



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

**Pseudo Campo Aharonov-Bohm nos níveis de
Landau relativísticos no grafeno**

Rosinildo Fideles do Nascimento

CAMPINA GRANDE

- Setembro 2015 -

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

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Pseudo Campo Aharonov-Bohm nos níveis de
Landau relativísticos no grafeno**

Rosinildo Fideles do Nascimento

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: Física de partículas.

Orientador: Prof. Dr. Diego Alejandro Cogollo Aponte

CAMPINA GRANDE

- Setembro 2015 -

N244p Nascimento, Rosinildo Fideles do.
Pseudo campo Aharonov-Bohm nos níveis de Landau relativísticos no grafeno / Rosinildo Fideles do Nascimento. – Campina Grande, 2015.
38 f. : il. color.

Dissertação (Mestrado em Física) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2015.
"Orientação: Prof. Dr. Diego Alejandro Cogollo Aponte".
Referências.

1. Física de Partículas. 2. Grafeno. 3. Teoria de Calibre Abelian e não Abelian. 4. Efeito Aharonov-Bohm. 5. Campos de Calibre no Grafeno. I. Aponte, Diego Alejandro Cogollo. III. Título.

CDU 539.12(043)

PSEUDO CAMPO AHARONOV-BOHM NOS NÍVEIS DE
LANDAU RELATIVÍSTICOS NO GRAFENO

ROSINILDO FIDELES DO NASCIMENTO

Aprovada em _____

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Diego Alejandro Cogollo Aponte
Orientador

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras
Coorientador

Prof. Dr. Lincoln Sampaio de Araújo
Examinador Interno

Prof. Dr. Edilberto Oliveira Silva
Examinador Externo

”Toda a nossa ciência, comparada com a realidade, é primitiva e infantil - e, no entanto, é a coisa mais preciosa que temos.”

Albert Einstein

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, por me dar força para ir em busca dos meus sonhos. Aos meus pais Paulo João do Nascimento e a minha mãe Maria do Socorro Fidelis do Nascimento, por ensinar-me: o respeito, a honestidade, a ser grato, entre outros valores que me garante uma convivência harmônica em uma sociedade. Aos meus irmãos e familiares que sempre me incentivaram a prosseguir nos estudos, apesar das dificuldades enfrentadas.

Agradeço também, aos meus amigos que contribuíram diretamente e indiretamente para meu desenvolvimento acadêmico. Em especial, a Raquel Luana Cavalcanti Ferreira, Aline Simões dos Santos, Wagner porto, Gutembergue Fernandes Felix e Frankbelson dos Santos Azevedo pelo companheirismo nos estudos durante o período no mestrado. Ao meu orientador Diego Alejandro Cogollo Aponte pela paciência e dedicação no decorrer da pesquisa. Ao meu coorientador Cleverson Filgueiras por me ensinar a importância de uma pesquisa para o desenvolvimento da ciência e da minha carreira acadêmica.

Por fim, agradeço aos professores da instituição por contribuírem para o desenvolvimento do meu aprendizado e a CAPES por financiar o desenvolvimento de minha pesquisa.

Aos meus pais e irmãos.

Lista de Figuras

2.1	Geometria dos orbitais atômico do carbono definida na seguinte ordem: orbital $1s$, orbital $2p_x$, orbital $2p_y$ e orbital $2p_z$	4
2.2	Em (a), temos a junção do orbital $2s$ com o orbital $2p_x$ para formar dois orbitais híbridos sp ; em (b), temos a junção do orbital $2s$ com os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ para formar três orbitais híbridos $2p^2$; em (c), temos a junção do orbital $2s$ com os orbitais $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$ para formar os quatro orbitais híbridos sp^3	5
2.3	Formação da rede hexagonal do grafeno a partir de orbitais híbridos sp^2 e orbitais não hibridizados $2p_z$ responsáveis pelas ligações σ e π respectivamente.	6
2.4	Grafeno como uma estrutura base para a formação do: (a) grafite, (b) nanotubos de carbono e (c) fulereno.	6
2.5	Em (a), temos a rede direta do grafeno. O losango representa a célula unitária com os dois sítios inequivalentes: o sítio A em vermelho e o sítio B em verde. \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os vetores primitivo da rede direta e τ_1 , τ_2 , τ_3 são os vetores vizinhos mais próximos. Em (b), temos a primeira zona de Brillouin destacada em azul; os vetores primitivos da rede recíproca \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 e os pontos de simetria Γ , M, K e K.	8
2.6	Relação de dispersão dos elétrons π na primeira zona de zona de Brillouin. Ao lado, está esquematizado a dispersão linear de energia próximos aos pontos Dirac, enfatizando a banda de valência e a banda de condução. . . .	14
3.1	Um feixe de Partículas carregadas é dividido em duas partes ao passar próximo a um solenoide e em um instante posterior se recombina gerando um padrão de interferência.	21

3.2	Desclinação positiva da rede hexagonal do grafeno causada pela remoção de um setor angular.	23
3.3	Nanotubo de grafeno analisado em um microscópio de efeito de túnel.	25
4.1	Níveis Landau na estrutura cristalina do Grafeno na presença de um pseudo campo Aharonov-Bhom.	32

Sumário

Agradecimentos	v
Lista de Figuras	vii
Resumo	ix
Abstract	x
1 Introdução	1
2 O grafeno	3
2.1 Estrutura atômica	3
2.2 Rede cristalina do grafeno	7
2.3 Estrutura eletrônica	8
2.3.1 Modelo de ligação forte	9
2.3.2 Férmions de Dirac em um cristal Bi-dimensional	13
3 Campos de calibre no grafeno	16
3.1 Campos de calibre	16
3.1.1 Teorias de calibre Abelianas	16
3.1.2 Teorias de calibre não-abeliano	18
3.2 Efeito Aharonov-Bohm	20
3.3 Campos de calibre no grafeno	22
3.3.1 Campos de calibre no grafeno na presença de defeitos topológicos	23
3.3.2 Campos de calibre no grafeno devido à deformações elásticas	24
4 Níveis de Landau	27

5 Conclusão e perspectiva	34
Referências Bibliográficas	36

Resumo

No limite contínuo de baixas energias no grafeno os elétrons se comportam como férmions de Dirac sem massa. E como já se sabe a algum tempo, deformações elásticas na rede hexagonal dão origem a propriedades magnéticas interessantes. Seguindo essa linha de raciocínio, juntamente com o fato de que essas deformações podem ser descritas matematicamente por um potencial vetor e, mais ainda, que esse potencial vetor pode ser introduzido na equação de Dirac através de um acoplamento mínimo, reescrevemos a equação de Dirac em um sistema de coordenadas polares em $2 + 1$ dimensões, adicionando um potencial vetor tipo Aharonov-Bohm e em seguida calculamos os níveis de Landau associados. Para esse modelo foi observado que no nível zero, os níveis de energia se desdobrava em outros dois níveis, diferentes de zero, indicando assim a existência de um *gap* na estrutura de bandas do grafeno.

Palavras-chave: Grafeno - Teoria de calibre Abelian e não-Abelian - Efeito Aharonov-Bohm - Campos de calibre no grafeno.

Abstract

In the limit continuous low power in graphene electrons behave as Dirac fermions massless. And as we have known for some time, elastic deformations in the hexagonal lattice give rise to interesting magnetic properties. Following this line of reasoning, together with the fact that this deformations can be described mathematically by a vector potential and, even more, that the vector potential can be introduced into the Dirac equation via a coupling minimum, rewrite the Dirac equation in a polar coordinate system in $2 + 1$ dimensions, adding a potential vector type Aharonov-Bohm and then calculated the Landau levels associated. For this model it was observed that at zero, power levels are unfolded in other two level nonzero, thus indicating the existence of an gap in the band structure of graphene.

Keywords: Graphene - Abelian gauge theories and non-Abelian - Aharonov-Bhom effect - gauge fields in graphene.

Capítulo 1

Introdução

Há mais de 70 anos atrás, pesquisadores teóricos afirmaram que cristais bidimensionais não poderiam existir, uma vez que eram termodinamicamente instáveis [1], [2]. Esta teoria foi derrubada, quando em 2004, os físicos russos Andre K. Geim e Konstantin S. Novoselov conseguiram isolar experimentalmente pela primeira vez o grafeno [3]. O método usado por eles, chamado de clivagem micromecânica, é bastante simples, ele consiste em esfoliar o grafite usando fitas adesivas. Após obtenção de uma amostra, o mesmo era avaliado através de um microscópio óptico. O grafeno é considerado atualmente um material bastante promissor como o substituto do silício, na eletrônica. As suas propriedades de alta mobilidade eletrônica, óptica e térmica [4][5][6] lhe colocaram em um patamar de um dos materiais mais promissores para o avanço tecnológico das próximas décadas. Empresas e universidades em todo o mundo estão investindo muito dinheiro em pesquisas na busca incessante de prepará-lo para ser aplicado na indústria, em especial, na eletrônica. O que garante tais propriedades no grafeno é o fato das partículas presentes na estrutura, próximos aos vértices dos hexágonos, comportarem-se como partículas quânticas e relativísticas, propriedade que não havia sido encontrada em nenhum material cristalino até o momento.

Pesquisas desenvolvidas em teoria de campos aplicadas ao grafeno, mostraram teoricamente, que o grafeno quando tensionado (ou curvado), adquire algumas propriedades magnéticas. Tais propriedades magnéticas foram observadas inicialmente em grafeno com defeitos topológicos, que foi descrito como a substituição de hexágonos por pentágonos (produzindo curvatura positiva) ou por heptágonos (produzindo curvatura negativa) [7]. Nesta nova configuração, foi verificado que os elétrons que circundam os defeitos em torno

de um caminho fechado adquirem um fator de fase análogo ao do efeito Aharonov-Bohm, quando circulando um solenóide na direção de um potencial vetor que é perpendicular a um campo magnético constante dentro do mesmo. Isto foi imediatamente generalizado para a estrutura com deformação elástica. Em contraste com o efeito Aharonov-Bohm, o aparecimento de pseudo campo magnético está associado a campos de gauge Abelianos e não-Abelianos decorrente de tensões e curvatura respectivamente.

Posteriormente, esta teoria ganhou destaque entre os pesquisadores da área, quando foi provado experimentalmente que os campos de gauge estão associados aos níveis de Landau para grafeno submetido a grandes deformações na folha [9], [10]. Experimentos realizados com microscópio de varredura e tunelamento em nanotubos de grafeno, conseguiram produzir um pseudo campo magnético com intensidade de 300T, resultado extraordinário para um material, já que nunca havia determinado um valor dessa magnitude.

No capítulo dois dessa dissertação abordaremos inicialmente a ocorrência de orbitais hibridizados na rede hexagonal e seu papel na formação das ligações entre os átomos. Na seção seguinte mostraremos a formação das bandas eletrônicas de valência e de condução, analisando detalhadamente o comportamento dos elétrons próximos aos pontos de Dirac no limite contínuo. No capítulo três trataremos um discurso entre teorias de calibre Abelianas e não-Abelianas e também sobre o efeito Aharonov-Bohm. Em seguida mostraremos os principais campos de calibre originados no grafeno e suas possíveis causas, focando principalmente naqueles decorrentes do estiramento da rede. No intuito de dar uma contribuição para pesquisas nessa área, no capítulo quatro buscaremos analisar os níveis de Landau na presença de um pseudo campo de calibre específico, análogo ao efeito Aharonov-Bohm. Finalmente, no capítulo cinco teremos a conclusão do trabalho realizado e algumas perspectivas para o desenvolvimento de trabalhos futuros.

Capítulo 2

O grafeno

A busca por novas classes de materiais fez com que em 2004 os cientistas Andre K. Geim, Konstantin S. Novoselov juntamente com colaboradores da Manchester university [3], conseguisse isolar pela primeira vez uma camada de grafite com espessura de um átomo de carbono, por meio de um processo conhecido por esfoliação mecânica surgindo, assim, o grafeno.

No intuito de compreender o motivo pelo qual esse material vem sendo bastante discutido na atualidade, neste capítulo faremos uma breve introdução sobre o carbono e estenderemos essa análise a formação do grafeno e de suas propriedades.

2.1 Estrutura atômica

O carbono é um dos elementos mais abundantes da natureza e responsável pela formação de diversos materiais orgânicos necessários para a sobrevivência humana. Pode ser encontrado no ambiente sob duas formas principais: o diamante (que é estável a altas pressões e altas temperaturas) e o grafite. No seu estado fundamental, o átomo de carbono possui seis elétrons que estão distribuídos em subníveis de energia, da menor até a maior (tomando como referência o núcleo) nos orbitais atômicos. De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, cada orbital pode conter no máximo dois elétrons, com spins emparelhados. Portanto, usando essas definições, temos que a configuração eletrônica do carbono é: $1s^2 2s^2 2p^2$ [11]. As formas dos orbitais são mostradas na figura 2.1, onde temos que os orbitais $1s$ e $2s$ são esferas, enquanto que os orbitais $2p$ são esferas (ou lobos) quase tangentes separadas por um plano. Nesta configuração, cada orbital corresponde a uma

região do espaço em torno do núcleo, e pode ser representado por uma função de onda ψ que é interpretada como um estado de uma partícula com suas respectivas energias. Mas, a função de onda não tem um sentido físico em si, sendo necessário uma interpretação estatística para ela. Para Born, o ψ^2 expressa a probabilidade de um elétron ser encontrado em uma determinada posição do espaço. A função de onda pode ser positiva, negativa ou zero, isto depende, em geral, da fase da onda. O orbital $2s$ possui uma superfície nodal, ou seja, uma região onde $\psi = 0$, já na parte interior ψ_2 é negativo. Para o orbital $2p$, ψ_{2p} , é positivo em um lobo e negativo do outro enquanto que no plano nodal $\psi = 0$ [13].

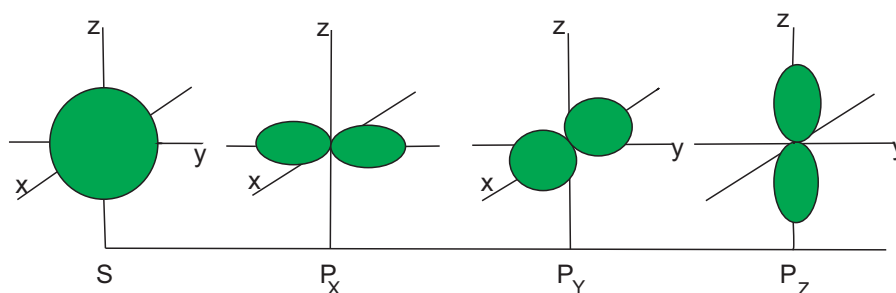


Figura 2.1: Geometria dos orbitais atômico do carbono definida na seguinte ordem: orbital $1s$, orbital $2p_x$, orbital $2p_y$ e orbital $2p_z$.

Até o momento, estávamos considerando o átomo de carbono isolado. Mas, o que acontece quando aproximamos um átomo de carbono do outro? O resultado é a formação de orbitais moleculares, que sobrepõe ao orbital do outro átomo através de uma ligação covalente, formando as moléculas de carbono. Estas ligações podem ser de dois tipos: do tipo σ que é uma ligação formada pela sobreposição frontal (eixo em comum), que é bastante forte e difícil de ser rompida e a ligação do tipo π que é obtida a partir de uma aproximação lateral (eixo paralelo), que é uma ligação mais fraca, e só ocorre em orbitais do tipo p .

Um modelo matemático baseado na mecânica quântica que ajuda a descrever satisfatoriamente a estrutura de materiais formados das ligações C-C (carbono-carbono) é chamado de hibridação (ou hibridização). A hibridação baseia-se em combinar funções de ondas individuais para os orbitais s e p para formar orbitais novos que tem as mesmas propriedades dos orbitais originais, em proporções variáveis, sendo chamados de orbitais híbridos.

No carbono, é possível encontrar três tipos de hibridação, sp , sp^2 e sp^3 , conforme a

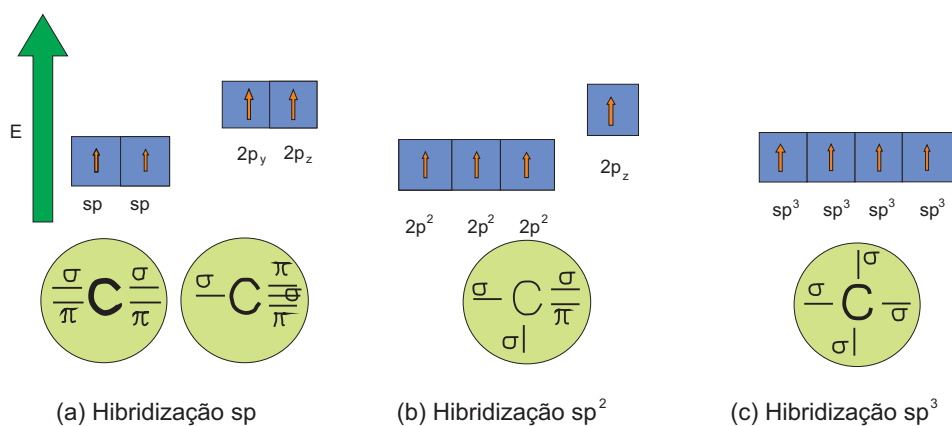


Figura 2.2: Em (a), temos a junção do orbital $2s$ com o orbital $2p_x$ para formar dois orbitais híbridos sp ; em (b), temos a junção do orbital $2s$ com os orbitais $2p_x$ e $2p_y$ para formar três orbitais híbridos $2p^2$; em (c), temos a junção do orbital $2s$ com os orbitais $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$ para formar os quatro orbitais híbridos sp^3 .

figura 2.2. A hibridação sp^3 consiste da combinação do orbital $2s$ com os três orbitais $2p$ gerando quatro orbitais híbridos do tipo σ . A estrutura geométrica formada é tetraédrica, que separa os orbitais hibridizados com ângulos de $109,5$ graus. O cristal tridimensional originado dessa combinação de orbitais é o diamante.

O segundo tipo de hibridação é o sp^2 , que é obtido quando o orbital atômico $2s$ é misturado com dois orbitais $2p$, gerando três orbitais híbridos (num plano) com ângulos de separação de 120 graus formando uma geometria trigonal plana, sobrando um orbital $2p$ não hibridizado responsáveis pelas ligações π , a ligação dos átomos por meio desse tipo de hibridação dá origem ao grafite.

Na hibridação do tipo sp , o orbital atômico $2s$ se junta a um orbital $2p$ formando dois orbitais híbridos sobrando dois orbitais não hibridizados. A estrutura obtida desse arranjo é linear plana com ângulo de separação dos orbitais de 180 graus. Um caso típico da ocorrência desse tipo de hibridação é a formação da molécula de acetileno.

Além do grafite, a hibridação sp^2 gera outros materiais com ligações C-C, como é o caso do grafeno, recentemente descoberto, que é uma camada de grafite com espessura de um átomo de carbono. Este cristal bidimensional é obtido quando orbitais híbridos sp^2 de um átomo de carbono sobrepõem a átomos vizinhos formando uma rede hexagonal, semelhante a um favo de mel, como mostrado na figura 2.3. Possui três ligações do tipo

σ no plano e uma ligação do tipo π perpendicular a folha, resultante do orbital $2p_z$ não hibridizado.

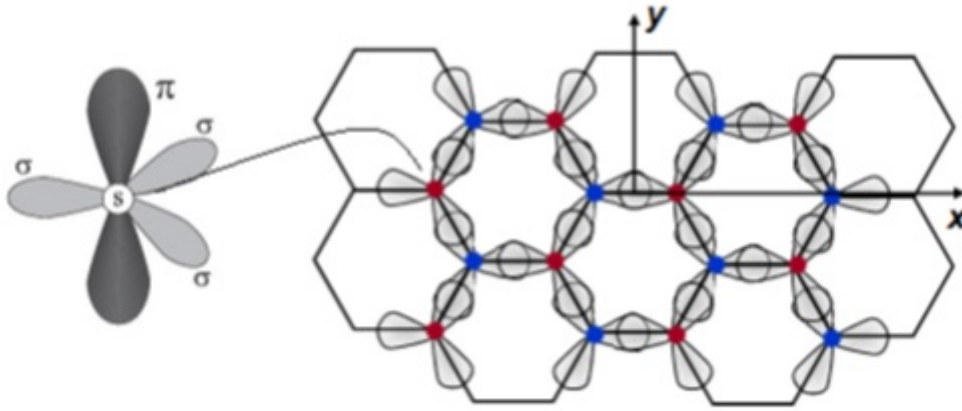


Figura 2.3: Formação da rede hexagonal do grafeno a partir de orbitais híbridos sp^2 e orbitais não hibridizados $2p_z$ responsáveis pelas ligações σ e π respectivamente.

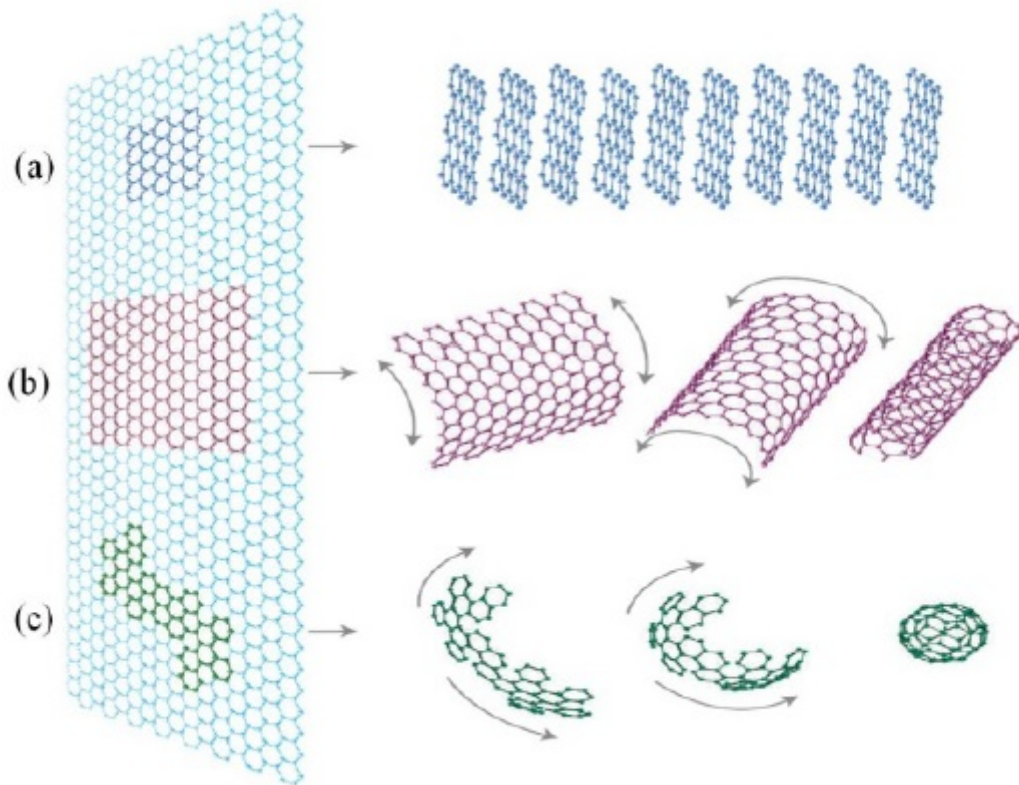


Figura 2.4: Grafeno como uma estrutura base para a formação do: (a) grafite, (b) nanotubos de carbono e (c) fulereno.

O grafeno é considerado o bloco fundamental para a construção de outros materiais com orbitais híbridos sp^2 , tais como: o fulereno (grafeno dobrado em forma de bola de futebol) com dimensão $0D$, o nanotubo (grafeno enrolado em forma de um cilindro) com dimensão $1D$ e o grafite, citado anteriormente, (empilhamento de grafeno) com dimensão $3D$, (conforme mostra a figura 2.4).

2.2 Rede cristalina do grafeno

Como foi mencionado anteriormente a estrutura cristalina do grafeno é originada da sobreposição de dois orbitais híbridos sp^2 que se juntam em um eixo comum para formar as três ligações σ que fazem um ângulo de 120 graus entre si, dando origem a um arranjo hexagonal e planar de átomos de carbono, enquanto que os orbitais $2p_z$ formam as ligações do tipo π gerando sobre a superfície um "mar" de orbitais π .

A estrutura cristalina do grafeno pode ser representada por uma rede de Bravais triangular bidimensional, com dois átomos de carbono por célula unitária, formando duas redes triangulares sobrepostas (a sub-rede A e a sub-rede B), conforme ilustrada na figura 2.5 (a). Nesta rede, os vetores unitários do espaço real $\vec{\alpha}_1$ e $\vec{\alpha}_2$, que definem a célula unitária, é dada em coordenadas cartesianas por:

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

onde $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3} \times a_{cc} = 2,46$ Angstrom é o parâmetro de rede e $a_{cc} = 1,42$ angstrom é a distância dos vizinhos mais próximos dos átomos de carbono.

Temos também que os átomos da sub-rede-A estão relacionados com os átomos da sub-rede B pelos seguintes vetores:

$$\tau_1 = \frac{a\sqrt{3}}{6}\hat{x} + \frac{a}{2}\hat{y}, \quad \tau_2 = \frac{a\sqrt{3}}{6}\hat{x} - \frac{a}{2}\hat{y}, \quad \tau_3 = -\frac{a\sqrt{3}}{3}\hat{x}. \quad (2.2)$$

Portanto, em termo dos vetores da rede direta (2.1) e dos vetores vizinhos mais próximos (2.2), podemos determinar a posição de cada átomo de carbono nas células unitárias do grafeno por:

$$\mathbf{R}_B = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad \mathbf{R}_A = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 + \tau_3, \quad (2.3)$$

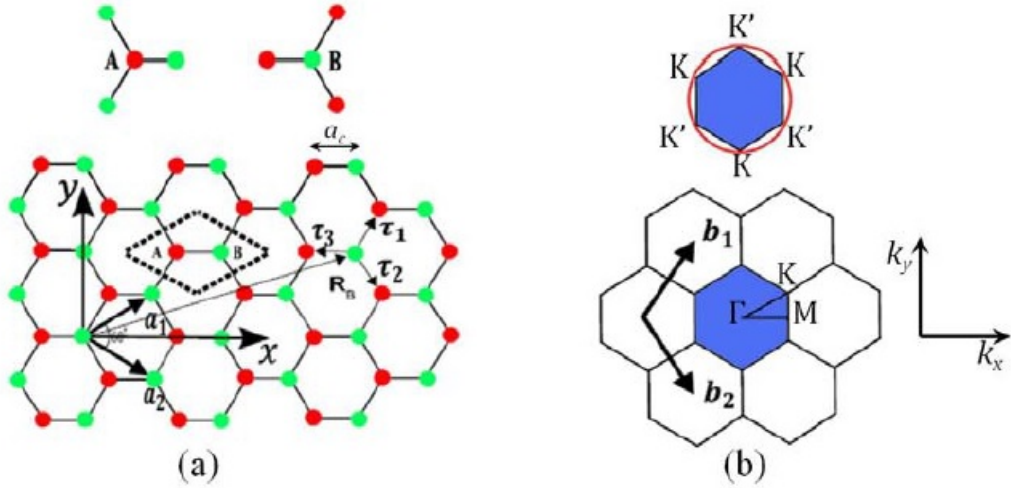


Figura 2.5: Em (a), temos a rede direta do grafeno. O losango representa a célula unitária com os dois sítios inequivalentes: o sítio A em vermelho e o sítio B em verde. \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os vetores primitivo da rede direta e τ_1, τ_2, τ_3 são os vetores vizinhos mais próximos. Em (b), temos a primeira zona de Brillouin destacada em azul; os vetores primitivos da rede recíproca $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ e os pontos de simetria Γ, M, K e K' .

onde m e n são números inteiros. Por outro lado, a primeira zona de Brillouin pode ser obtida fazendo uma transformada de Fourier da rede direta. Assim, os vetores unitários da rede recíproca que definem a primeira zona de Brillouin são:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\hat{x} + \frac{2\pi}{a}\hat{y} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\sqrt{3}\pi}{3a}\hat{x} - \frac{2\pi}{a}\hat{y}, \quad (2.4)$$

onde $b = |\mathbf{b}_1| = |\mathbf{b}_2| = 4\pi/3a$ é o parâmetro de rede do grafeno no espaço recíproco.

Na figura 2.5 (b) está ilustrada a primeira zona de Brillouin revelando os principais pontos de simetria Γ, M, k, k' . Os pontos k e k' , nos vértices da zona de Brillouin, são pontos não-equivalentes conhecido na literatura como pontos de Dirac. Estes pontos passarão a ser nosso foco de agora em diante já que são deles que as principais características do grafeno são verificadas.

2.3 Estrutura eletrônica

Dentre alguns modelos teóricos usados para calcular a estrutura eletrônica de bandas para o grafeno, usamos o modelo teórico conhecido como ligação forte. Neste modelo, as funções de onda dos elétrons são construídas como uma combinação linear de orbitais

atômicos $2p_z$ [12], não-hibridizados, onde se considera apenas um orbital por sitio a fim de que se possa analisar os estados eletrônicos próximo ao nível de Fermi.

2.3.1 Modelo de ligação forte

Devido à simetria da rede cristalina do grafeno, tomamos como base para a construção das funções de onda dos elétrons, as funções de Bloch, as quais são definidas a partir do orbital p_z . Como há duas redes triangulares sobrepostas (sub-rede A e sub-rede B) para cada célula unitária, teremos duas funções de Bloch deslocadas correspondentes, ou seja,

$$\Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j,i}} \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j,i}) \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{R}_{j,i}$ é a posição do átomo, ϕ_j é a função de base correspondente ao orbital p_z (no centro do átomo) e N é o número de células unitárias. Então, a função de onda eletrônica $\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ pode ser escrita em termos das funções de Bloch como

$$\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n C_{j,j'}(\mathbf{k}) \Phi_j'(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad \text{para} \quad j = A, B, \quad (2.6)$$

com $C_{j,j'}$ sendo os coeficientes da expansão a serem determinados.

Os autovalores de energia descritos pelo hamiltoniano H são dados por:

$$E_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{\int \Psi_j^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) H \Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int \Psi_j^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) d\mathbf{r}}, \quad (2.7)$$

no qual substituindo $\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ em 2.7, obtemos:

$$E_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{\sum_{j,j'=1}^n c_{j,i}^* c_{j',j'} \langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle}{\sum_{j,j'=1}^n c_{j,i}^* c_{j',j'} \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle}, \quad (2.8)$$

onde podemos definir os elementos da matriz de transferência H (que representa o salto dos elétrons entre os diferentes átomos de carbono) e da matriz de sobreposição S (que caracteriza a sobreposição dos orbitais de átomos diferentes) como:

$$H_{j,j'} = \langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle \quad S_{j,j'} = \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle. \quad (2.9)$$

Agora, minimizando os autovalores de energia E_j em relação aos coeficientes de expansão $c_{j,j'}^*$, obtemos a equação de autovalores

$$H\Psi_j = E_j S\Psi_j, \quad (2.10)$$

no qual as bandas de energia E_j podem ser obtidas resolvendo a equação secular

$$\det(H\Psi_j - E_j S\Psi_j) = 0. \quad (2.11)$$

Levando em consideração um orbital $2p_z$ por sitio atômico para uma monocamada de grafeno, temos a seguinte representação para as matrizes de transferência H , de sobreposição S e pseudo-spinor Ψ

$$H_G = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{pmatrix}, \quad \Psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

Passaremos agora a determinar os elementos das matrizes de transferência e sobreposição (2.12). Substituindo a função de onda (2.6) nas equações (2.9), podemos escrever os elementos equivalentes à sub-rede A como

$$H_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{A,j} - \mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,j}) \rangle. \quad (2.13)$$

Se assumirmos que a contribuição dominante decorre do mesmo local $j = i$ dentro de cada célula unitária, temos

$$H_{AA} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) \rangle, \quad (2.14)$$

com o elemento da matriz dentro da somatória sendo igual ao parâmetro

$$\varepsilon_{2p} = \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) \rangle, \quad (2.15)$$

o qual corresponde a energia do orbital $2p_z$. Portanto, o elemento H_{AA} será:

$$H_{AA} \approx \varepsilon_{2p}. \quad (2.16)$$

Visto que a sub-rede A possui a mesma estrutura que a sub-rede B, e os átomos são quimicamente idênticos, podemos escrever

$$H_{BB} = H_{AA} \approx \varepsilon_{2p} \quad (2.17)$$

O procedimento usado para calcular os elementos da matriz de sobreposição é o mesmo utilizado para a matriz de transferência. Contudo, neste caso, a superposição do orbital $2p_z$ é igual a uma unidade, a saber

$$\langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,j}) \rangle = 1. \quad (2.18)$$

Assumindo a contribuição dominante no mesmo sitio, podemos escrever

$$S_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{A,j} - \mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,j}) \rangle, \quad (2.19)$$

$$S_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) \rangle, \quad (2.20)$$

$$S_{AA} = 1. \quad (2.21)$$

Novamente, assumindo que a estrutura da sub-rede A é semelhante ao da sub-rede B, temos

$$S_{BB} = S_{AA} = 1. \quad (2.22)$$

Passaremos agora a calcular os elementos fora da diagonal. Substituindo novamente a função de onda do elétron (2,6) em (2,9) e assumindo a interação apenas entre os vizinhos mais próximos, temos que:

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{B,j} - \mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,j}) \rangle. \quad (2.23)$$

Este elemento expõe o salto entre a sub-rede A e a sub-rede B, no qual a soma é feita em todos os sítios nas respectivas sub-redes. Assim, podemos definir um novo parâmetro

$$t = -\langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,j}) \rangle. \quad (2.24)$$

Portanto, H_{AB} é dado por

$$H_{AB} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{B,j} - \mathbf{R}_{A,i})} t = -t f(\mathbf{k}), \quad (2.25)$$

com

$$f(k) = \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}\tau_{j'}}, \quad (2.26)$$

onde τ é o vetor posição do átomo B_l relativo ao átomo A_i . Agora substituindo as equações (2.2) em (2.26), podemos reescrever a expressão (2.26) como

$$f(\mathbf{k}) = \sqrt{1 + 4\cos\frac{k_y a}{2} \cos\frac{\sqrt{3}k_x a}{2} + 4\cos^2\frac{k_y a}{2}}. \quad (2.27)$$

Podemos obter o outro elemento fora da diagonal da matriz H_{BA} tomando o complexo conjugado de H_{AB} . Assim, temos

$$H_{AB} = -tf(\mathbf{k}) \quad e \quad H_{BA} = -tf^*(\mathbf{k}). \quad (2.28)$$

De uma forma similar podemos obter os elementos fora da diagonal da matriz de sobreposição

$$S_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{B,j} - \mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,j}) \rangle, \quad (2.29)$$

$$S_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^3 e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_{B,q} - \mathbf{R}_{A,i})} \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,q}) \rangle, \quad (2.30)$$

$$S_{AB} = -S_0 f(\mathbf{k}). \quad (2.31)$$

Aqui, podemos definir mais um parâmetro S_0 de modo que quando ele for considerado diferente de zero, devemos levar em conta a possibilidade de que orbitais em sítios atômicos adjacentes não são estritamente ortogonais, isto é,

$$S_0 = \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,q}) \rangle. \quad (2.32)$$

Deste modo, o elemento da matriz de sobreposição fora da diagonal é dado por

$$S_{AB} = -S_0 f(\mathbf{k}) = S_{BA}^* = S_0 f^*(\mathbf{k}). \quad (2.33)$$

Finalmente, substituindo as expressões (2.17), (2.22), (2.28) em (2.12), obtemos

$$H_G = \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} & -tf(\mathbf{k}) \\ -tf^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_{2p} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & S_0 f(\mathbf{k}) \\ S_0 f^*(\mathbf{k}) & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

As matrizes acima serão de grande valia na próxima seção para o cálculo de bandas de energia na vizinhança dos pontos de Férmi.

2.3.2 Férmions de Dirac em um cristal Bi-dimensional

Como já relatado, o grafeno possui dois átomos por célula unitária, e desta forma, teremos a formação de duas bandas, a banda de valência π e a banda de condução π^* . Uma das formas de obter a dispersão dos elétrons π é resolvendo a equação secular 2.11, que ao ser introduzida a expressão 2.34, obtemos

$$\det \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} - E & -(t + S_0 E)f(\mathbf{k}) \\ -(t + S_0 E)f^*(\mathbf{k}) & \varepsilon_{2p} - E \end{pmatrix} = 0. \quad (2.35)$$

Resolvendo o determinante (2.35) para a energia E , obtemos

$$E_{\pm} = \frac{\varepsilon_{2p} \pm t|f(\mathbf{k})|}{1 \mp S_0|f(\mathbf{k})|}. \quad (2.36)$$

Aqui, os valores de energia E_- correspondem a banda de valência e E_+ a banda de condução. Os parâmetros t e ε_{2p} podem ser encontrados mediante cálculos de primeiros princípios ou medidas experimentais. Assumindo para esses parâmetros os valores $t = 3,003eV$, $S_0 = 0,129$, $\varepsilon_{2p} = 0$ podemos construir a figura (2.4)[28] (Este último valor significa que a energia de Férmi foi escolhido para ser igual a energia do orbital $2p_z$). Nela podemos observar que as bandas de valência π e de condução π^* estão separadas em todos os pontos com exceção dos pontos k e k' , chamados de pontos de Dirac. Temos ainda que os elétrons da célula unitária ocupam completamente a banda de valência deixando a banda de condução completamente vazia, caracterizando assim o grafeno como um semicondutor de gap nulo.

Próximo aos pontos de Dirac k e k' , a dispersão é linear e as propriedades eletrônicas podem ser representadas por um hamiltoniano de Dirac efetivo. Isto pode ser observado fazendo uma expansão linear da função $f(\mathbf{k})$ para momentos $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{K}_{\xi}$ medido do centro do ponto K_{ξ} . Portanto, teremos o hamiltoniano

$$H_{\xi} = \hbar v_f \begin{pmatrix} 0 & \xi k_x - i k_y \\ \xi k_x + i k_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

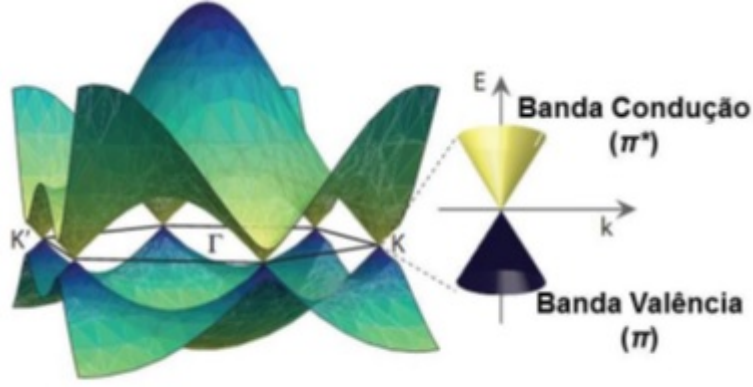


Figura 2.6: Relação de dispersão dos elétrons π na primeira zona de zona de Brillouin. Ao lado, está esquematizado a dispersão linear de energia próximos aos pontos Dirac, enfatizando a banda de valência e a banda de condução.

onde temos que $\xi = \pm 1$ correspondem respectivamente aos pontos de Dirac k e k' e $v_f = \sqrt{3}at/2\hbar$ é a velocidade de Fermi que vale aproximadamente $10^6 m/s$.

Os autovalores e autofunções de H são

$$E = \pm v_f \hbar k \quad e \quad \psi = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \xi e^{i\xi\theta} \end{pmatrix} e^{ip \cdot r/\hbar}, \quad (2.38)$$

onde θ é o ângulo formado entre o vetor de onda k e o eixo x .

A dispersão de energia linear dada por (2.38) é precisamente idêntica à solução da equação de Dirac para uma partícula relativística com massa de repouso nula. A relação de dispersão para uma partícula relativística é dada por:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4, \quad (2.39)$$

onde c é a velocidade da luz e m_0 , a massa de repouso da partícula.

Para partículas relativísticas com massa de repouso igual a zero, a relação de dispersão $E = \pm \hbar c k$ é análoga a equação (2.38) com a velocidade da luz substituída pela velocidade de Fermi. Portanto, os elétrons próximos aos pontos k e k' podem ser tratados usando a equação de Dirac, movendo-se com velocidade de Fermi que é aproximadamente 300 vezes menor que a velocidade da luz. Além disso, devido a existência das duas sub-redes equivalentes (dois átomos por célula unitária) os portadores de carga no grafeno são representados por funções de onda de duas componentes, sendo cada uma delas perten-

cente à contribuição de uma das sub-redes.

Levando em consideração tudo que foi dito acima, podemos escrever uma equação de Dirac efetiva que descreve a dinâmica de partícula de spin 1/2 relativística no grafeno como:

$$-iv_f(\sigma\nabla)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}), \quad (2.40)$$

onde σ são as matrizes de Pauli na representação do grupo $SU(2)$.

Então, os portadores de carga no grafeno, em regiões próximas aos pontos de Dirac, podem ser tratados como Férmions de Dirac sem massa que possui uma alta mobilidade eletrônica e apresentam condução balística, razão pela qual despertou grande interesse em pesquisas nesta área.

Capítulo 3

Campos de calibre no grafeno

3.1 Campos de calibre

Muitas teorias em física podem ser representadas por lagrangianas que são invariantes por determinados tipos de simetrias. Esta é definida em teoria de campos em função dos vários campos (spinorial, por exemplo) e de suas primeiras derivadas em relação às coordenadas. Usando esta definição, passaremos a desenvolver neste seção o conceito de teoria de calibre, que é uma classe de teorias físicas fundamentadas na ideia de que as transformações de simetria podem ser locais ou globais.

3.1.1 Teorias de calibre Abelianas

O conceito de teoria de gauge surgiu inicialmente em 1864 na eletrodinâmica clássica a partir das equações Maxwell que unificaram as interações elétricas e magnéticas [24]. Para compreendermos como se deu esse processo, começamos com a equação de Maxwell para a carga magnética, $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$. Isso nos possibilita escrever:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (3.1)$$

com os campos se transformando como

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}. \quad (3.2)$$

A razão pelo qual os campos (3.2), quando introduzido nas expressões (3.1), conduzir aos mesmos campos eletromagnéticos é uma consequência da invariância de calibre na

eletrodinâmica clássica.

Em teoria quântica de campos, as invariâncias de calibre podem ser determinadas usando Lagrangeanas. Para analisarmos esta teoria, considere a lagrangiana de Dirac para partículas de spin 1/2,

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi. \quad (3.3)$$

Ela tem uma simetria global U(1) envolvida, ou seja, o lagrangiano é invariante por rotações globais do tipo:

$$\psi \rightarrow U\psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}U^\dagger, \quad (3.4)$$

onde $U = e^{-iq\alpha}$. Tomando o fator de fase α dependente das coordenadas do espaço tempo, $\alpha = \alpha(x)$, a transformação é chamada de transformação local, e (em uma transformação local), podemos perceber que $\partial_\mu\psi$ não se transforma da mesma forma que ψ , conforme mostrado a seguir:

$$\partial_\mu(\psi e^{-iq\alpha(x)}) = \partial_\mu\psi e^{-iq\alpha(x)} - iq\psi e^{-iq\alpha(x)}\partial_\mu\alpha(x). \quad (3.5)$$

portanto

$$\mathcal{L}' = \bar{\psi} e^{iq\alpha(x)} [i\gamma^\mu \partial_\mu(\psi e^{-iq\alpha(x)}) - m\psi e^{-iq\alpha(x)}], \quad (3.6)$$

$$\mathcal{L}' = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi - q\bar{\psi}\gamma^\mu\psi\partial\alpha(x). \quad (3.7)$$

Portanto, a lagrangiana não é mais invariante. Para resolver esse problema precisamos acrescentar um novo campo A_μ chamado de campo de calibre. Este novo termo é introduzido mediante uma derivada covariante que chamamos de acoplamento mínimo, definido como

$$D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu, \quad (3.8)$$

com o campo A_μ se transformando como

$$A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu\alpha(x). \quad (3.9)$$

Substituindo a derivada covariante (3.8) e a transformação de calibre (3.9) na Lagrangeana (3.1), obtemos:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi - J^\mu A_\mu, \quad (3.10)$$

onde

$$J^\mu = q\bar{\psi}\gamma^\mu\psi. \quad (3.11)$$

Ao inserir o campo A_μ , estamos exigindo uma transformação de fase local, ou melhor, ao impor que uma fase se transforme localmente, estamos fazendo com que um fóton interaja com os elétrons. Essa é a razão pela qual aparece o termo extra na expressão (3.10). A presença dessa interação nos obriga a introduzir na Lagrangeana de Dirac um termo extra correspondente à energia cinética para os campos vetoriais, que descrevem a propagação dos fótons livres. Essa nova Lagrangeana é escrita como

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi - q\bar{\psi}\gamma^\mu\psi A_\mu - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}. \quad (3.12)$$

A Lagrangeana (3.12) deu origem a uma nova teoria física conhecida na literatura como eletrodinâmica quântica (QED).

3.1.2 Teorias de calibre não-abeliano

Uma teoria de calibre Abelian, como foi visto na última seção, é a base da QED. Uma generalização dessa teoria foi obtida por Yang e Mills [25], para um grupo não-Abeliano. Para entendermos essa teoria, consideremos inicialmente a Lagrangeana livre:

$$\mathcal{L}_0 = \bar{\Psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu - M)\Psi, \quad (3.13)$$

onde Ψ e seu adjunto $\bar{\Psi}$, são dados, respectivamente, por

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \bar{\Psi} = \left(\bar{\psi}_1 \quad \bar{\psi}_2 \right), \quad (3.14)$$

e M uma matriz quadrada

$$M = \begin{pmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

A Lagrangeana (3.13) se assemelha à Lagrangeana de Dirac (3.3), exceto pelo fato de estarmos tratando de grupos não-Abelianos com simetria SU(2). Os dois elementos da matriz coluna têm uma invariância global

$$\Psi \rightarrow G\Psi. \quad (3.16)$$

A matriz G da transformação é do tipo

$$G = e^{\frac{\sigma_a \alpha_a}{2}}, \quad (3.17)$$

onde σ são as matrizes de Pauli, α são parâmetros reais e $a = 1, 2, 3$.

A matriz (3.17) tem determinante 1, para preservar a normalização. De forma análoga ao que foi feito na *QED*, Yang e Mills propuseram que o parâmetro α fosse uma função de x . Para isso, foi assumido um $\lambda(x) = -\alpha(x)/g$, tal que, inserido na expressão (3.12), temos

$$\Psi \rightarrow e^{-ig\sigma_a \lambda_a} \Psi. \quad (3.18)$$

Contudo, isso não garantiu uma invariância para a Lagrangiana, já que a derivada $\partial_\mu \Psi$ não se transforma da mesma forma que Ψ sendo necessário definir uma derivada covariante

$$D_\mu = \partial_\mu + ig\sigma^a A_\mu^a, \quad (3.19)$$

onde a vai de 1 até 3 e g é a constante de acoplamento do grupo SU(2), semelhante a constante de acoplamento e do grupo U(1). Assim, a derivada covariante passa a se transformar como

$$D_\mu \rightarrow e^{-ig\sigma\lambda(x)} (D_\mu \psi). \quad (3.20)$$

A invariância da Lagrangiana (3.13) garante as seguintes correntes conservadas, segundo o teorema de Noether [24]>

$$J^\mu = g(\bar{\Psi}\gamma^\mu \sigma^\alpha \Psi). \quad (3.21)$$

Portanto, a lagrangeana correspondente a essa teoria é dada por

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(i\gamma^\mu D_\mu - M)\Psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu}, \quad (3.22)$$

onde o tensor $F_{\mu\nu}$, da teoria de calibre abeliana, pode ser generalizado para a teoria de calibre $SU(2)$, fazendo

$$F_{\mu\nu}^a = \frac{1}{ig}[D_\nu, D_\mu] = D_\nu A_\mu^a - D_\mu A_\nu^a + ig[A_\nu^a, A_\mu^a]. \quad (3.23)$$

3.2 Efeito Aharonov-Bohm

Em eletrodinâmica clássica, as intensidades dos campos elétricos e magnéticos são as quantidades relevantes. Os potenciais escalar e vetor que aparecem nas equações (3.1) são construções teóricas convenientes [14], introduzidas para auxiliar nos cálculos matemáticos.

Por outro lado, na mecânica quântica, os potenciais passam a ter um significado físico, como foi comprovado no experimento de Aharonov-Bohm. O potencial vetor é inserido na hamiltoniana de Schrodinger por meio de um acoplamento mínimo $\mathbf{P} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$, da seguinte forma:

$$H = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2 + e\phi. \quad (3.24)$$

Classicamente, tinha sido provado, através da expressão da força de Lorentz que não poderia existir influências eletromagnéticas nas regiões em que E e B fossem zero [14]. Contudo, em 1959, Aharonov e Bohm [27] mostraram que o potencial vetor pode afetar o comportamento quântico de uma partícula carregada até mesmo quando ela está passando por pontos em que o campo é zero.

Para compreendermos melhor este efeito, considere um feixe de partículas carregadas movendo-se em direção a um solenoide. O feixe se divide em dois ao passar por um obstáculo (como ilustrado na figura 3.1) e se recombina em uma certa região do espaço (depois de ter passado pelas vizinhanças do solenoide), gerando um padrão de interferência. O solenoide é extremamente longo e circula uma corrente I . Nessas condições haverá um campo magnético interno B constante e um campo externo nulo. No entanto, o potencial vetor não será zero fora do solenóide, ele é dado (em coordenadas polares) pelas seguintes expressões

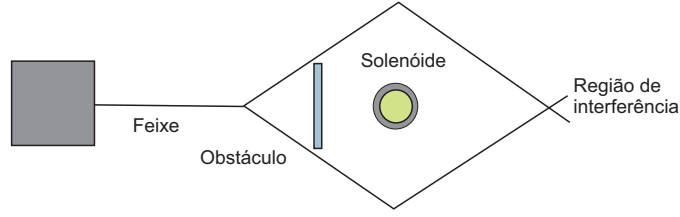


Figura 3.1: Um feixe de Partículas carregadas é dividido em duas partes ao passar próximo a um solenoide e em um instante posterior se recombina gerando um padrão de interferência.

$$A_\phi = \frac{B}{2}r, \quad r < a \quad A_\phi = \frac{BR^2}{2r} = \frac{\Phi}{2\pi r}, \quad r > a \quad (3.25)$$

onde $\Phi = \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ é o fluxo magnético através do solenóide.

Na região onde o campo magnético é nulo, a equação de Schrodinger dependente do tempo é dada por

$$\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2 + V \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad (3.26)$$

cuja solução é obtida a partir da construção de Dirac

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\phi} \Psi_0, \quad (3.27)$$

onde ψ_0 é a solução da equação de Schrodinger quando \mathbf{A} é zero. O fator de fase magnética é dado por

$$\phi = \frac{e}{\hbar} \int_{r_0}^r \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}. \quad (3.28)$$

O gradiente de Ψ é dado por:

$$\nabla \Psi = e^{i\phi} (i\nabla \phi) \Psi_0 + e^{i\phi} (\nabla \Psi_0) \quad (3.29)$$

onde, $\nabla \phi = \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}$. Então,

$$(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})\psi = -i\hbar e^{i\phi} \nabla \Psi_0 \quad (3.30)$$

e segue-se que

$$(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2\psi = (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})(-i\hbar e^{i\phi}\nabla\Psi_0), \quad (3.31)$$

$$= -\hbar^2 e^{i\phi}\nabla^2\Psi_0 \quad (3.32)$$

Substituindo a expressão (3.18) na equação (3.13) e eliminando o fator de fase, obtemos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\Psi_0 = i\hbar\frac{\partial\Psi_0}{\partial t} \quad (3.33)$$

Isto mostra que ψ_0 satisfaz a equação de Schrodinger na ausência de um potencial vetor \mathbf{A} . Já na presença de um campo magnético, a solução da equação de Schrodinger pode ser obtida multiplicando ψ_0 pelo fator de fase magnética, conforme mostrado na expressão 3.27.

Voltando ao experimento de Aharonov-Bohm, os feixes de elétrons que eram divididos em dois ao passarem próximo a um solenóide longo, se recombinam novamente com fases diferentes,

$$\phi = \frac{e}{\hbar} \int \mathbf{A} d\mathbf{r} = \frac{e\Phi}{2\pi\hbar} \int \frac{1}{r} \hat{e}_\theta \cdot (rd\theta\hat{e}_\theta) = \pm \frac{e\Phi}{2\hbar}, \quad (3.34)$$

onde o sinal positivo corresponde ao fato de os elétrons se moverem na mesma direção do potencial \mathbf{A} e o sinal de menos no caso contrário.

A diferença de fase, que é proporcional ao fluxo de campo magnético, é

$$\Delta\phi = \frac{e\Phi}{\hbar} = \frac{e}{\hbar} \int \mathbf{A} d\mathbf{r}. \quad (3.35)$$

3.3 Campos de calibre no grafeno

Diferentes procedimentos físicos dão origem a perturbações na equação de Dirac e podem ser descritos matematicamente como campos de calibre efetivos que correspondem a saltos entre sub-redes [7]. Usando esta definição, passaremos a analisar nesta seção os diferentes campos de calibre que podem ser encontrados no grafeno.

3.3.1 Campos de calibre no grafeno na presença de defeitos topológicos

Experimentos realizados mostraram a existência de defeitos topológicos na rede hexagonal proveniente de uma quebra espontânea de simetria, semelhante ao que acontece na teoria da relatividade geral. Estes defeitos podem ser descritos pela substituição de hexágonos por pentágonos ou heptágonos, provocando uma curvatura e também pela substituição de pares pentágono-heptágonos [6] [7], causando um deslocamento no meio chamado de desclinações e luxações respectivamente.

Como mostrado na figura (3.2), outra forma de analisar esses defeitos, é a partir do processo Volterra, o qual se baseia em fazer um corte na estrutura, retirando ou inserindo um setor angular, formando uma estrutura por meio de uma simetria de rotação. A figura geométrica formada da retirada de setores angulares são cones, enquanto que o excesso de setores angulares origina pontos de sela.

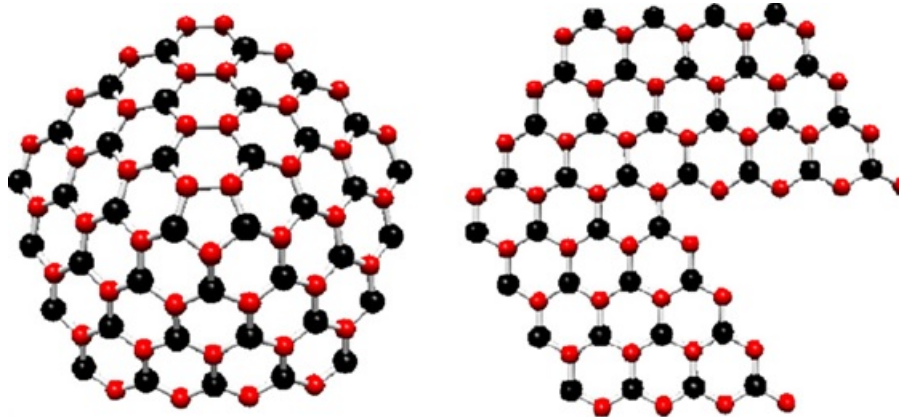


Figura 3.2: Desclinação positiva da rede hexagonal do grafeno causada pela remoção de um setor angular.

No limite contínuo, a modelagem de desclinações dá origem a três campos de gauge acoplados aos graus eletrônicos de liberdade. De acordo com Vozmediano [7], o primeiro está associado com o desfasamento da fase dos elétrons quando circulando em torno do defeito (holonomia) e é responsável pela forma cônica do grafeno. A segunda está associada ao fato dos spinores saltarem para a mesma sub-rede. Por fim, a presença de vários defeitos obriga a introdução de um terceiro tipo de campo de calibre associado com o fato da fase da ligação forte não comutar com a holonomia associada com a troca

dos pontos de Fermi.

3.3.2 Campos de calibre no grafeno devido à deformações elásticas

Uma outra forma de produzir campos de gauge localmente no grafeno, é mediante a introdução de tensões. As deformações elásticas gerada na rede interagem com os elétrons da mesma forma que um campo magnético. Se admitirmos deformações suaves na folha do grafeno, as ligações entre os vizinhos mais próximos deverão ser não equivalentes. Assim, os parâmetros de salto podem ser todos diferentes. Diante dessas condições, o hamiltoniano efetivo na aproximação dos vizinhos mais próximos [15], que descreve os estados eletrônicos próximos aos pontos de Dirac k é dado por

$$H = -i\hbar v_F \vec{\sigma} (\vec{\nabla} - i\vec{A}), \quad (3.36)$$

onde $\mathbf{A} = A_x \hat{x} + A_y \hat{y}$ é o potencial vetor e σ_i são as matrizes de Pauli.

O potencial não perturbado da hamiltoniana é definido em termo dos parâmetros de salto t_i como

$$A_x = \frac{\sqrt{3}}{2}(t_3 - t_2) \quad A_y = \frac{1}{2}(t_2 + t_3 - 2t_1). \quad (3.37)$$

Na presença de ondulações, o parâmetro de salto t dos vizinhos mais próximos passa a ser flutuante, uma vez que depende do tensor deformação,

$$\mathbf{u}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} + \frac{\partial h}{\partial x_i} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right), \quad (3.38)$$

onde x_i são as coordenadas no plano, u_i são as componentes do vetor deslocamento no plano e h são os deslocamentos fora do plano. Visto que os deslocamentos atômicos \mathbf{u} são pequenos, na estrutura fracamente deformada, quando comparado com a constante da rede, temos que o parâmetro de salto dos vizinhos mais próximos é modificado por uma quantidade da forma

$$t_i = t + \frac{\beta t}{a^2} \tau_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_0). \quad (3.39)$$

Na equação acima $\beta = -\frac{\partial \ln t}{\partial \ln a} = 2$ é o parâmetro de Gruneisen, a é o parâmetro da rede, τ_i ($i = 1, 2, 3$) são os vetores vizinhos mais próximos definidos na expressão (2.2) e u_0 é o

vetor deslocamento para o átomo central.

No limite contínuo (teoria da elasticidade), os deslocamentos locais dos átomos na rede de favo mel podem ser relacionados com \mathbf{u} por [7]

$$\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_0 \propto \tau_i \nabla \mathbf{u}, \quad (3.40)$$

do qual obtemos os seguintes campos de gauge:

$$A_x = -2\frac{\beta}{a}u_{xy}, \quad A_y = \frac{\beta}{a}(u_{xx} - u_{yy}), \quad (3.41)$$

onde o tensor tensão $u(\mathbf{r})_{ij}$ está associado a deformações locais no grafeno.

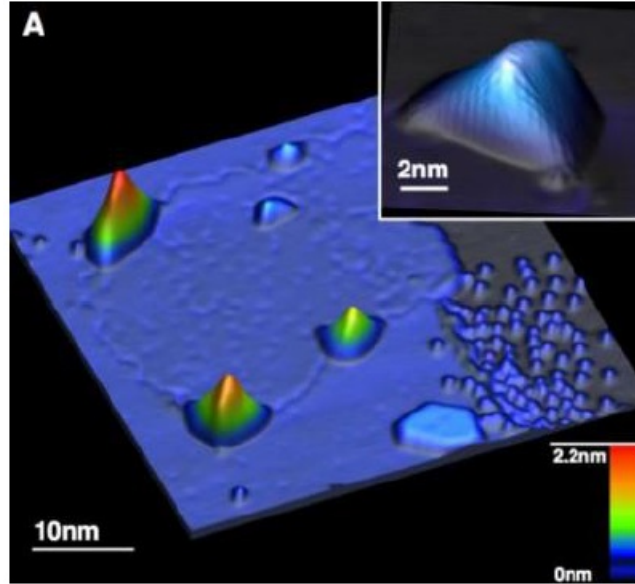


Figura 3.3: Nanotubo de grafeno analisado em um microscópio de efeito de túnel.

No grafeno com deformações, a simetria de inversão temporal é quebrada para um vale [23], contribuindo para um fator de fase adicional da função de onda de um elétron que se move em um caminho fechado. Portanto, elétrons que viajam no sentido horário e anti-horário produzem fases com sinais diferentes. A diferença de fase observada é semelhante ao do efeito Aharonov-bohm, quando o spinor circunda um solenoide. Esta equivalência com o efeito Aharonov-Bohm possibilita a introdução de um pseudo campo magnético,

$$B = \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}. \quad (3.42)$$

Campos como esses foram investigados experimentalmente em nanotubos de carbono no qual foi obtido uma intensidade de 300T Valores como este jamais tinha sido observado. Na figura 3.3, podemos observar a estrutura formada a partir de um microscópio de efeito de túnel. Na próximo capítulo, estudaremos as quantizações de Landau provocada pela aplicação de um campo magnético perpendicular ao material.

Capítulo 4

Níveis de Landau

É conhecido que o campo magnético pode ser introduzido na equação de Dirac usando potenciais escalares e vetoriais. Recentemente, alguns trabalhos vêm sendo desenvolvido na área da dinâmica quântica relativística para investigar o comportamento de partículas carregadas de spin $1/2$ na presença de campos magnéticos. Diferentes mecanismos matemáticos vem sendo utilizado para calcular os estados e os níveis de Landau das partículas na presença de potenciais específicos, como feito nas referências [16], [17], [18]. De forma análoga, passaremos agora a calcular os estados e as energias das partículas presentes na rede hexagonal do grafeno na presença de dois campos magnéticos perpendiculares a estrutura cristalina, um é constante e uniforme e o outro é causado pelo fluxo AB (Aharonov-Bohm). Para isso, consideremos inicialmente a equação de Dirac em $2 + 1$ dimensões em coordenadas cartesianas ($\hbar = c = 1$) na presença de um potencial eletromagnético A_c^μ ,

$$[\gamma^\mu (i\partial_\mu^c - eA_\mu^c) - m]\Psi_c = 0, \quad (4.1)$$

em que os índices gregos variam de 0 a 2 e os índices latinos de 1 a 2. Temos também, que γ^μ é um conjunto de quatro matrizes (matrizes de Dirac) que obedecem a relação de anticomutação

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad (4.2)$$

onde $g^{\mu\nu}$ é a métrica do espaço-tempo plano, ou melhor, a métrica do espaço de Minkowski. Aqui, adotamos a assinatura $(+, -, -)$ para a métrica nesse espaço. Por outro lado, segundo o teorema fundamental de Pauli [19], dois conjuntos de matrizes, $\bar{\gamma}^\mu$ e γ^μ , em

diferentes representações, que obedecem a relação de anticomutação (4.2), são conectadas pela transformação de similaridade

$$\bar{\gamma}^\mu = S\gamma^\mu S^{-1}. \quad (4.3)$$

A matriz S responsável pela transformação de similaridade (4.3) poderá ser unitária se obedecer a relação

$$\gamma^{\mu\dagger} = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 \quad (4.4)$$

Dando presseguinto, passaremos a desenvolver a equação de Dirac (4.1) em um sistema de coordenadas polares. Para isso, consideremos primeiramente a relação existente entre derivadas ordinárias em coordenadas cartesianas e polares, isto é,

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{\sin\theta}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta} \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\cos\theta}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta}. \quad (4.5)$$

e a relação entre potenciais eletromagnéticos

$$A_x = A_\rho \cos\theta - A_\theta \sin\theta \quad A_y = A_\rho \sin\theta + A_\theta \cos\theta. \quad (4.6)$$

Dessa forma desenvolvendo a equação (4.1) e substituindo as expressões (4.5) e (4.6), obtemos

$$\left[\gamma^t \left(i\frac{\partial}{\partial t} - eA_0 \right) + \gamma^\rho \left(i\frac{\partial}{\partial\rho} - eA_\rho \right) + \gamma^\theta \left(\frac{i}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta} - eA_\theta \right) - m \right] \Psi_c = 0, \quad (4.7)$$

em que as matrizes $\bar{\gamma}^\mu = \gamma^t, \gamma^\rho, \gamma^\theta$ são dependentes do espaço e escritas como:

$$\gamma^t = \gamma^0 \quad \gamma^\rho = \gamma^1 \cos\theta + \gamma^2 \sin\theta \quad \gamma^\theta = -\gamma^1 \sin\theta + \gamma^2 \cos\theta. \quad (4.8)$$

Por simplicidade, podemos ainda escrever a expressão (4.7) em uma forma mais compacta como

$$[\bar{\gamma}^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) - m] \Psi_c = 0. \quad (4.9)$$

Definindo o ansatz como $\Psi_c = e^B S \Psi$ (onde $B = -\frac{1}{2} \log \rho$), inserindo na equação (4.9) e multiplicando pela esquerda por $e^{-B} S^{-1}$, temos

$$e^{-B}S^{-1}[\bar{\gamma}^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]e^BS\Psi = 0, \quad (4.10)$$

onde

$$\partial_\mu(e^BS\Psi) = e^BS\partial_\mu\Psi + e^B(\partial_\mu B)S\Psi + e^B(\partial_\mu S)\Psi, \quad (4.11)$$

de modo que obtemos

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu + i\Gamma_\mu - eA_\mu) - m]\Psi = 0. \quad (4.12)$$

Como podemos observar a introdução do ansatz na equação de Dirac faz surgir um termo extra

$$\Gamma_\mu = \partial_\mu B + S^{-1}\partial_\mu S. \quad (4.13)$$

no qual o segundo termo que aparece na expressão (4.13) é a conexão spinorial.

A matriz unitária S que transforma as matrizes $\bar{\gamma}^\rho, \bar{\gamma}^\theta$ em $\gamma^\rho, \gamma^\theta$, depende das coordenadas espaciais e é definida como

$$S(\theta) = e^{-\frac{\theta\sigma_3}{2}} \quad (4.14)$$

onde σ é o gerador da rotação em torno do eixo z . Temos ainda que a expressão (4.14) precisa obedecer a relação de similaridade

$$\gamma^1 = S^{-1}\gamma^\rho S \quad \gamma^2 = S^{-1}\gamma^\theta S. \quad (4.15)$$

Para que o termo extra, $\gamma^\mu\Gamma_\mu$ presente na expressão (4.12) desapareça, é preciso atribuir um valor para B . Isso pode ser obtido através do ansatz $\Psi_c = e^{-\frac{\theta\sigma_3}{2}}\Psi$, ou seja,

$$\begin{aligned} \gamma^\mu\Gamma_\mu &= \gamma^\mu(\partial_\mu B + S^{-1}\partial_\mu S) \\ &= \gamma^1 \left(\frac{\partial}{\partial\rho} B + e^{i\frac{\theta\sigma_3}{2}} \frac{\partial}{\partial\rho} e^{-i\frac{\theta\sigma_3}{2}} \right) + \gamma^2 \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial\theta} B + e^{i\frac{\theta\sigma_3}{2}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial\theta} e^{-i\frac{\theta\sigma_3}{2}} \right) \\ &= \gamma^1 \left(\frac{\partial}{\partial\rho} B + \frac{1}{2\rho} + \gamma^2 \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial\theta} B \right) \end{aligned} \quad (4.16)$$

Portanto, a equação de Dirac (4.12) pode ser reescrita como

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\Psi = 0. \quad (4.17)$$

onde as derivadas ordinárias e o spinor estão definidas em coordenadas polares enquanto que as matrizes gamas de Dirac estão em coordenadas cartesianas.

Uma vez que estamos tratando de Férmons de Dirac no grafeno deformado, na presença de um campo magnético externo constante aplicado perpendicularmente ao plano, podemos tomar a massa de repouso $m = 0$ e um gauge resultante na direção angular, proveniente do campo magnético aplicado e da deformação da rede, como discutido na subseção 3.3.2. Portanto, a expressão (4.17) assume a forma

$$\left[\gamma^0 i \frac{\partial}{\partial t} + \gamma^1 i \frac{\partial}{\partial \rho} + \gamma^2 \left(\frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} - eA_\theta \right) \right] \Psi = 0. \quad (4.18)$$

Como feito por Villalba e Maggiolo [20] [21], escreveremos os spinores em duas componentes, para isso, devemos inserir a seguinte representação em termos das matrizes de Pauli:

$$\beta\gamma^0 = I \quad \beta\gamma^1 = \sigma_1 \quad \beta\gamma^2 = \sigma_2. \quad (4.19)$$

Na verdade a representação (4.19) são matrizes 4×4 com as matrizes de Pauli na diagonal. Assim, podemos construir duas equações diferenciais correspondendo a cada ponto de Dirac. Para o ponto k , por exemplo, temos

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} + \sigma_1 i \frac{\partial}{\partial \rho} + \sigma_2 \left(\frac{i}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} - eA_\theta \right) - m \right] \Psi = 0. \quad (4.20)$$

Aplicando o método de separação de variáveis na expressão (4.21), chegamos à seguinte solução

$$\Psi = \begin{pmatrix} \chi_A \\ \chi_B \end{pmatrix} e^{-i(l\theta + Et)}, \quad (4.21)$$

em que os pseudospinors χ_A e χ_B correspondem à sub-rede A e a sub-rede B, respectivamente, enquanto que as constantes obtidas durante o processo de separação de variáveis l e E é o momento angular e a energia.

Resolvendo agora a expressão (4.20) para a parte radial, encontramos as seguintes equações diferenciais de primeira ordem acopladas:

$$i \left(\frac{d}{d\rho} + \frac{l}{\rho} + eA_\theta \right) \chi_B - E\chi_A = 0, \quad (4.22)$$

$$i \left(\frac{d}{d\rho} - \frac{l}{\rho} - eA_\theta \right) \chi_A - E\chi_B = 0. \quad (4.23)$$

Como estamos considerando que as partículas na rede cristalina do grafeno estão se movendo na presença de um campo magnético constante e uniforme, e sob a ação do efeito AB precisamos adicionar o gauge resultante $A_\theta = \frac{B\rho}{2} + \frac{\lambda}{\rho}$ nas expressões (4.22) e (4.23). Agora, desacoplando-as, encontramos duas equações diferenciais de segunda ordem

$$\frac{d^2\chi_A}{d\rho^2} - \frac{l(l+1) + e\lambda + 2\lambda + e^2\lambda^2}{\rho^2} \chi_A - \frac{e^2B^2\rho^2}{4} \chi_A = \varepsilon\chi_A \quad (4.24)$$

$$\frac{d^2\chi_B}{d\rho^2} - \frac{l(l+1) + e\lambda + 2\lambda + e^2\lambda^2}{\rho^2} \chi_B - \frac{e^2B^2\rho^2}{4} \chi_B = \varepsilon\chi_B \quad (4.25)$$

onde: $\lambda = \pm \frac{\Phi}{2\pi}$ e $\varepsilon = -E^2 - \frac{eB}{2} + eBl + e^2B\lambda$.

A solução geral para as equações diferenciais de segunda ordem (4.24) e (4.25) são as mesmas e podem ser obtidas a partir do método de Frobenius de expansão em séries, cujo resultado é

$$\chi_A(\rho) = \frac{C_1 M(\mu, \nu, z) + C_2 W(\mu, \nu, z)}{\sqrt{\rho}}. \quad (4.26)$$

Aqui, as funções *Whittaker* são definidas em termo das funções *KummerU* e *Hipergeometrica* da seguinte forma:

$$W(\mu, \nu, z) = e^{\frac{z}{2}} z^{\frac{1}{2}+\nu} \text{KummerU} \left(\frac{1}{2} + \nu - \mu, 1 + 2\nu, z \right) \quad (4.27)$$

$$M(\mu, \nu, z) = e^{\frac{z}{2}} z^{\frac{1}{2}+\nu} \text{hipergeometrica} \left(\frac{1}{2} + \nu - \mu, 1 + 2\nu, z \right) \quad (4.28)$$

com

$$\mu = \frac{-2Bel - 2Be\lambda + Be + 2E^2}{4Be} \quad (4.29)$$

$$\nu = \frac{1}{4} + \frac{l}{2} + \frac{\lambda}{2} \quad (4.30)$$

$$z = \frac{1}{2} eB\rho^2 \quad (4.31)$$

De acordo com a condição polinomial das funções hipergeométricas, as soluções correspondentes aos spinores 4.26 só serão normalizadas se $\chi_i \rightarrow 0$ quando $\rho \rightarrow \pm\infty$. Isto só é admitido quando

$$\frac{1}{2} + \nu - \mu = -n. \quad (4.32)$$

Assim, as energias correspondentes aos spinores de Dirac serão

$$E_n = \pm \sqrt{2eB \left(n + l + \lambda + \frac{1}{2} \right)}. \quad (4.33)$$

com números quânticos $l = j \pm \frac{1}{2}$ e $n' = n + j + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}$, onde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, e $l = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Assim, a equação (4.33) é reduzida a

$$E_n = \pm \sqrt{2eB (n' + \lambda)}. \quad (4.34)$$

temos ainda que para $n' = 0$, que é o estado da partícula onde a energia correspondente é zero, a expressão anterior torna-se

$$E_0 = \pm \sqrt{2eB\lambda}. \quad (4.35)$$

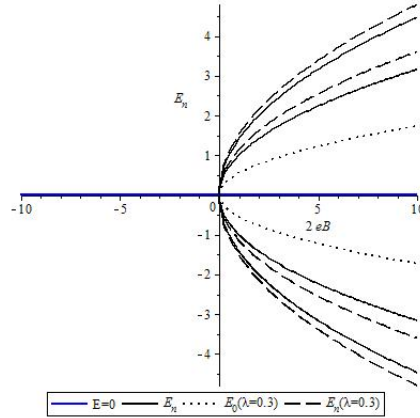


Figura 4.1: Níveis Landau na estrutura cristalina do Grafeno na presença de um pseudo campo Aharonov-Bhom.

Na figura (4.1) temos os níveis de Landau para valores de $\lambda = 0, 3$ e $n' = 0$. Nele, podemos observar que este nível de energia se desdobra em outros dois. Isto pode ser interpretado como a abertura de um *gap* nas estruturas de bandas do grafeno. Este resultado

quando implementado poderá contribuir para a construção de dispositivos eletrônicos a base de grafeno no futuro.

Capítulo 5

Conclusão e perspectiva

Nesta dissertação, estudamos as propriedades eletrônicas do grafeno no limite de baixas energias, em que as partículas podem ser consideradas livres. Assim, nesse sistema de $2 + 1$ dimensão, o movimento desses elétrons pode ser descrito por uma equação de Dirac efetiva, com a velocidade da luz substituída pela velocidade de Fermi, que é 300 (trezentas) vezes menor que a velocidade da luz. Também fizemos uma breve discussão das propriedades magnéticas que o grafeno pode adquirir na presença de defeitos topológicos e de deformações elásticas

Partindo da ideia de que em teoria quântica de campos um potencial vetor e escalar pode ser introduzido na equação de Dirac por meio de um acoplamento mínimo. Partimos da equação de Dirac em coordenadas cartesianas e a escrevemos em coordenadas polares no formalismo das matrizes de Pauli com a intenção de investigar os níveis de Landau na presença de um pseudo campo magnético na direção angular, originada das deformações elásticas na estrutura cristalina do grafeno, provocado por um campo magnético constante. Primeiramente, usando o método de separação de variáveis encontramos as soluções gerais para os pseudo spinores da sub-reda A e B do grafeno. Em seguida, obtivemos uma solução, para a parte radial, em função das funções Kummer U e hipergeométrica, que ao ser analisada assintoticamente foi possível determinar as energias em função do campo magnético e do pseudo campo magnético. Ao analisar essas energias para um $n' = 0$, observamos que os níveis de energia de Landau se desdobra em dois novos níveis. Esse resulta pode ser interpretado como a abertura de um *gap* na estrutura de bandas do espectro de energia. Este resultado quando analisado experimentalmente e implementado poderá contribuir para a construção de novos dispositivos eletrônico a base de grafeno.

Como uma primeira forma de trabalhar com esse modelo em trabalhos futuros, propomos a verificação da tensão originada no *gap* para diferentes intensidades de campo magnético aplicado. Outra forma seria analisar o efeito Hall quântico e também calcular algumas propriedades térmicas do grafeno para esse modelo como feito na referencia [22], tais como: energia livre de Helmholtz, entropia, calor específico e energia interna.

Referências Bibliográficas

- [1] GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S., **The rise of graphene**. Nature Materials, vol. 6, no 3, pp. 183-191, 2007.
- [2] NOVOSELOV, K., S., **Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland**, Reviews of modern physics, V. 83, 2011.
- [3] ALLEN, M. J.; TUNG, V. C, KANER, R. B, **Honeycomb Carbon: A review of graphene**, Chemical Reviews, vol. xxx, no. xx, pp. 132-145, 2009.
- [4] NOVOSELOV, K. S. **A Roadmap for graphene** Nature, Vol. 490, pp. 192-200, 2012.
- [5] ARAKI, Y, **Phase structure of monolayer graphene from effective U(1) gauge theory on honeycomb lattice**. Phys. Rev. B. Vol. 85, 2012.
- [6] ZHU, B, Y.; MURALI, S, et al, **Graphene and Graphene Oxide: Synthesis, Properties, and Applications**, Advanced Materials, 2010.
- [7] VOZMEDIANO, M. A. H.; KATSNELSON, M. I.; GUINEA, F., **Gauge field in graphene**. Phys. Reports. vol. 496, pp. 109 - 148, 2010.
- [8] LEVY, N.; BURKE, S. A., et al, **Strain-Induced Pseudo Magnetic Fields Greater Than 300 Tesla in Graphene Nanobubbles**, Science, V. 329, no. 5 991, pp. 544-547, 2010.
- [9] MENG, L.; He, W. Y., et al, **Strain Induced One-Dimensional Landau-Level Quantization in Corrugated Graphene**, Phys. review B, V. 87, 2013.
- [10] GUINEA, F.; KATSNELSON, M. I.; GEIM, A. K., **Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering**, Nature Physics, V. 6, pp. 30-33, 2009.

- [11] LIMA, D. B., **variações do grafeno:uma abordagem AB-initio de novas estruturas bidimensionais**. 2012. tese (doutorado em ciências) Universidade de São Paulo, São Paulo. 2012.
- [12] Xu. Z, **Graphene Properties, Synthesis and Applications**, pp. 1-56, 2011
- [13] FRYHLE, G., S., C, **Química Orgânica**, LTC, ed. 7º, V. 1,,
- [14] GRIFFTHS, D, J, **mecânica quântica 2e**, pearson.
- [15] BATELAAN, H.; TONOMURA, **The Aharonov-Bohm Effects: Variations on a Subtle Theme**, AIP Scitation, pp. 38, 2009.
- [16] CASTRO, L. B.; SILVA, E. O., **quantum dynamics of a spin-1/2 charged particle in the presence of a magnetic field with scalar and vector couplings**. The European Physical Journal C, 2015.
- [17] HAMZAVI, M.; IKHDAIR, S. M.; FALAYE, B. J., **Dirac bound states of anharmonic oscillator in external fields**. Annals of Physics, Vol. 341, pp.153-163, 2014.
- [18] IKHDAIR, S. M., **Scalar Charged Particle in Presence of Magnetic and Aharonov Bohm Fields Plus Scalar Vector Killingbeck Potentials**, Few-Body Syst, Vol. 54, pp. 1987-1995, 2013.
- [19] SCHLUTER, P.; WIETSCHORK, K, H.; GREINER, W, **The Dirac equation in orthogonal coordinate systems: I. The local representation**. IOP Science, pp. 1999-2016, 1982.
- [20] VILLALBA, V. M.; MAGGILO, A. A. R, **Energy spectrum of a 2D Dirac oscillator in the presence of a constant magnetic field**, Eur. Phys. J. B, 22, 31-35, 2001.
- [21] VILLALBA, V. M, **Exact solution of the two-dimensional Dirac oscillator**, Phys. Rev. A 49, 586-587, 1994.
- [22] SANTOS, V.; MALUF, R.; V, ALMEIDA, C. A. S., **Thermodynamical properties of graphene in noncommutative phase space** Annals of Physics, Vol. 349, pp. 402-410, 2014.

- [23] KATSNELSON, M, I.; NOVOSELOV, K, S, **Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics**, Elsevier, pp.3-13, 2007.
- [24] QUIGG, C., **Gauge Theories of the Strong, Weak, and Electromagnetic Interactions**, Westview, 1997.
- [25] GRIFFITHS, D., **Introduction to Elementary Particles**. 2º edição, Wiley-vch, 2008.
- [26] MANDL, F.; SHAW, G., **Quantum field theory**, 2º edição, Wiley, 2009.
- [27] AHARONOV, Y.; BHOM., D, **Significance of Electromagnetic Potential in the Quantum Theory**, Physical Review Letters, Vol. 115, No. 3, 1959.
- [28] MCCANN, E., **Graphene Nanoelectronics: Metrology, Synthesis, Properties and Applications**. Springer, 2012.
- [29] LIMA, D, B. **Variações do grafeno: uma abordagem ab-intio de novas estruturas bidimensionais**, pp 130, tese (Doutorado em ciências, São Paulo,) 2012.
- [30] JACKIW, R.; Pi. S. W., **Quiral Gauge Theory for Graphene**, Condensed Matter ,V.1, 2007.
- [31] LEYVA, M. O.; NAUMIS, G. G., **Novel effective Dirac Hamiltonian without pseudomagnetic fields for strained graphene**, Condensed Matter, 2014.
- [32] JUAN, F.; VOSMEDIANO, M. A. H. et al, **Aharonov-Bhom interferences from local deformations in graphene**, Nature Physics, V. 7, pp. 810-815, 2011.
- [33] ARAÚJO, L. R. S.; FILGUEIRAS, C.; MORAES, F., **Landau levels, self-adjoint extensions and hall conductivity on a cone**, the European Physical Journal Plus, 2014.
- [34] TEAGUE, M. L.; YEOM, S., et al **Strain-induced pseudo-magnetic fields and charging effects on CVD-grown graphene**, Cond-Mat, 2011.
- [35] VOZMEDIANO, M. A. H.; VAEZI, A., et al, **Topological electric current from time-dependent elastic deformations in graphene**, Phys. Rev. B, V. 88, 2013.