

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Física



Tese de Doutorado

Propriedades Eletrônicas de Grafeno com Defeitos

Maria Jannaira Bueno

João Pessoa

-2011-

Universidade Federal da Paraíba
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Física



Tese de Doutorado

Propriedades Eletrônicas de Grafeno com Defeitos

Maria Jannaira Bueno

Tese submetida ao Departamento de Física da Universidade Federal da Paraíba, sob orientação do professor Cláudio Benedito da Silva Furtado, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

João Pessoa

-2011-

B928p Bueno, Maria Jannaira.
Propriedades eletrônicas de grafeno com defeitos / Maria
Jannaira Bueno.-- João Pessoa, 2011.
97f. : il.
Orientador: Cláudio Benedito da Silva Furtado
Tese (Doutorado) – UFPB/CCEN
1. Física. 2. Grafeno. 3. Defeitos topológicos. 4. Ângulo de
mudança de fase. 5. Níveis de Landau. 6. Oscilador de Dirac.

UFPB/BC

CDU: 53(043)

Ata da Sessão Pública da Defesa de Tese de **Doutorado** da aluna **Maria Jannaíra Bueno**, candidata ao Título de Doutor em Física na Área de Concentração Física da Matéria Condensada.

1 Aos doze dias do mês de agosto do ano de dois mil e onze, às 10:00, na sala de
2 reuniões do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da
3 Universidade Federal da Paraíba, reuniram-se os membros da Banca Examinadora
4 constituída para examinar a candidata ao grau de Doutor em Física na área de Física da
5 Matéria Condensada, a Sr. **Maria Jannaíra Bueno**. A comissão examinadora foi
6 composta pelos professores doutores: *Cláudio Benedito da Silva Furtado* (UFPB),
7 orientador e presidente da banca examinadora, *Sergio André Fontes Azevedo* (UFPB),
8 *Fernando Jorge Sampaio Moraes* (UFPB), *Claudionor Bezerra Gomes* (UFRN) e *José*
9 *Ricardo de Sousa* (UFAM). Dando início aos trabalhos, o Prof. *Cláudio Benedito da*
10 *Silva Furtado* comunicou aos presentes a finalidade da reunião. A seguir, passou a
11 palavra a candidata para que a mesma fizesse, oralmente, a exposição do trabalho de
12 tese intitulado "*Propriedades eletrônicas de Grafeno com defeitos*". Concluída a
13 exposição, a candidata foi arguida pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte
14 parecer: "**aprovada**". Assim sendo, deve a Universidade Federal da Paraíba expedir o
15 respectivo diploma de Doutor em Física na forma da lei. E para constar, eu, Danilo
16 Wilson Lemos Menezes, servindo de Secretário, lavrei a presente ata que vai assinada
17 por mim mesmo e pelos membros da Banca Examinadora." João Pessoa, Paraíba, **12 de**
18 **agosto de 2011**.
19

Prof. Dr. Cláudio Benedito da Silva Furtado
Orientador - UFPB

Prof. Dr. Sergio André Fontes Azevedo
UFPB

Prof. Dr. Fernando Jorge Sampaio Moraes
UFPB

Prof. Dr. Claudionor Bezerra Gomes
UFRN

Prof. Dr. José Ricardo de Sousa
UFAM

Danilo Wilson Lemos Menezes
Secretário

Cláudio Furtado

Sergio Azevedo

Fernando Moraes

Claudionor Bezerra

José Ricardo de Sousa

[Assinatura]

Ao meus filhos: Jorge Luis, Jacqueline Bueno

Agradecimentos

- Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da vida, que me permitiu prosseguir nesta jornada de aprendizagem e auto-conhecimento;
- Agradeço, em especial, ao meu orientador prof. Dr. Cláudio Furtado, pelo apoio, confiança, além da paciência para com a conclusão deste trabalho. Neste breve convívio percebi o exemplo de humildade, dedicação e diplomacia característica de quem tem a certeza dos objetivos a serem conquistados.
- Ao prof. Dr. Fernando Moraes, pelo exemplo de integridade;
- Aos professores da pós graduação, em especial Dr. Eugênio Bezerra, Dr. Alexandre Rosas, Dr. Alexandre Carvalho, Dr. Jose Roberto, Dr. Albert Petrov, pelo exemplo de dedicação profissional;
- Ao sr. Mariano, pela sua percepção e seu bom coração sem deixar de agradecer o otimismo sempre presente;
- A todos os amigos que fiz na pós-graduação, como: Dr. Mauro (cabrunco), Dr. Anibal Silva Netto, Dr. Eduardo Passos, Dr. Knut, Dr. Lincoln Rodrigues, Dr. Marcelo (MIB), Dr. Edilberto Silva, Dr. Cleverson Filgueiras, pelo incentivo e exemplo nesta caminhada;

- Aos colegas do curso de pós graduação que estão aqui e que já seguiram em frente, pelo apoio quando necessário, como por exemplo: Anderson Lima, Jilvan Lemos, Thiago Ferreira, Thiago Caramês, Soraya Maciel;
- A sra. Nazaré, secretária do departamento, pelo carinho e dedicação, sempre acompanhado de um sorriso;
- Aos funcionários do departamento da programa de pós-graduação: Virgínia, Danilo, sempre prestativos;
- Aos meus professores da UFMT: Dr. Alberto Arruda, Dr. Jorge Luiz (Hulk), Dr Teldo Anderson, Dr. Max Roos, Dr. Sandro Silva e Costa (em memória, UFABC) e ao prof. José R. Sousa (UFAM) pelo apoio que me fez seguir em frente;
- Aos amigos Alesandro Ferreira e família, Dorilson e família, Breno e família, Rebeca e sua adorável filha Luiza, pela amizade sincera e pelos bons momentos;
- Ao Dr. Roberto Medeiros - do LNLS, por suas palavras de incentivo, por ocasião do SBPC em 2004, as quais reacenderam em mim o desejo de seguir nesta carreira acadêmica;
- Agradeço aos meus filhos Jorge Luis e Jacqueline Bueno, pelo amor, carinho, apoio incondicional que mesmo sabendo dos grandes obstáculos nunca me deixaram desistir, além das boas risadas diante dos desafios;
- Agradeço a Ricardo Boa Ventura pelo amor, dedicação, companheirismo, paciência e bom humor nesta etapa final;
- Ao meu irmão, Jannairo P. Bueno, e sua esposa, Janaina A. Bueno, que mesmo distante se fizeram presente nesta caminhada, sem deixar

de comentar: agradeço também as férias forçadas;

- Agradeço aos Meus pais (em memória): Claudionor A. Nogueira e Brasília P. Bueno exemplos: de garra, dedicação e Fé, por acreditarem sempre que amanhã será um dia melhor, os quais fizeram de mim uma pessoa com a necessidade intrínseca de querer aprender, como meu pai sempre falava "Todo conhecimento adquirido nunca será desperdiçado, de uma forma ou outra, um dia, você vai usar". Além da necessidade incondicional de passar adiante o conhecimento apreendido;
- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior / Programa Nacional de Cooperação Acadêmica - CAPES/Procad pelo suporte financeiro, sem o qual seria possível concluir esta tese.

“A Força não vem da capacidade física, ela vem de uma vontade inabalável.”

Mahatma Gandhi

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

Albert Einstein

Resumo

No limite de baixas energias, o grafeno pode ser descrito por uma teoria de férmions livres sem massa. Neste trabalho, escrevemos uma métrica não-Euclidiana que representa o grafeno e introduzimos um campo de gauge não-Abeliano devido a presença de defeitos topológicos (desclinações). Neste pano de fundo, estudamos o espalhamento elástico de férmions por esses defeitos. Depois, obtemos o ângulo de mudança de fase e a amplitude de espalhamento. Discutimos também a influência destes resultados em propriedades de transporte. Nesta abordagem, aplicamos um campo magnético uniforme e perpendicular a folha de grafeno. Assim, o sistema também passa a ser descrito por um campo de gauge Abelian e observamos que ocorre a quebra da degenerescência dos níveis de Landau com possíveis implicações físicas para o estudo do efeito Hall quântico no grafeno. Além disso, estudamos a dinâmica dos spinores de Dirac na presença de um potencial confinante, como o Oscilador de Dirac, e o confinamento espacial dos elétrons em uma estrutura de grafeno no formato de um anel com defeito topológico. Finalmente, encontramos que a dinâmica dos spinores é afetada por esta geometria e pelas desclinações.

Palavras-chave: Grafeno, defeitos topológicos, ângulo de mudança de fase, amplitude de espalhamento, níveis de Landau, oscilador de Dirac.

Abstract

In the limit of low energy, graphene can be described by a theory of free massless Fermions. In this work, we write a non-Euclidean metric that represents graphene and introduce a non-Abelian gauge field due to the presence of topological defects (disclinations). Furthermore, in this background, we study the elastic scattering of Fermions by these defects. Afterwards, we obtain the phase shift angle and the scattering amplitude. We also discuss the influence of these results to transport properties. In this approach, we apply a uniform magnetic field perpendicular to the graphene sheet. Thus, the system also becomes described by an Abelian gauge field and we observe that occurs the break of the degeneracy of Landau levels with possible physical implications for the study of the quantum Hall effect in graphene. In addition, we study the dynamics of Dirac spinors in the presence of a confining potential, as the Dirac oscillator, and the spatial confinement of electrons in a graphene structure in the shape of a ring with topological defects. Finally, we find that the dynamics of spinors is affected by this geometry and the disclination.

keywords: Graphene, topological defects, Landau levels, phase shift, scattering amplitude, Dirac oscillator.

Sumário

Agradecimentos	i
Resumo	v
Abstract	vi
Introdução	1
1 Grafeno: Cristal Bidimensional	6
1.1 Nova classe de materiais	6
1.2 Propriedades do Grafeno	9
1.3 Estrutura Eletrônica do Grafeno	10
1.4 Espectro de energia para os orbitais π	13
1.5 Teoria de férmions livres sem massa	17
2 Defeitos Topológicos no Grafeno	20
2.1 Ondulações na Folha de Grafeno	20
2.2 Defeitos Topológicos	21
2.3 Defeitos Topológicos no Grafeno	22
3 Espalhamento Elástico em Grafeno com Defeitos	28
3.1 Transporte eletrônico em Duas Dimensões	28

3.2	Espalhamento Elástico de Férmions sem massa por Defeitos em Grafeno	29
3.2.1	Equação de Dirac sem massa no espaço-tempo curvo	29
3.3	Teoria do Espalhamento Elástico Quântico para o grafeno	35
3.3.1	Ângulo de mudança de fase, δ_l :	36
3.3.2	Amplitude de espalhamento, $f(\phi)$:	37
4	Níveis de Landau na presença de defeitos	42
4.1	Efeito Hall Quântico	42
4.2	Aplicação de um Campo Magnético perpendicular à Folha Plana de Grafeno	44
4.2.1	Comportamento Assintótico da função hipergeométrica confluyente	48
4.2.2	Níveis de Landau	49
4.3	Aplicação de um Campo Magnético perpendicular à Folha de Grafeno com defeito topológico	50
4.3.1	Níveis de Landau	53
5	Nanoestruturas em grafeno	56
5.1	Nanoestruturas	56
5.2	Oscilador de Dirac	58
5.3	Oscilador de Dirac na Presença de Defeitos no Grafeno	59
5.4	Oscilador de Dirac na Presença de Defeitos no Grafeno em um Campo Magnético Constante	63
5.5	Confinamento espacial de elétrons em um anel de Grafeno com desclinações	67
	Conclusão	71

Lista de Figuras

1.1	Comparação da região de domínio da nanotecnologia desde as macroestruturas até dimensões subatômicas em escala logarítmica (Figura retirada da referência [28]).	7
1.2	Dimensões representativas de algumas espécimes (Figura retirada da referência [29]).	8
1.3	Amostra de grafeno suspenso (Figura retirada da referência [20]).	9
1.4	Representação dos orbitais atômicos do carbono.	10
1.5	Da esquerda para direita: as estruturas do fulereno, do nanotubo de carbono e do grafite, todos construídos a partir da mesma matriz bidimensional – o grafeno. (Figura retirada da referência [21]).	11
1.6	representação das Sub-redes A (átomos de carbono de cor cinza) e B (átomos de carbono de cor verde), os vetores da base da rede cristalina: \vec{c}_1 e \vec{c}_2 ; os vetores dos primeiros vizinhos: $\vec{u}_{j=1,2,3}$ e $\vec{v}_{j=1,2,3}$ e a célula unitária (losango em linhas tracejadas).	13
1.7	Em a, temos o gráfico de superfície do espectro de energia, descrito pela equação(1.6), fazendo $t = 2.8$ eV [42]. Em b, primeira zona de Brillouin, delimitada pela linha tracejada, da mesma equação.	16

2.1	Representação do Processo Volterra, em: (a) folha de grafeno plana, com o setor angular, λ igual a $\frac{\pi}{3}$, em destaque de cor amarelo , (b) desclinação positiva, (c) desclinação negativa. . .	22
2.2	Descontinuidade nas sub-redes do grafeno devido a introdução da curvatura.	25
4.1	A condutividade Hall (em vermelho) e a resistência longitudinal (em verde) (Figura retirada da referência [34]).	43
4.2	Efeitos Hall quântico fracionário (Figura retirada da referência [19]), como função da densidade de carga	44

Introdução

Nesta última década, uma nova classe de materiais foram identificados e analisados, são os materiais cristalinos bidimensionais (2D). O grafeno, uma mono-camada de átomos de carbono, é o primeiro material identificado nesta nova classe. A observação experimental deste material somente foi possível, em 2004, graças aos cientistas Andre K. Geim e Konstantin S. Novoselov [1] que tiveram sucesso em: produzir, usando a técnica de clivagem micromecânica, simples e eficaz, para extrair finas camadas do cristal grafite; identificar e caracterizar o grafeno, através do Microscópio de Força Atômica (AFM - Atomic Force Microscopy). Devido a este êxito, eles foram agraciados com o Prêmio Nobel de Física no ano de 2010.

Acreditava-se que a existência de cristais bidimensionais não seria possível, uma vez que, as flutuações térmicas na estrutura desses cristais ultrafinos provocariam um deslocamento dos átomos comparáveis com as distâncias interatômicas, deixando-os instáveis, este argumento fundamental foi demonstrado por Landau [2] em 1937. Além deste fato, em 1966 e 1968, Mermin e Wagner [3, 4] provaram que não poderia existir ordem magnética em uma ou duas dimensões e estenderam este resultado, generalizando para sistemas bidimensionais (com simetria contínua), ao estabelecer que não há ordem cristalina em duas dimensões.

Mas a natureza encontra seu caminho, como no caso do grafeno, onde o cristal bidimensional torna-se intrinsecamente estável, deformando-se suavemente na terceira dimensão (3D). Essas Ondulações em 3D (observadas até uma escala lateral de 10nm) leva a um ganho de energia elástica, provavelmente devido a interação entre os fônons com grande comprimento de onda, estabilizando as membranas atômicas finas através de sua deformação na terceira dimensão. De fato, como observado por Meyer e colaboradores [5], os cristais de grafeno suspenso podem existir livremente, sem um substrato, e exibem deformações elásticas aleatórias que envolvem as três dimensões.

Esta descoberta, experimental, permitiu a possibilidade de uma nova área para testes das extraordinárias propriedades do grafeno previstas teoricamente. A análise teórica do grafeno já estava sendo realizada desde 1947, quando Wallace [6], usando um plano do grafite como um exemplo didático para os cálculos de física do estado sólido, previu a estrutura eletrônica e observou a relação de dispersão linear. Em 1956, McClure [7] propôs a função de onda para a excitação próxima do ponto de Fermi. Em 1984, a similaridade com a equação de Dirac foi discutida por Semenoff [8]. No mesmo ano, DiVincenzo e Mele [9], concluíram que em compostos intercalados com metal alcalino e grafite a carga transferida é distribuída quase que homogeneamente no plano do carbono.

Desde 2005, o desenvolvimento nesta área de investigação tem atraído, com grande empolgação, a atenção dos pesquisadores de diversas áreas, como da física, da química, da computação, da biologia, entre outras. O grafeno tem se destacado entre os materiais bidimensionais por apresentar propriedades peculiares: é um material 100 vezes mais forte que o aço [10], devido a ligação carbono-carbono; quase transparente [11]; um excelente condutor elétrico [12] e térmico [13], conduzindo o calor 10 vezes melhor do que o

cobre. Além disso, o grafeno é um material extremamente flexível, resistente, com altíssima mobilidade eletrônica e boa condutividade térmica.

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

Os elétrons, presentes no grafeno, que participam do transporte eletrônico, no limite contínuo em baixas energias, podem ser descritos a partir da equação de Dirac. Esta semelhança formal entre as excitações no grafeno e os férmions de Dirac possibilitou novos testes para alguns fenômenos como: o efeito Hall quântico [18], efeito Hall quântico fracionário [19] e a ausência de localização [21]. Em 2006, Katsnelson, Geim e Novoselov [22] sugeriram que poderia ser observado no grafeno um fenômeno relativístico que não é observado na física de altas energias: o paradoxo de Klein [23] - fenômeno em que elétrons relativísticos penetram em barreiras de potenciais, independente da altura ou largura delas - que foi verificado por Young e Kim em 2009 [24].

Apesar de toda a riqueza científica conquistada, em tão pouco tempo, ainda existe muito a ser compreendido, principalmente, em relação as propriedades eletrônicas do grafeno. A compreensão dos fenômenos de transporte é essencial para a fabricação de dispositivos eletrônicos. Entre outras aplicações como a perspectiva da compreensão do efeito Hall quântico acrescentará qualidade à metrologia de resistência quântica [25] porque aumentará consideravelmente a precisão nas medições. Nossa contribuição é proporcionar uma investigação teórica que ajude na compreensão do fenô-

meno de transporte próximo ao nível de Fermi, elucidando a real importância dos defeitos topológicos na estrutura do grafeno.

No capítulo um, apresentamos a estrutura cristalina do grafeno e assim fazemos uma revisão do cálculo do espectro de energia para os orbitais π a partir do método "*tight-binding*" (Método das ligações fortes), onde verificamos a relação de dispersão linear próxima aos pontos de Fermi. Com esta observação apresentamos a semelhança formal entre as excitações presente 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 dois, apresentamos uma revisão sobre defeitos topológicos denominados por desclinações e descrevemos as ondulações presente nas folhas de grafeno produzidas por esses defeitos, introduzimos esta informação no meio elástico contínuo do grafeno através da teoria geométrica de defeitos em sólidos. Verificamos a influência topológica que modifica a estrutura eletrônica em baixa energia, e modelamos o sistema através da equação de Dirac em espaço-tempo curvo com a inclusão da conexão spinorial, devido a curvatura, e também a inclusão um campo de gauge não-Abeliano, devido a presença do defeito.

No capítulo três, para a compreensão do fenômeno de transporte no grafeno construímos um modelo para o espalhamento elástico quântico a partir da resolução da equação de Dirac, descrita no capítulo dois. Observamos o comportamento assintótico para os spinores de Dirac e encontramos o ângulo de mudança de fase, a amplitude de espalhamento e a dependência do ponto de Fermi, além da interação com o defeito.

No capítulo quatro, encontramos os níveis de Landau quando resolvemos a equação de Dirac, descrita no capítulo dois. Aqui acrescentamos de um termo de gauge Abeliano, devido ao campo magnético aplicado per-

pendicular a folha de grafeno e obtemos a energia do sistema. Verificamos novamente a influência do defeito topológico e do ponto de Fermi junto aos estados excitados do grafeno.

No capítulo cinco investigamos a dinâmica dos spinores de Dirac, na mesma configuração do capítulo anterior, acrescido de um potencial confinante (o acoplamento do Oscilador de Dirac). Estudamos também o confinamento espacial dos elétrons em uma nanoestrutura de grafeno em formato de anel, encontramos que a dinâmica dos spinores de Dirac é afetada pela geometria do anel e pela superfície com defeito.

Finalmente, concluimos apresentando os resultados observados e futuras perspectivas.

Capítulo 1

Grafeno: Cristal Bidimensional

1.1 Nova classe de materiais

Os conhecimentos acumulados, desde a década de sessenta do século passado, possibilitaram integrar grandes quantidades de circuitos sobre um mesmo substrato de semicondutor. A relação entre quantidade de circuitos integrados sobre o substrato de semicondutor e sua funcionalidade e benefício estão diretamente relacionados. Atualmente um dispositivo eletrônico comum consiste de um substrato de Silício, Si - tipo-n, coberto por uma camada de óxido de Silício, SiO_2 - que serve como isolante (porta dielétrica), entre a superfície de Si, tipo-p, e um eletrodo metálico, porta metálica (gate). Com o passar dos tempos cientistas e engenheiros observaram que a redução nas dimensões dos dispositivos aumenta o seu desempenho e diminui o consumo de energia, desta forma, o custo-benefício explica a grande evolução eletrônica no último século [26].

Contudo, a medida que os dispositivos foram reduzindo, as portas

dielétricas precisaram ser mais finas, começando a ter limitações devido as correntes de tunelamento através do óxido. Este problema chamou a atenção dos pesquisadores, que intensificaram o estudo de novos materiais, desde o início deste século, com o objetivo de encontrar um novo material para dar continuidade ao processo de miniaturização, por mais algum tempo, dos dispositivos eletrônicos [27].

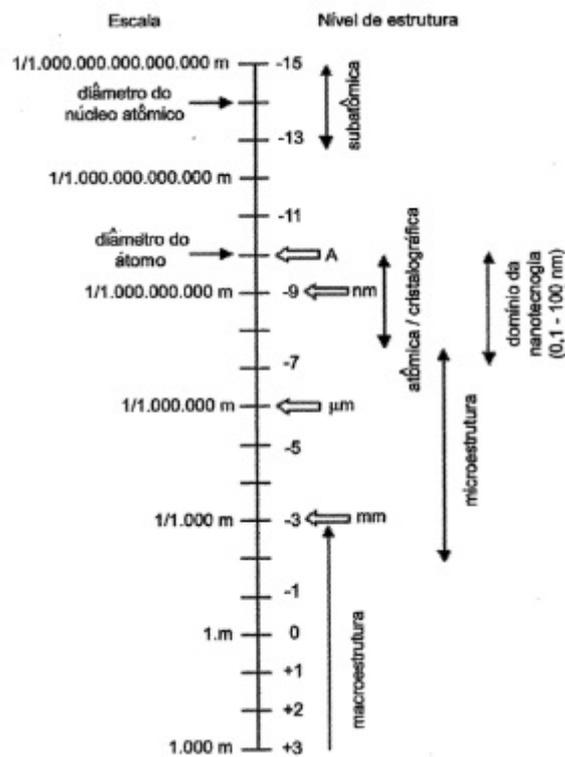


Figura 1.1: Comparação da região de domínio da nanotecnologia desde as macroestruturas até dimensões subatômicas em escala logarítmica (Figura retirada da referência [28]).

Mas a redução da dimensão implica na observação predominante de fenômenos regidos pela mecânica quântica. Por isso, esses novos materiais, em escala nanométrica, $1nm = 10^{-9}m$, exibem propriedades e fenômenos físi-

cos, químicos e/ou biológicos novos ou modificados que não se podem observar nos mesmos materiais em uma escala macroscópica. Portanto, uma nova abordagem científica para a compreensão do comportamento desses materiais se fez necessária, a esta abordagem chamamos de nanociência e a aplicação desse conhecimento científico de forma prática, técnica e economicamente viável, chamamos de nanotecnologia [28]. Na figura 1.1 temos, em escala logarítmica, a comparação da região de domínio da nanotecnologia desde as macroestruturas até as dimensões subatômicas, e na figura 1.2 temos a representação das dimensões de algumas espécimes em suas respectivas escalas.

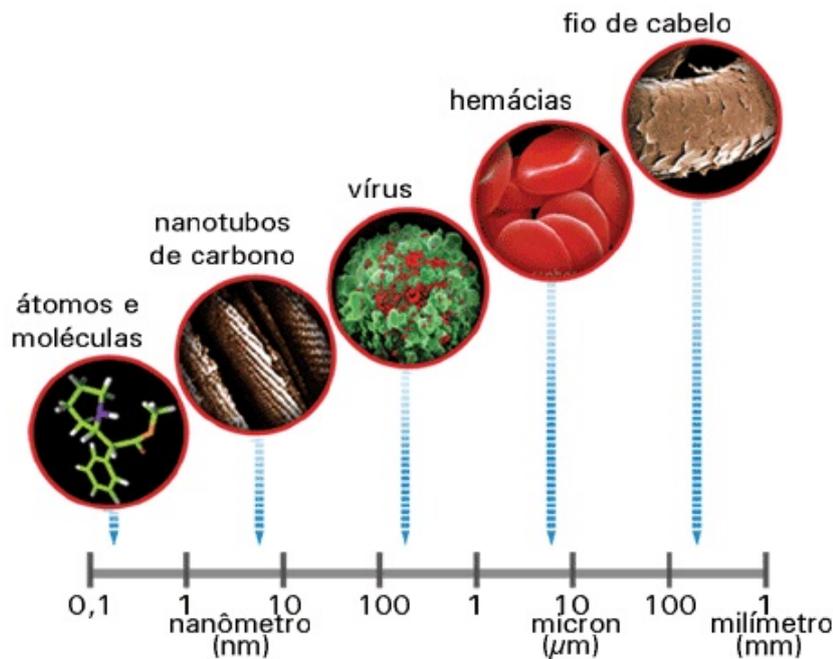


Figura 1.2: Dimensões representativas de algumas espécimes (Figura retirada da referência [29]).

1.2 Propriedades do Grafeno

Desta busca incessante por novos materiais culminou a caracterização de uma nova classe de materiais, os cristalinos bidimensionais (2D) que pertencem a uma escala métrica de $0,1$ a 100 nm .

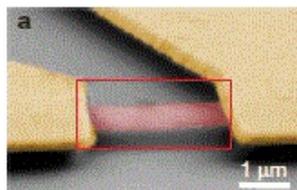


Figura 1.3: Amostra de grafeno suspenso (Figura retirada da referência [20]).

Na figura 1.3, temos uma amostra do grafeno suspenso, 150 nm , em destaque na falsa cor vermelho, artifício típico da microscopia eletrônica por escaneamento. Este material tem se destacado entre os cristais bidimensionais por apresentar propriedades peculiares, como:

- resistência à ruptura de 42 N/m , se comparado com uma folha do aço mais forte em 2D, cuja força de ruptura é de $0,40\text{ N/m}$, o grafeno é 100 vezes mais forte [10];
- independente do comprimento de onda óptico, o grafeno é quase transparente, pois absorve apenas 2,3% da intensidade de luz, o interessante é que este número é determinado unicamente pela constante de estrutura fina [11];
- a condutividade elétrica que é $0,96 \times 10^6\ \Omega^{-1}\text{ cm}^{-1}$, em uma camada de grafeno, um pouco maior do que a condutividade do cobre que é de $0,60 \times 10^6\ \Omega^{-1}\text{ cm}^{-1}$, portanto um excelente condutor [12];

- a condutividade térmica do grafeno, à temperatura ambiente, é dominada por fônons, sendo aproximadamente $5000W/mK$, enquanto que o cobre apresenta uma condutividade térmica de $401W/mK$, com isso, o grafeno conduz o calor 10 vezes melhor do que o cobre [13].

1.3 Estrutura Eletrônica do Grafeno

O carbono é um dos elementos químicos mais abundantes no universo, está presente em organismos vivos, nos minerais, isto graças a sua configuração eletrônica: $1s^22s^22p^2$, a qual permite que as ligações químicas entre átomos de carbono sofram hibridação (ou hibridização), ou seja, os orbitais dos subníveis atômicos s e p se misturam, dando origem a orbitais híbridos sp , sp^2 e sp^3 , possibilitando a formação de diversas substâncias. Para os casos em que os compostos são formados somente por átomos de carbono e que diferem no arranjo dos mesmos, temos a propriedade denominada alotropia.

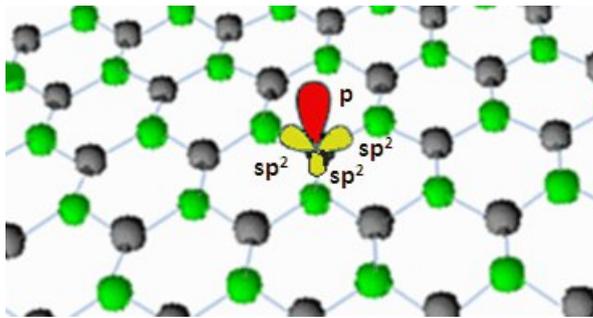


Figura 1.4: Representação dos orbitais atômicos do carbono.

Uma das formas alotrópicas do átomo de carbono é o grafeno, o processo de hibridação deste é do tipo sp^2 , como representado na figura 1.4. Nessa hibridação o orbital $2s$ mescla com dois orbitais $2p$ para gerar três

ligações σ , dispostos na forma trigonal plana ao longo de três direções no plano xy , em 120° . A ligação σ confere a estabilidade estrutural da molécula e o orbital $2p$ restante, forma uma ligação π perpendicular as outras ligações σ , e por estar fracamente ligado o elétron desta ligação π é responsável pelas propriedades eletrônicas [30].

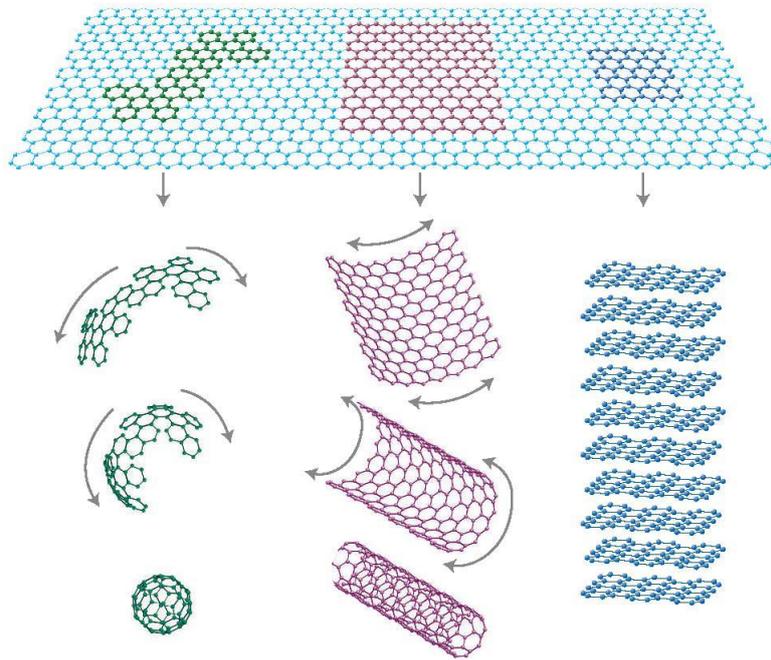


Figura 1.5: Da esquerda para direita: as estruturas do fulereno, do nanotubo de carbono e do grafite, todos construídos a partir da mesma matriz bidimensional – o grafeno. (Figura retirada da referência [21]).

O grafeno pode ser descrito como uma folha de mono-camada de átomos de carbono, formando uma rede cristalina hexagonal plana, constituindo um cristal bidimensional [21]. Sendo também a base de outras estruturas (veja a representação na figura 1.5) como o caso do fulereno [31], que pode ser descrito como a dobra de uma folha de grafeno em uma es-

estrutura zero-dimensional¹ semelhante a uma bola de futebol, e o nanotubo de carbono [32] que consiste em uma camada de grafeno dobrada em um tubo unidimensional². Tanto o fulereno quanto o nanotubo de carbono são materiais sintéticos.

Folhas de grafeno são encontradas na natureza somente empilhadas na forma do mineral grafite. Estas folhas são interligadas por meio de forças de Van der Waals, as quais são ligações fracas que favorecem o deslizamento de um plano sobre o outro mediante a aplicação de uma força externa. Estudos teóricos sobre este material existem a algumas décadas [6,33], mas sem muito interesse da comunidade científica, até que em 2004 foi possível sintetizar folhas de grafeno por meio da técnica de clivagem micromecânica [1]. Fato este que permitiu a observação de fenômenos físicos interessantes [18, 34, 35], revelando que as folhas de grafeno são semicondutores de "gap" nulo com alta mobilidade e relativa facilidade de controlar os portadores de carga mesmo à temperatura ambiente. Possibilitando também a realização de novos estudos sobre o tunelamento quântico, pontos quânticos [36], estudo de membranas livres [37], além da idealização de dispositivos eletrônicos com aplicações tecnológicas como sensores ultra-sensíveis de gás [38], eletrodos transparentes para tela de cristal líquido [15] e transistores de grafeno [39, 40].

¹por convenção, a dimensão adotada para o fulereno é devido a sua estrutura fechada ser semelhante a um ponto.

²por convenção, a dimensão adotada para o nanotubo de carbono é devido a sua estrutura ser semelhante a um fio com o interior oco.

1.4 Espectro de energia para os orbitais π

O cálculo do espectro de energia para os orbitais das ligações π [8,41] permite compreender as propriedades eletrônicas presentes no grafeno, como vimos anteriormente, o elétron desta ligação é delocalizado, sendo o responsável pelo fenômeno de transporte. Entre vários métodos aplicados para calcular o espectro eletrônico em potenciais periódicos, usamos o método de "*tight-binding*", que é definido como uma combinação linear dos orbitais atômicos e supondo a existência de sobreposição das funções de onda.

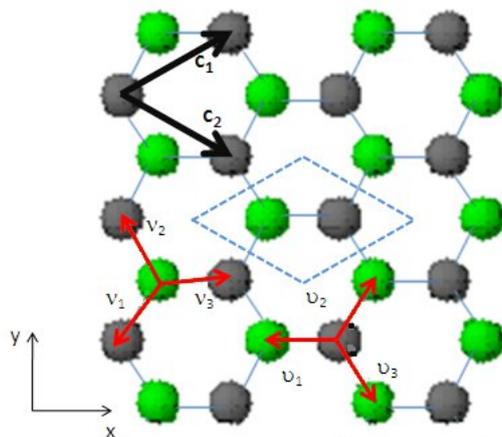


Figura 1.6: representação das Sub-redes A (átomos de carbono de cor cinza) e B (átomos de carbono de cor verde), os vetores da base da rede cristalina: \vec{c}_1 e \vec{c}_2 ; os vetores dos primeiros vizinhos: $\vec{u}_{j=1,2,3}$ e $\vec{v}_{j=1,2,3}$ e a célula unitária (losango em linhas tracejadas).

Em física da matéria condensada, o potencial periódico corresponde a distribuição dos átomos em intervalos regulares formando o cristal. Para o grafeno, a estrutura cristalina hexagonal pode ser entendida como a interconexão e sobreposição de duas sub-redes triangulares, sub-rede A e sub-rede B, respectivamente representadas pelos átomos de cor cinza e verde

na figura 1.6. Usando os elementos de simetria da rede cristalina, pode-se por translação dos vetores da base: \vec{c}_1 e \vec{c}_2 obter as duas redes de Bravais triangular, a sub-rede A, gerada pelo vetor $\vec{r}_i = n_i\vec{c}_1 + m_i\vec{c}_2$ e a sub-rede B, gerada pelo vetor $\vec{r}_i = n_i\vec{c}_1 + m_i\vec{c}_2 + \vec{d}$, com n_i e $m_i \in Z$, e a origem do sistema na célula unitária, $\vec{d} = d(-1, 0)$. Cada sítio de uma sub-rede interage com outros três sítios vizinhos da outra sub-rede através dos vetores dos primeiros vizinhos: $\vec{u}_{j=1,2,3}$ e $\vec{v}_{j=1,2,3}$ pertencentes a sub-rede A e B, respectivamente. Porém, a célula unitária do espaço real contém 2 átomos de carbono pertencentes a sub-redes distintas, separados a uma distância $d \approx 1,42 \text{ \AA}$.

Em uma folha de grafeno perfeita e infinita, define-se os vetores de base como:

$$\begin{aligned}\vec{c}_1 &= d \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \\ \vec{c}_2 &= d \left(\frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)\end{aligned}$$

cuja origem do sistema está na célula unitária, $\vec{d} = d(-1, 0)$, assim os vetores de primeiros vizinhos são:

$$\begin{aligned}\vec{u}_1 &= d(-1, 0), \quad \vec{u}_2 = d \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \vec{u}_3 = d \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), \\ \vec{v}_1 &= d(1, 0), \quad \vec{v}_2 = d \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \vec{v}_3 = d \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right).\end{aligned}$$

No Método de *tight-binding*, o Hamiltoniano que descreve os orbitais π do carbono é dado por:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=A} \sum_{j=1}^3 a^\dagger(\vec{r}_i) b(\vec{r}_i + \vec{u}_j) - t \sum_{i=B} \sum_{j=1}^3 b^\dagger(\vec{r}_i) a(\vec{r}_i + \vec{v}_j). \quad (1.1)$$

Sendo que o termo t chama-se "hopping", ou transferência, que é a probabilidade de transição mediante o tunelamento. Os índices i e j são os

sítios da rede onde estão ocorrendo a transferência. O operador de criação, $a^\dagger(\vec{r}_i)$, cria um elétron na sub-rede A, e o operador de aniquilação, $a(\vec{r}_i)$, aniquila um elétron na sub-rede A, da mesma forma que quando o operador $b^\dagger(\vec{r}_i)$, cria um elétron na sub-rede B, o operador $b(\vec{r}_i)$ aniquila um elétron na sub-rede B, obedecendo as relações de anticomutação:

$$\{a(\vec{r}_i), a^\dagger(\vec{r}_{i'})\} = \{b(\vec{r}_i), b^\dagger(\vec{r}_{i'})\} = \delta_{ii'}.$$

Devido a periodicidade da rede pode-se usar a transformada de Fourier:

$$\begin{aligned}\tilde{a}(\vec{k}) &= \int_{\Gamma} \frac{dx^2}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} a(\vec{r}_i) \\ \tilde{b}(\vec{k}) &= \int_{\Gamma} \frac{dx^2}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} b(\vec{r}_i),\end{aligned}$$

assim, é possível sair da representação da célula unitária do espaço real para a primeira zona de Brillouin, Γ , na representação do espaço recíproco, cujo os vetores são obtidos pela equação $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$ e assim temos uma nova expressão para o Hamiltoniano de Tight-Binding, dado por:

$$\mathcal{H} = \int_{\Gamma} \frac{dk^2}{(2\pi)^2} \begin{pmatrix} \tilde{a}^\dagger(\vec{k}) & \tilde{b}^\dagger(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{u}_j} \\ -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{a}(\vec{k}) \\ \tilde{b}(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

Diagonalizando a matriz 2x2 que está no interior da integral na equação (1.2), considerando o problema de autovalores:

$$\begin{pmatrix} 0 & -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{u}_j} \\ -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_A \\ \chi_B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \chi_A \\ \chi_B \end{pmatrix}, \quad (1.3)$$

em que $\begin{pmatrix} \chi_A \\ \chi_B \end{pmatrix}$ são as componentes do autovetor. Os autovalores emergem do cálculo do determinante:

$$\det \begin{vmatrix} 0 - E & -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{u}_j} \\ -t \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_j} & 0 - E \end{vmatrix} = 0 \quad (1.4)$$

Assim, os autovalores de energia são encontrados:

$$E^2 = t^2 \sum_{j=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_j} \sum_{j'=1}^3 e^{i\vec{k}\cdot\vec{v}_{j'}} \quad (1.5)$$

realizando o cálculo dos somatórios temos:

$$E = \pm t \sqrt{1 + 4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y d \right) + 4 \cos \left(\frac{3}{2} k_x d \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y d \right)}. \quad (1.6)$$

O espectro de energia para uma partícula (equação 1.6) consiste de duas superfícies ($E > 0$ e $E < 0$) as quais se tocam quando $E = 0$ em seis pontos que estão localizados nos vértices da primeira zona de Brillouin formando um hexágono (veja figura 1.7). Os estados de energia negativa

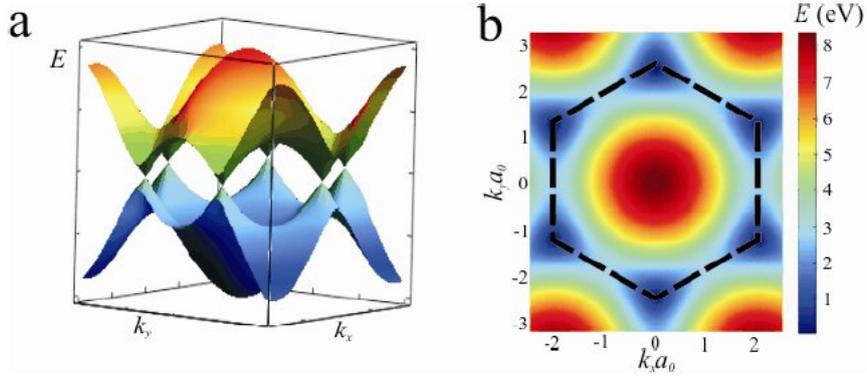


Figura 1.7: Em a, temos o gráfico de superfície do espectro de energia, descrito pela equação(1.6), fazendo $t = 2.8$ eV [42]. Em b, primeira zona de Brillouin, delimitada pela linha tracejada, da mesma equação.

(bandas de valência) estão preenchidos e os estados de energia positiva (bandas de condução) estão vazios, desta forma, a estrutura de banda de energia é semi-preenchida e o nível de Fermi corresponde aos seis pontos isolados

($E = 0$). Por periodicidade o número de pontos de Fermi se reduz a dois pontos não equivalentes: $K_{\pm} = \left(0, \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}d}\right)$.

1.5 Teoria de férmions livres sem massa

Excitações em baixa energia são estudadas tomando o limite contínuo ($d \rightarrow 0$). Para compreender melhor o comportamento do grafeno próximo aos pontos de Fermi, escolhendo os pontos de Fermi não equivalentes, substituindo o termo $\vec{k} = \vec{K}_{\pm} + |\vec{p}|$ e fazendo uma expansão no Hamiltoniano na representação do espaço recíproco, matriz 2x2 que está no interior da integral na equação (1.2), considerando apenas os termos para $|\mathbf{p}|$ pequeno, obtêm-se a seguinte equação:

$$H_{\pm} = \frac{3t}{2}d \begin{pmatrix} 0 & p_x \pm ip_y \\ p_x \mp ip_y & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

o termo H_{\pm} significa em torno de qual ponto de Fermi, K_+ ou K_- , foi feita a expansão do Hamiltoniano; o parâmetro $\frac{3t}{2}d$ tem o valor aproximado de $v_F \approx 10^6 m/s$ que recebe o nome de velocidade de Fermi. Reescrevendo a equação (1.7), temos:

$$\begin{pmatrix} H_+ & 0 \\ 0 & H_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \cdot \mathbf{p} & \mathbf{0} \\ 0 & (\sigma \cdot \mathbf{p})^* \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

e para simplificar fizemos $v_F = 1$, onde $\sigma = (\sigma^1, \sigma^2)$ são matrizes de Pauli³, que são o conjunto de três matrizes 2×2 , com a seguinte forma:

³São matrizes que foram introduzidas na mecânica quântica não-relativística pelo físico suíço Wolfgang Ernst Pauli para descrever uma partícula de spin 1/2.

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.9)$$

que satisfazem: a relação de anticomutação: $\{\sigma^i, \sigma^j\} = 2\delta_{ij}I_2$; a relação $\sigma^i\sigma^j = i\sigma^k$ e $(\sigma^i)^2 = I_2$, cujo os índices i, j, k são 1, 2, 3 respectivamente, e I_2 é a matriz 2×2 unitária.

Podemos substituir a expressão (1.8) na equação (1.3), obtemos a seguinte equação:

$$\begin{pmatrix} \sigma \cdot \mathbf{p} & \mathbf{0} \\ 0 & (\sigma \cdot \mathbf{p})^* \end{pmatrix} \psi_{(\vec{r})} = E\psi_{(\vec{r})}, \quad (1.10)$$

onde $\psi_{(\vec{r})} = \begin{pmatrix} \chi_A \\ \chi_B \end{pmatrix}$.

De forma mais compacta, sendo $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, fazendo $\hbar = 1$, podemos reescrever a equação (1.10) em termos das matrizes de Dirac, γ , obtemos:

$$-\gamma \cdot \mathbf{i}\nabla\psi_{(\vec{r})} = \mathbf{E}\psi_{(\vec{r})}. \quad (1.11)$$

A equação (1.11) permite compreender que no grafeno os estados eletrônicos de baixa energia para o orbital π são descritos por um modelo com base na equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com 2+1 dimensões. Os auto-estados do operador de Dirac são vetores bidimensionais, chamados spinores, $(|\mathbf{K}_\pm\mathbf{A}\rangle, |\mathbf{K}_\pm\mathbf{B}\rangle)^T$, e suas componentes são funções de onda, $(\psi_{A_\pm}, \psi_{B_\pm})^T$, correspondendo as duas sub-redes e aos dois pontos de Fermi, comportando como pseudospin, mas o papel da velocidade da luz, c , é desempenhado pela velocidade de Fermi, $v_F = c/300$.

Podemos concluir que no grafeno a presença dos pontos de Fermi são responsáveis pelo comportamento semi-metálico, ou seja, comportando como metal devido ao ponto de fuga entre as bandas de valência e de condução, permitindo a observação de propriedades com elevada mobilidade, por isso, os elétrons que se encontram nestes orbitais são considerados elétrons livres. Reforçando na observação de que o espectro da energia para momentos pequenos próximos aos pontos de Fermi apresentam uma relação de dispersão linear, caracterizando a dinâmica da equação de Dirac.

Capítulo 2

Defeitos Topológicos no Grafeno

2.1 Ondulações na Folha de Grafeno

Em um sistema físico real, a rede cristalina de um sólido pode apresentar alguns defeitos. Desta forma, podemos compreender tais defeitos como estruturas que aparecem devido a uma ocorrência local em torno de um sítio na rede, onde pode ser de origem química, elétrica ou estrutural. Estudos de defeitos em sólidos são importantes para entender o comportamento em muitos materiais como a difusão, transição de fase, transporte eletrônico e reatividade dos compostos sólidos [43]. Além de despertar um grande interesse da comunidade científica, devido às possibilidades de aplicação tecnológica, na medicina [44] e no desenvolvimento de novos materiais [45]. Experimentos com microscópio eletrônico de transmissão (TEM - Transmission Electron Microscope) [5] mostram que folhas de grafeno suspensas exibem uma aparente curvatura aleatória e espontânea em que podem ser visualizadas como ondulações de vários tamanhos. Semelhantes ondulações

também foram relatados em experimentos com microscópio de tunelamento (STM - Scanning Tunneling Microscope) [46]. Cargas não homogêneas no grafeno foram calculadas e associadas a estados de impureza [47] ou deformação elástica [48], de uma natureza muito semelhante ao obtido anteriormente com defeitos topológicos [49–51].

2.2 Defeitos Topológicos

A teoria da Relatividade Geral prevê que o surgimento da gravitação se deve a curvatura no espaço-tempo, esta curvatura que é caracterizada pelo tensor de Riemann [52]. Defeitos topológicos, na gravitação, aparecem devido a quebra espontânea de simetria, como exemplo, o surgimento das cordas cósmicas [53]. Neste campo gravitacional, uma partícula em repouso em torno de uma corda cósmica estática, infinita e reta não será atraída, porque não existe a gravidade local e o espaço-tempo ao redor da mesma é localmente plano, mas não globalmente. O campo gravitacional externo devido a uma corda cósmica pode ser descrito por uma métrica cônica. Efeitos interessantes como: o efeito gravitacional Aharonov-Bohm [54, 55], lentes gravitacionais [57] e a auto-força por uma carga elétrica em repouso [58] podem ser explicados através desta topologia.

Em matéria condensada, defeitos topológicos também surgem da quebra espontânea de simetria. A partir desta correlação Katanaev e Volovick desenvolveram uma abordagem geométrica fundamentada na geometria de Riemann-Cartan, mostrando a equivalência entre a teoria gravitacional tridimensional com torção e a teoria de defeitos em sólidos, assim, cristais com defeitos topológicos em um limite contínuo podem ser descritos pela teoria geométrica de defeitos [59, 60]. Permitindo utilizar: cristais

líquidos, supercondutores, super-fluídos e outros materiais como laboratório para Gravitação e Cosmologia [61], além de descrever fenômenos interessantes nesta área, como fases geométricas em superfícies cônicas [62], efeito Aharonov-Bohm [63] e a possibilidade de futura aplicação tecnológica como computação quântica holonômica [64].

2.3 Defeitos Topológicos no Grafeno

Defeitos topológicos denominados por desclinações podem ser observados na rede cristalina hexagonal do grafeno. Estes defeitos são classificados em relação à simetria de rotação da rede cristalina, podem ser descritos pelo processo de "cortar e colar", conhecido na literatura como "processo Volterra" [65], ou seja, cortando a estrutura ao longo de uma linha e adicionando (ou removendo) um setor angular, λ , do mesmo material entre as duas bordas do corte, como podemos observar na figura 2.1, onde em (a) temos uma folha de grafeno plana com a área em destaque, de cor amarelo,

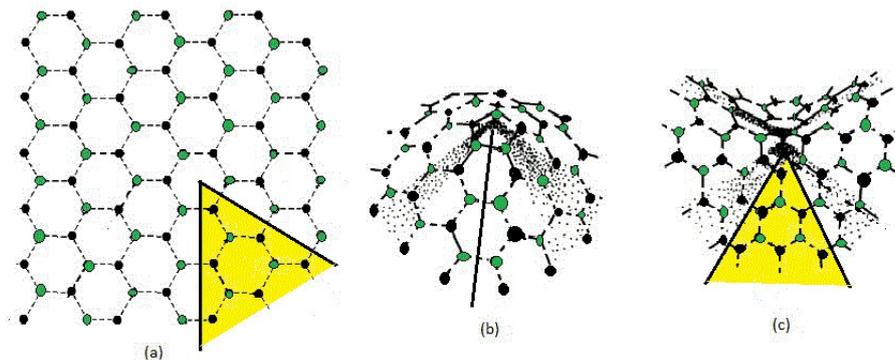


Figura 2.1: Representação do Processo Volterra, em: (a) folha de grafeno plana, com o setor angular, λ igual a $\frac{\pi}{3}$, em destaque de cor amarelo, (b) desclinação positiva, (c) desclinação negativa.

representando o setor angular, a ser adicionado (ou removido); em (b) temos

a folha de grafeno com desclinação positiva, devido a remoção do setor angular; em (c) agora temos a folha de grafeno com desclinação negativa devido a inserção do setor angular.

Nas estruturas cônicas das folhas de grafeno com desclinações os defeitos agem como a fonte de um campo de distorção geométrica, modificando a estrutura eletrônica em baixas energias como consequência para as propriedades de transporte não-locais [62]. Estas informações introduzidas pelo defeito no meio elástico contínuo do grafeno podem ser descrita usando a teoria geométrica de defeitos em sólidos, na abordagem de Katanaev e Volovick, pela métrica bidimensional no espaço-tempo:

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\phi^2, \quad (2.1)$$

onde α é um parâmetro que identifica a presença do defeito e está relacionado com o setor angular, λ , que é retirado (ou inserido) para formar o defeito pela expressão $\alpha = 1 + \frac{\lambda}{2\pi}$. O caso de $\alpha = 1$, corresponde a ausência de desclinação. No grafeno, devido a sua simetria hexagonal, podemos relacionar $\lambda = \pm N \frac{\pi}{3}$, onde N é um número inteiro no intervalo de $[0, 6]$ indicando com o número de setor removido (ou inserido), e obter uma nova expressão para α , na qual o sinal negativo representa a remoção de setor:

$$\alpha = 1 - \frac{N}{6} \quad (2.2)$$

Esta geometria possui uma singularidade cônica representada pelo seguinte tensor de curvatura:

$$R_{\rho,\phi}^{\rho,\phi} = \frac{1-\alpha}{4\alpha} \delta_2(\vec{\rho}), \quad (2.3)$$

onde $\delta_2(\vec{\rho})$ é a função delta em duas dimensões, este comportamento do tensor de curvatura é denominado singularidade cônica, ou seja, a origem da curvatura é no centro do defeito e em outros lugares a curvatura é nula.

Valores de α no intervalo de $0 < \alpha < 1$, significa espaços com curvatura positiva, devido a remoção de um setor ou mais setores do material para formar o defeito, e para $\alpha > 1$, significa espaços com curvatura negativa, devido a inserção de um setor ou mais setores do material para formar o defeito.

Com a introdução de curvatura na folha de grafeno devido a adição (ou remoção) de um setor angular, ocorre uma distorção geométrica na rede hexagonal, que pode ser mensurada pela circulação de um vetor tangencial, ao redor do ápice da estrutura que agora é cônica, por um caminho fechado em torno do defeito. Observou-se que através do transporte paralelo de um spinor, o mesmo adquire uma fase não-trivial, esta mudança de fase chamamos de holonomia. O fator de fase adquirido é análogo ao efeito conhecido como efeito Aharonov-Bohm [66], ou seja, a função de onda do elétron adquire um fator de fase, ϕ_{AB} , quando percorre uma trajetória ao redor de um fluxo magnético gerado por um solenoide muito longo ou por um arranjo linear de dipolos magnéticos que é dado por:

$$\phi_{AB} = \oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = q\Phi_c \quad (2.4)$$

sendo $\vec{A}_{(\vec{r})}$ o potencial vetor; q é a carga do elétron e Φ_c é o fluxo de campo magnético contido no solenoide. Baseado neste efeito é possível considerar que a descontinuidade gerada no grafeno, devido ao efeito de curvatura, pode dar origem a um campo de gauge efetivo, desta forma, $U_{(C)} = e^{i \oint \vec{A} \cdot d\vec{r}}$, onde $U_{(C)}$ é a holonomia encontrada a partir da expressão: $U_{(C)} = P e^{\oint \Gamma_\mu dx^\mu}$, onde P representa o produto ordenado, Γ_μ é a conexão spinorial, bem conhecida na teoria de campos em espaços curvos. Esta observação realizada por Furtado, Moraes e Carvalho [62], que obtiveram a seguinte expressão

para a holonomia nos cones de grafeno:

$$U_{(C)} = e^{\left[\frac{-i}{2}(\alpha-1)\sigma^3\phi\right]_0^{2\pi}}, \quad (2.5)$$

permitindo descrever a geometria cônica do grafeno no limite contínuo com a métrica que é dada pela equação (2.1), onde σ^3 é uma das matrizes de Pauli.

A curvatura introduzida devido a retirada (ou adição) do setor angular, não é a única consequência observada. Em uma rede hexagonal plana, a circulação dos spinores através de um caminho fechado em torno do defeito, observa-se que os mesmos pulam da sub-rede A para a sub-rede B, e vice-versa, mas quando inserimos uma desclinação conectamos dois átomos da mesma sub-rede, obrigando os spinores a saltarem a sítios que são da mesma sub-rede (ver figura 2.2). Esta descontinuidade tem um efeito sobre cada spinor misturando-os nas sub-redes, sendo análoga ao efeito Aharonov-

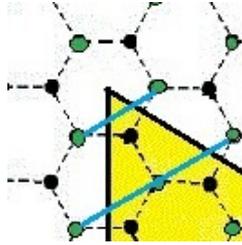


Figura 2.2: Descontinuidade nas sub-redes do grafeno devido a introdução da curvatura.

Bohm, devemos acrescentar um termo similar a um campo de gauge não-abeliano [67] que compensa o salto do spinor para a mesma sub-rede. Este termo para a remoção de um único setor temos:

$$\int_{(c)} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{\pi}{2}\tau^2 \quad (2.6)$$

onde τ^2 é uma das matrizes de Pauli, que mistura as componentes spinoriais referente aos pontos de fermi, K_+ e K_- .

A circulação do potencial vetor, \vec{A} , ao redor de um caminho fechado, c , a partir do ápice da estrutura cônica foi observada por Crespi e Lammert [68], que encontraram a seguinte holonomia para a função de onda dos spinores quanto aos número de setores removidos (ou inseridos):

$$U'_{(c)} = e^{[-i3\pi(\alpha-1)\tau^2]}, \quad (2.7)$$

Encontraremos o termo de gauge não-abeliano, $\frac{\Omega}{\rho}$, a ser acrescentado no nosso modelo através da expressão:

$$\int_{(c)} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_{(c)} \frac{\Omega}{\rho} \cdot dl, \quad (2.8)$$

a partir da equação (2.8) e a expressão de holonomia de Crespi e Lammert (a equação 2.7), obtemos o termo a ser considerado para compensar descontinuidade fictícia da função de onda:

$$\Omega = \pm \frac{3}{2} (\alpha - 1) \quad (2.9)$$

onde o sinal \pm refere-se aos spinores correspondentes a cada ponto de Fermi (K_+ e K_-). Neste momento destacamos que no grafeno com defeito topológico tipo desclinação, a descontinuidade fictícia da função de onda para os spinores somente existe quando o número de setor removido (ou inserido) for $N = 1, 3$ ou 5 , para $N = 2$ ou 4 , esta descontinuidade não ocorre, lembrando que o valor máximo é $N = 5$, para a existência do grafeno com defeito.

Portanto, para que a teoria seja consistente, as consequências do efeito da curvatura nas folhas de grafeno devem ser investigados através da Equação de Dirac em espaço-tempo curvo devido a presença de desclinações, com a inclusão da conexão spinorial, devido a curvatura, e também a inclusão

um campo de gauge não-abeliano, para compensar a descontinuidade fictícia da função de onda dos spinores. Desta forma, podemos reescrever a equação (1.11):

$$\gamma^\mu \left(i\nabla_\mu - \frac{\Omega_\mu}{\rho} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0. \quad (2.10)$$

A derivada covariante, ∇_μ , é definida como $\partial_\mu + \Gamma_\mu$, sendo, ∂_μ é a derivada ordinária, em relação as coordenadas do espaço-tempo curvo, Γ_μ é a conexão spinorial, obtida por Furtado, Moraes e Carvalho [62], que demonstraremos no próximo capítulo, e $\frac{\Omega_\mu}{\rho}$ é o campo de gauge não-abeliano, determinado anteriormente.

Capítulo 3

Espalhamento Elástico em Grafeno com Defeitos

3.1 Transporte eletrônico em Duas Dimensões

Como vimos, no grafeno existe uma influência topológica que modifica a estrutura eletrônica em baixa energia. Uma única folha de grafeno apresenta propriedades eletrônicas interessantes, compreender o papel dos defeitos nas propriedades de transporte de grafeno é central para a realização de dispositivos eletrônicos no futuro com base em carbono. Em experimentos com microscópio de tunelamento (STM - Scanning Tunneling Microscope) utilizado para medir os padrões de interferência das quasi-partículas presentes no grafeno, os estados de energia na densidade local revelam modulações em duas diferentes escalas de comprimento, mas quando sua fonte são defeitos, as funções de onda de diferentes simetrias podem se misturar [69]. Também foram relatados que certos tipos de ondulações presentes no grafeno

podem criar um potencial de espalhamento de longo alcance que resulta na alta mobilidade da carga, praticamente independente da concentração de portadores [70]. Magnetorresistência de baixo campo é sempre presente em sistema de baixa dimensão, no grafeno a magnetorresistência é fraca e em alguns casos, completamente ausente, essa observação inesperada é atribuída as ondulações que podem causar um efeito de defasagem semelhante ao de um campo magnético aleatório [71].

3.2 Espalhamento Elástico de Férmions sem massa por Defeitos em Grafeno

No capítulo 1, vimos que o método de *tight-binding* descreve muito bem a banda de condução e a banda de valência para os orbitais π do grafeno no limite contínuo em baixa energia, assim podendo descrever as excitações próxima aos pontos de Fermi, localizados na zona de Brillouin, através da equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com 2+1 dimensões. E no capítulo 2, observamos que, a presença de desclinações modifica a estrutura eletrônica do grafeno como consequência da curvatura introduzida pelo defeito. Agora, com essas informações vamos analisar aprofundando nosso conhecimento em relação a influência das desclinações nas propriedades de transporte estudando o espalhamento elástico dos férmions por defeitos.

3.2.1 Equação de Dirac sem massa no espaço-tempo curvo

No nosso modelo utilizamos a equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com 2+1 dimensões, na abordagem geométrica de defeitos de-

vido a presença das desclinações dado pela métrica na equação (2.1) a seguir:

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\phi^2, \quad (3.1)$$

e acrescido de um campo de gauge não-abeliano. Nós adotamos a assinatura $(+, -, -)$ para métrica e a convenção $\hbar = c = 1$. A dinâmica do spinor de Dirac neste pano de fundo é governada pela equação de Dirac:

$$\gamma^\mu \left(i\nabla_\mu - \frac{\Omega_\mu}{\rho} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0. \quad (3.2)$$

Na expressão acima, γ^μ são as matrizes de Dirac; ∇_μ é a derivada covariante; e Ω_μ é o termo de gauge não-Abeliano, que surge para compensar a descontinuidade das sub-redes na presença do defeito topológico, como definimos no capítulo anterior (veja a equação 2.9).

As matrizes de Dirac γ^μ satisfazem a relação de comutação $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$. O tensor métrico que é definido por (2.1) e pode ser escrito em termos dos campos de tetradas locais $g^{\mu\nu} = E_a^\mu E_b^\nu \eta^{ab}$, onde os índices latinos a, b, c, \dots , pertencente ao espaço-tempo de Minkowski e correspondendo a $0, 1, 2, \dots$, enquanto que os índices gregos μ, ν, \dots pertencente ao espaço-tempo curvo e correspondendo a t, ρ, ϕ, \dots , as matrizes de Dirac são definidas como:

$$\gamma^0 = \hat{\beta} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ -\sigma^i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

Escrevemos os spinores de Dirac em duas componentes, desta forma, introduzimos a seguinte representação em termos das matrizes de Pauli:

$$\beta\gamma^1 = \sigma^1, \beta\gamma^2 = \sigma^2, \beta = \sigma^3, \quad (3.4)$$

onde $\beta\gamma^0 = (\sigma^3)^2 = I$.

A derivada covariante é definida como:

$$\nabla_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu, \quad (3.5)$$

sendo ∂_μ , a derivada ordinária, em relação as coordenadas do espaço-tempo curvo, e Γ_μ , a conexão spinorial, que será definida em breve, desta maneira a equação (3.2) ficará reescrita na forma:

$$\gamma^\mu \left(i\partial_\mu + i\Gamma_\mu - \frac{\Omega_\mu}{\rho} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0. \quad (3.6)$$

Definido o pano de fundo para o grafeno, vamos encontrar os referenciais locais dos observadores. Estes referenciais são construídos através das componentes da base não-coordenada $\widehat{\theta}^a = e_\mu^a dx^\mu$ para cada elemento de linha da métrica (2.1):

$$\begin{aligned} \widehat{\theta}^0 &= dt, \\ \widehat{\theta}^1 &= \cos(\phi)d\rho - \alpha\rho\sin(\phi)d\phi, \\ \widehat{\theta}^2 &= \sin(\phi)d\rho + \alpha\rho\cos(\phi)d\phi, \end{aligned}$$

desta forma, podemos escrever os campos de tetradas $e_\mu^a(x)$, como sua inversa, $e_a^\mu(x)$, na forma matricial:

$$e_\mu^a(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\alpha\rho\sin\phi \\ 0 & \sin\phi & \alpha\rho\cos\phi \end{pmatrix}, \quad e_a^\mu(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \\ 0 & -\frac{\sin\phi}{\alpha\rho} & \frac{\cos\phi}{\alpha\rho} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Para calcular a conexão de spin e obter a conexão spinorial, precisamos calcular a conexão um-forma, $\omega_b^a = \omega_\mu^a dx^\mu$, que são obtidas das equações de estrutura de Maurer-Cartan $d\widehat{\theta}^a + \omega_b^a \wedge \widehat{\theta}^b = 0$, observando a

simetria do defeito (2.1) existe duas componentes não-nulas para a conexão um-forma:

$$\omega_1^2 = -\omega_2^1 = (\alpha - 1)d\phi. \quad (3.8)$$

Através da expressão: $\Gamma_{\mu b}^a(x) = \omega_{\mu b}^a dx^\mu$, obtemos a matriz conexão de spin que esta relacionada com a conexão um-forma:

$$\Gamma_{\mu b}^a(x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(\alpha - 1) \\ 0 & (\alpha - 1) & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Finalmente, a conexão spinorial que é descrita em termos da conexão de spin pela expressão: $\Gamma_\mu = -\frac{1}{8}\Gamma_{\mu ab}[\gamma^a, \gamma^b]$, com somente uma única componente não nula:

$$\Gamma_\phi = -\frac{i}{2}(\alpha - 1)\sigma^3. \quad (3.10)$$

Usando a conexão spinorial (3.10), o campo de gauge não-Abeliano, a equação de Dirac (1.11) com este procedimento torna-se:

$$\left\{ i\gamma^t \partial_t + i\gamma^\rho \left(\partial_\rho + \frac{1}{2\rho} - \frac{1}{2\alpha\rho} \right) + \gamma^\phi \frac{i\partial_\phi}{\alpha\rho} - \gamma^\phi \frac{\Omega_\phi}{\rho} \right\} \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0 \quad (3.11)$$

As matrizes de Dirac devem ser definidas em termos dos referenciais locais pela expressão $\gamma^\mu = e_a^\mu \gamma^a$, sendo γ^a satisfazem a relação de comutação $\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\eta^{ab}$ no espaço-tempo de Minkowski, obedecendo a seguinte relação:

$$\bar{\gamma}^0 = e_a^\mu \gamma^a = \gamma^0 = \gamma^t; \quad (3.12a)$$

$$\bar{\gamma}^1 = e_a^\mu \gamma^a = \gamma^1 \cos \phi + \gamma^2 \sin \phi = \gamma^\rho; \quad (3.12b)$$

$$\bar{\gamma}^2 = e_a^\mu \gamma^a = \frac{1}{\alpha\rho} (\gamma^2 \cos \phi - \gamma^1 \sin \phi) = \frac{\gamma^\phi}{\alpha\rho}. \quad (3.12c)$$

Realizamos a separação de variáveis na equação (3.11). Assim, escolhemos o *ansatz* a seguir como solução da equação de Dirac, consideramos a independência temporal e a simetria rotacional do plano de fundo. Esta escolha pode ser considerada como a solução de uma partícula livre num referencial em repouso [72, 73]:

$$\psi = e^{-iEt+i\left(l+\frac{1}{2}-\frac{\sigma^3}{2}\right)\phi} \begin{pmatrix} \chi_A(\rho) \\ \chi_B(\rho) \end{pmatrix}, \quad (3.13)$$

onde E e l são constantes de separação que podem ser interpretada como energia e momento angular, respectivamente. O spinor $\chi_A(\rho)$ refere-se a sub-rede A e $\chi_B(\rho)$ refere-se a sub-rede B.

Usando o mesmo procedimento adotado por Villalba [72, 73], onde utilizou a transformação de similaridade $S(\phi)$, em que as matrizes γ^ρ e γ^ϕ são reduzidas para matrizes γ^1 e γ^2 , respectivamente, e esta transformação assumirá a seguinte forma:

$$S(\phi) = e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma^3}. \quad (3.14)$$

Satisfazendo a seguinte propriedade:

$$S^{-1}(\phi)\gamma^\rho S(\phi) = \gamma^1, \quad (3.15a)$$

$$S^{-1}(\phi)\gamma^\phi S(\phi) = \gamma^2. \quad (3.15b)$$

O *ansatz* (3.13), a transformação de similaridade (3.15a e 3.15b) e a representação em termos das matrizes de Pauli (3.4) permitem escrever o seguinte conjunto de equações diferenciais para a parte radial:

$$E\chi_{A(\rho)} = -i\left(\partial_\rho + \frac{1}{2\rho}\right)\chi_{B(\rho)} - i\left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha\rho} + \frac{\Omega_\pm}{\rho}\right)\chi_{B(\rho)}, \quad (3.16a)$$

$$E\chi_{B(\rho)} = -i\left(\partial_\rho + \frac{1}{2\rho}\right)\chi_{A(\rho)} + i\left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha\rho} + \frac{\Omega_\pm}{\rho}\right)\chi_{A(\rho)}, \quad (3.16b)$$

onde o sinal \pm , corresponde a cada ponto de Fermi, ou seja, o sinal $+$ para o ponto de Fermi K_+ , e o sinal $-$ para o ponto de Fermi K_- .

Encontramos as equações de movimento que satisfaz a cada spinor:

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho - \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm + \frac{1}{2} \right)^2 + E^2 \right] \chi_{B(\rho)} = 0, \quad (3.17a)$$

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho - \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm - \frac{1}{2} \right)^2 + E^2 \right] \chi_{A(\rho)} = 0. \quad (3.17b)$$

Escrevendo as equações (3.17a) e (3.17b) de forma mais compacta, temos:

$$(\rho^2 \partial_\rho^2 + \rho \partial_\rho - \nu^2 + E^2 \rho^2) \chi_{A(\rho)} = 0, \quad (3.18a)$$

$$(\rho^2 \partial_\rho^2 + \rho \partial_\rho - (\nu + 1)^2 + E^2 \rho^2) \chi_{B(\rho)} = 0, \quad (3.18b)$$

onde $\nu = \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm - \frac{1}{2} \right)$ e $\nu + 1 = \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm + \frac{1}{2} \right)$. Os parâmetros $\nu, \nu + 1$ e Ω dependem da natureza do defeito em questão, ou seja, dependem do ângulo de desclinação quanto ao número de setores adicionado (ou removido).

As equações radiais de Dirac (3.18a) e (3.18b) são equações diferenciais de Bessel com a seguinte solução geral:

$$\chi_\nu(E\rho) = A_\nu J_\nu(E\rho) + B_\nu N_\nu(E\rho), \quad (3.19a)$$

$$\chi_{\nu+1}(E\rho) = A_{\nu+1} J_{\nu+1}(E\rho) + B_{\nu+1} N_{\nu+1}(E\rho). \quad (3.19b)$$

De forma que os spinores de Dirac são $\chi_{\nu(\rho)} = \chi_{A(\rho)}$ e $\chi_{\nu+1(\rho)} = \chi_{B(\rho)}$, com os termos $A_\nu, B_\nu, A_{\nu+1}, B_{\nu+1}$ que são constantes de normalização.

As funções de Bessel do primeiro tipo, $J_\nu(E\rho)$ e $J_{\nu+1}(E\rho)$, são funções finitas na origem, enquanto que as funções de Bessel do segundo tipo, $N_\nu(E\rho)$ e $N_{\nu+1}(E\rho)$, são divergentes na origem. Necessitamos que a solução

seja bem comportadas na origem, desta forma, escolhemos as constantes $B_\nu = B_{\nu+1} = 0$, e temos como solução para as equações de Bessel (3.18a) e (3.18b):

$$\chi_\nu(\rho) = A_\nu J_\nu(E\rho), \quad (3.20a)$$

$$\chi_{\nu+1}(\rho) = A_{\nu+1} J_{\nu+1}(E\rho). \quad (3.20b)$$

Temos como forma assintótica da função de Bessel [74] para os spinores de Dirac das equações (3.20a) e (3.20b):

$$\chi_\nu(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos\left(E\rho - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (3.21a)$$

$$\chi_{\nu+1}(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos\left(E\rho - \frac{\nu\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (3.21b)$$

3.3 Teoria do Espalhamento Elástico Quântico para o grafeno

Vamos analisar o problema de espalhamento não associado a um tipo de potencial tradicional, utilizando o mesmo procedimento de Deser e Jackiw [76], implementado com êxito para analisar o espalhamento relativístico em relação ao movimento quântico da partícula sobre um cone. Desta forma, precisamos encontrar a solução da Equação de Dirac para analisar o espalhamento relativo ao movimento quântico relativístico dos elétrons de Dirac sobre o defeito, lembrando que não existe a interação com um potencial, está informação esta inserida na métrica.

Considerando o problema de espalhamento, isto é, o movimento de elétrons livres, $\psi(\rho, \phi) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{p}}$, com origem em $t = -\infty$ para $t = \infty$ que serão espalhados pelo defeito presente na folha de grafeno, onde a solução

pode ser construída como uma superposição de ondas parciais, para os spinores de Dirac, da função de onda plana incidente, teremos:

$$\psi_{(\rho,\phi)} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l e^{i\delta_l} \begin{pmatrix} \chi_l^A(\rho) \\ \chi_{l+1}^B(\rho) \end{pmatrix} e^{il\phi}, \quad (3.22)$$

sendo $i^l = e^{il\frac{\pi}{2}}$ e usando a seguinte expansão para a função de onda plana: $e^{iE\rho \cos \phi} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l J_l(\rho) e^{il\phi}$.

E se assumimos que a região de interação é especialmente restrita, podemos considerar o comportamento assintótico com a seguinte solução para a parte radial:

$$\chi_l^A(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos \left(E\rho - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_l^A \right), \quad (3.23a)$$

$$\chi_{l+1}^B(\rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos \left(E\rho - \frac{l\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta_{l+1}^B \right). \quad (3.23b)$$

onde δ_l^A é o ângulo de mudança de fase sub-rede A e δ_{l+1}^B é o ângulo de mudança de fase sub-rede B.

3.3.1 Ângulo de mudança de fase, δ_l :

O ângulo de mudança de fase, δ_l , tem como origem a interação com o defeito, o mesmo descreve a mudança com relação a solução para a onda livre. Vamos obter o ângulo de mudança de fase: δ_l^ν igualando os argumentos da função cosseno das equações (3.21a) e (3.23a); e obtemos $\delta_l^{\nu+1}$ igualando os argumentos da função cosseno das equações (3.21b) e (3.23b) e substituindo os termos $\nu = \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm - \frac{1}{2} \right)$ e $\nu + 1 = \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm + \frac{1}{2} \right)$. Assim determinamos que ângulo de mudança de fase será o mesmo para ambos spinores de Dirac: $\chi_\nu(\rho)$ e $\chi_{\nu+1}(\rho)$:

$$\delta_l = \delta_l^A = \delta_{l+1}^B = - \left(\left(l + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega}{2} + \frac{\pi}{2} \Omega_\pm \right), \quad (3.24)$$

sendo $\omega = (\alpha^{-1} - 1)\pi$.

Podemos concluir que o ângulo de mudança de fase, δ_l , não depende só da influência da geometria do defeito que está contido em ω , como foi observado por Fonseca, Moura-Melo e Pereira [77], mas o mesmo também depende de Ω_{\pm} que está relacionado com a presença do campo de gauge não-Abeliano. Logo, temos duas contribuições: uma referente ao efeito Aharonov-Bohm devido a geometria, e a segunda contribuição devido ao campo de gauge não-Abeliano. Em termos dos números de setores removidos (ou inseridos) podemos reescrever o ângulo de mudança de fase como:

$$\delta_l = \left(- \left(l + \frac{1}{2} \right) \frac{N}{6 - N} \pi \pm \frac{N\pi}{8} \right), \quad (3.25)$$

Lembrando que para a rede hexagonal do grafeno com desclinação, sendo N um número inteiro no intervalo $[0, 5]$ representando o número de setor removido (ou inserido), gerando o defeito. Na expressão acima para δ_l , o termo $\pm \frac{N\pi}{8}$ é devido a descontinuidade adquirida na função de onda dos spinores, portanto, somente será considerado para N igual a 1, 3 ou 5, quando observamos a descontinuidade das sub-redes no grafeno.

3.3.2 Amplitude de espalhamento, $f(\phi)$:

Na seção 3.3, escrevemos a solução da função de onda espalhada como uma superposição de ondas parciais (veja a equação 3.22), com o seguinte comportamento assintótico, quando $\rho \rightarrow \infty$:

$$\psi(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i(\delta_l + l\pi/2)} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{2}{\pi E\rho}} \cos \left(E\rho - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_l \right) \\ \sqrt{\frac{2}{\pi E\rho}} \cos \left(E\rho - \frac{l\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta_l \right) \end{pmatrix} e^{il\phi} \quad (3.26)$$

Reescrevendo a equação anterior explicitando as funções de onda espalhada de cada spinor, desta forma:

$$\psi^A(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i(\delta_l + l\pi/2)} \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos\left(E\rho - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_l\right) e^{il\phi}, \quad (3.27a)$$

$$\psi^B(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{i(\delta_l + l\pi/2)} \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos\left(E\rho - \frac{l\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta_l\right) e^{il\phi}. \quad (3.27b)$$

Devido a superposição também podemos decompor a equação (3.26) em duas partes: uma parte a função de onda incidente, $\psi_{inc}(\rho, \phi)$, mas a outra parte como a função de onda espalhada, $\psi_{sc}(\rho, \phi)$:

$$\psi(\rho, \phi) = \psi_{inc}(\rho, \phi) + \psi_{sc}(\rho, \phi), \quad (3.28)$$

Analisando o comportamento assintótico, isto é, quando $\rho \rightarrow \infty$ temos:

$$\psi(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l \begin{pmatrix} \chi_l^A(\rho) \\ \chi_{l+1}^B(\rho) \end{pmatrix} e^{il\phi} + \frac{f(\phi)}{\sqrt{\rho}} e^{iE\rho} \quad (3.29)$$

a função $f(\phi)$ é a magnitude da função de onda da parte espalhada, esta função é chamada de amplitude de espalhamento. Nós assumimos que a amplitude de espalhamento, $f(\phi)$, desaparece quando o potencial de interação é zero.

Temos como comportamento assintótico para $\psi^A(\rho, \phi)$:

$$\psi^A(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l \chi_l^A(\rho) e^{il\phi} + \frac{f_A(\phi)}{\sqrt{\rho}} e^{iE\rho},$$

$$\psi^A(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos\left(E\rho - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_l\right) e^{il\phi} + \frac{f_A(\phi)}{\sqrt{\rho}} e^{iE\rho}. \quad (3.30)$$

Temos como comportamento assintótico para $\psi_B(\rho, \phi)$:

$$\psi^B(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l \chi_{l+1}^B(\rho) e^{il\phi} + \frac{f_B(\phi)}{\sqrt{\rho}} e^{iE\rho}, \quad (3.31)$$

$$\psi^B(\rho, \phi) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l \sqrt{\frac{2}{\pi E \rho}} \cos\left(E\rho - \frac{l\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta_l\right) e^{il\phi} + \frac{f_B(\phi)}{\sqrt{\rho}} e^{iE\rho}. \quad (3.32)$$

Comparando as equações (3.30) e (3.27a), obtemos que a função amplitude de espalhamento, $f_A(\phi)$, será dada por:

$$f_A(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} (e^{2i\delta_l} - 1) e^{i(l\phi - \frac{\pi}{4})}. \quad (3.33)$$

Comparando as equações (3.32) e (3.27b), obtemos que a função de amplitude de espalhamento, $f_B(\phi)$, será dada por:

$$f_B(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} (e^{2i\delta_l} - 1) e^{i(l\phi + \frac{\pi}{4})}. \quad (3.34)$$

Substituindo a expressão para δ_l dada pela equação (3.25) na função amplitude de espalhamento para a sub-rede A, equação (3.33), e para a sub-rede B, equação (3.34), encontramos:

$$f_\sigma(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(e^{-2i(l+\frac{1}{2})i\frac{N}{6-N}\pi \pm \frac{N\pi}{4}} - 1 \right) e^{i(l\phi - \frac{\sigma\pi}{4})}, \quad (3.35)$$

com $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno.

Precisamos resolver a soma na equação (3.35), vamos reescrever esta equação na forma:

$$f_\sigma(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E}} \left(e^{i(\pm\frac{N\pi}{4} - \frac{\sigma\pi}{4} + \frac{N}{6-N}\pi)} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il(\phi - 2\frac{N}{6-N}\pi)} - e^{-i\frac{\sigma\pi}{4}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\phi} \right), \quad (3.36)$$

Temos duas somas:

$$\begin{aligned} S_1 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il(\phi - 2\frac{N}{6-N}\pi)} \\ S_1 &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(e^{il(\phi - 2\frac{N}{6-N}\pi)} + e^{-il(\phi - 2\frac{N}{6-N}\pi)} \right) - 1; \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} S_2 &= \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\phi} \\ S_2 &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(e^{il\phi} + e^{-il\phi} \right) - 1. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Vamos resolver as somas nas expressões (3.37) e (3.38) fazendo uma regularização, efetuando a inserção de um fator exponencial convergente, $e^{i\epsilon}$, conforme o mesmo método utilizado por Jackiw e Deser [76], o resultado desta regularização substituímos na equação (3.36), e apresentamos a solução final para a amplitude de espalhamento:

$$f_{\sigma}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi E}} \left(e^{i\left(\pm \frac{N\pi}{4} - \frac{\sigma\pi}{4} + \frac{N}{6-N}\pi\right)} 2\pi\delta\left(\phi - 2\frac{N}{6-N}\pi\right) - e^{-i\frac{\sigma\pi}{4}} 2\pi\delta(\phi) \right), \quad (3.39)$$

Observando que $\omega = (\alpha^{-1} - 1)\pi = \frac{N}{6-N}\pi$, e comparando com o resultado para o espalhamento quântico em um cone, encontrado por Jackiw [76], percebemos que nosso resultado apresenta alguns termos, referentes aos pontos de Fermi e as sub-redes, que são agregados devido ao defeito estar inserido no grafeno. Portanto, nos pontos de Fermi os spinores de Dirac sofrem influência da geometria inserida pelo defeito.

Capítulo 4

Níveis de Landau na presença de defeitos

4.1 Efeito Hall Quântico

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 [78]. Este fenômeno é de grande interesse para a fabricação de dispositivos eletrônicos.

A verificação experimental do efeito Hall quântico é indicado por platôs nas medidas da condutância Hall, ρ_{xy} , e das oscilações no valor da resistência longitudinal, σ_{xx} , (Oscilações Shubnikov-de Haas) em função do campo magnético aplicado perpendicular, B , (ou em função da tensão de *gate* aplicada, V_g) à amostra. A figura 4.1 mostra o efeito Hall quântico em uma amostra de grafeno epitaxial, esta observação experimental mostra que

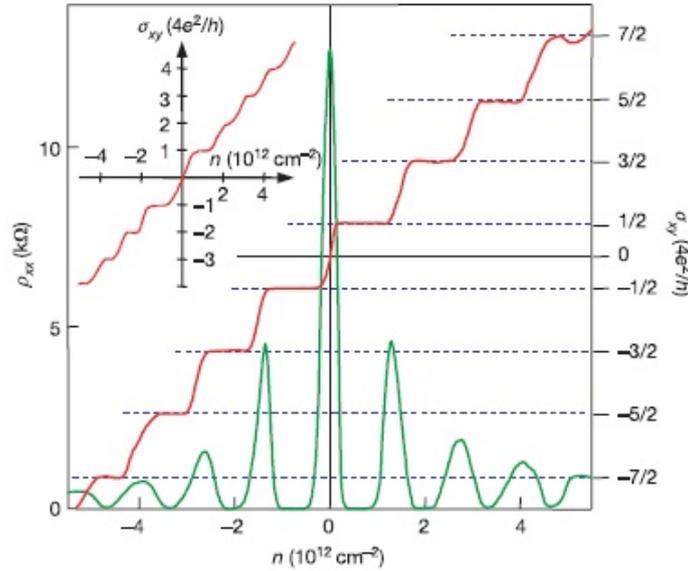


Figura 4.1: A condutividade Hall (em vermelho) e a resistência longitudinal (em verde) (Figura retirada da referência [34]).

o efeito Hall quântico é de forma não convencional, devido ao espaçamento entre os platôs do grafeno ser de $4e^2/h$, enquanto que no efeito Hall usual ocorrem com passos pela metade e em múltiplos inteiros desse valor.

Mesmo a temperatura ambiente podemos observar o efeito Hall quântico no grafeno [79], ao contrário dos sistemas convencionais nos quais não são observados o mesmo efeito em temperaturas acima de 30K. Recentemente, Xu Du e colaboradores [19] observaram em amostra de grafeno suspenso o efeito Hall quântico fracionário, veja a figura 4.2, e concluíram que os elétrons de Dirac exibem um comportamento coletivo muito forte, além disso encontraram uma transição de campo-induzido para isolante. Eles acreditam que para portadores de carga relativísticos novos estados de correlação devam surgir.

A influência de defeitos topológicos tipo desclinação sobre o es-

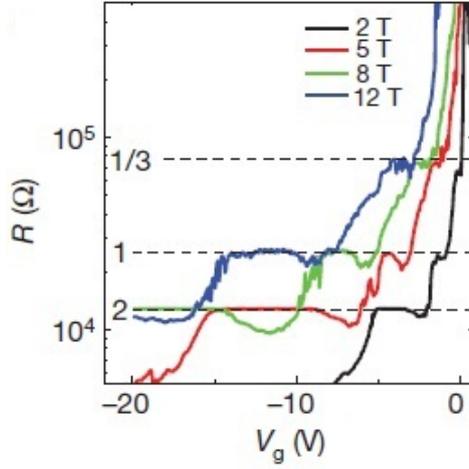


Figura 4.2: Efeitos Hall quântico fracionário (Figura retirada da referência [19]), como função da densidade de carga

pectro de um elétron na presença de uma campo magnético foi investigado por Furtado e colaboradores [80], no qual observaram que a presença de desclinações quebram a degenerescência infinita dos níveis de Landau, devido ao acoplamento da curvatura do defeito cônico com o momento angular.

Mostraremos que a presença do defeito topológico modifica a estrutura dos níveis de Landau com possíveis implicações físicas para o estudo de efeito Hall no grafeno.

4.2 Aplicação de um Campo Magnético perpendicular à Folha Plana de Grafeno

Primeiramente analisamos o comportamento dos elétrons em uma superfície plana de grafeno na presença de um campo magnético aplicado perpendicular ao movimentos dos mesmos, em coordenadas polares (t, ρ, ϕ) . Nessa configuração nossa métrica será:

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \rho^2 d\phi^2, \quad (4.1)$$

neste capítulo também adotamos a assinatura $(+, -, -)$ para métrica e a convenção $\hbar = c = 1$.

A dinâmica do spinor neste pano de fundo é governada pela seguinte equação de Dirac em espaço-tempo com $(2+1)$ dimensões:

$$\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0. \quad (4.2)$$

Na expressão acima, γ^μ são as matrizes de Dirac que satisfazem a relação de comutação $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$. O tensor métrico que é definido por (4.1) e pode ser escrito em termos dos campos de tetradas locais $g^{\mu\nu} = E_a^\mu E_b^\nu \eta^{ab}$, onde os índices latinos a, b, c, \dots , pertencente ao espaço-tempo de Minkowski e correspondem a $0, 1, 2, \dots$, enquanto que os índices gregos μ, ν, \dots pertencente ao espaço-tempo curvo e correspondem a t, ρ, ϕ, \dots ; ∂_μ é a derivada ordinária em relação as coordenadas do espaço-tempo curvo; e A_μ é o termo de gauge Abelianiano, devido a presença do campo magnético.

Escrevemos os spinores de Dirac em duas componentes, desta forma, introduzimos a seguinte representação em termos das matrizes de Pauli:

$$\beta\gamma^1 = \sigma^1, \quad \beta\gamma^2 = \sigma^2, \quad \beta = \sigma^3, \quad (4.3)$$

onde $\beta\gamma^0 = (\sigma^3)^2 = I$.

Definimos os referenciais locais dos observadores, construídos através das componentes da base não-coordenada $\hat{\theta}^a = e_\mu^a dx^\mu$ para cada elemento de linha da métrica (4.1):

$$\begin{aligned}
\widehat{\theta}^0 &= dt, \\
\widehat{\theta}^1 &= \cos(\phi)d\rho - \rho \sin(\phi)d\phi, \\
\widehat{\theta}^2 &= \sin(\phi)d\rho + \rho \cos(\phi)d\phi,
\end{aligned}$$

desta forma, podemos escrever os campos de tetradas $e_\mu^a(x)$, como sua inversa, $e_a^\mu(x)$, na forma matricial:

$$e_\mu^a(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\rho \sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \rho \cos \phi \end{pmatrix}, \quad e_a^\mu(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi \\ 0 & -\frac{\sin \phi}{\rho} & \frac{\cos \phi}{\rho} \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Vamos definir as matrizes de Dirac em termos dos referenciais locais, obedecendo o princípio da equivalência na relatividade geral, pela expressão $\gamma^\mu = e_\mu^a \gamma^a$, sendo que γ^a satisfazem a relação de comutação $\{\gamma^a, \gamma^b\} = 2\eta^{ab}$ no espaço-tempo de Minkowski, obedecendo a seguinte relação:

$$\bar{\gamma}^0 = e_a^\mu \gamma^a = \gamma^0 = \gamma^t; \quad (4.5a)$$

$$\bar{\gamma}^1 = e_a^\mu \gamma^a = \gamma^1 \cos \phi + \gamma^2 \sin \phi = \gamma^\rho; \quad (4.5b)$$

$$\bar{\gamma}^2 = e_a^\mu \gamma^a = \frac{1}{\rho} (\gamma^2 \cos \phi - \gamma^1 \sin \phi) = \frac{\gamma^\phi}{\rho}. \quad (4.5c)$$

O potencial vetor, \vec{A} , associado ao campo magnético uniforme é:

$$\vec{A} = \frac{B}{2} \hat{e}_\phi \quad (4.6)$$

podemos escrever em coordenadas polares o campo magnético, \vec{B} , perpendicular ao plano como:

$$\vec{B} = B \hat{e}_z \quad (4.7)$$

Reescrevemos a dinâmica do spinor (veja a equação (4.2)) governada pela equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com 2+1 dimensões:

$$\left(i\gamma^t \partial_t + i\gamma^\rho \partial_\rho + i\frac{\gamma^\phi}{\rho} \partial_\phi + \gamma^\phi \frac{eB\rho}{2} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0, \quad (4.8)$$

onde B é o campo magnético uniforme.

Seguindo o mesmo procedimento da seção 3.2. usando o *ansatz* (3.13), a transformação de similaridade (3.15a e 3.15b e a representação em termos das matrizes de Pauli (4.3), permitem escrever o seguinte conjunto de equações diferenciais para a parte radial:

$$E\chi_{A(\rho)} = -i \left(\partial_\rho + \frac{1}{2} \right) \chi_{B(\rho)} + i \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\rho} - \frac{eB\rho}{2} \right) \chi_{B(\rho)}, \quad (4.9a)$$

$$E\chi_{B(\rho)} = -i \left(\partial_\rho + \frac{1}{2} \right) \chi_{A(\rho)} - i \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\rho} - \frac{eB\rho}{2} \right) \chi_{A(\rho)}, \quad (4.9b)$$

Encontramos as equações de movimento que satisfaz a cada spinor:

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho - \frac{1}{\rho^2} \widetilde{M}_\sigma^2 + \widetilde{K}_\sigma - \left(\frac{eB\rho}{2} \right)^2 \right] \chi_{\sigma(\rho)} = 0 \quad (4.10)$$

onde \widetilde{M}_σ , \widetilde{N}_σ e \widetilde{k}_σ são, respectivamente dados por:

$$\widetilde{M}_\sigma = \left(l + \frac{1}{2} - \frac{\sigma}{2} \right) \quad (4.11a)$$

$$\widetilde{N}_\sigma = \left(l + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2} \right) \quad (4.11b)$$

$$\widetilde{K}_\sigma = eB\widetilde{N}_\sigma + E^2 \quad (4.11c)$$

com $\sigma = \pm 1$, sendo +1 corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno. A equação (4.10), fazendo a seguinte mudança de variável $\xi = \frac{eB\rho^2}{2}$, podemos reescrevê-la de forma mais conveniente:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\widetilde{M}_\sigma^2}{4\xi^2} + \frac{\widetilde{K}_\sigma}{2eB\xi} - \frac{1}{4} \right] \chi_{\sigma(\xi)} = 0$$

Verificamos os limites quando $\xi \rightarrow 0$ e $\xi \rightarrow \infty$, analisamos assim o comportamento de $\chi_{\sigma(\xi)}$, podemos assumir a seguinte soluç~ao:

$$\chi_{\sigma(\xi)} = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|\widetilde{M}_\sigma|}{2}} F(\xi) \quad (4.12)$$

Substituindo o *ansatz* (4.12) na equaç~ao (4.10) encontramos:

$$\xi \partial_\xi^2 F(\xi) + \left(|\widetilde{M}_\sigma| + 1 - \xi \right) \partial_\xi F(\xi) - \left(\frac{|\widetilde{M}_\sigma|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\widetilde{K}_\sigma}{2eB} \right) F(\xi) = 0 \quad (4.13)$$

A equaç~ao (4.13) é uma equaç~ao diferencial hipergeométrica confluyente, com a seguinte soluç~ao:

$$F_{\sigma(\xi)} = F \left(\frac{|\widetilde{M}_\sigma|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\widetilde{K}_\sigma}{2eB}, |\widetilde{M}_\sigma| + 1; \xi \right). \quad (4.14)$$

4.2.1 Comportamento Assintótico da função hipergeométrica confluyente

A função hipergeométrica confluyente ou série hipergeométrica confluyente [74] é definida como:

$$F(a, c; x) = 1 + \frac{a}{c} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} \dots = \frac{(a)_m}{(c)_m} \frac{x^m}{m!}, \quad (4.15)$$

com $c \neq 0, -1, -2, \dots$. No limite assintótico, a função hipergeométrica confluyente é dada por:

$$F(a, c; x \rightarrow \infty) \approx \frac{e^x \Gamma(c)}{x^{c-a} \Gamma(a)} \quad (4.16)$$

onde $\Gamma(a) = (a-1)!$ é a função gamma.

Analisando a equação (4.16) temos que a função hipergeométrica confluyente torna-se nula no limite assintótico somente quando $\Gamma(a) \rightarrow \infty$, por definição a função $\Gamma(-n) = \pm\infty$. Assim podemos concluir que o parâmetro a desta função deve ser zero ou um número inteiro negativo:

$$a = 0, -1, -2, -3... = -n., \quad (4.17)$$

com isso a função hipergeométrica confluyente torna-se um polinômio.

4.2.2 Níveis de Landau

Para que a solução encontrada referente aos spinores de Dirac (4.12) seja normalizada, a mesma terá que tender para zero quando $\rho \rightarrow \infty$ ou $\xi \rightarrow \infty$. Portanto, pela condição polinomial da função hipergeométrica confluyente (a equação (4.17)), e observando a solução (4.14), podemos escrever:

$$-n = \frac{|\widetilde{M}_\sigma|}{2} + \frac{1}{2} + \frac{\widetilde{K}_\sigma}{2eB}, \quad (4.18)$$

substituindo na equação (4.18) as expressões para \widetilde{M}_σ (4.11a), \widetilde{K}_σ (4.11c) e \widetilde{N}_σ (4.11b), encontramos:

$$-n = \frac{|l + \frac{1}{2} - \frac{\sigma}{2}|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{l + \frac{1}{2} + \frac{\sigma}{2}}{2} - \frac{E^2}{2eB}. \quad (4.19)$$

Desta forma obtemos os níveis de energia para os spinores de Dirac:

$$E^2 = 2eB \left(n + \left| \frac{l}{2} + \frac{1}{4}(1 - \sigma) \right| - \frac{l}{2} + \frac{1}{4}(1 - \sigma) \right),$$

com o número quântico $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, lembrando que $\sigma = \pm 1$ sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, este termo conecta a quiralidade, confirmando a peculiaridade dos níveis de Landau para férmions sem massa representados no grafeno, ou seja, apresenta uma degenerescência duas vezes menor que outro nível de energia, e também a existência de estados de energia para o número quântico $n = 0$, observando anomalia em relação aos semicondutores usuais [75]. ,

4.3 Aplicação de um Campo Magnético perpendicular à Folha de Grafeno com defeito topológico

Estamos interessados nos efeitos da presença de um campo magnético uniforme aplicado perpendicular à folha de grafeno, com a mesma estrutura do defeito topológico que estamos trabalhando, dado pela métrica na equação (2.1), a seguir:

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\phi^2, \quad (4.20)$$

O potencial vetor, \vec{A} , associado ao campo magnético uniforme é:

$$\vec{A} = \frac{B}{2} \hat{e}_\phi, \quad (4.21)$$

deste modo, podemos escrever em coordenadas polares o campo magnético, \vec{B} , perpendicular ao plano como:

$$\vec{B} = B\hat{e}_z \quad (4.22)$$

Desta Forma, o sistema passa a ser descrito por dois campos de gauge (um campo de gauge Abelian, A_μ , devido ao campo externo uniforme; e o outro campo de gauge não-Abeliano, $\frac{\Omega_\mu}{\rho}$, devido a presença do defeito topológico) acoplados a equação de Dirac sem massa em espaço-tempo com 2+1 dimensões. A dinâmica do spinor de Dirac neste pano de fundo é governada pela equação:

$$\gamma^\mu \left(i\nabla_\mu - e\mathbf{A}_\mu - \frac{\Omega_\mu}{\rho} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0, \quad (4.23)$$

na expressão acima, γ^μ é matriz de Dirac (veja a equação (3.3)); ∇_μ é a derivada covariante (veja a equação (3.5)); $\frac{\Omega_\mu}{\rho}$ é o termo de gauge não-Abeliano, (veja a equação (2.9)); e é a carga da partícula; A_μ é o campo de gauge Abelian (veja a equação (4.21)). Com este procedimento a equação de Dirac (4.23) torna-se:

$$\left(i\gamma^t\partial_t + i\gamma^\rho\partial_\rho + i\frac{\gamma^\phi}{\alpha\rho}\partial_\phi + i\frac{(\alpha-1)}{2\alpha\rho}\gamma^\rho + \gamma^\phi\frac{eB\rho}{2} - \gamma^\phi\frac{\Omega_\phi}{\rho} \right) \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0, \quad (4.24)$$

onde B é o campo magnético uniforme.

Seguindo o mesmo procedimento da seção 3.2. usando o *ansatz* (3.13), a transformação de similaridade (3.15a e 3.15b e a representação em termos das matrizes de Pauli (4.3), permitem escrever o seguinte conjunto

de equações diferenciais para a parte radial:

$$E\chi_{A(\rho)} = -i \left(\partial_\rho + \frac{1}{2} \right) \chi_{B(\rho)} - i \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha\rho} - \frac{eB\rho}{2} + \frac{\Omega_\pm}{\rho} \right) \chi_{B(\rho)} \quad (4.25a)$$

$$E\chi_{B(\rho)} = -i \left(\partial_\rho + \frac{1}{2} \right) \chi_{A(\rho)} + i \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha\rho} - \frac{eB\rho}{2} + \frac{\Omega_\pm}{\rho} \right) \chi_{A(\rho)} \quad (4.25b)$$

onde o sinal \pm , corresponde a cada ponto de Fermi, ou seja, o sinal $+$ para o ponto de Fermi K_+ , e o sinal $-$ para o ponto de Fermi K_- .

Assim encontramos as equações de movimento que satisfaz a cada spinor:

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho - \frac{1}{\rho^2} M_\sigma^2 + K_\sigma - \left(\frac{eB\rho}{2} \right)^2 \right] \chi_{\sigma(\rho)} = 0 \quad (4.26)$$

onde M_σ , N_σ e k_σ são, respectivamente, dados por:

$$M_\sigma = \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} - \frac{\sigma}{2} + \Omega_\pm \right) \quad (4.27a)$$

$$N_\sigma = \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \frac{\sigma}{2} + \Omega_\pm \right) \quad (4.27b)$$

$$K_\sigma = eBN_\sigma + E^2 \quad (4.27c)$$

com $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno. Na equação (4.26), fazendo a seguinte mudança de variável: $\xi = \frac{eB\rho^2}{2}$, podemos reescrevê-la de forma mais conveniente:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{M_\sigma^2}{4\xi^2} + \frac{K_\sigma}{2eB\xi} - \frac{1}{4} \right] \chi_{\sigma(\xi)} = 0$$

Verificamos os limites quando $\xi \rightarrow 0$ e $\xi \rightarrow \infty$, analisamos assim o comportamento de $\chi_{\sigma(\xi)}$, podemos assumir a seguinte solução:

$$\chi_{\sigma(\xi)} = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|M_{\sigma}|}{2}} F_{(\xi)} \quad (4.28)$$

Substituindo o *ansatz* (4.28) na equação (4.26) encontramos:

$$\xi \partial_{\xi}^2 F_{(\xi)} + (|M_{\sigma}| + 1 - \xi) \partial_{\xi} F_{(\xi)} - \frac{1}{2} \left(|M_{\sigma}| + 1 - \frac{K_{\sigma}}{eB} \right) F_{(\xi)} = 0 \quad (4.29)$$

A equação (4.29) é uma equação diferencial hipergeométrica confluyente, com a seguinte solução:

$$F_{\sigma(\xi)} = F \left(\frac{1}{2} \left(|M_{\sigma}| + 1 - \frac{K_{\sigma}}{eB} \right), |M_{\sigma}| + 1; \xi \right). \quad (4.30)$$

4.3.1 Níveis de Landau

Para que a solução encontrada referente aos spinores de Dirac (4.28) seja normalizada, a mesma terá que tender para o zero quando $\rho \rightarrow \infty$ ou $\xi \rightarrow \infty$. Portanto, pela condição polinomial da função hipergeométrica confluyente (a equação (4.17)), e observando a solução para a função hipergeométrica confluyente (4.30), podemos escrever:

$$-n = \frac{1}{2} \left(|M_{\sigma}| + 1 - \frac{K_{\sigma}}{eB} \right), \quad (4.31)$$

substituindo na equação (4.31) as expressões para M_{σ} (4.27a), K_{σ} (4.27c) e N_{σ} (4.27b), temos:

$$-n = \frac{1}{2} \left| \frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} - \frac{\sigma}{2} + \Omega_{\pm} \right| + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \frac{\sigma}{2} + \Omega_{\pm} \right) - \frac{E^2}{2eB}. \quad (4.32)$$

Desta forma encontramos os níveis de energia para os spinores de Dirac na presença de defeitos topológicos (desclinações):

$$E^2 = 2eB \left(n + \frac{1}{2} + \left| \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} - \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right) \right| - \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} + \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right) \right) \quad (4.33)$$

com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, a equação (4.33) para os níveis de energia torna-se mais explícita quanto aos números de setores, N , inserido (ou retirado) substituindo a expressão para α e Ω_{\pm} , obtemos:

$$E^2 = 2eB \left(n + \frac{1}{2} + \left| \frac{3(l + \frac{1}{2})}{6 - N} + \frac{1}{4} \left(\frac{\wp N}{2} - \sigma \right) \right| - \frac{3(l + \frac{1}{2})}{6 - N} - \frac{1}{4} \left(\frac{\wp N}{2} + \sigma \right) \right) \quad (4.34)$$

sendo $\wp = \mp$, o sinal $-$ corresponde aos pontos de Fermi K_+ e o sinal $+$ corresponde ao ponto de Fermi K_- ; lembrando que $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno, lembrando também que N é um número inteiro no intervalo $(0,5)$ representando o número de setor removido (ou inserido), gerando o defeito, onde o termo $\frac{\wp N}{8}$ somente será considerado para N igual 1, 3 ou 5, esta contribuição é devido a descontinuidade das sub-redes no grafeno.

Após a normalização da função hipergeométrica confluyente, temos a seguinte expressão para a autofunção:

$$\psi(t, \rho, \phi) = C e^{-iEt + i(l + \frac{1}{2} - \frac{\sigma^3}{2})\phi} \left(\frac{eB}{2} \right)^{\frac{|M_{\sigma}|}{2}} e^{-\frac{eB\rho^2}{4}} \rho^{|M_{\sigma}|} \times F \left(-n, |M_{\sigma}| + 1; \frac{eB\rho^2}{2} \right). \quad (4.35)$$

onde C representa a constante de normalização do spinor.

Na expressão para os autovalores (4.34), o termo σ que conecta a quiralidade, ainda se faz presente, confirmando a peculiaridade dos níveis de Landau para férmions sem massa representados no grafeno, com a existência de estados de energia para o número quântico $n = 0$, mas agora observamos que a degenerescência (o número de estados eletrônicos com a mesma energia) dos níveis de Landau é quebrada devido ao acoplamento da curvatura do defeito cônico com os pontos de Fermi e o momento angular orbital, promovendo uma mudança nos níveis de Landau. Esta investigação mostra que os efeitos provocados pelos defeitos topológicos no grafeno estabelecem novos estados de correlação eletrônica.

Capítulo 5

Nanoestruturas em grafeno

5.1 Nanoestruturas

A compreensão dos fenômenos na interface dos semicondutores cristalinos teve grande influência no desenvolvimento e fabricação de dispositivos eletrônicos [81]. Este fato permitiu otimizar o desempenho de circuitos integrados desde os anos 60 por cientistas e engenheiros [82]. Mudanças significativas na observação de materiais com baixa dimensionalidade surgiram nos anos 80 com a construção de instrumentos que permitiram a manipulação em escala nanométrica, $1nm = 10^{-9}m$, como, por exemplo, os microscópios: de varredura por sonda, de varredura por força atômica, de varredura por tunelamento [83].

As nanoestruturas são compreendidas na escala entre 1 a 100 nm, estas características proporcionam novas propriedades que não se podem observar nos mesmos materiais em uma escala macroscópica, pois os efeitos predominantes na escala nanométrica são regidos pela mecânica quântica.

As nanoestruturas são classificadas devido ao confinamento dos elétrons, ou seja, quando o movimento dos elétrons é restrito: em uma das dimensões, temos as nano-fitas; em duas das dimensões, temos os nanofios; ou nas três dimensões, temos os pontos quânticos, também chamados de transistor de um só elétron ou bit quântico.

A tendência da redução contínua do tamanho dos dispositivos eletrônicos visa o aumento de seu desempenho e a redução de custos. A combinação do aumento da área superficial com o transporte elétrico eficiente permite a utilização das nanoestruturas como sensores químicos, biológicos, em dispositivos de conversão, ou armazenamento de energia. Desta forma, o grafeno é um forte candidato para o material a ser usado na construção desses dispositivos [14, 17].

A estrutura eletrônica em pontos quânticos de grafeno e em nanofitas de grafeno foi investigada por Ritter e Lyding [84], onde observaram que a geometria das bordas deste material tem influência significativa em suas propriedades eletrônicas. Ezawa [85] também encontrou uma dependência peculiar da propriedade eletrônica das nanofitas de grafeno com a geometria das mesmas.

Portanto, uma vez que a estrutura em escala nanométrica de materiais bidimensionais influencia significativamente a sua estrutura eletrônica, nosso objetivo, com a mesma abordagem geométrica dos capítulos anteriores, é investigar a influência dos defeitos topológicos no comportamento dos elétrons confinados nas nanoestruturas.

5.2 Oscilador de Dirac

Em 1989, o termo oscilador de Dirac foi introduzido na literatura científica por Moshinsky e Szczepaniak [86], após verificarem que no limite relativístico o potencial investigado por Itô e colaboradores [87], em 1967, reproduzia o Hamiltoniano do oscilador harmônico com um forte acoplamento spin-órbita, partindo da equação de Dirac que possui o momento linear. Itô e colaboradores estudaram o problema das partículas com spin 1/2 e encontraram o seguinte momento \vec{p} com acoplamento:

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - iM\varpi\hat{\beta}\vec{x}, \quad (5.1)$$

onde M e ϖ são, respectivamente a massa e a frequência do oscilador, e $\hat{\beta}$ é a matriz definida pela mecânica quântica relativística na representação de Dirac, e \vec{x} é a posição da partícula.

A partir desta descoberta este formalismo vem sendo muito utilizado para descrever propriedades físicas: em termodinâmica [88], em ótica quântica [89]. Também descrevendo com boa aproximação o espectro do elétron confinado em sistemas com baixa dimensionalidade [90], tornando-se um excelente método de pesquisa devido ao grande interesse nos últimos tempos na compreensão do comportamento das nanoestruturas. Em sistemas de anéis quânticos, em semicondutores são utilizados potenciais confinantes fenomenológicos para descrever pontos e anéis quânticos. No grafeno, devido a sua descrição "relativística", não podemos simplesmente introduzir um potencial harmônico na equação de Dirac como potencial externo. A solução é introduzir, fenomenologicamente, o oscilador de Dirac como uma forma de analisar o confinamento nestas estruturas. Com esta motivação, vamos estudar a dinâmica dos spinores na mesma configuração que investigamos nos

capítulos anteriores acrescido do termo referente ao oscilador de Dirac para estudar o confinamento no ponto quântico.

5.3 Oscilador de Dirac na Presença de Defeitos no Grafeno

Com a mesma estrutura do defeito topológico que estamos trabalhando, ou seja, com a presença das desclinações, introduzida através da métrica da equação (2.1), a seguir:

$$ds^2 = dt^2 - d\rho^2 - \alpha^2 \rho^2 d\varphi^2, \quad (5.2)$$

neste capítulo também adotamos a assinatura $(+, -, -)$ para métrica e a convenção $\hbar = c = 1$. Escrevemos os spinores de Dirac em duas componentes, desta forma, é conveniente introduzir a seguinte representação em termos das matrizes de Pauli:

$$\beta\gamma^1 = \sigma^1, \quad \beta\gamma^2 = \sigma^2, \quad \beta = \sigma^3, \quad (5.3)$$

onde $\beta\gamma^0 = (\sigma^3)^2 = I$.

Para resolver o oscilador de Dirac na presença de desclinações, precisamos acrescentar o termo do oscilador de Dirac, $i\varpi\beta\rho$, onde ϖ é uma constante, na equação (3.11) mudando a componente do momento $i\partial_\rho \rightarrow i\partial_\rho + i\varpi\beta\rho$, assim temos a equação:

$$\left[i\gamma^t \partial_t + i\gamma^\rho \left(\partial_\rho + \varpi\beta\rho + \frac{(\alpha - 1)}{2\alpha\rho} \right) + \gamma^\phi \left(i\frac{\partial_\phi}{\alpha\rho} - \frac{\Omega_\phi}{\rho} \right) \right] \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0, \quad (5.4)$$

Seguindo o mesmo procedimento da seção 3.2. usando o *ansatz* (3.13), a transformação de similaridade (3.15a e 3.15b e a representação em termos das matrizes de Pauli (5.3), permitem escrever o seguinte conjunto de equações diferenciais para a parte radial:

$$E\chi_{A(\rho)} = -i\left(\partial_\rho + \frac{1}{2\rho}\right)\chi_{B(\rho)} - i\left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha\rho} + \frac{\Omega_\pm}{\rho} + \varpi\rho\right)\chi_{B(\rho)}, \quad (5.5a)$$

$$E\chi_{B(\rho)} = -i\left(\partial_\rho + \frac{1}{2\rho}\right)\chi_{A(\rho)} + i\left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha\rho} + \frac{\Omega_\pm}{\rho} + \varpi\rho\right)\chi_{A(\rho)}, \quad (5.5b)$$

onde o sinal \pm , corresponde a cada ponto de Fermi, ou seja, o sinal $+$ para o ponto de Fermi K_+ , e o sinal $-$ para o ponto de Fermi K_- .

Encontramos as equações de movimento que satisfaz a cada spinor:

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho}\partial_\rho - \frac{1}{\rho^2}M_\sigma^2 + \lambda_\sigma - (\varpi\rho)^2\right]\chi_{\sigma(\rho)} = 0 \quad (5.6)$$

onde M_σ e λ_σ são respectivamente:

$$M_\sigma = \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha} - \frac{\sigma}{2} + \Omega_\pm\right) \quad (5.7a)$$

$$\lambda_\sigma = 2\varpi\left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha} + \frac{\sigma}{2} + \Omega_\pm\right) + E^2 \quad (5.7b)$$

com $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno. A equação (5.6), fazendo a seguinte mudança de variável: $\xi = \varpi\rho^2$, podemos reescrevê-la de forma mais conveniente:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{M_\sigma^2}{4\xi^2} + \frac{\lambda_\sigma}{4\varpi\xi} - \frac{1}{4}\right]\chi_{\sigma(\xi)} = 0 \quad (5.8)$$

Verificamos os limites quando $\xi \rightarrow 0$ e $\xi \rightarrow \infty$, analisamos assim o comportamento de $\chi_{\sigma(\xi)}$, podemos assumir a seguinte solução:

$$\chi_{\sigma(\xi)} = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|M_{\sigma}|}{2}} F_{(\xi)} \quad (5.9)$$

Substituindo o *ansatz* (5.9) na equação (5.8) encontramos:

$$\xi \partial_{\xi}^2 F_{(\xi)} + (|M_{\sigma}| + 1 - \xi) \partial_{\xi} F_{(\xi)} - \left(\frac{|M_{\sigma}|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\lambda_{\sigma}}{4\varpi} \right) F_{(\xi)} = 0 \quad (5.10)$$

A equação (5.10) é uma equação diferencial hipergeométrica confluyente, com a seguinte solução:

$$F_{\sigma(\xi)} = F \left(\frac{|M_{\sigma}|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\lambda_{\sigma}}{4\varpi}, |M_{\sigma}| + 1; \xi \right). \quad (5.11)$$

A solução encontrada referente aos spinores de Dirac (5.9) tem que ser normalizada, devendo tender a zero quando $\rho \rightarrow \infty$ ou $\xi \rightarrow \infty$. Portanto, pela condição polinomial da função hipergeométrica confluyente (a equação (4.17)), e observando a solução (5.11), podemos escrever:

$$-n = \frac{|M_{\sigma}|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\lambda_{\sigma}}{4\varpi} \quad (5.12)$$

substituindo na equação (5.12) as expressões para M_{σ} (5.7a) e λ_{σ} (5.7b), temos:

$$-n = \left| \frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} - \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right| + \frac{1}{2} - \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} + \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right) + \frac{E^2}{4\varpi} \quad (5.13)$$

Desta forma encontramos os níveis de energia para os spinores do Oscilador de Dirac na presença de defeitos topológicos (desclinações):

$$E^2 = 4\varpi \left(n + \frac{1}{2} + \left| \frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} - \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right| - \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} + \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right) \right) \quad (5.14)$$

com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Vamos substituir na equação (5.14) o termo α (2.2) e Ω_{\pm} (2.9), onde observamos a relação dos níveis de energia quanto aos números de setores, N , inserido (ou retirado) que gera o defeito, desta forma temos:

$$E^2 = 4\varpi \left(n + \frac{1}{2} + \left| \frac{3(l + \frac{1}{2})}{6 - N} + \frac{1}{4} \left(\frac{\wp N}{2} - \sigma \right) \right| - \frac{3(l + \frac{1}{2})}{6 - N} - \frac{1}{4} \left(\frac{\wp N}{2} + \sigma \right) \right), \quad (5.15)$$

sendo $\wp = \mp$, o sinal $-$ corresponde aos pontos de Fermi K_+ e o sinal $+$ corresponde ao ponto de Fermi K_- ; lembrando que $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno, lembrando também que N é um número inteiro no intervalo $(0,5)$ representando o número de setor removido (ou inserido), gerando o defeito, onde o termo $\wp \frac{N}{8}$ somente será considerado para N igual 1, 3 ou 5, esta contribuição é devido a descontinuidade das sub-redes no grafeno.

Após a normalização da função hipergeométrica confluyente, podemos escrever a expressão para a autofunção do spinor do Oscilador de Dirac:

$$\begin{aligned} \psi(t, \rho, \phi) &= C e^{-iEt + i(l + \frac{1}{2} - \frac{\sigma^3}{2})\phi} \varpi^{\frac{|M_{\sigma}|}{2}} e^{-\frac{\varpi \rho^2}{2}} \rho^{|M_{\sigma}|} \times \\ &F \left(- \left(\frac{|M_{\sigma}|}{2} + \frac{1}{2} + \frac{\lambda_{\sigma}}{4\varpi} \right), |M_{\sigma}| + 1; \varpi \rho^2 \right). \end{aligned} \quad (5.16)$$

onde C representa a constante de normalização do spinor.

Com este resultado observamos que a frequência do oscilador de Dirac apresenta a mesma influência do campo magnético na rede hexagonal do grafeno, confirmando a característica de um potencial confinante.

5.4 Oscilador de Dirac na Presença de Defeitos no Grafeno em um Campo Magnético Constante

Nesta seção estudaremos a influência de um campo magnético externo perpendicular a folha de grafeno com desclinações introduzida através da métrica da equação (2.1). Para resolver o oscilador de Dirac neste pano de fundo temos que introduzir o termo do oscilador de Dirac, $i\varpi\beta\rho$, na equação (4.24) mudando a componente momento $i\partial_\rho \rightarrow i\partial_\rho + i\varpi\beta\rho$ temos a seguinte equação:

$$\left[i\gamma^t \partial_t + i\gamma^\rho \left(\partial_\rho + \varpi\beta\rho + \frac{(\alpha - 1)}{2\alpha\rho} \right) + \gamma^\phi \left(i\frac{\partial_\phi}{\alpha\rho} + \frac{eB\rho}{2} - \frac{\Omega_\phi}{\rho} \right) \right] \psi_{(t,\rho,\phi)} = 0, \quad (5.17)$$

Realizando o mesmo procedimento da seção 3.2. usando o *ansatz* (3.13), a transformação de similaridade (3.15a e 3.15b) e a representação em termos das matrizes de Pauli (5.3), permitem escrever o seguinte conjunto

de equações diferenciais para a parte radial:

$$E\chi_{A(\rho)} = -i\left(\partial_\rho + \frac{1}{2\rho}\right)\chi_{B(\rho)} - i\left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha\rho} + \frac{\Omega_\pm}{\rho} - \frac{eB\rho}{2} - \varpi\rho\right)\chi_{B(\rho)}, \quad (5.18a)$$

$$E\chi_{B(\rho)} = -i\left(\partial_\rho + \frac{1}{2\rho}\right)\chi_{A(\rho)} + i\left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha\rho} + \frac{\Omega_\pm}{\rho} - \frac{eB\rho}{2} - \varpi\rho\right)\chi_{A(\rho)}, \quad (5.18b)$$

onde o sinal \pm , corresponde a cada ponto de Fermi, ou seja, o sinal $+$ para o ponto de Fermi K_+ , e o sinal $-$ para o ponto de Fermi K_- .

Encontramos as equações de movimento que satisfaz a cada spinor:

$$\left[\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho}\partial_\rho - \frac{1}{\rho^2}M_\sigma^2 + \lambda_\sigma - (\vartheta\rho)^2\right]\chi_{\sigma(\rho)} = 0 \quad (5.19)$$

A constante $\vartheta = \frac{eB}{2} + \varpi$ é a soma da influência do campo magnético com a frequência do oscilador de Dirac, podemos dizer que este termo representa a frequência de oscilação do sistema, e M_σ e $\tilde{\lambda}_\sigma$ são, respectivamente dados por:

$$M_\sigma = \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} - \frac{\sigma}{2} + \Omega_\pm\right) \quad (5.20a)$$

$$\tilde{\lambda}_\sigma = 2\vartheta\left(\frac{l + \frac{1}{2}}{\alpha} + \frac{\sigma}{2} + \Omega_\pm\right) + E^2 \quad (5.20b)$$

com $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno. A equação (5.6), fazendo a seguinte mudança de variável: $\xi = \vartheta\rho^2$, podemos reescrevê-la de forma mais conveniente:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{M_\sigma^2}{4\xi^2} + \frac{\tilde{\lambda}_\sigma}{4\vartheta\xi} - \frac{1}{4}\right]\chi_{\sigma(\xi)} = 0 \quad (5.21)$$

Verificamos os limites quando $\xi \rightarrow 0$ e $\xi \rightarrow \infty$, analisamos assim o comportamento de $\chi_{\sigma(\xi)}$, podemos assumir a seguinte solução:

$$\chi_{\sigma(\xi)} = e^{-\frac{\xi}{2}} \xi^{\frac{|M_{\sigma}|}{2}} F(\xi) \quad (5.22)$$

Substituindo o *ansatz* (5.22) na equação (5.8) encontramos:

$$\xi \partial_{\xi}^2 F(\xi) + (|M_{\sigma}| + 1 - \xi) \partial_{\xi} F(\xi) - \left(\frac{|M_{\sigma}|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\tilde{\lambda}_{\sigma}}{4\vartheta} \right) F(\xi) = 0 \quad (5.23)$$

A equação (5.23) é uma equação diferencial hipergeométrica confluyente, com a seguinte solução;

$$F_{\sigma(\xi)} = F \left(\frac{|M_{\sigma}|}{2} + \frac{1}{2} + \frac{\tilde{\lambda}_{\sigma}}{4\vartheta}, |M_{\sigma}| + 1; \xi \right). \quad (5.24)$$

A solução encontrada referente aos spinores de Dirac (5.22) tem que ser normalizada, devendo tender a zero quando $\rho \rightarrow \infty$ ou $\xi \rightarrow \infty$. Portanto, pela condição polinomial da função hipergeométrica confluyente (a equação (4.17)), e observando a solução para a função hipergeométrica confluyente (5.24), podemos escrever:

$$-n = \frac{|M_{\sigma}|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{\tilde{\lambda}_{\sigma}}{4\vartheta} \quad (5.25)$$

substituindo na equação (5.25) as expressões para M_{σ} (5.20a) e $\tilde{\lambda}_{\sigma}$ (5.20b), temos:

$$-n = \left| \frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} - \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right| + \frac{1}{2} - \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} + \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right) - \frac{E^2}{4\vartheta} \quad (5.26)$$

Desta forma encontramos os níveis de energia para os spinores do Oscilador de Dirac na presença de defeitos topológicos (desclinações) sob a influência de um campo magnético externo:

$$E^2 = 4\vartheta \left(n + \frac{1}{2} + \left| \frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} - \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right| - \left(\frac{l + \frac{1}{2}}{2\alpha} + \frac{\sigma}{4} + \frac{\Omega_{\pm}}{2} \right) \right) \quad (5.27)$$

com $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ e $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Vamos substituir na equação (5.27) o termo α (2.2) e Ω_{\pm} (2.9), onde observamos a relação dos níveis de energia quaaunto aos números de setores, N , inserido (ou retirado) o qual gera o defeito, assim temos:

$$E^2 = 4 \left(\frac{eB}{2} + \varpi \right) \times \left(n + \frac{1}{2} + \left| \frac{3(l + \frac{1}{2})}{6 - N} + \frac{1}{4} \left(\frac{\varphi N}{2} - \sigma \right) \right| - \frac{3(l + \frac{1}{2})}{6 - N} - \frac{1}{4} \left(\frac{\varphi N}{2} + \sigma \right) \right), \quad (5.28)$$

com $\varphi = \mp$, o sinal $-$ corresponde aos pontos de Fermi K_+ e o sinal $+$ corresponde ao ponto de Fermi K_- ; lembrando que $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A e -1 corresponde a sub-rede B, na representação para o grafeno, lembrando também que N é um número inteiro no intervalo $(0,5)$ representando o número de setor removido (ou inserido), gerando o defeito, onde o termo $\varphi \frac{N}{8}$ somente será considerado para N igual 1, 3 ou 5, esta contribuição é devido a descontinuidade das sub-redes no grafeno. Observamos que o oscilador de Dirac na presença de um campo magnético perpendicular continua a contribuir para o confinamento dos elétrons, porém a presença de defeitos topológicos quebra a degenerescência dos níveis de Landau devido ao acoplamento do defeito com o momento angular e o ponto de Fermi.

Após a normalização da função hipergeométrica confluyente, podemos escrever a expressão para a autofunção do spinor do Oscilador de Dirac na presença de um campo magnético constante:

$$\begin{aligned} \psi(t, \rho, \phi) = & C e^{-iEt + i\left(l + \frac{1}{2} - \frac{\sigma^3}{2}\right)\phi} \left(\frac{eB}{2} + \varpi\right)^{|M_\sigma|} e^{-\left(\frac{eB}{4} + \frac{\varpi}{2}\right)\rho^2} \rho^{|M_\sigma|} \times \\ & F \left(- \left(\frac{|M_\sigma|}{2} + \frac{1}{2} + \frac{\tilde{\lambda}_\sigma}{2eB + 4\varpi} \right), |M_\sigma| + 1; \left(\frac{eB}{2} + \varpi \right) \rho^2 \right). \end{aligned} \quad (5.29)$$

onde C representa a constante de normalização do spinor.

5.5 Confinamento espacial de elétrons em um anel de Grafeno com desclinações

Com o intuito de estudar anéis quânticos em grafeno com defeitos topológicos, propomos um novo modelo usando o confinamento em geometria anular com potencial infinito da seguinte forma:

$$V(\rho) = \begin{cases} \infty & 0 < \rho < a; \\ 0 & a < \rho < b; \\ \infty & \rho > b; \end{cases} \quad (5.30)$$

sendo o raio interno da estrutura, $\rho = a$, e o raio externo, $\rho = b$, ou seja, $a < \rho < b$, com $b > a$, que irá confinar o spinor de Dirac, desta forma, analisaremos qual a influência deste confinamento na energia do sistema.

No capítulo 3, encontramos a solução geral para as equações diferenciais de Bessel como resolução da parte radial dos spinores de Dirac sem

massa em espaço tempo curvo:

$$\chi_\nu(E\rho) = A_\nu J_\nu(E\rho) + B_\nu N_\nu(E\rho), \quad (5.31a)$$

$$\chi_{\nu+1}(E\rho) = A_{\nu+1} J_{\nu+1}(E\rho) + B_{\nu+1} N_{\nu+1}(E\rho). \quad (5.31b)$$

A fim de facilitar nossa resolução vamos definir que $\eta = \nu$ ou $\eta = \nu + 1$. Uma vez que ν corresponde ao spinor $\chi_{\nu(E\rho)}$ na representação para a sub-rede A, e $\nu + 1$ corresponde ao spinor $\chi_{\nu+1(E\rho)}$ na representação para a sub-rede B, portanto: $\eta = \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm - \frac{\sigma}{2}\right)$, lembrando que: $\sigma = \pm 1$, sendo +1 corresponde a sub-rede A, e -1 corresponde a sub-rede B, assim as equações (5.31a) e (5.31b) podem ser compactadas da seguinte forma:

$$\chi_\eta(E\rho) = A_\eta J_\eta(E\rho) + B_\eta N_\eta(E\rho), \quad (5.32)$$

Para realizar o confinamento temos como condição de contorno que quando $\rho = a$ e $\rho = b$ a função de onda tem que ser igual a zero, ou seja, $\psi(\rho = a) = \psi(\rho = b) = 0$, visto que o potencial é infinito, encontramos a seguinte equação matricial:

$$\begin{bmatrix} J_\eta(Ea) & N_\eta(Ea) \\ J_\eta(Eb) & N_\eta(Eb) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_\eta \\ B_\eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (5.33)$$

Para que a expressão na equação (5.33) seja verdadeira a matriz 2×2 , onde os elementos são as funções de Bessel, deve ter o determinante nulo, com isso temos a seguinte expressão:

$$J_\eta(Ea) N_\eta(Eb) - N_\eta(Ea) J_\eta(Eb) = 0, \quad (5.34)$$

e encontramos as seguintes relações para as constantes das funções de Bessel:

$$\frac{B_\eta}{A_\eta} = -\frac{J_\eta(Ea)}{N_\eta(Ea)}, \quad (5.35a)$$

$$\frac{B_\eta}{A_\eta} = -\frac{J_\eta(Eb)}{N_\eta(Eb)}. \quad (5.35b)$$

Com a finalidade de encontrar a energia do sistema vamos considerar os limites $Ea \gg 0$ e $Eb \gg 0$, verificamos a expansão assintótica na equação (5.34) para as funções de Bessel, com base na expansão assintótica de Hankel [74], para η fixo, temos:

$$J_{|\eta|}(Ea) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi Ea}} \left[\cos\left(Ea - \frac{\eta\pi}{2} - \frac{\sigma\pi}{4}\right) - \frac{4\eta^2 - 1}{8Ea} \sin\left(Ea - \frac{\eta\pi}{2} - \frac{\sigma\pi}{4}\right) \right], \quad (5.36a)$$

$$N_{|\eta|}(Ea) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi Ea}} \left[\sin\left(Ea - \frac{\eta\pi}{2} - \frac{\sigma\pi}{4}\right) + \frac{4\eta^2 - 1}{8Ea} \cos\left(Ea - \frac{\eta\pi}{2} - \frac{\sigma\pi}{4}\right) \right], \quad (5.36b)$$

da mesma forma para $J_{|\eta|}(Eb)$ e $N_{|\eta|}(Eb)$, substituindo as expressões anteriores na equação (5.34), obtemos:

$$E^2 \cong \left(\frac{n\pi}{ab}\right)^2 + \frac{4\left(\frac{l+\frac{1}{2}}{\alpha} + \Omega_\pm - \frac{\sigma}{2}\right)^2 - 1}{4ab} \quad (5.37)$$

onde o número quântico $n = 0, 1, 2, 3, \dots$, lembrando que: $\sigma = \pm 1$, sendo $+1$ corresponde a sub-rede A (ν), e -1 corresponde a sub-rede B ($\nu + 1$) na representação para a rede hexagonal do grafeno.

Na equação (5.37) temos os níveis de energia para os elétrons confinados no anel quântico, sendo o primeiro termo referente ao confinamento da partícula na geometria do anel e o segundo termo refere-se a sua

dinâmica na superfície do anel sob influência do defeito e dos pontos de Fermi na energia do sistema.

Conclusão

Nesta tese estudamos as propriedades eletrônicas do grafeno no limite contínuo em baixas energias para o orbital π , 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 contexto, no nosso modelo introduzimos defeitos topológicos (desclinações positivas ou negativas) na folha de grafeno para analisar o comportamento dos elétrons, uma vez que este material apresenta ondulações intrínsecas a sua estrutura. Esta informação foi introduzida no meio elástico contínuo do grafeno através da métrica na abordagem geométrica de defeitos (processo Volterra). Com esta informação acrescentamos na equação de Dirac sem massa a conexão spinorial, termo referente a curvatura inserida pelos defeitos topológicos, além de incluir um campo de gauge não-Abeliano, para compensar a descontinuidade fictícia da função de onda dos spinores. Com a resolução da equação de Dirac, nesta abordagem, nossa contribuição permite compreender a influência dos defeitos topológicos na dinâmica dos spinores de Dirac.

Primeiramente, utilizando o mesmo procedimento de Deser e Jackiw, resolvemos a equação de Dirac neste pano de fundo e estudamos o problema de espalhamento elástico quântico presente no grafeno. Encon-

tramos a amplitude de espalhamento e a mudança de fase dos spinores de Dirac. Comparamos com o resultado para o espalhamento quântico em um cone, encontrado por Jackiw, percebemos que nosso resultado apresenta mais alguns termos, referente aos pontos de Fermi e as sub-redes, que são agregados devido a introdução do defeito no grafeno.

Posteriormente estudamos o comportamento dos spinores de Dirac na presença de um campo magnético uniforme e perpendicular a folha de grafeno, onde construímos os conjuntos de autovalores e de autofunções. Como no caso para o grafeno sem defeitos, a partir do nosso modelo, encontramos na expressão de autovalor a existência de estados de energia para o número quântico, $n = 0$. Além da quiralidade, diminuindo pela metade a degenerescência dos níveis de Landau. Sendo, nossa contribuição, a observação de que a introdução de defeitos topológicos quebram ainda mais a degenerescência dos níveis de Landau, em razão do acoplamento da curvatura do defeito cônico, com os pontos de Fermi e o momento angular orbital. Esta investigação mostra que os efeitos provocados pelos defeitos topológicos no grafeno estabelecem efeitos que podem ser utilizado na investigação do efeito Hall quântico anômalo, observados em amostras de grafeno epitaxial e no efeito Hall quântico fracionário observado em amostra de grafeno suspenso. Devido a este resultado, sugerimos que seja considerado agregar defeitos topológicos de forma controlada na construção de dispositivos eletrônicos feitos de grafeno, como, por exemplo, a construção de dispositivos de porta quântica numa futura computação quântica.

Continuamos nossos estudos analisando a influência dos defeitos topológicos no comportamento de elétrons confinados em estrutura de escala nanométrica, como o grafeno. Analisamos a dinâmica dos spinores na mesma configuração que investigamos, nos capítulos anteriores, acrescido

de um termo referente ao acoplamento do oscilador de Dirac no operador momento, sendo este um excelente método de pesquisa na compreensão do comportamento das nanoestruturas, pois no limite relativístico o potencial investigado (o oscilador de Dirac) reproduz o Hamiltoniano do oscilador harmônico com um forte acoplamento spin-órbita. Deste modo, construímos os conjuntos de autovalores de autofunções e encontramos que o oscilador de Dirac apresenta o mesmo comportamento confinante do campo magnético aplicado perpendicular à folha de grafeno. Continuando neste pano de fundo, investigamos também a influência de um campo magnético uniforme perpendicular ao plano da folha de grafeno, resolvemos a equação de Dirac, construímos os conjuntos de autovalores de autofunções e encontramos que o oscilador de Dirac na presença de um campo magnético perpendicular continua a contribuir para o confinamento dos elétrons. A presença de defeitos topológicos quebra a degenerescência dos níveis de Landau devido ao acoplamento do defeito com o momento angular e o ponto de Fermi. Além disso, o confinamento espacial dos elétrons presentes em uma estrutura de grafeno como um anel quântico e observamos na expressão para os autovalores ocorre o confinamento dos elétrons devido à geometria, bem como a influência do defeito e dos pontos de Fermi na dinâmica dos spinores da superfície do anel. Nessa investigação, concluímos que as nanoestruturas feitas de grafeno com defeitos topológicos influenciam significativamente na estrutura eletrônica.

O grafeno apresenta propriedades eletrônicas interessantes, a influência topológica modifica a estrutura eletrônica em baixa energia. Portanto, nossa contribuição mostra que defeitos topológicos são necessários, pois proporcionam suas características peculiares em relação às propriedades eletrônicas. Compreender o papel da geometria inserida pelos defeitos nas propriedades de transporte de grafeno é central para a realização de dispos-

itivos eletrônicos no futuro.

Como perspectiva de novos trabalhos podemos propor a construção de modelos com dois planos de grafeno e investigar a dinâmica dos spinores de Dirac na presença de outros defeitos topológicos, como deslocação, ou dispiração, verificando se existe a possibilidade de controlar o "*gap*" entre a banda de condução e banda valência, necessário para a fabricação de dispositivos eletrônicos. Entender a geometria necessária para criar portas lógicas específicas para uma futura computação quântica, através de defeitos topológicos presente em nanoestruturas de grafeno. Também podemos estudar o efeito Hall quântico nesta geometria.

Referências Bibliográficas

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim *et al*, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science*, **306**, 666-669 (2004).
- [2] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics Part I*, Sections 137 and 138 (Pergamon, Oxford, 1980).
- [3] N. D. Mermin e H. Wagner, Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models, *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133-1136 (1966).
- [4] N. D. Mermin, Crystalline order in two dimensions. *Phys. Rev.*, **176**, 250-254(1968).
- [5] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov e T.J. Booth, S. Roth. The structure of suspended graphene sheets, *Nature*, **446**, 60-63 (2007).
- [6] P. R. Wallace, The band theory of graphite, *Phys. Rev.*, **71**, 622-634 (1947).
- [7] J. W. McClure, Diamagnetism of Graphite, *Phys. Rev.*, 104, 666-671 (1956).

- [8] G. W. Semenoff, Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly, *Phys. Review Letters*, **53**, 2449-2452 (1984).
- [9] D. P. DiVincenzo e E. J. Mele, Self-consistent effective-mass theory for intralayer screening in graphite intercalation compounds, *Phys. Rev. B*, **29**, 1685-1694 (1984).
- [10] C. Lee, X. D. Wei, J. W. Kysar e J. Hone, Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene, *Science*, **321**, 385 (2008).
- [11] R. R. Nair, P. Blake, U.M. Grigorenko, K.S. Novoselov, T.J. Booth , T. Stauber, N.M.R. Peres e A.K. Geim, Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene, *Science*, **320**, 1308 (2008).
- [12] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak e A. K. Geim, Giant Intrinsic Carrier Mobilities in Graphene and Its Bilayer, *Physical Review Letters*, **100**, 016602-016605 (2008).
- [13] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao e C. N. Lau, Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene, *Nano Letters*, **8**, 902-907 (2008).
- [14] A. K. Geim, Graphene: Status and Prospects, *Science*, **324**, 1530-1534 (2009).
- [15] P. Blake, P. D. Brimicombe, R. R. Nair, T. J. Booth, D. Jiang, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, S. V. Morozov, H. F. Gleeson, E. W. Hill, A. K. Geim e K. S. Novoselov, Graphene-Based Liquid Crystal Device *Nano Lett.*, **8**, 1704-1708 (2008).

- [16] X. Wang, L. Zhi, K. e Mullen, Transparent, Conductive Graphene Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells Nano Letters, **8**, 323-327 (2008).
- [17] Y. M. Lin, C. Dimitrakopoulos, K. A. Jenkins, D. B. Farmer, H. Y. Chiu, A. Grill e P. Avouris, 100-GHz Transistors from Wafer-Scale Epitaxial Graphene, Science, **327**, 662 (2010).
- [18] Y. Zhang, Y. Tan, H. L. Stormer e P. Kim, Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. Nature, **438** 201-204 (2005)
- [19] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican e E. Y. Andrei, Fractional quantum Hall effect and insulating phase of Dirac electrons in graphene, Nature, **462**, 192-195 (2009).
- [20] K. I. Bolotin, F. Ghahar, M. D. Shulman, H. L. Stormer e P. Kim, Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene, Nature, **462**, 196-199 (2009).
- [21] A. K. Geim e K. S. Novoselov, The rise of graphene, Nature materials, **6**, 183-191 (2007).
- [22] M.I. Katsnelson, K. S. Novoselov e A. K. Geim. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene. Nature Physics., **2**, 620-625 (2006).
- [23] W. Greiner, Relativistic Quantum Mechanics (Springer-Verlag,1990).
- [24] A. F. Young e P. Kim, Quantum interference e Klein tunnelling in graphene heterojunctions, Nature Physics, **5**, 222-226 (2009).
- [25] A. Tzalenchuk, S. Lara-Avila, A. Kalaboukhov, S. Paolillo, M. Syväjärvi, R. Yakimova, O. Kazakova, T. Janssen, V. Fal'ko e S. Kubatkin,

- Graphene: Setting New Standards, *Nature Nanotechnology*, **5**, 186-189 (2010).
- [26] G. D. Wilk, R. M. Wallace, e J. M. Anthony, *J. Appl. Phys.*, **89**, 5243 (2001).
- [27] G. E. Moore, *Electronics* 38, 8 (1965).
- [28] N. Durán, L. H. C. Mattoso e P. C. Morais, *Nanotecnologia - Introdução, preparação e caracterização de nanomateriais e exemplos de aplicação* (Artliber Editora, São Paulo, 2006).
- [29] H. E. Toma, *O mundo nanométrico: a dimensão do novo século* (Oficina de Textos, 2004).
- [30] P. Lambin e J. Fink, *Electronic states of carbon materials*, *Encyclopedia of Condensed Matter Physics*, **1**, 142-151 (Elsevier Science, 2007)
- [31] E. V. Gorbar, V. P. Gusynin H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl e R. E. Smalley, *C60: Buckminsterfullerene*, *Nature*, **318**, 162 (1985).
- [32] S. Iijima, *Helical microtubules of graphitic carbon*, *Nature*, **354**, 56 (1991).
- [33] J. González, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, *Unconventional Quasi-particle Lifetime in Graphite*, *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 3589 (1996).
- [34] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos e A. A. Firsov, *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, *Nature*, **438**, 197-200 (2005).

- [35] A. J. M. Giesbers, U. Zeitler, M.I. Katsnelson, L.A. Ponomarenko, T.M.G. Mohiuddin e J.C. MaanPhys, Quantum-Hall Activation Gaps in Graphene, *Rev. Lett.*, **99**, 206803 (2007)
- [36] F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson e K. S. Novoselov, Detection of Individual Gas Molecules Adsorbed on Graphene, *Nat. Mater.*, **6**, 652-655 (2007).
- [37] D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson e A. I. Lichtenstein, Hydrogen on graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations, *Phys. Rev. B*, **77**, 035427 (2008).
- [38] S. Lara-Avila, K. Moth-Poulsen, R. Yakimova, T. Bjornholm, V. Fal'ko, A. Tzalenchuk e S. Kubatkin, Non-Volatile Photochemical Gating of an Epitaxial Graphene-Polymer Heterostructure, *Advanced Materials*, **23**, 878882 (2011).
- [39] X. Liang, Z. Fu e S. Chou, Graphene Transistors Fabricated via Transfer-Printing In Device Active-Areas on Large Wafer, *Nano Letters*, **7**, 3840-3844 (2007).
- [40] M. C. Lemme, T.J. Echtermeyer, M. Baus, B.N. Szafranek, J. Bolten, M. Schmidt, T. Wahlbrink e H. Kurz, Mobility in Graphene Double Gate Field Effect Transistors, *Solid State Electronics*, **52**, 514-518 (2008).
- [41] F. Guinea e M. Vozmediano, The Electronic Spectrum of Fullerenes from the Dirac Equation, *Nuclear Physics B*, **406**, 771-794 (1993).
- [42] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 109-162 (2009).

- [43] S. Hyde, S. Andersson, Z. Blum, T. Landg, S. Lidin e B. W. Ninham, The Language of shape the role of curvature in condensed matter physics, Chemistry and Biology (Elsevier Science, 1997).
- [44] J. E. Riviere, Pharmacokinetics of nanomaterials: an overview of carbon nanotubes, fullerenes and quantum dots, Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology, **1**, 26-34 (2009).
- [45] J. Lahiri, Y. Lin, P. Bozkurt, I. I. Oleynik e M. Batzill, An extended defect in graphene as a metallic wire Nature Nanotechnology, **5**, 326 - 329 (2010).
- [46] E. Stolyarova *et al.* High-Resolution Scanning Tunneling Microscopy Imaging of Mesoscopic Graphene Sheets on an Insulating Surface, PNAS, **104**, 9209-9212, (2007).
- [47] T. O. Wehling, A. V. Balatsky, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, K. Scharnberg e R. Wiesendanger, Impurity States in Graphene. Phys. Rev. B, **75**, 125425 (2007)
- [48] E. Kim , A. H. Castro Neto, Graphene as an electronic membrane, EPL, **84** 57007 (2008).
- [49] J. González, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, Electron-electron interactions in graphene sheets Phys.Rev. B, **63**, 134421 (2001).
- [50] A. Cortijo e M. A. H. Vozmediano. Electronic properties of curved graphene sheets Eur. Phys. Lett.77, 47002 (2007).
- [51] A. Cortijo e M. A. H. Vozmediano, Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene, Nucl. Phys. B, **763**, 293-308 (2007).

- [52] S. Carroll, Spacetime and Geometry - An Introduction to General Relativity (Addison Wesley, 2004).
- [53] A. Vilenkin e E.P.S. Shellard, Cosmic and Other Topological Defects (Cambridge University Press, 1994).
- [54] A. N. Aliev e D. V. Gal'tsov, Gravitational Aharonov-Bohm radiation in string-generated conical space-time, *Ann. Phys.*, **193**, 142-165 (1989).
- [55] L. H. Ford e A. Vilenkin, A gravitational analogue of the Aharonov-Bohm effect, *J. Phys. A*, 14, 2353 (1981)
- [56] V. B. Bezerra, Some remarks on loop variables, holonomy transformation, and gravitational Aharonov-Bohm effect, *Annals of Physics*, **203**, 392-409 (1990).
- [57] J. R. Gott III, Gravitational lensing effects of vacuum strings - Exact solutions, *Astrophysical Journal*, **288**, 422-427 (1985).
- [58] B. Linet, Force on a charge in the space-time of a cosmic string, *Phys. Rev. D*, **33**, 1833-18834 (1986).
- [59] M. O. Katanaev e I. V. Volovich, Theory of Defects in Solids and Three-Dimensional Gravity, *Ann. Phys*, **216**, 1-28 (1992)
- [60] M. O. Katanaev, Geometric Theory of defects, *Physics Uspekki*, **48**, 675-701 (2005).
- [61] F. Moraes, Condensed matter physics as a laboratory for gravitation and cosmology, *Brasilian Journal Physics*, **30**, 304-308 (2000).
- [62] C. Furtado, F. Moraes e A. M. de M. Carvalho, Geometric phase in graphite cones, *Phys. Lett. A*, **372**, 5368 (2008).

- [63] C. Furtado, C. A. de Lima Ribeiro e S. Azevedo, Ahaaronov-Bohm effect in the presence of a density of defects, *Phus. Letters A*, **296**, 171-175 (2002)
- [64] K. Bakke, C. Furtado e S. Sergeenkov, Holonomic quantum computation associated with a defect structure of conical graphene, *EPL* 87, 30002 (2009).
- [65] R. A. Puntingan e H. H. Soleng, Volterra distortions, spinning strings, and Cosmic defects, *Class. Quant. Grav.*, **14**, 1129-1149 (1997).
- [66] Y. Aharonov e D. Bohm, Significance of electromagnetic potencial in the quantum theory, *Phys. Rev.*, **115**, 485-491 (1959).
- [67] J. K. Pachos, Manifestations of topological effects in graphene, *Contemporary Physics*, **50**, 375-395 (2009).
- [68] P. E. Lammert e V. H. Crespi, Topological Phases in Graphitic Cones, *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 5190-5193 (2000).
- [69] G. M. Rutter, J. N. Crain, N. P. Guisinger, T. Li, P. N. First e J. A. Stroscio, Scattering and Interference in Epitaxial Graphene, *Science*, **317**, 219-222 (2007)
- [70] M. I Katsnelson e A. K Geim, Electron scattering on microscopic corrugations in graphene *Phil. Trans. R. Soc. A*, **366**, 195-204 (2008).
- [71] S. V. Morozov, K.S. Novoselov, M.I. Katsnelson, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, D. Jiang e A.K. Geim, Strong suppression of weak localization in graphene, *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 016801-016804 (2006).

- [72] V. M. Villalba e A. Rinón Maggiolo, Energy spectrum of a 2D Dirac electron in the presence of a constant magnetic field, *Eur. Phys. J. B*, **22**, 31-35 (2001).
- [73] V. M. Villalba, Exact solution of the two-dimensional Dirac oscillator, *Phys. Rev A* **49**, 586-587 (1994).
- [74] M. Abramowitz e I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Nat. Bur. Stand. Appl. Math. (Washington, D.C., 1965).
- [75] M. I. Katsnelson e K.S. Novoselov, Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics, *Solid State Communications*, **143** 3-13(2007).
- [76] S. Deser e R. Jackiw, Classical and quantum Scattering on a Cone, *Commun. Matth Phys.*, **118**, 495-509 (1988).
- [77] J. M. Fonseca, W.A. Moura-Melo e A.R. Pereira, Scattering of charge carriers in graphene induced by topological defects, *Physics Letters A*, **374**, 4359-4363 (2010).
- [78] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory*, Section 112 (Pergamon, Oxford, 1977).
- [79] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger e P. Kim, A. K. Geim, Room-temperature quantum Hall effect in graphene, *Science* **315**, 1379 (2007).
- [80] C. Furtado, B. G. C da Cunha, F. Moraes, E. R. Bezerra de Mello e V. B. Bezzerra, Landau levels in the presence of disclinations, *Phys. Lett. A* **195**, 90 (1994).

- [81] J. Bardeen, Surface states and rectification at a metal semiconductor contact, *Phys. Rev.*, **71**, 717-727 (1947).
- [82] J. S. Kilby, Miniaturized electronic circuit. US Patent No. 3,138,743 (Issued June 23, 1964; Filed Feb. 6, 1959).
- [83] G. Fishbine, *The inventor's guide to nanotechnology and micromachines*, (John Wiley and Sons, 2002)
- [84] K. A. Ritter e J. W. Lyding, The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons, *Nature Materials* **8**, 235-242 (2008).
- [85] M. Ezawa, Peculiar width dependence of the electronic properties of carbon nanoribbons, *Phys. Rev. B*, **73**, 045432 (2006).
- [86] M. Moshinsky e A. Szczepaniak, The Dirac oscillator, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **22**, p. L817, (1989).
- [87] K. Itô, K. Mori e E. Carrieri, An example of dynamical systems with linear trajectory, *Nuovo Cimento A*, **51**, 119 (1967).
- [88] M. H. Pacheco, R. R. Landim e C. A. S. Almeida, One-dimensional Dirac oscillator in a thermal bath, *Phys. Lett. A*, **311**, 93 - 96 (2003).
- [89] A. Bermudez, M. A. Martin-Delgado e A. Luis, Nonrelativistic limit in the 2+1 Dirac oscillator: A Ramsey-interferometry effect, *Phys. Review A*, **77**, 033832-033840 (2008).
- [90] V. M. Villalba e R. Pino, Energy spectrum of the ground state of a two-dimensional relativistic hydrogen atom in the presence of a constant magnetic field, *Mod. Phys. Letter B*, **17**, 1331-1334 (2003).