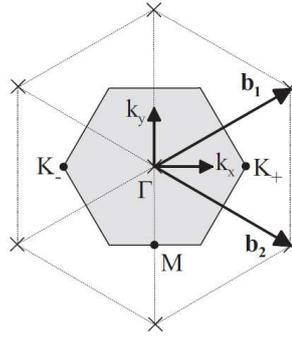


Figura 2.3: A rede recíproca da monocamada de grafeno onde as cruzes indicam os pontos de rede recíproca, os vetores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 são vetores primitivos da rede recíproca. O hexágono sombreado indica a primeira zona de Brillouin com Γ indicando o centro, e K_- e K_+ mostrando dois pontos não equivalentes [11].

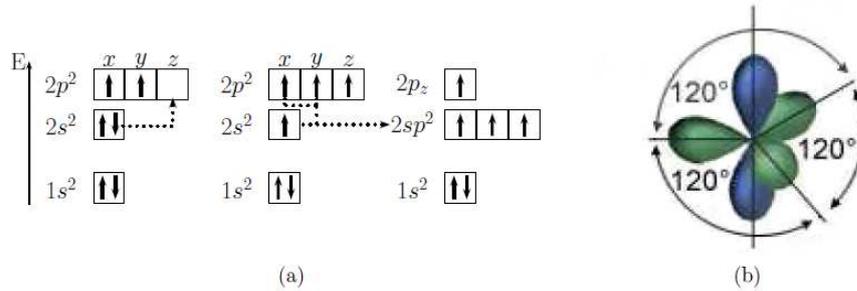


Figura 2.4: Representação dos orbitais atômicos do carbono.

As três ligações covalentes σ são coplanares e separadas por um ângulo de 120° , e são as responsáveis pelas propriedades mecânicas e elásticas do grafeno, enquanto que as ligações π são responsáveis pelas propriedades elétricas do grafeno, pois os elétrons nestes orbitais estão mais fracamente ligados aos átomos e podem assim se locomover na rede cristalina, respeitando, obviamente, o princípio de exclusão de Pauli.

2.3 Estrutura Eletrônica

Para o cálculo de estrutura de bandas, a aproximação mais utilizada é o modelo Tight-Binding. Nesse modelo, considera-se as funções de onda dos elétrons como uma combinação linear de orbitais atômicos. Usando como base as funções de Bloch construídas a partir dos orbitais $2p_z$ e levando-se em conta apenas as interações entre primeiros

vizinhos (dados pelos vetores δ_1 , δ_2 e δ_3) Figura 2.5.

2.3.1 Modelo Tight-Binding

Considerando um cristal arbitrário com invariância translacional e M orbitais atômicos ϕ_m por célula unitária, designado pelos índices $m = 1 \dots M$. Então, o modelo pode ser descrito usando as funções de Bloch $\Phi_m(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, que dependem do vetor posição \mathbf{r} e do vetor de onda \mathbf{k} . Que são dadas por

$$\Phi_m(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{m,i}} \phi_m(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{m,i}), \quad (2.3)$$

sendo N o número de células unitárias, $\mathbf{R}_{m,i}$ denota a posição do orbital m na célula unitária i .

A função de onda eletrônica $\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ é obtida por uma combinação linear das funções de Bloch

$$\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{m=1}^M \psi_{j,m}(\mathbf{k}) \Phi_m(\mathbf{k}, \mathbf{r}), \quad (2.4)$$

onde $\psi_{j,m}$ são coeficientes da expansão. As energias $E_j(\mathbf{k})$ são dadas por

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle}, \quad (2.5)$$

onde H é a Hamiltoniana. Minimizando a energia E_j em relação ao coeficiente da expansão $\psi_{j,m}$, obtemos

$$H\psi_j = E_j S\psi_j, \quad (2.6)$$

onde ψ_j é um vetor coluna $\psi_j^T = (\psi_{j1}, \psi_{j2}, \dots, \psi_{jM})$. Os elementos da matriz de transferência H e sobreposição S são definidos por

$$H_{mm'} = \langle \Phi_m | H | \Phi_{m'} \rangle \quad \text{e} \quad S_{mm'} = \langle \Phi_m | \Phi_{m'} \rangle. \quad (2.7)$$

As bandas de energia E_j podem ser determinadas a partir da equação de auto valor (2.6), resolvendo a equação

$$\det(H - E_j S) = 0. \quad (2.8)$$

Aqui, vamos delimitar a forma de aplicar o modelo tight-binding ao grafeno. Levando em conta um orbital $2p_z$ por sítio atômico, e como existe dois átomos na célula

unitária da monocamada de grafeno, Fig 2.2, o modelo inclui dois orbitais por célula unitária, rotulados como $m = A$ e $m = B$ (o átomo A e o átomo B estão disposto na rede de Bravais hexagonal). Agora vou prosseguir para determinar a matriz de transferência H (descreve o salto dos elétrons entre os diferentes átomos de carbono) e a matriz de sobreposição S (descreve a sobreposição dos orbitais de átomos diferentes).

Substituindo a expressão da função de Bloch (2.3) nas equações (2.7), podemos escrever os elementos das matrizes correspondente à sub-rede A, como

$$H_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{A,j}-\mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,j}) \rangle, \quad (2.9)$$

sendo $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ o vetor de onda no plano do grafeno. A equação (2.9) inclui o somatório duplo sobre todos os sítios A da rede. Se assumirmos que a contribuição dominante surge a partir do mesmo local $j = i$ dentro de cada célula unitária, então

$$H_{AA} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) \rangle. \quad (2.10)$$

O elemento da matriz $\langle \phi_A | H | \phi_A \rangle$ dentro do somatório tem o mesmo valor em cada sítio A, isto é, independente do índice do sítio i . Sendo igual ao parâmetro

$$\langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) \rangle = \varepsilon_{2p}, \quad (2.11)$$

que é igual a energia do orbital $2p_z$. Assim, mantendo só a a contribuição local, temos

$$H_{AA} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_{2p} = \varepsilon_{2p}. \quad (2.12)$$

A sub-rede B tem a mesma estrutura que a sub-rede A, e os átomos são quimicamente idênticos. Com isto temos que

$$H_{BB} = H_{AA} \approx \varepsilon_{2p}. \quad (2.13)$$

O cálculo dos elementos da diagonal da matriz de superposição é realizado de maneira similar ao da matriz de transferência. Neste caso, a superposição de um orbital $2p_z$ no mesmo átomo é igual a unidade.

$$\langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) \rangle = 1. \quad (2.14)$$

Então, assumido a contribuição dominante no mesmo sítio,

$$\begin{aligned}
S_{AA} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{A,j}-\mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,j}) \rangle, \\
&\approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) \rangle, \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1 \\
&= 1.
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Novamente, como a sub-rede B tem a mesma estrutura que a sub-rede A ,

$$S_{BB} = S_{AA} = 1. \tag{2.16}$$

Calculando os elementos fora da diagonal, temos que

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{B,j}-\mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{B,j}) \rangle. \tag{2.17}$$

Ele descreve o salto entre as sub-redes A e B , e contém uma soma sobre todos os sítios A ($i = 1 \dots N$) nas posições $\mathbf{R}_{A,i}$ e todos os sítios B ($j = 1 \dots N$) em $\mathbf{R}_{B,j}$.

A seguir, vamos assumir que a contribuição surge somente do salto entre vizinhos mais próximos. Se concentrarmos em um átomo A , ou seja, se considerarmos um valor fixo do índice i , vemos que ele tem três átomos B vizinhos, Figura 2.5, que vamos rotular com um novo índice l ($l = 1 \dots 3$). Com isso podemos reescrever a equação (2.17) como sendo

$$H_{AB} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{B,l}-\mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{B,l}) \rangle. \tag{2.18}$$

O elemento de matriz entre átomos vizinhos, $\langle \phi_A | H | \phi_B \rangle$, tem o mesmo valor independente dos índices. Na qual será definido um novo parâmetro,

$$t \equiv -\langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{B,l}) \rangle. \tag{2.19}$$

Então escreveremos os elementos fora da diagonal como

$$\begin{aligned}
H_{AB} &\approx -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{B,l}-\mathbf{R}_{A,i})} t, \\
&= -\frac{t}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_{il}} = -tf(\mathbf{k}),
\end{aligned} \tag{2.20}$$

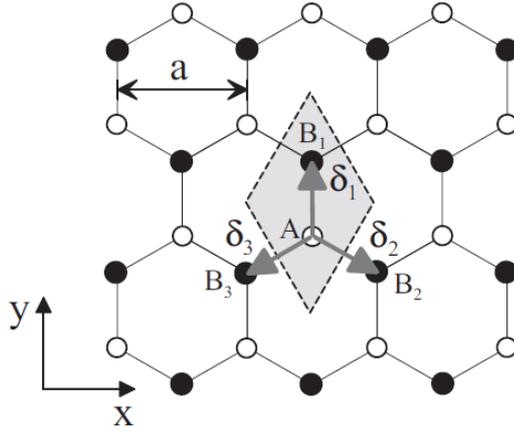


Figura 2.5: A estrutura cristalina de uma monocamada de grafeno. Se consideramos o salto a partir de um sítio A (branco), existem três sítios adjacentes B (preto), rotulados por B_1 , B_2 e B_3 , com vetores de posicionamento δ_1 , δ_2 e δ_3 [11].

com $f(\mathbf{k})$ dado por

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_l}, \quad (2.21)$$

em que o vetor posição do átomo B_l relativo ao átomo A_i é denotado por $\delta_l = \mathbf{R}_{B,l} - \mathbf{R}_{A,i}$, e usamos o fato que o somatório ao longo dos três átomos vizinhos B é o mesmo para todos os átomos A_i .

Para os três átomos B mostrados na Figura 2.5, os vetores são dados por

$$\delta_1 = \left(0, \frac{a}{\sqrt{3}}\right), \quad \delta_2 = \left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}}\right), \quad \delta_3 = \left(-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2\sqrt{3}}\right), \quad (2.22)$$

com $|\delta_1| = |\delta_2| = |\delta_3| = a/\sqrt{3}$.

Substituindo as expressões (2.22) em (2.21), obtemos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_l}, \\ &= e^{ik_y a/\sqrt{3}} + 2e^{-ik_y a/2\sqrt{3}} \cos(k_x a/2). \end{aligned} \quad (2.23)$$

O outro elemento da matriz fora da diagonal principal H_{BA} é o complexo conjugado de H_{AB} , logo temos

$$H_{AB} \approx -tf(\mathbf{k}) \quad \text{e} \quad H_{BA} \approx -tf^*(\mathbf{k}) \quad (2.24)$$

O cálculo dos elementos da matriz de superposição fora da diagonal principal é

obtido de forma semelhante:

$$\begin{aligned}
S_{AB} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{B,j}-\mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{B,j}) \rangle, \\
&\approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{B,j}-\mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{B,l}) \rangle, \\
&= s_0 f(\mathbf{k}),
\end{aligned} \tag{2.25}$$

onde o parâmetro $s_0 \equiv \langle \phi_A(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{A,i}) | \phi_B(\mathbf{r}-\mathbf{R}_{B,l}) \rangle$, e $S_{AB} = s_0 f(\mathbf{k})$ e $S_{BA} = s_0 f^*(\mathbf{k})$.

2.3.2 Limite de Baixa Energia: Férmions de Dirac

Resumindo os resultados da seção precedente, a matriz de transferência H dada pelas equações (2.13) e (2.24) e a matriz de superposição dada pelas equações (2.16) e (2.25), podem se escritas como

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} & -tf(\mathbf{k}) \\ -tf^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_{2p} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad S = \begin{pmatrix} 1 & s_0 f(\mathbf{k}) \\ s_0 f^*(\mathbf{k}) & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.26}$$

A energia E pode ser determinada através da resolução da equação $\det(H - ES) = 0$, (2.8):

$$\det \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} - E & -(t + Es_0)f(\mathbf{k}) \\ -(t + Es_0)f^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_{2p} - E \end{pmatrix} = 0. \tag{2.27}$$

Resolvendo esta equação para a energia, obtemos

$$E_{\pm} = \frac{\varepsilon_{2p} \pm t|f(\mathbf{k})|}{1 \mp s_0|f(\mathbf{k})|}. \tag{2.28}$$

Usando [11] para os valores dos parâmetros $t = 3.033eV$, $s_0 = 0.129$, $\varepsilon_{2p} = 0$. Este último valor ($\varepsilon_{2p} = 0$) significa que o zero de energia (energia de Fermi) é configurado para ser igual à energia do orbital $2p_z$. A estrutura de banda é mostrada na Figura 2.6 na vizinhança da zona de Brillouin.

As bandas são representadas como função das componentes do vetor de onda k_x ao longo da linha $k_y = 0$. A estrutura consiste de duas bandas: A banda de condução (E_+) e a de banda de valência (E_-). Uma característica interessante da estrutura de bandas é que não há *gap* entre elas nos cantos da zona de Brillouin, que são conhecidos como pontos K , e dois deles, são nomeados de pontos de Dirac K_+ e K_- . Perto desses

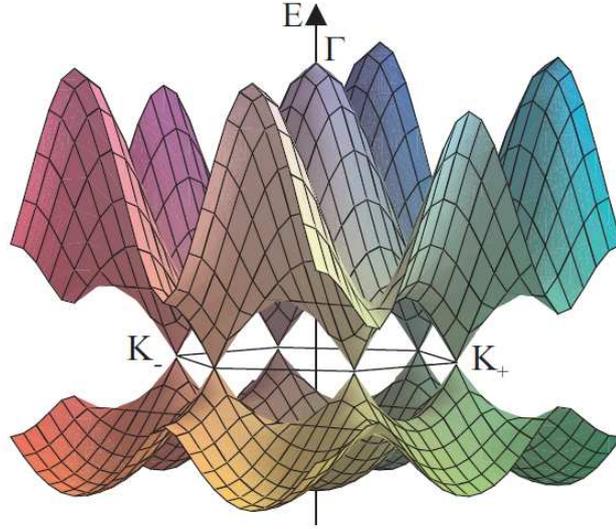


Figura 2.6: A estrutura de bandas de uma monocamada de grafeno a baixas energias [11].

pontos, a dispersão é linear e as propriedades eletrônicas podem ser descritas por uma Hamiltoniana semelhante à de Dirac.

O próximo passo é fazer uma expansão em torno dos pontos K_+ e K_- . Será introduzido um índice $\xi = \pm 1$, que é 1 para K_+ e -1 para K_- . Usando os vetores \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 da rede recíproca Figura 2.3, podemos representar o ponto \mathbf{K}_ξ que é dado por

$$\mathbf{K}_\xi = \xi \left(\frac{4\pi}{3a}, 0 \right). \quad (2.29)$$

Será introduzido um momento \mathbf{p} que é medido a partir do centro do ponto \mathbf{K}_ξ ,

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{K}_\xi. \quad (2.30)$$

Em seguida substituindo na equação (2.21) e expandido até a primeira ordem de \mathbf{p} temos

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= e^{ip_y a/\sqrt{3}\hbar} + 2e^{-ip_y a/2\sqrt{3}\hbar} \cos\left(\frac{2\pi\xi}{3} + \frac{p_x a}{2\hbar}\right), \\ &\approx \left(1 + \frac{ip_y a}{\sqrt{3}\hbar}\right) + 2\left(1 - \frac{ip_y a}{2\sqrt{3}\hbar}\right) \left(-\frac{1}{2} - \frac{\xi\sqrt{3}p_x a}{4\hbar}\right), \\ &\approx -\frac{\sqrt{3}a}{2\hbar} (\xi p_x - ip_y), \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ e $p = |\mathbf{p}| = (p_x^2 + p_y^2)^{1/2}$. Usando esta expressão aproximada para a função $f(\mathbf{k})$, a matriz de transferência (2.26) próximo do ponto K_ξ torna-se

$$H_\xi = v_f \begin{pmatrix} 0 & \xi p_x - ip_y \\ \xi p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

onde foi usado $\varepsilon_{2p} = 0$. Os parâmetros a e t foram combinados em uma velocidade v_f definida como $v_f = \sqrt{3}at/(2\hbar)$ (velocidade de Fermi).

Os valores próprios de energia e auto-estados de H são dados por

$$E_{\pm} = \pm v_f p \quad \text{e} \quad \psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \xi e^{i\xi\varphi} \end{pmatrix} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}, \quad (2.33)$$

onde \pm refere-se às bandas de condução e de valência, respectivamente. Aqui φ é o ângulo polar do momento no plano do grafeno, $\mathbf{p} = (p_x, p_y) = p(\cos \varphi, \sin \varphi)$.

A dispersão de energia linear dada pela equação (2.33) é semelhante á dispersão de energia de partículas relativísticas $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$ para $m_0 = 0$, com a velocidade de Fermi v_f fazendo o papel da velocidade da luz c . Por isso, os portadores de carga no grafeno podem ser vistos como partículas relativísticas, sem massa. Além disso, devido à existência das duas sub-redes equivalentes - dois átomos por célula unitária - os portadores de carga no grafeno são descritos por funções de onda de duas componentes, cada uma delas relacionada à contribuição de uma das sub-redes.

Em consequência do exposto acima, a descrição pode ser realizada através de uma equação como a de Dirac para uma partícula livre com massa nula, dada por

$$-i v_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.34)$$

onde σ são as matrizes de Pauli na representação do grupo especial unitário $SU(2)$. Logo, os portadores de carga no grafeno são chamados de férmions de Dirac sem massa ou de partículas quirais sem massa.

Capítulo 3

Efeito Hall

3.1 Efeito Hall Clássico

O Efeito Hall Clássico foi descoberto por Edwin H. Hall em 1879. Este fenômeno é extremamente importante no estudo da condutividade pois, a partir do coeficiente de Hall podemos determinar o sinal e a densidade dos portadores de carga em diferentes tipos de materiais [12]. A geometria básica de uma medida de Efeito Hall está esquematizada na Figura 3.1. Aplica-se um campo magnético B perpendicularmente à superfície de um material condutor plano. Faz-se passar uma corrente elétrica I ao longo de uma das direções da amostra e são então medidas duas voltagens características. A primeira, V , é medida ao longo da direção de passagem da corrente e fornece a resistência R do material ($R = V/I$). A outra voltagem, V_H , é medida na direção perpendicular à passagem da corrente, como mostra a Figura 3.1 abaixo

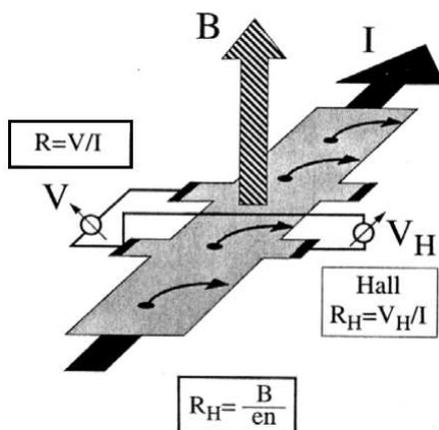


Figura 3.1: Representação esquemática de um experimento Hall.

O efeito que Hall observou em 1879 foi que quando um campo magnético é aplicado perpendicularmente à amostra, surge uma voltagem V_H (voltagem Hall) nesta segunda direção, sendo V_H diretamente proporcional à intensidade do campo magnético. A explicação para este efeito é bem conhecida: na presença do campo magnético, os elétrons que se movem na direção da corrente, sofrem a ação da força de Lorentz, acumulando-se em um dos lados da amostra, gerando assim a voltagem V_H .

Naturalmente, quanto maior B , maior a força de Lorentz, e maior V_H . A razão V_H/I é conhecida como Resistência Hall (R_H), e esta é também diretamente proporcional a B . Além disso, observa-se que V_H é maior quanto menor a densidade eletrônica (n) no material. Isso porque, para que menos elétrons gerem a mesma corrente, precisam ser mais “rápidos”. Uma vez mais rápidos, os elétrons passam a sentir uma força de Lorentz maior, criando uma maior voltagem V_H e portanto uma resistência R_H maior. Assim, a expressão clássica para R_H é:

$$R_H = \frac{B}{ne}, \quad (3.1)$$

onde e representa a carga e n a densidade de carga bidimensional.

Pela equação (3.1), nota-se que a resistência Hall aumenta linearmente com o aumento do campo magnético Figura 3.2.

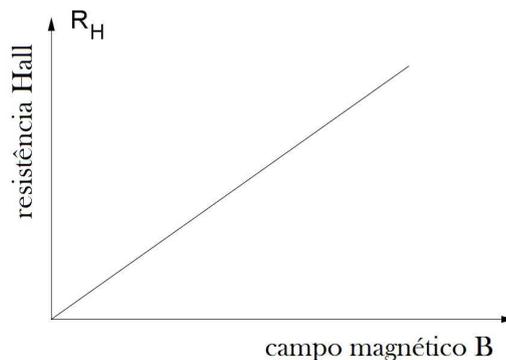


Figura 3.2: Gráfico da resistência Hall clássica versus o campo magnético [13].

Podemos compreender o efeito Hall clássico, utilizando o modelo de Drude que explica as propriedades de transporte de partículas carregadas negativamente em metais [14].

A força que as partículas sentem, ao atravessarem a placa condutora bidimensional, chama-se força de Lorentz. Ela é a força resultante gerada pelo campo magnético e campo

elétrico [15], dada por:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (3.2)$$

Porém, tratando do modelo de Drude, temos que levar em consideração um tempo de relaxação (τ) para o movimento independente das partículas que colidem com os íons da rede, com isso a força é modificada para:

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{p}}{m^*} \times \mathbf{B}\right) - \frac{\mathbf{p}}{\tau}, \quad (3.3)$$

onde \mathbf{E} e \mathbf{B} são os campos elétrico e magnético, e é a carga da partícula em movimento (elétrons) e m^* é sua massa efetiva.

Com o passar do tempo, as cargas se acumulam nas bordas (devido à força magnética) de modo que, devido à força gerada pelo campo elétrico transversal, estas cargas serão repelidas. Então, o vetor força elétrica se anulará com o vetor força magnética, o que implica em $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = 0$. Com isso, para elétrons em duas dimensões ($2D$), temos $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ e logo podemos reescrever a equação (3.3) como:

$$\begin{aligned} eE_x &= -\frac{eB}{m^*}p_y - \frac{p_x}{\tau} \\ eE_y &= -\frac{eB}{m^*}p_x - \frac{p_y}{\tau}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Sabemos que o campo magnético está na direção z e que a frequência cíclotron (frequência angular) é a dada por $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$, pois partículas carregadas circulam exatamente com essa frequência em um determinado tipo de acelerador, o cíclotron. A condutividade de Drude é escrita como sendo $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m^*}$. Substituindo estas duas equações em (3.4), obtemos:

$$\sigma_0 E_x = -en \frac{p_x}{m^*} - en \frac{p_y}{m^*} (\omega_c \tau) \quad (3.5)$$

e

$$\sigma_0 E_y = -en \frac{p_x}{m^*} (\omega_c \tau) - en \frac{p_y}{m^*}. \quad (3.6)$$

Em termos da densidade de corrente $\mathbf{j} = -en \frac{\mathbf{p}}{m^*}$ e sabendo-se que $\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$, podemos escrever o tensor resistividade

$$\rho = \sigma^{-1} = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & \mu B \\ -\mu B & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

onde, na expressão acima, introduzimos a mobilidade ($\mu = \frac{e\tau}{m^*}$), sendo este um termo que caracteriza a intensidade do movimento dos portadores de carga através de metais e semicondutores devido a um dado campo elétrico aplicado.

A partir das expressões acima, para a resistividade Hall temos

$$\rho_H = \frac{\omega_c\tau}{\sigma_0} = \frac{eB}{m^*} \tau \times \frac{m^*}{ne^2\tau} = \frac{B}{en}. \quad (3.8)$$

Temos ainda que o tensor condutividade é obtido da resistividade, dado pela matriz inversa

$$\sigma = \rho^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma_L & -\sigma_H \\ \sigma_H & \sigma_L \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

onde a condutividade longitudinal é dada por $\sigma_L = \frac{\sigma_0}{(1+\omega_c^2\tau^2)}$ e a condutividade Hall $\sigma_H = \frac{\sigma_0\omega_c\tau}{(1+\omega_c^2\tau^2)}$. No limite teórico do desaparecimento de impurezas, ou seja, o limite em que $\omega_c\tau \rightarrow \infty$ (tempos de espalhamento muito longos), os tensores resistividade e condutividade são [13]

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & \frac{B}{en} \\ -\frac{B}{en} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

e

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{en}{B} \\ \frac{en}{B} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Quanto a relação entre a resistividade e a resistência, sabemos que $R = \rho \frac{L}{A}$ sendo A a área da seção transversal de um material condutor. Porém, como estamos tratando de um material bidimensional, então a dimensão de área passa a ser de comprimento, logo

$$R \sim \rho. \quad (3.12)$$

Logo, em um sistema bidimensional, a resistência Hall equivale à resistividade Hall.

Uma das mais importantes aplicações práticas para o efeito Hall é na medida de campos magnéticos. Em uma pequena barra de semicondutor, percorrido por uma dada corrente elétrica aplicamos um campo magnético cuja intensidade desejamos medir. Então, o valor da tensão que aparece transversalmente na barra fornece uma medida direta do campo magnético.

3.2 Efeito Hall Quântico Inteiro

Nesta seção, faremos uma breve revisão acerca dos principais tópicos para compreender o Efeito Hall Quântico Inteiro (EHQI). Primeiramente, faremos uma abordagem tratando dos Níveis de Landau e, em seguida, trataremos do Efeito Hall Quântico Inteiro, sendo este bem definido pelos níveis de Landau.

3.2.1 Níveis de Landau

Consideremos uma partícula carregada eletricamente movendo-se na presença de um campo magnético uniforme perpendicular a esse movimento. Essa partícula descreverá um movimento orbital cíclico possuindo valores discretos de energia chamados níveis de Landau. São esses níveis que determinam o comportamento dos elétrons em um campo magnético intenso.

O Hamiltoniano H para uma partícula livre é dado por

$$H = \frac{p^2}{2m}, \quad (3.13)$$

onde p é o momento e m a massa da partícula. Consideremos então essa partícula movendo-se em um plano xy e com um campo magnético aplicado no eixo z (perpendicular ao plano).

O campo magnético na qual essa partícula vai interagir é dado pelo acoplamento mínimo

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (3.14)$$

em que $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ é o potencial vetor ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$) e e , a carga da partícula. Com isso o Hamiltoniano (3.13) pode ser escrito como

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2. \quad (3.15)$$

Consideremos o comutador do momento

$$\begin{aligned} [\Pi_x, \Pi_y] &= [p_x + eA_x(\mathbf{r}), p_y + eA_y(\mathbf{r})] = \\ &= [p_x, p_y] + [p_x, eA_y(\mathbf{r})] + [eA_x(\mathbf{r}), p_y] + [eA_x(\mathbf{r}), eA_y(\mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

As relações de comutação para duas dimensões são dadas por

$$[x, p_x] = [y, p_y] = i\hbar \quad e \quad [x, p_y] = [y, p_x] = [p_x, p_y] = [x, y] = 0, \quad (3.17)$$

onde $\mathbf{r} = (x, y)$ e o momento canônico $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$.

Utilizando (3.17) e pela propriedade $[p_i, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i}$, (3.16) torna-se

$$[\Pi_x, \Pi_y] = -ie\hbar \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = -ie\hbar (\vec{\nabla} \times \vec{A})_z = -i \frac{\hbar^2}{l_B^2}. \quad (3.18)$$

Onde foi introduzido o termo comprimento magnético que é a escala de comprimento fundamental na presença de um campo magnético

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}. \quad (3.19)$$

Lembrando das relações da Mecânica Quântica para os operadores escada

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \quad e \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right). \quad (3.20)$$

Utilizando a equação (3.18) na equação dos operadores escada, obtemos

$$a = \frac{l_b}{\sqrt{2}\hbar} (\Pi_x - i\Pi_y) \quad e \quad a^\dagger = \frac{l_B}{\sqrt{2}\hbar} (\Pi_x + i\Pi_y). \quad (3.21)$$

Pela relação de comutação $[a, a^\dagger] = 1$, temos

$$\Pi_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l_B} (a^\dagger + a) \quad e \quad \Pi_y = \frac{\hbar}{i\sqrt{2}l_B} (a^\dagger - a). \quad (3.22)$$

Para nossa definição de momento, o Hamiltoniano será

$$H = \frac{1}{2m_b} (\Pi_x^2 + \Pi_y^2). \quad (3.23)$$

Substituindo (3.22) na equação (3.23), temos

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2}{4ml_b^2} [(a^\dagger)^2 + a^\dagger a + aa^\dagger + a^2 - ((a^\dagger)^2 - a^\dagger a - aa^\dagger + a^2)] \\ &= \frac{\hbar^2}{2ml_b^2} (a^\dagger a + aa^\dagger) = \frac{\hbar^2}{ml_b^2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{ml_b^2} \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde sabemos que

$$a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle \quad (3.25)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$. Então,

$$H = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.26)$$

Onde foi usada a frequência ciclotron que é dada por $\omega_c = \hbar/ml_B^2$. Usando $H |n\rangle = E_n |n\rangle$, obtemos

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.27)$$

3.2.2 Efeito Hall Quântico Inteiro em um gás de elétrons bidimensional (GE2D)

A primeira indicação da relevância de efeitos quânticos em medidas de transporte eletrônico em duas dimensões foi apresentada em 1930, com a descoberta do efeito Shubnikov-de Haas [13]. Ao passo que a teoria clássica prevê que a resistência longitudinal seja independente do campo de indução magnética, Shubnikov e de Haas observaram que, acima de um valor característico, a resistência longitudinal oscila como função de B , como representado na Figura 3.3.

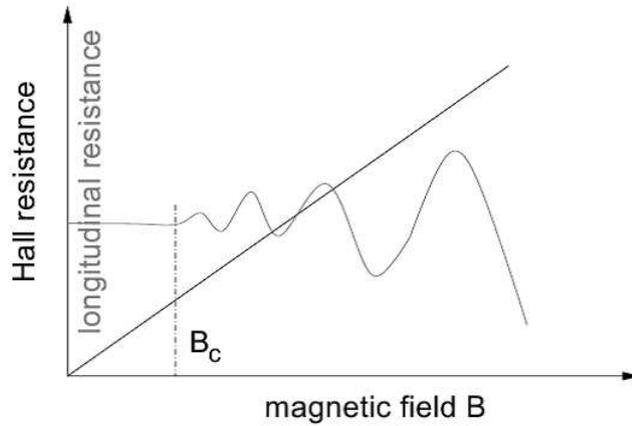


Figura 3.3: Esboço do efeito Shubnikov-de Haas. Acima de um valor característico B_c , a resistência longitudinal (cinza) começa a oscilar; a resistência Hall (preto) continua linear em B [13].

Uma manifestação ainda mais marcante de efeitos quânticos nas propriedades de transporte de um gás de elétrons bidimensional (GE2D) foi a descoberta em 1980, do efeito Hall quântico inteiro (EHQI) (Quantização da resistência Hall [3]).

O efeito Hall quântico inteiro é caracterizado pelo aparecimento de uma sequência de platôs nas medidas de resistência transversal (R_H) de um gás de elétrons bidimensional em função do campo magnético B aplicado. Os valores dos platôs nas medidas de resistência de Hall em função do campo aplicado podem ser expressos por:

$$R_H = \frac{1h}{\nu e^2} = \frac{1}{\nu} 25.8128 k\Omega, \quad (3.28)$$

onde h é a constante de Plank, e é a carga do elétron e ν é chamado fator de preenchimento (definido como a razão entre o número de cargas e o número de linhas de fluxo magnético), leva apenas valores inteiros e indica o número de níveis de Landau totalmente preenchido.

A Figura 3.4 mostra resultados experimentais com medidas do Efeito Hall Quântico, onde os platôs estão muito bem definidos.

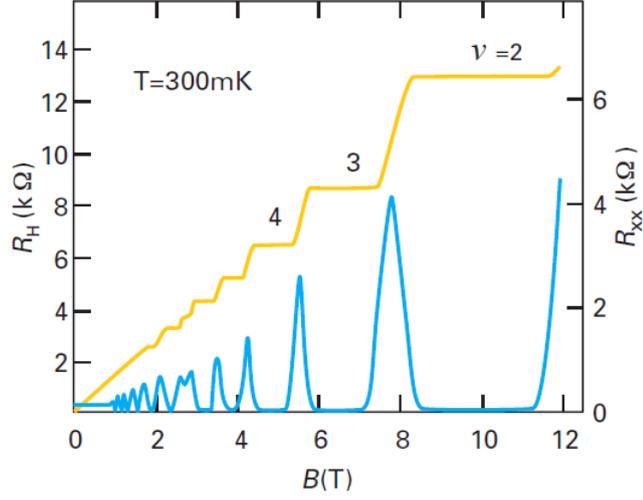


Figura 3.4: Medida experimental evidenciando as características do Efeito Hall Quântico: os platôs na resistência Hall, coincidindo com os zeros na resistência longitudinal [16].

É possível notar claramente os platôs na resistência transversal (Hall), bem como a resistência longitudinal indo a zero nessas regiões. Outro fato interessante que surge desse resultado se apresenta na região de baixo campo, onde é possível observar a transição do limite clássico para o regime quântico.

Para deduzir a equação (3.28), temos que a energia cinética do elétron em um sistema bidimensional é dada pela seguinte equação

$$E = \left[\left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{2m} \right] \{k_x^2 + k_y^2\}, \quad (3.29)$$

onde k_x e k_y são números de onda do elétron.

O número de estados, N , abaixo da energia de Fermi, E_f é dado por

$$N(E) = \frac{S_k}{(2\pi)^2} = \frac{\pi k^2}{(2\pi)^2}, \quad (3.30)$$

onde S_k é a área no espaço k .

A densidade de estados, $D(E)$, é

$$D(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{2\pi m}{h^2}. \quad (3.31)$$

Onde vemos que, em um sistema bidimensional, a densidade de estados é constante com a energia cinética dos elétrons Figura 3.5.

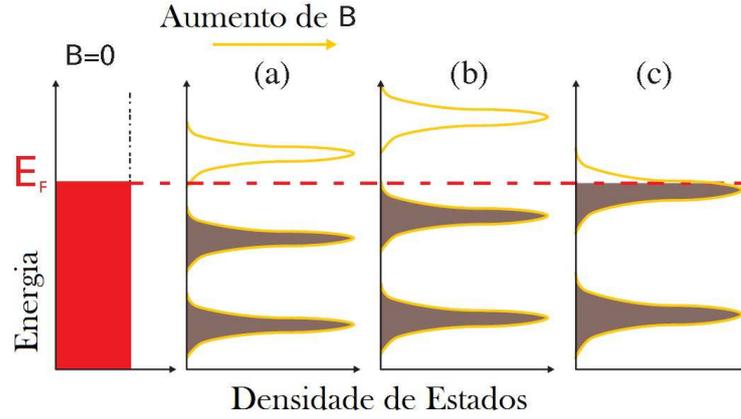


Figura 3.5: Densidade de estados em função da energia para valores crescentes do campo magnético [16].

Como foi Mostrado, a energia cinética em um campo magnético B , é quantizada conforme os níveis de Landau, devido ao movimento cíclotron. Então, níveis de energia em um sistema bidimensional são discretos em um campo magnético. A energia de separação entre os níveis de Landau é dada pela energia cíclotron $(h/2\pi)\omega_c$. O número de estados por unidade de área em cada nível de Landau, N_L , é

$$N_L = D(E) \left(\frac{h}{2\pi} \right) \omega_c = \left[\frac{2\pi m}{h^2} \right] \left(\frac{h}{2\pi} \right) \left(\frac{eB}{m} \right) = \frac{eB}{h}. \quad (3.32)$$

A condição para baixas temperaturas e altos campos magnéticos de modo que o *gap* de energia entre os níveis de Landau seja mais distante da energia de excitação térmica Figura 3.5 é

$$\left(\frac{h}{2\pi} \right) \omega_c \gg k_B T, \quad (3.33)$$

onde k_B é a constante de Boltzman e T é a temperatura.

Quando o último nível de Landau é totalmente preenchido abaixo do nível de Fermi, eles estão totalmente preenchido com $\nu eB/h$ elétrons e a resistência Hall é dada por

$$R_H = \frac{B}{eN_s} = \frac{B}{\left[e \left(\frac{\nu eB}{h} \right) \right]} = \frac{h}{\nu e^2}. \quad (3.34)$$

Onde N_s é o número de elétrons. Assim, temos a quantização da resistência Hall, equação (3.28).

Para explicar o platô do efeito Hall, nós precisamos dos conceitos de estados localizados e estados estendidos ou deslocalizados [17].

O fenômeno de que entre dois níveis de Landau a resistência de Hall tem valor fixo, e a resistência longitudinal tem valor nulo, implica à existência de estados localizados nessa região. Devido à presença de impurezas, o perfil da densidade de estados de um sistema bidimensional evolui de um sistema de níveis de Landau estreito e fino para um espectro de níveis mais alargados, como pode ser observado na Figura 3.6. Nesse novo espectro de níveis existem estados localizados e estados estendidos. Somente os estados estendidos podem contribuir para a corrente elétrica em temperatura zero.

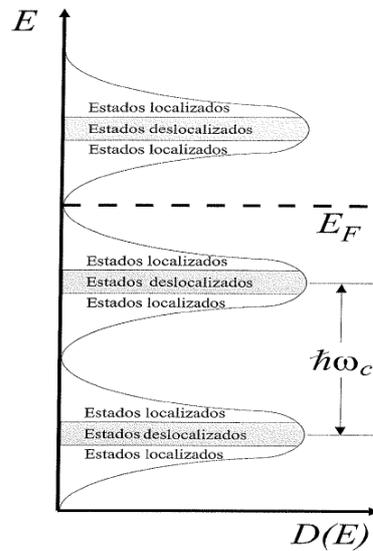


Figura 3.6: Diagrama da densidade de estados alongada de um gás bidimensional de elétrons na presença de um campo magnético.

A existência de estados localizados explica o aparecimento dos platôs na resistência de Hall. Quando o nível de Fermi se encontra dentro de uma região de existência de estado localizados, ocorre a aparição de um mínimo nas oscilações-de Haas e a existência de um platô quântico na resistência de Hall.

3.3 Efeito Hall Quântico Inteiro no Grafeno

Vimos na seção anterior que quando os elétrons estão presos em um sistema bidimensional sob a ação de um campo magnético perpendicular ao plano de movimento dos mesmos, a energia do elétron é quantizada, ou seja, a energia do sistema se desdobra em níveis discretos conhecidos como níveis de Landau: $E_n = \hbar\omega_c (n + \frac{1}{2})$, onde n é um número inteiro e $\omega_c = \frac{eB}{m}$ a frequência ciclotron.

Sempre que a energia de Fermi situa-se entre dois níveis de Landau, a resistência longitudinal exhibe um mínimo e a resistência Hall torna-se constante. Os valores para os platôs de condutividade são dados por $\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}$.

A estrutura de banda do grafeno leva a uma diferente quantização da energia em um campo magnético. As energias dos níveis de Landau no grafeno são dadas por

$$E_n = \pm v_f \sqrt{2e\hbar B n}, \quad (3.35)$$

onde v_f é a velocidade de Fermi. A diferença mais importante em relação ao caso do (GE2D) é a existência de um estado de energia zero, compartilhado entre elétrons e buracos. Isto leva a uma mudança na sequência dos platôs de condutividade Hall, que assumem os valores

$$\sigma_{xy} = \pm 4 \frac{e^2}{h} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.36)$$

onde n é o índice do nível de Landau e o fator 4 é originado da degenerescência do vale e de spin. A Figura 3.7 mostra o efeito Hall quântico em uma amostra de grafeno. O fator adicional de $1/2$ na equação (3.36) pode ser entendido como a expressão induzida pela fase de Berry adicional que os elétrons, devido à sua natureza quiral, adquirem ao completar uma órbita [18].

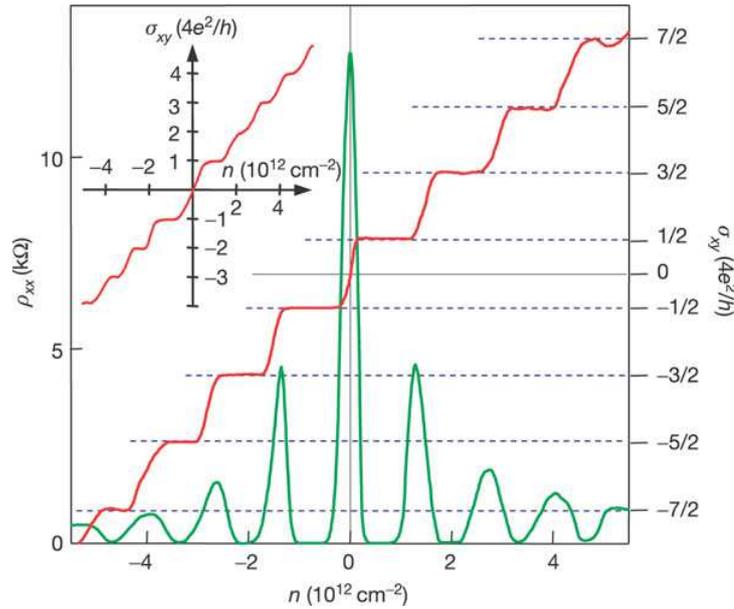


Figura 3.7: EQH para férmions de Dirac sem massa. A condutividade Hall (em vermelho) e a resistência longitudinal (em verde)[19].

Capítulo 4

Pseudo Campo Magnético no Grafeno

4.1 Introdução

Há mais de 100 anos que se vem expondo diferentes materiais a campos magnéticos para perceber a forma como os seus elétrons se comportam, mas é impossível manter um campo magnético tremendamente forte em laboratório. O recorde até ao momento era de 85 teslas durante um período de alguns milésimos de segundo.

O grafeno, o material de um átomo de espessura composto de átomos de carbono em uma estrutura de favo de mel, já produziu uma longa lista de surpresas experimentais [1] [19] [20]. Os pesquisadores da ref. [5] relataram a criação de pseudo campos magnéticos muito mais fortes do que os mais fortes campos magnéticos já produzidos em um laboratório, apenas colocando o tipo certo de deformação em um folha de grafeno.

A equipe coordenada pelo físico Francisco Guinea, do Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (Espanha), tinha previsto no início de 2010 que se uma camada de grafeno fosse esticada ao longo das suas três direções cristalográficas principais começaria a agir como se estivesse num campo magnético uniforme. Isto dever-se-ia ao fato da alteração da tensão mecânica alterar o comprimento das ligações entre átomos, afetando a forma como os elétrons se movem de uns para os outros.

A teoria foi confirmada após a equipa de Crommie [5] ter usado um microscópio de efeito de túnel para estudar flocos de grafeno sobre um substrato de platina Figura 4.1. O microscópio em questão funciona através do uso de uma sonda em forma de agulha muito

fina que passa ao longo da superfície de um material para medir as alterações de corrente elétrica, revelando assim a densidade dos estados eletrônicos em cada ponto e construindo uma imagem a partir desses dados.

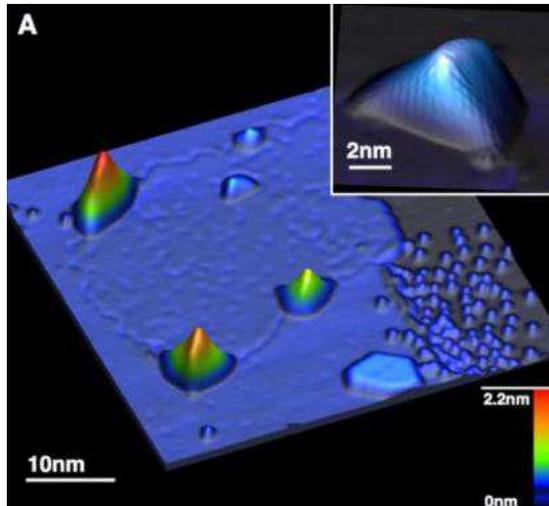


Figura 4.1: Nanobolha de grafeno vista através de um microscópio de efeito de túnel [5].

4.2 Pseudo campo magnético induzido por deformações

O grafeno a temperaturas finitas é inevitavelmente ondulado. Como resultado, em qualquer configuração atômica real, as três ligações de cada átomo com os seus vizinhos não são equivalentes [21].

Começando com o hamiltoniano sem deformação na rede e usando a aproximação de primeiros vizinho, temos

$$H_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (|A, i\rangle \langle B, j| + h.c), \quad (4.1)$$

onde t é o parâmetro de salto e $|A, i\rangle \langle B, j|$ representa o tunelamento de um elétron no átomo A e célula i , para um átomo B em uma célula unitária j . Considerando deformações suaves, e levando em consideração que os parâmetros de salto t_i , podem ser todos diferentes, o hamiltoniano (4.1), torna-se

$$H = H_0 - \sum_{\langle i,j \rangle} \delta t_{ij} (|A, i\rangle \langle B, j| + h.c), \quad (4.2)$$

onde δt_{ij} é uma pequena variação em relação a t ($t_{ij} = t + \delta t_{ij}$). Fazendo uma transformação de Fourier para os estados $|A, i\rangle$ e $|B, j\rangle$, que são dadas por

$$|A, i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{K}} |A, \mathbf{K}\rangle e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_i} \quad (4.3)$$

$$|B, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{K}} |B, \mathbf{K}\rangle e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_j}, \quad (4.4)$$

e fazendo a expansão em torno do ponto K (Detalhes no Apêndice A), obtemos o hamiltoniano

$$H = \sigma \cdot (-i\hbar v_f \nabla + \mathcal{A}), \quad (4.5)$$

onde $\mathcal{A} = (\mathcal{A}_x, \mathcal{A}_y)$ é o potencial vetor.

Da equação (4.5), vemos que distorções na rede interagem com os elétrons da mesma forma que campos magnéticos interagem com eles. Porém os pontos K e K' no grafeno estão ligados por uma simetria de inversão temporal, ou seja, se fizermos uma expansão em torno do ponto K' , vemos que o potencial vetor tem sinal oposto. Logo esse campo magnético não quebra simetria de inversão temporal [22], e por isso esse ele é chamado de pseudo campo magnético. Com isso temos

$$B_K = -B_{K'}, \quad (4.6)$$

O próximo passo é relacionar as deformações da rede com os parâmetros de salto t_i (Detalhes no Apêndice B), para isso vamos assumir que os deslocamentos atômicos \mathbf{u} são pequenos em comparação com as distâncias interatômicas a .

No limite do contínuo (teoria da elasticidade), os deslocamentos locais dos átomos na célula unitária pode ser relacionado com $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ [21] por

$$(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B) \propto (\delta_a \cdot \nabla) \mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (4.7)$$

de onde obtemos o campo de *gauge*

$$A_x = \frac{3}{4} \beta \kappa (u_{xx} - u_{yy}), \quad (4.8)$$

$$A_y = \frac{3}{2} \beta \kappa u_{xy}, \quad (4.9)$$

onde u_{ij} é o tensor deformação, que é definido por

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (4.10)$$

e β é o parâmetro de Grüneisen, ele descreve a dependência do parâmetro de salto do vizinho mais próximo com a distância interatômica. Este valor situa-se no intervalo $\beta \approx 2 - 3$ [21].

No âmbito da aproximação de Dirac, uma deformação uniforme não pode abrir um *gap* no espectro, mas leva apenas a uma mudança nos pontos dos cones. No entanto, se a tensão é muito forte e t_1 , t_2 e t_3 , são essencialmente diferentes, o *gap* pode ser aberto [21].

Se a tensão não é uniforme o potencial vetor cria, em geral, um pseudo campo magnético (em unidades de normalização)[21],

$$\frac{ev\mathbf{B}}{c} = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}. \quad (4.11)$$

Capítulo 5

Grafeno na presença de um pseudo campo magnético variável com a posição

5.1 Introdução

Neste capítulo, apresentaremos nossa contribuição [23] ao estudo de pseudo campo magnético no grafeno.

Investigamos um gás de elétrons bidimensional no grafeno na presença de dois campos magnéticos: um constante e um pseudo campo magnético que cai com o inverso do quadrado da distância. Ambos os campos são perpendiculares a folha de grafeno. Especificamente investigamos como um pseudo campo magnético não constante que cai com $1/x^2$, modifica os níveis de Landau relativísticos. Essa configuração não é conhecida experimentalmente, mas ao considerar que é induzido por deformações elásticas no grafeno, acreditamos que alguém será capaz de implementá-lo em laboratório.

Resolvemos a equação de Dirac de segunda ordem e mostramos que, entre as possíveis opções para a função de onda, a correta é a que diverge na origem do sistema de coordenadas. Isto é compatível com o fato de que a nossa equação diferencial também diverge na origem. Um importante resultado é que o estado de energia zero, existente nos níveis de Landau relativísticos apenas quando o campo magnético constante ortogonal está presente, não aparece para um intervalo específico do parâmetro que caracteriza o pseudo campo magnético. Nós, então, falamos sobre as consequências desses fatos para o efeito

Hall quântico no grafeno e analisamos as mudanças na frequência cíclotron relativística.

5.2 Níveis de Landau Relativísticos

Nesta seção, vamos investigar como um pseudo campo magnético variável perpendicular a uma folha de grafeno irá afetar os níveis de Landau relativísticos. Como relatado do capítulo 2, as excitações de baixas energias no grafeno se comportam como férmions de Dirac sem massa, em vez de elétrons maciços. Estas excitações de baixas energias são descritas pela equação de Dirac em $(2 + 1)$ - dimensões, isto é,

$$-iv_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) , \quad (5.1)$$

onde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ são as matrizes de Pauli, $\Psi = (\varphi_1, \varphi_2)^T$ é um campo espinorial de duas componentes, a velocidade da luz c foi substituída pela velocidade de Fermi ($v_F \approx 10^6$ m/s) e o \hbar foi fixado igual a um.

Em nossa análise, o pseudo campo magnético variável deve aparecer devido a tensões sobre a folha de grafeno [24]. Os vales K e K' sente um campo efetivo de $\tilde{\mathbf{A}} \pm \mathbf{A}$, onde $\tilde{\mathbf{A}}$ é devido ao campo magnético real e \mathbf{A} é devido ao pseudo campo magnético. Note que um sinal diferente tem que ser usado para o campo de *gauge* devido à tensão nos vales K e K' uma vez que tais campos não quebram a simetria de reversão temporal [25]. Considerando-se o *gauge* de Landau, temos

$$\tilde{\mathbf{A}} \pm \mathbf{A} = \left[A_x = 0, A_y = \left(B_0 x \pm \frac{\lambda}{x} \right), A_z = 0 \right] , \quad (5.2)$$

onde λ é uma constante. Desta forma, o campo magnético é $\mathbf{B} = [B_0 \pm \frac{\lambda}{x^2}] \hat{\mathbf{z}}$. O primeiro termo campo, B_0 , corresponde ao campo magnético constante ao longo da direção z perpendicular ao plano do grafeno.

Considerando os estados eletrônicos em torno do vale K e o acoplamento mínimo para o elétron como $-i\nabla \rightarrow -i\nabla + e\mathbf{A} = \boldsymbol{\pi}$, obtemos,

$$\boldsymbol{\pi} = \left[p_x, p_y + e \left(B_0 x - \frac{\lambda}{x} \right) \right] . \quad (5.3)$$

(para o vale K' deve-se fazer a mudança $\lambda \rightarrow -\lambda$).

O hamiltoniano é dado por

$$H = v_F (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi}) . \quad (5.4)$$

Escrevendo

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\pi} = \sigma_x \pi_x + \sigma_y \pi_y, \quad (5.5)$$

usando a equação (5.3) e substituindo $\mathbf{p} \rightarrow i\nabla$ e $E \rightarrow i\partial_t$, podemos escrever a equação (5.1) na forma

$$\begin{pmatrix} \dot{\varphi}_1 \\ -\dot{\varphi}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & W \\ Z & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

onde

$$W = -v_F \partial_x + iv_F \left[\partial_y + ie \left(B_0 x - \frac{\lambda}{x} \right) \right], \quad (5.7)$$

e

$$Z = v_F \partial_x + iv_F \left[\partial_y + ie \left(B_0 x - \frac{\lambda}{x} \right) \right]. \quad (5.8)$$

Tomando a derivada no tempo da equação (5.6), podemos escrever a equação de Dirac de segunda ordem para φ_1 e φ_2 , isto é,

$$\ddot{\varphi}_1 = -WZ\varphi_1, \quad (5.9)$$

e

$$\ddot{\varphi}_2 = -ZW\varphi_2. \quad (5.10)$$

Propondo a solução para (5.10) com a forma

$$\varphi_2(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt} \varphi(\mathbf{r}), \quad (5.11)$$

onde $\varphi(\mathbf{r})$ é a parte espacial da componente do spinor $\varphi_2(\mathbf{r}, t)$, com isso obtemos

$$\begin{aligned} E^2 \varphi(\mathbf{r}) &= \left[v_F \partial_x + iv_F \partial_y - v_F e B_0 x + v_F e \frac{\lambda}{x} \right] \\ &\times \left[-v_F \partial_x + iv_F \partial_y - v_F e B_0 x + v_F e \frac{\lambda}{x} \right] \varphi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (5.12)$$

A equação (5.12) acima fornece

$$\begin{aligned} E^2 \varphi(\mathbf{r}) &= v_F^2 \left[-\nabla^2 - eB_0 - 2e^2 B_0 \lambda + \frac{e\lambda(e\lambda - 1)}{x^2} \right. \\ &\left. + 2ie \frac{\lambda}{x} \partial_y - 2ie B_0 x \partial_y + e^2 B_0^2 x^2 \right] \varphi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (5.13)$$

A função de onda pode ser fatorada como $f(x)g(y)$. Desde que o potencial vetor dependa apenas da coordenada x , os férmions irão se comportar como ondas planas na direção y .

Então, consideramos o *ansatz* para (5.13) como

$$\varphi(\mathbf{r}) = f(x) e^{ik_y y}. \quad (5.14)$$

Assim chegamos em,

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \left[\epsilon - \frac{e\lambda(e\lambda - 1)}{x^2} + \frac{2ek_y\lambda}{x} - 2ek_y B_0 x - e^2 B_0^2 x^2 \right] f(x) = 0, \quad (5.15)$$

onde

$$\epsilon = \frac{E^2}{v_F^2} - k_y^2 + 2e^2 B_0 \lambda + eB_0. \quad (5.16)$$

Definindo variáveis adimensionais

$$\chi = \sqrt{e|B_0|x}, \quad (5.17)$$

a equação (5.15) muda para

$$f''(\chi) + \left[C + \frac{F}{\chi^2} + \frac{D}{\chi} + B\chi - \chi^2 \right] f(\chi) = 0, \quad (5.18)$$

onde

$$\begin{aligned} B &= -2k_y \sqrt{1/(e|B_0|)} \frac{B_0}{|B_0|}, \\ C &= \frac{\epsilon}{e|B_0|}, \\ D &= 2ek_y\lambda \sqrt{1/(e|B_0|)}, \\ F &= -e\lambda(e\lambda - 1). \end{aligned} \quad (5.19)$$

A solução geral desta equação diferencial pode ser obtida utilizando o método de Frobenius de expansão em série. Uma equação diferencial semelhante foi obtida em [26] e constatou que

$$f(\chi) = |\chi|^\beta e^{-\alpha\chi^2 - \gamma\chi} \text{HeunB}(\chi), \quad (5.20)$$

onde β , α , γ são constantes e HeunB é chamada *função biconfluente de Heun* [27]. Considerando o módulo na primeira variável em (5.20) uma vez que $\chi \in (-\infty, \infty)$ [28]. Após substituir (5.20) em (5.18), obtemos

$$\begin{aligned} f(\chi) &= C_1 |\chi|^{\frac{1}{2}(1+\sqrt{1-4F})} e^{-\frac{1}{2}(\chi^2 - B\chi)} \text{HeunB} \left(\sqrt{1-4F}, B, C + \frac{1}{4}B^2, 2D, -\chi \right) \\ &+ C_2 |\chi|^{\frac{1}{2}(1-\sqrt{1-4F})} e^{-\frac{1}{2}(\chi^2 - B\chi)} \text{HeunB} \left(-\sqrt{1-4F}, B, C + \frac{1}{4}B^2, 2D, -\chi \right), \end{aligned} \quad (5.21)$$

em que C_1 e C_2 são constantes de normalização. A fim de investigar estados ligados, a função de onda em geral deve ser quadrado integrável:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(\chi)|^2 d\chi < \infty. \quad (5.22)$$

Nós, então, analisamos o comportamento assintótico das soluções para a equação acima, para $\chi \rightarrow 0^\pm$ e $\chi \rightarrow \pm\infty$. O termo exponencial garante que

$$\lim_{\chi \rightarrow \pm\infty} f(\chi) \rightarrow 0, \quad (5.23)$$

se a série HeunB reduz a um polinômio de grau n . Não existe mais nenhuma condição a ser considerada para a função de onda. Mas devemos ter cuidado na escolha da solução correta para a nossa equação diferencial (5.18), pois ela tem uma singularidade em $\chi = 0$. Considerando $C_2 \equiv 0$ na equação (5.21), temos

$$\begin{aligned} & \lim_{\chi \rightarrow 0^\pm} |\chi|^{\frac{1}{2}(1+\sqrt{1-4F})} e^{-\frac{1}{2}(\chi^2-B\chi)} \\ & \times \text{HeunB} \left(\sqrt{1-4F}, B, C + \frac{1}{4} B^2, 2D, -\chi \right) \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (5.24)$$

que significa que a função de onda é regular na origem ($\text{HeunB} \rightarrow 1$ com $\chi \rightarrow 0$ [27]). Por outro lado se tomarmos $C_1 \equiv 0$, a função de onda (5.21) pode divergir na origem por causa do termo $|\chi|^{(1-\sqrt{1-4F})/2}$. Dito isto, podemos concluir que a solução compatível com o fato de que nossa equação diferencial é singular em $\chi = 0$ deve ser a segunda solução da equação (5.21), isto é, colocando $C_1 \equiv 0$. Fazendo isso temos

$$\begin{aligned} f(\chi) &= C_2 |\chi|^{\frac{1}{2}(1-\sqrt{1-4F})} e^{-\frac{1}{2}(\chi^2-B\chi)} \\ & \times \text{HeunB} \left(-\sqrt{1-4F}, B, C + \frac{1}{4} B^2, 2D, -\chi \right). \end{aligned} \quad (5.25)$$

Caso contrário, obtemos o espectro errado como discutido em [29]. Veremos abaixo que esta é a única opção que recupera o espectro conhecido para um campo magnético constante ortogonal, B_0 . Observe que a divergência na função de onda acontece quando

$$\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1-4F} \right) < 0. \quad (5.26)$$

A partir desta última equação, podemos ver na Figura 5.1 que a divergência na função de onda existe para $e\lambda < 0$ e para $e\lambda > 1$.

Vamos investigar o comportamento da probabilidade quântica quando $\chi \rightarrow 0$. Quando HeunB torna-se um polinômio de grau n , temos

$$\begin{aligned} \lim_{\chi \rightarrow 0^\pm} \int |f(\chi)|^2 d\chi &= |C_2|^2 \lim_{\chi \rightarrow 0^\pm} \int \left[|\chi|^{\frac{1}{2}(1-\sqrt{1-4F})} \right]^2 d\chi \\ &= \text{constante} \times |\chi|^{-\sqrt{1-4F}+2}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Para evitar divergência nesta equação, temos que impor

$$-\sqrt{1-4F} + 2 > 0. \quad (5.28)$$

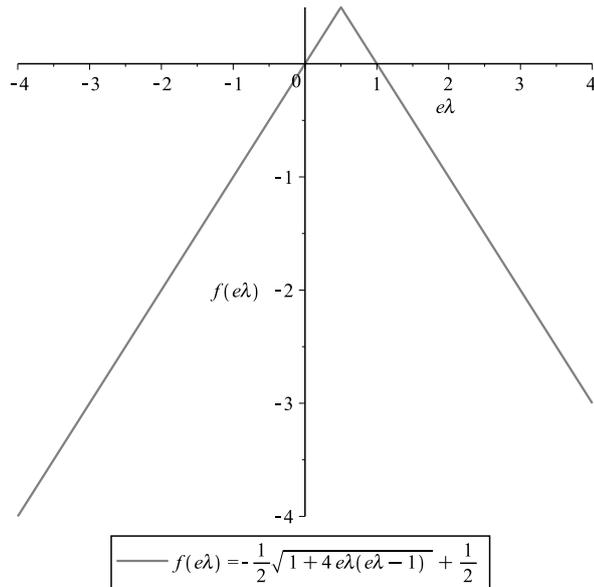


Figura 5.1: Este gráfico mostra que a função de onda diverge para $e\lambda < 0$ e para $e\lambda > 1$.

Na Figura 5.2, está representada a equação (5.28). A figura mostra que o parâmetro $e\lambda$ pode assumir qualquer valor real no intervalo $(-1/2, 3/2)$. Este intervalo é obtido a partir das raízes da equação (5.28).

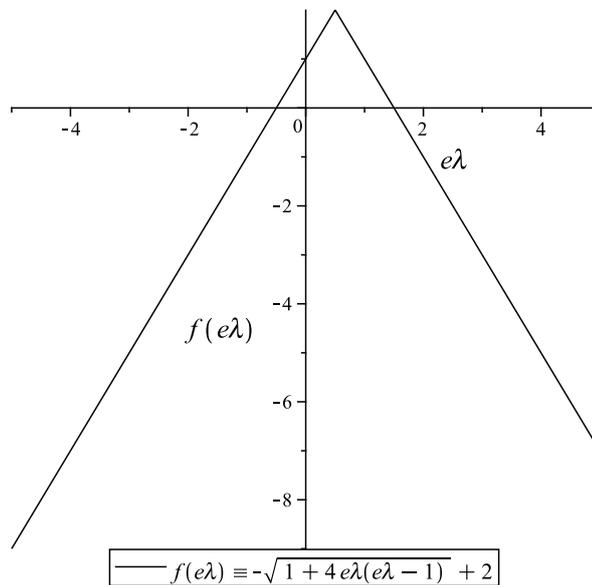


Figura 5.2: Este gráfico mostra que existe estados ligados para $-1/2 < e\lambda < 3/2$, desde que a probabilidade quântica não divirja neste intervalo.

Antes de continuar, devemos mencionar que o potencial $1/x^2$ pode levar ao problema “queda ao centro” [30]. Para evitar este fenômeno, devemos ter $1 - 4F \geq 0$. Esta

expressão pode ser colocada em duas formas, $(1 - 2e\lambda)^2$ e $(-1 + 2e\lambda)^2$. Concluimos que as soluções físicas aparecem no intervalo $(-1/2, 3/2)$. Para $e\lambda = 1/2$, temos $1 - 4F = 0$. Como vimos acima, as funções de onda divergem para $e\lambda < 0$ e $e\lambda > 1$, isso significa que as soluções regulares existem para $0 \leq e\lambda \leq 1$ e existem soluções irregulares para $-1/2 < e\lambda < 0$ e $1 < e\lambda < 3/2$. Por fim, a série *biconfluyente de Heun* torna-se um polinômio de grau n quando [31]

$$C + \frac{1}{4}B^2 = 2n + 2 - \sqrt{1 - 4F}, \quad (5.29)$$

com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Colocando $E \equiv E_n^\lambda$ e substituindo as expressões em (5.19), chegamos em

$$E_n^\lambda = \pm v_F \sqrt{2e |B_0| \left(n + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{1 + 4e\lambda(e\lambda - 1)}}{2} - e\lambda \right)}. \quad (5.30)$$

Note que, para $\lambda = 0$, obtemos

$$E_n^0 = \pm v_F \sqrt{2e |B_0| n}, \quad (5.31)$$

que são os conhecidos níveis de Landau relativísticos para fermions sem massa na presença de um campo magnético perpendicular e constante. Se tivéssemos escolhido a função de onda regular na equação (5.21), encontraríamos $E_n^0 = \pm v_F \sqrt{2e |B_0| (n + 1)}$ com $\lambda \rightarrow 0$. Então, isso corrobora com a nossa afirmação acima de que a solução correta deve ser aquela que pode mostrar divergência na função de onda na origem. É útil representar em um gráfico a energia versus o parâmetro $e\lambda$, a fim de ver claramente as modificações introduzidas por este pseudo campo magnético variável.

Como é conhecido, existe um modo de energia zero para $n = 0$ na equação (5.31). Na Figura 5.3, representamos $(E_0^\lambda)^2 / 2ev_F^2 |B_0|$ para o modo $n = 0$. A partir do gráfico, podemos observar que o modo de energia zero não aparece quando $1/2 < e\lambda < 3/2$, pois para $n = 0$ os autovalores são imaginários. A energia zero ainda existe para $-1/2 < e\lambda \leq 1/2$.

Vamos olhar agora para o efeito Hall quântico anômalo no grafeno para ver a consequência desse resultado. A condutividade Hall é geralmente dado por $\sigma_{xy} = \nu e^2/h$, onde ν é o fator de enchimento (definido como a razão entre o número de cargas e o número de linhas de fluxo magnético), e é a carga elétrica e h é a constante de Planck. No ponto de Dirac, ambos elétrons e buracos coexistem na energia zero e existe uma contribuição

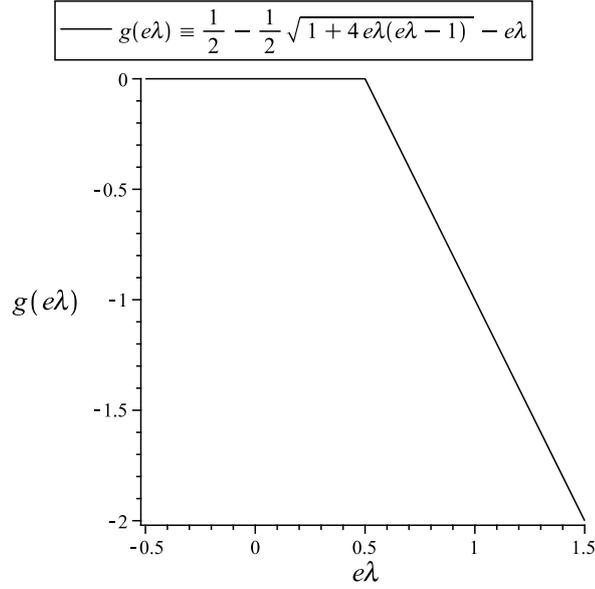


Figura 5.3: Gráfico de $g(e\lambda) = (E_0^\lambda)^2/2ev_F^2 |B_o|$ versus $e\lambda$. A partir do gráfico, podemos ver que o modo zero não existe para certo $e\lambda$ (os valores próprios são imaginários nesta região).

finita (e quantizada) para a condutividade transversal dada por $\pm 2e^2/h$. Em palavras simples, variando-se a concentração de carga, os platôs de condutividade σ_{xy} aparecerão como uma escada ininterrupta de passos equidistantes [20, 1]. A condutividade Hall no grafeno é dada por $\sigma_{xy} = \pm 4(e^2/h)(n+1/2)$, onde n é o índice do nível de Landau e o fator 4 aparece devido a degenerescência do vale e spin. Quando ligamos o campo magnético variável, o nível zero de Landau, não consegue se desenvolver e os platôs em $\nu = \pm 2$ colapsam em um único platô em $\nu = 0$ [32]. Em seguida, temos os platôs subsequentes em $\nu = \pm 6$ aparecem em $\nu = \pm 4$, e assim por diante.

Uma análise mais aprofundada sobre o efeito Hall quântico, tendo em conta as interações elétron-elétron [33, 34, 35], deve ser realizado em um trabalho futuro.

Na Figura 5.4 (esquerda), plotamos os níveis de Landau (5.30) versus o parâmetro $e\lambda$ para $n = 1, 2, 3$. As energias diminuem para os valores positivos (buracos) e aumentam para as energias negativas (elétrons), quando $1/2 < e\lambda < 3/2$, ver Figura 5.4 (direita). O espectro de energia permanece inalterado para $-1/2 < e\lambda \leq 1/2$. Note que o modo de energia de $n = 1$ assume valores reais apenas até $e\lambda = 1$.

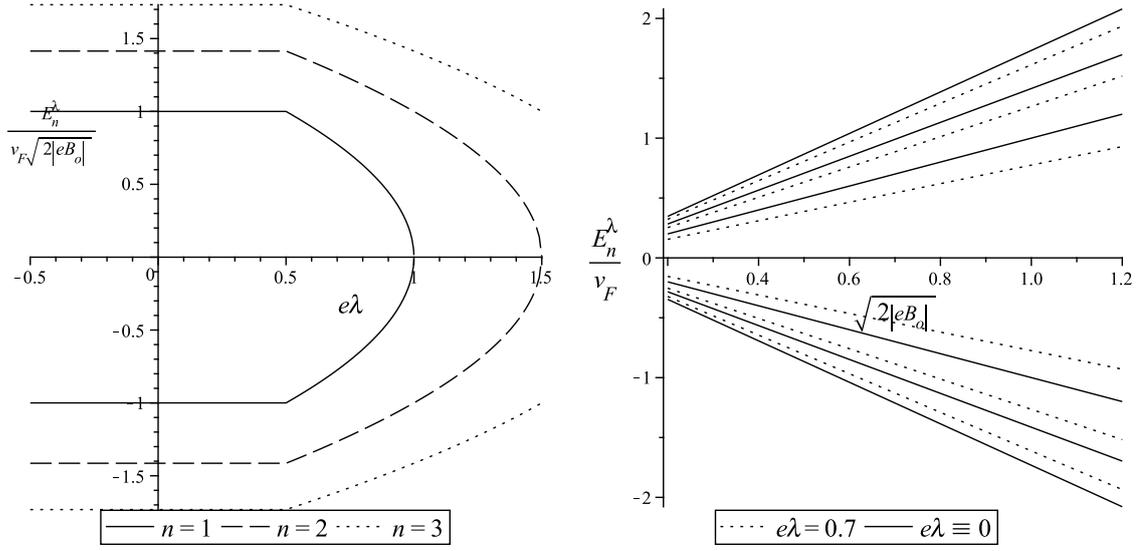


Figura 5.4: (figura esquerda) gráfico da energia versus o parâmetro $e\lambda$. Como podemos ver, as energias positivas (buracos) diminuem e as energias negativas (elétrons) aumentam no intervalo $1/2 < e\lambda < 3/2$. Eles são inalterados quando $-1/2 < e\lambda < 1/2$. (figura direita) gráfico da energia versus $\sqrt{2|eB_0|}$ para $n = 1, 2, 3$. As energias mudam para valores mais baixos para os buracos (curvas superiores) e valores mais elevados para os elétrons (curvas inferiores). O caso $e\lambda = 0$ corresponde aos níveis de Landau relativísticos para um único campo magnético constante ortogonal.

Estes resultados vão afetar a frequência cíclotron relativística como

$$\begin{aligned} \omega_c &= v_F \sqrt{2|eB_0|} \\ &\times \left(\sqrt{n+1 + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{1+4e\lambda(e\lambda-1)}}{2}} - e\lambda \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{n + \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{1+4e\lambda(e\lambda-1)}}{2}} - e\lambda \right), \end{aligned} \quad (5.32)$$

que está representado na figura (5.5). A partir da figura, vemos que, para $n = 1$, ω_c aumenta à medida que aumenta o parâmetro $e\lambda$ no intervalo $1/2 < e\lambda \leq 1$. Depois de $e\lambda = 1$, a frequência é imaginária. Para $n \geq 2$, ω_c cresce à medida que aumenta o parâmetro $e\lambda$ no intervalo $1/2 < e\lambda < 3/2$ e este efeito é mais forte para menor valores de n . Então, muitas propriedades físicas no grafeno, que dependem de ω_c , serão influenciadas pela presença do pseudo campo magnético variável aqui considerado. Por exemplo, ele pode ter algum impacto em problemas que envolvem transições entre níveis de Landau induzidos por radiação externa [36].

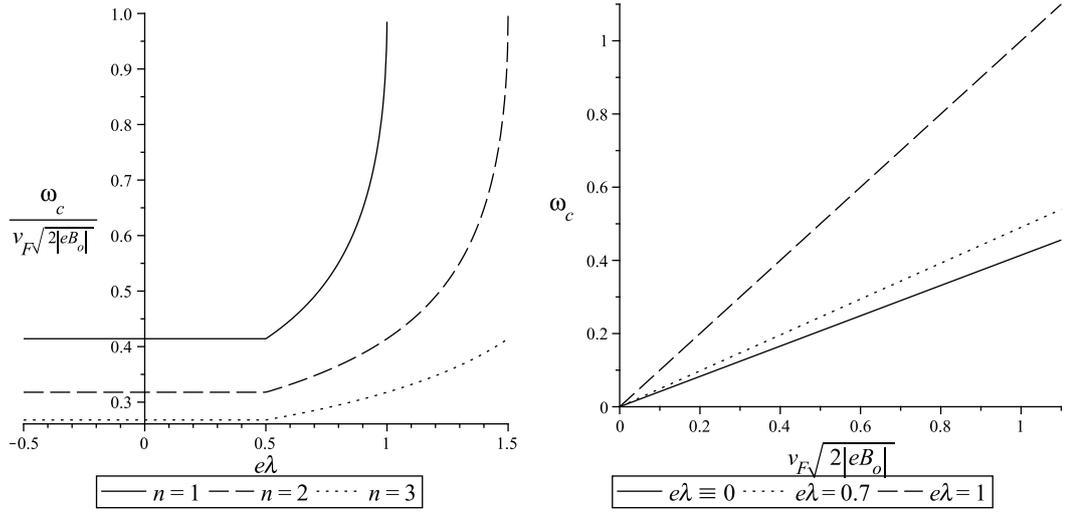


Figura 5.5: (figura esquerda) gráfico da frequência cíclotron ω_c versus $e\lambda$. ω_c aumenta à medida que aumenta o parâmetro $e\lambda \in (1/2, 3/2)$. Isso não muda quando $-1/2 < e\lambda \leq 1/2$. Este efeito é mais forte para menores valores de n ; (figura direita) gráfico de ω_c versus $v_F \sqrt{2|eB_0|}$ para alguns valores de $e\lambda$ e para $n = 1$.

Para as soluções em torno do vale K' , nós apenas mudamos λ por $-\lambda$. Desta forma, temos $-3/2 < e\lambda < 1/2$. Para $n = 0$, a energia zero é ausente quando $-3/2 < e\lambda < -1/2$. A energia zero existe se $-1/2 \leq e\lambda < 1/2$, como antes. Concluimos então que o pseudo campo magnético dado por $1/x^2$ não mostra o nível de Landau zero em torno de ambos os vales, K e K' .

Outros problemas devem ser interessantes para investigar as consequências da modulação espacial sobre os níveis de Landau relativísticos, entre eles estão, a versão relativística dos estados do gato de Schrodinger [37] e o estudo de transições de fases quânticas [38].

Capítulo 6

Conclusões e perspectivas futuras

Nesta dissertação estudamos as propriedades eletrônicas do grafeno, sendo este o primeiro sistema bidimensional observado experimentalmente. Sua estrutura é responsável por intrigantes propriedades, tais como uma boa condutividade térmica, mecânica, e sendo o primeiro material onde os elétrons são considerados livres e podem ser modelados como um sistema fermiônico pela equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com $(2 + 1)$ dimensões. A partir deste cenário, introduzimos no nosso modelo o pseudo campo magnético na folha de grafeno para analisar o comportamento dos elétrons. Este pseudo campo foi introduzido devido a deformações mecânicas, que com isso, muda o comprimento das ligações entre átomos, afetando a forma como os elétrons se propagam na sua rede cristalina.

Investigamos como os níveis de Landau relativísticos no grafeno são modificados na presença de um campo magnético perpendicular constante, juntamente com um pseudo campo magnético ortogonal variando espacialmente. Consideramos este último caindo como $1/x^2$. Fomos capazes de estudar este problema analiticamente desde a nossa equação de Dirac, restando uma equação diferencial chamada de equação *Equação Biconfluent de Heun*(EBH), cuja solução está bem estabelecida e tem aparecido em muitos contextos [26, 39, 40], ajudando e abordando diferentes problemas físicos analiticamente como fizemos aqui. Temos observado que em tal campo, dado por $1/x^2$, o nível de Landau zero em torno de ambos os vales, K e K' deixa de ser observado. A consequência é que um platô Hall desenvolve um fator de enchimento $\nu = 0$.

Também examinamos a mudança de energia, devido à presença do pseudo campo magnético variável e investigamos como ele influencia a frequência de ciclotron relativís-

tica. Vimos que funções de onda irregulares e funções de onda que não divergem (são soluções regulares) estão presentes. Observamos que os níveis de Landau relativísticos ficam inalterados quando $-1/2 < e\lambda \leq 1/2$.

Podemos citar que o grafeno sob diferentes campos magnéticos dependente da posição foi investigado teoricamente na referência [41], incluindo um único campo magnético proporcional a $1/x^2$. Seria também interessante verificá-los como pseudo campos magnéticos combinados com um campo magnético constante, como fizemos aqui. Se qualquer simulações ou experimentos envolvendo grafeno deixar de observar o nível de Landau zero, a presença de variados campos pseudo magnéticos devem ser investigados. Outra possibilidade é a presença de *defeito topológico* em uma folha de grafeno, uma vez que a sua existência também divide a energia zero [42].

Como perspectivas de novos trabalhos podemos propor novas configurações de pseudo campo magnético, verificando se existe a possibilidade de abrir o *gap* entre a banda de condução e a banda de valência a partir de deformações mecânicas.

Apêndice A

Modificando os parâmetros de salto

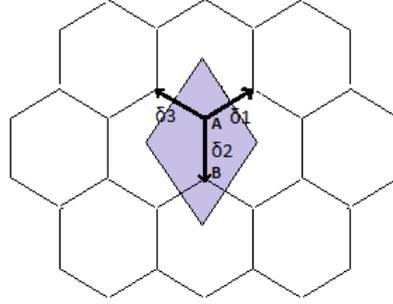


Figura A.1: Célula unitária do grafeno.

Começando com o hamiltoniano sem deformação na rede e usando a aproximação de primeiros vizinhos, temos

$$H_0 = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (|A, i\rangle \langle B, j| + h.c). \quad (\text{A.1})$$

Considerando deformações suaves, e levando em consideração que os parâmetros de salto t_i , podem ser todos diferentes, o hamiltoniano (A.1), torna-se

$$H = H_0 - \sum_{\langle i,j \rangle} \delta t_{ij} (|A, i\rangle \langle B, j| + h.c), \quad (\text{A.2})$$

onde δt_{ij} é uma pequena variação em relação a t ($t_{ij} = t + \delta t_{ij}$).

Fazendo uma transformada de Fourier para os estados $|A, i\rangle$ e $|B, j\rangle$, obtemos

$$|A, i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{K}} |A, \mathbf{K}\rangle e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_i} \quad (\text{A.3})$$

$$|B, j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{K}} |B, \mathbf{K}\rangle e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_j}, \quad (\text{A.4})$$

e substituindo na equação (A.2), temos

$$H = H_0 - \sum_{\langle i,j \rangle} \delta t_{ij} \left[\sum_{\mathbf{K}} |A, \mathbf{K}\rangle e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_i} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}'} \langle B, \mathbf{K}' | e^{-i\mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_j} + h.c. \right] \quad (\text{A.5})$$

$$H = H_0 - \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} |A, \mathbf{K}\rangle \langle B, \mathbf{K}' | \frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta t_{ij} e^{i(\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_i - \mathbf{K}'\cdot\mathbf{R}_j)} + h.c., \quad (\text{A.6})$$

fazendo a soma em todos i e sobre os seus vizinhos mais próximos

$$\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \delta, \quad (\text{A.7})$$

podemos escrever a equação (A.6) como

$$H = H_0 - \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} |A, \mathbf{K}\rangle \langle B, \mathbf{K}' | \frac{1}{N} \sum_{\langle i, \delta \rangle} \delta t_i(\delta) e^{i[\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}_i - \mathbf{K}'\cdot(\mathbf{R}_i + \delta)]} + h.c. \quad (\text{A.8})$$

$$H = H_0 - \sum_{\mathbf{K}, \mathbf{K}'} |A, \mathbf{K}\rangle \langle B, \mathbf{K}' | \frac{1}{N} \sum_{\langle i, \delta \rangle} \delta t_i(\delta) e^{i(\mathbf{K} - \mathbf{K}')\cdot\mathbf{R}_i - i\mathbf{K}'\cdot\delta} + h.c. \quad (\text{A.9})$$

Pegando pequenos valores próximo ao ponto K , como

$$\mathbf{K} = \mathbf{K} + \mathbf{q} \quad \text{e} \quad \mathbf{K}' = \mathbf{K} + \mathbf{q}', \quad (\text{A.10})$$

e substituindo na equação (A.9), temos

$$H \approx H_0 - \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} |A, \mathbf{q}\rangle \langle B, \mathbf{q}' | \frac{1}{N} \sum_{\langle i, \delta \rangle} \delta t_i(\delta) e^{i(\mathbf{q} - \mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}_i - i\mathbf{K}\cdot\delta} \underbrace{e^{-i\mathbf{q}'\cdot\delta}}_{=1} + h.c. \quad (\text{A.11})$$

Voltando para o espaço real pela transformação

$$|A, r\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} |A, \mathbf{q}\rangle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}}, \quad (\text{A.12})$$

e fazendo a substituição

$$\delta t_i(\delta) \rightarrow \delta t_\delta(\mathbf{r}) \quad \text{e} \quad \sum_i \rightarrow \int \frac{d\mathbf{r}}{A}, \quad (\text{A.13})$$

onde A é a área da célula unitária, obtemos

$$H = H_0 + \int d\mathbf{r} |A, \mathbf{r}\rangle \langle B, \mathbf{r} | \mathcal{A}(r), \quad (\text{A.14})$$

onde

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = - \sum_{\delta} \frac{\delta t_\delta}{A}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K}\cdot\delta}. \quad (\text{A.15})$$

Podemos escrever (A.14), como

$$H = H_0 + \int d\mathbf{r} \mathcal{A}(r) |\mathbf{r}, \mathbf{A}\rangle \langle \mathbf{r}, \mathbf{B}|, \quad (\text{A.16})$$

e temos que \mathcal{A} , sempre pode ser escrita como

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \mathcal{A}_x(\mathbf{r}) - i\mathcal{A}_y(\mathbf{r}). \quad (\text{A.17})$$

Com isso obtemos

$$H = H_0 + \int d\mathbf{r} \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{A}_x - i\mathcal{A}_y \\ \mathcal{A}_x + i\mathcal{A}_y & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.18})$$

que podemos reescrever como

$$H = H_0 + \int d\mathbf{r} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{A}(\mathbf{r})]. \quad (\text{A.19})$$

Substituindo H_0

$$H = \int d\mathbf{r} [v_f \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\nabla) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{A}(\mathbf{r})] \quad (\text{A.20})$$

$$H = \int d\mathbf{r} [\boldsymbol{\sigma} \cdot (-iv_f \nabla + \mathcal{A})]. \quad (\text{A.21})$$

Com isso temos que o hamiltoniano é dado por

$$H = \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\hbar v_f \nabla + \mathcal{A}), \quad (\text{A.22})$$

onde $\mathcal{A} = (\mathcal{A}_x, \mathcal{A}_y)$.

Apêndice B

Relacionando as modificações dos parâmetros de salto com as deformações da rede

Vamos assumir que os deslocamentos atômicos \mathbf{u} são pequenos em comparação com as distâncias interatômicas $a = l$.

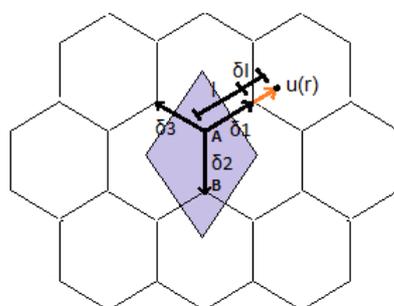


Figura B.1: Rede do grafeno.

Mudanças nos comprimentos das ligações leva a mudanças nas amplitudes de salto, sendo estas dadas por

$$\delta t_a = \left(\frac{\partial t}{\partial a} \right) \delta l_a \quad \text{com} \quad a = 1, 2, 3. \quad (\text{B.1})$$

A alteração local no comprimento das ligações entre vizinhos pode ser escrita como

$$\delta l_a = \frac{\delta_a}{l} \cdot [\mathbf{u}_A(\mathbf{R}_i) - \mathbf{u}_B(\mathbf{R}_i + \delta_a)], \quad (\text{B.2})$$

onde \mathbf{u}_A e \mathbf{u}_B são vetores para os átomos correspondente e δ_a é o vetor do vizinho mais próximo.

No limite do contínuo (teoria da elasticidade), os deslocamentos locais dos átomos na célula unitária pode ser relacionado com $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ por

$$(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B) = \kappa^{-1}(\delta_a \cdot \nabla)\mathbf{u}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.3})$$

onde κ é uma quantidade adimensional que depende de detalhes microscópicos.

Substituindo (B.3) em (B.2), temos

$$\delta l_a = \frac{1}{l\kappa} \delta_a \cdot [(\delta_a \cdot \nabla)\mathbf{u}(\mathbf{r})] \quad (\text{B.4})$$

$$\delta l_a = \frac{1}{l\kappa} \sum_i \delta_{a_i} \left[\sum_j \delta_{a_j} \frac{\partial}{\partial x_j} \right] u_i \quad (\text{B.5})$$

$$\delta l_a = \frac{1}{l\kappa} \sum_{ij} \delta_{a_i} \delta_{a_j} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right], \quad (\text{B.6})$$

e substituindo (B.6) em (B.1), encontramos

$$\delta t_a = \frac{1}{l\kappa} \left(\frac{\partial t}{\partial a} \right) \sum_{ij} \delta_{a_i} \delta_{a_j} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right], \quad (\text{B.7})$$

onde o tensor deformação é definido por

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (\text{B.8})$$

logo podemos reescrever a equação (B.7) como

$$\delta t_a = \frac{1}{l\kappa} \left(\frac{\partial t}{\partial a} \right) \sum_{ij} \delta_{a_i} \delta_{a_j} u_{ij}. \quad (\text{B.9})$$

Substituindo (B.9) na equação

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = - \sum_{a=1}^3 \delta t_a(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \delta} \quad (\text{B.10})$$

encontramos

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = - \sum_{\delta} \frac{1}{l\kappa} \left(\frac{\partial t}{\partial a} \right) \sum_{ij} \delta_{a_i} \delta_{a_j} u_{ij}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{K} \cdot \delta} \quad (\text{B.11})$$

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = - \sum_{ij} \Gamma_{ij} u_{ij}(\mathbf{r}), \quad (\text{B.12})$$

sendo

$$\Gamma_{ij} = -\frac{1}{l\kappa} \left(\frac{\partial t}{\partial a} \right) \sum_{\delta} \delta_{a_i} \delta_{a_j} e^{-i\mathbf{K}\cdot\delta}, \quad (\text{B.13})$$

logo temos que

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \text{tr}[\Gamma u]. \quad (\text{B.14})$$

Encontramos que

$$\Gamma = \frac{3}{4}\beta\kappa(\sigma_x - i\sigma_y), \quad (\text{B.15})$$

calculando o traço da equação (B.14), obtemos

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \frac{3}{4}\beta\kappa [(u_{xx} - u_{yy}) - 2iu_{xy}] \quad (\text{B.16})$$

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = \frac{3}{4}\beta\kappa [(u_{xx} - u_{yy})\hat{x} - 2iu_{xy}\hat{y}] \quad (\text{B.17})$$

Referências Bibliográficas

- [1] GEIN, A. K.; NOVOSELOV, K.S., **The rise of graphene**. Nature Materials, vol. 6, no 3, pp. 183-191, 2007.
- [2] WALLACE,P.R., **The Band Theory of Graphite**. Physical. Review, vol. 71, no 9, pp. 622-634, 1947.
- [3] KLITZING, K. V., DORDA, G., PEPPER, M., **New Method for High - Accuracy Determination of the Fine - Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance**. Physical Review Letters, Vol. 45, no 6, pp. 495-497, 1980.
- [4] KLITZING, K. V., **The Quantum Hall Effect**. Nobel lecture, December 9, 1985.
- [5] LEVY, N., BURKE, S. A., MEAKER, K. L., PANLASIGUI, M., ZETTL, A., GUINEA, F., CASTRO NETO, A. H., CROMMIER, M. F., **Strain-Induced Pseudo Magnetic Fields Greater Than 300 Tesla in Graphene Nanobubbles**. Science. vol. 329, pp. 544 - 547, 2010.
- [6] KROTO, H. W., HEATH, J.R., O'BRIEN, S.C., CURL, R.F., SMALLEY, R.E., **C_{60} : Buckminsterfullerene**. Nature, vol.318, pp. 162-163, 1985.
- [7] IJIMA, S., **Helical Microtubes of graphite carbon**. Nature, Vol.354, pp. 56-58, 1991.
- [8] LEE, C., WEI, X., KYSAR, J. W., HONE, J., **Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene**. Science, vol. 321, no 5887, pp. 385-388, 2008.
- [9] NOVOSELOV, K. S., GEIN, A. K., MOROZOV, S. V., JIANG, D., ZHANG, Y., DUBONOS, S. V., GRIGORIEVA, V., FIRSOV, A. A., **Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films**. Science, vol. 306, no 5696, pp. 266-669, 2004.

- [10] MERMIN, N. D., **Crystalline order in two dimensions**. Physical Review Letters, vol. 176, pp. 250-254, 1968.
- [11] MCCANN, E., **Graphene Nanoelectronics: Metrology, Synthesis, Properties and Applications**. 2012.
- [12] HALLIDAY, D., RESNICK, R., WALKER, J., **Fundamentos de física**. 8ª edição, vol. 3, editora LTC, 2009.
- [13] GOEBING, M. O., **Quantum Hall Effects**, Lecture notes (2009)
- [14] ASHCROFT, N. W., MERMIN, N. D., **Solid State Physics** (Harcourt, 1976)
- [15] GRIFFITHS, D. J., **Introduction to Electrodynamics**. New Jersey, 1999.
- [16] KINOSHITA, J., **Quantum Hall Effect**. *Nimt.*, vol. 9, no 39, pp. 3 - 5, 2007.
- [17] KLITZING, K. V., **The Quantized Hall Effect**. *Rev. Mod. Phys.*, vol. 58, no 519, 1986.
- [18] DAS SARMA, S., ADAM, S., HWANG, E. H., ROSSI, E., **Electronic transport in two-dimensional graphene**. *Reviews of Modern Physics*. vol. 83, no 2, pp. 407-470, 2011.
- [19] NOVOSELOV, K. S.; GEIN, A.K.; MOROSOV, S. V., JIANG, D., KATSNELSON, M. I., GRIGORIEVA, I. V., DUBONOS, S. V., FIRSOV, A. A., **Two Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene**. *Nature*, vol. 438, no 7065, pp. 197-200, 2005.
- [20] NETO, A. H., GUINEA, F., PERES, N. M. R.; NOVOSELOV, K. S., GEIN, A. K. **The Electronic Properties of Graphene**. *Reviews of Modern Physics*. vol. 81, no 1, pp. 109-162, 2009.
- [21] KATSNELSON, M.I., **Graphene : carbon in two dimensions**. Cambridge University, 2012.
- [22] VOZMEDIANO, M.A.H., KATSNELSON, M.I., GUINEA, F., **Gauge field in graphene**. *Elsevier*. vol. 496, pp. 109 - 148, 2010.

- [23] LEITE, L. G. S., FILGUEIRAS, C., COGOLLO, D., SILVA, E. O., **Influence of spatially varying pseudo-magnetic field on a 2D electron gas in graphene.** Physics Letters A, vol. 379, pp. 907-911, 2015.
- [24] PEREIRA, V. M., NETO, A. H. C., **Strain Engineering of Graphene Electronic Structure.** Physical Review Letters., vol. 103, 2009.
- [25] GUIANA, F., LOW, T., **Strain-induced pseudo-magnetic field for novel graphene electronics.** Nano Lett., vol. 10, 2010.
- [26] MEDEIROS, E. R. F., MELO, E. R. B., **Relativistic quantum dynamics of a charged particle in cosmic string spacetime in the presence of magnetic field and scalar potential.** Eur. Phys. J., vol. 72, 2012.
- [27] CHEB-TERRAB, E. S., **Solutions for the general, confluent and biconfluent Heun equations and their connection with Abel equations.** Journal of Physics A, vol. 37, no 42, 2004.
- [28] KOWALSKI, K., REMBIELINSKI, J., **On the dynamics of a particle on a cone,** Ann. Phys., vol. 329, pp. 146-157, 2013.
- [29] HAGEN, C. R., **Comment on Relativistic Aharonov-Bohm effect in the presence of planar Coulomb potentials.** Phys. Rev. A, vol. 77, 2008.
- [30] PERELOMOV, A. M., POPOV, V. S., **“Fall to the center” in quantum mechanics.** Teoret. Mat. Fiz., vol. 4, no 1, pp. 48-65, 1970.
- [31] RONVEAUX, A., **Heun’s Differential Equations.** Oxford University Press, Oxford (1995)
- [32] GIESBERS, A. J. M., PONOMARENKO, L. A., NOVOSELOV, K. S., GEIM, A. K., KATSNELSON, M. I., MAAN, J. C., ZEITLER, U., **Gap opening in the zeroth Landau level of graphene.** Phys. Rev. B, vol. 80, 2009.
- [33] ORTMANN, F., ROCHE, S., **Splitting of the Zero-Energy Landau Level and Universal Dissipative Conductivity at Critical Points in Disordered Graphene.** Phys. Rev. Lett., vol. 110, 2013.

- [34] HERBUT, I. F., ROY, B., **Quantum critical scaling in magnetic field near the Dirac point in graphene.** Phys. Rev. B, vol.77, 2008.
- [35] SAHOO, S., **Quantum Hall effect in graphene: Status and prospects.** Indian. Jour. of Pure and App. Phys., vol. 49, pp. 367-371, 2011.
- [36] JIANG, Z., HENRIKSEN, E. A., TUNG, L. C., WANG, Y.-J., SCHWARTZ, M. E., HAN, M. Y., KIM, P., STORMER, H. L., **Infrared Spectroscopy of Landau Levels of Graphene.** Phy. Rev. Lett., vol. 98, 2007.
- [37] A. BERMUDEZ, A., MARTIN-DELGADO, M. A., SOLANO, E., **Mesoscopic Superposition States in Relativistic Landau Levels.** Phys. Rev. Lett., vol. 99, 2007.
- [38] BERMUDEZ, A., MARTIN-DELGADO, M. A., LUIS, A., **Chirality quantum phase transition in the Dirac oscillator.** Phys. Rev. A, vol. 77, 2008.
- [39] SETARE, M. R., JAHANI, D., **The Effect of a Varying Magnetic Field on the Dirac Fermion Spectrum of Graphene.** Int. Jour. of Mod. Phys. B, vol. 25, no. 3, 2011.
- [40] CASTRO, L. B., **Relating pseudospin and spin symmetries through chiral transformation with tensor interaction.** Phys. Rev. C, vol. 86, 2012.
- [41] KURU, Ş. NEGRO, J. NIETO, L. M., **Exact analytic solutions for a Dirac electron moving in graphene under magnetic fields.** J. Phys. Condens. Matter, vol. 21, 2009.
- [42] BUENO, M. J., FURTADO, C., CARVALHO, A. M. M., **Landau levels in graphene layers with topological defects.** Eur. Phys. Jour. B, vol. 85, 2012.