

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO À PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

**Espectro de energia, funções de onda, estados de borda e internos em tira de grafeno
em campo magnético quântico.**

BOLSISTA: Gabriel Evangelista Bezerra da Silva

FAPEAM

MANAUS

2016

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
DEPARTAMENTO DE APOIO À PESQUISA
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO PARCIAL
PIB-E/0005/2015

**Espectro de energia, funções de onda, estados de borda e internos em tira de grafeno
em campo magnético quântico.**

Bolsista: Gabriel Evangelista Bezerra da Silva

Orientador: Professor Dr. Oleg Grigorievich Balev

Manaus

2016

RESUMO

Neste projeto será feito um estudo sobre as propriedades eletrônicas do grafeno tendo ênfase nos estados quânticos das bordas armchair e zig zag em campo magnético quântico. Em particular abordar as propriedades desses estados localizados nas bordas de uma tira de grafeno e na sua parte interna (bulk), para tal foram feitas revisões de Física moderna, Física matemática e Estado sólido.

Primeiramente será descrito sua estrutura cristalina para melhor entendimento do material, logo após pelo sob o ponto de vista de uma aproximação tight-binding será obtido a relação de dispersão e estrutura das bandas de energia do grafeno.

ABSTRACT

This project will be a study of the electronic properties of graphene with emphasis on quantum states of armchair and zigzag edges in quantum magnetic field. In particular the properties of these states located on the edges of a graphene ribbon and inside (bulk). To conduct such treatments the widespread revisions of Modern Physics, Mathematical Physics and Solid State Physics were made.

First we describe the crystalline structure of these systems, for better understanding of the material, then within a framework of the tight-binding approach we obtain dispersion relation and structure of energy bands for graphene ribbons.

SUMÁRIO

1.INTRODUÇÃO.....	1
2.REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	2
3.METODOLOGIA.....	4
4.DISCURSÃO.....	5
5.CONCLUSÃO.....	9
REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.....	10
CRONOGRAMA.....	12

1. INTRODUÇÃO

Grafeno é o nome dado a uma estrutura monoatômica estritamente bidimensional onde sua rede é arranjada de maneira hexagonal, ou seja, na forma de favos de mel. É um ingrediente para materiais de grafite de outras dimensões, como fulerenos, nanotubos ou o próprio grafite que é o “empilhamento” de varias folhas de grafeno.

Como material teórico ele é conhecido há bastante tempo porem foi negligenciado no meio científico. Boa parte dessas negligencias se da ao fato de em 1933, uma teoria elaborada por Lev Davidovic Landau (1908-1968), Nobel de Física de 1962, preconizara a inexistência de cristais em duas dimensões de tamanho infinito em razão de uma fraca divergência em flutuações de tais cristais com crescimento de tamanho. Embora a ideia fosse útil nos estudos teóricos, esse tipo de material seria termodinamicamente instável. Apesar que para cristais bidimensionais finitos teve alguns duvidas sobre condições de instabilidade, ainda não teve uma prova de estabilidade de um cristal bidimensional de tamanho macroscópico.

Porém em 2004 uma descoberta experimental mostra que diferente do previsto, o grafeno se mostra estável em condições ambientes e possui ótimas qualidades cristalinas e eletrônicas quando tem tamanhos laterais macroscópicos. As propriedades do material variam com sua ordem de espessura podendo ter no máximo nove camadas monoatômicas, pois um material composto de dez camadas de grafeno já tem propriedades bem semelhantes ao grafite (3D). Apenas o grafeno de camada única e dupla possuem espectro eletrônico mais simples. Para três ou mais camadas, o espectro começa a se tornar mais complicado.

Assim os estados de borda e de “bulk” são de grande relevância para as aplicações tecnológicas desse material sendo essa a grande motivação para este projeto já que o conhecimento das propriedades física é imprescindível para as aplicações tecnológicas.

2. REVISÃO BIBLIOGRAFICA

Como já foi dito a estrutura cristalina do grafeno é formada por uma rede hexagonal bidimensional, em que cada sítio dessa rede possui um átomo de carbono, a distancia entre os átomos é aproximadamente $a \cong 1,42\text{Å}$. Sendo que essas ligações entre os átomos de carbono possuem hibridização do tipo sp^2 , possuindo quatro elétrons em sua camada de valência tendo três deles ligados fortemente a outros três átomos mais próximos enquanto o ultimo fica num estado $2p_z$.

Devido a essa forma hexagonal a estrutura pode ser vista como uma rede triangular com base de dois átomos por célula unitária. Os vetores da rede direta podem ser escritos como.

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$$

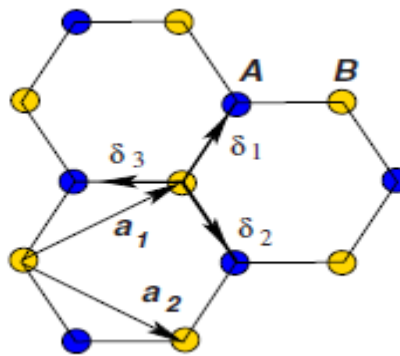


Figura (2.1): Mostra a estrutura do grafeno feita com uma rede triangular (\mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 são os vetores unitários da rede, e $\delta_i; i = 1,2,3$ são os vetores dos “vizinhos mais próximos”).

Assim os vetores da rede recíproca vão ser dados por.

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3})$$

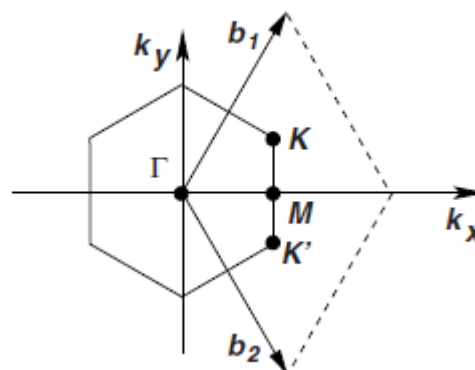


Figura (2.2): Representa a zona de Brillouin tendo os pontos de Dirac representado nos cantos por K e K' .

Os pontos K e K' localizados nos cantos da zona de Brillouin são chamados de pontos de Dirac e possuem grande importância na física do grafeno já que neles as bandas de condutância e de valência irão ter um gap nulo entre si. A localização destes pontos no espaço recíproco vai ser dado por.

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

Os vetores dos três vizinhos mais próximos são dados por.

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

Onde os seis outros vizinhos mais próximos vão estar localizados em $\boldsymbol{\delta}'_1 = \pm\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{\delta}'_2 = \pm\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{\delta}_3 = (\boldsymbol{a}_2 - \boldsymbol{a}_1)$.

Agora vamos definir o Hamiltoniano do tight-binding para os elétrons do grafeno considerando que esses elétrons podem interagir tanto com os três vizinhos mais próximos ou com os outros seis que estão ligeiramente mais afastados

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,i} + H.c) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + b_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + H.c),$$

Onde $a_{i,\sigma}$ ($a_{i,\sigma}^\dagger$) aniquila (cria) um elétron com spin σ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) no sítio \mathbf{R}_i na sub rede A (rede que define somente os átomos A, e essa definição é equivalente para sub rede B), t ($\approx 2,8eV$) é a energia de interação entre os átomos da vizinhança mais próxima (interação entre sub redes diferentes) e t' é a energia de interação entre os outros vizinhos mais próximos (interação entre indivíduos da mesma sub rede). As bandas de energia derivadas do Hamiltoniano tem forma [9].

$$E_{\pm}(k) = \pm t \sqrt{3 + f(k)} - t' f(k)$$

A função $f(k)$ é definida abaixo.

$$f(k) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right)$$

3. METODOLOGIA

Este projeto tem como finalidade o estudo dos estados das bordas (armchair e zig zag) e de “bulk” de tiras de grafeno em campo magnético quântico. Onde, foi introduzido um estudo de eletromagnetismo, Física-Matemática, física moderna; isso para assim executar estudos sobre o Estado Sólido para entender os comportamentos e fenômenos dessa estrutura.

Então fazer um estudo contínuo dos trabalhos pioneiros sobre o grafêneo [1],[2] e [9]. Logo após, fazer uma leitura de todos os trabalhos [1-14] para melhor entendimento do grafeno e suas propriedades, com o apoio dos livros textos [15] e [16] para auxiliar esses estudos. Cálculos serão refeitos para então mostrar as propriedades do material em campo magnético quântico e em suas duas bordas (armchair e zig zag)

4. DISCUSSÃO

Agora para estudar a tira de grafeno com a borda de tipo armchair com $y = \pm L_y/2$ é interessante deixar os pontos de Dirac apenas na direção de \hat{y} de forma que facilite o problema, ou seja, teremos $\vec{K} = (0, K)$ e $\vec{K}' = (0, -K)$.

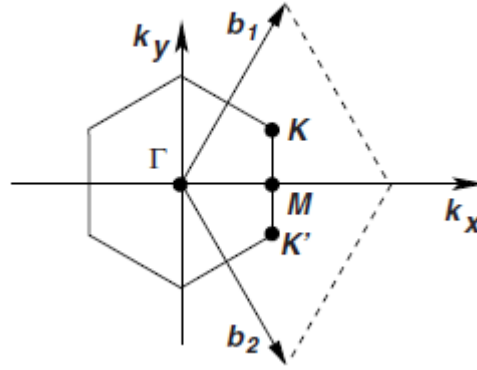


Fig4.1:Primeira zona de Brillouin

Os pontos de Dirac se localizam nas arestas da primeira zona de Brillouin os pontos que serão usados são os dois que tem a maior distância entre si e estão localizados em cima do eixo \vec{y} . Também deve ser considerado um campo magnético $B = B\hat{z}$, este campo é estático, ou seja, não depende do tempo nem ira gerar um campo elétrico associado a ele e assumiremos soluções para energias e vetores de onda próximos a \vec{K} e \vec{K}' . As condições de contorno para a borda de tipo armchair são.

$$\phi_A^{total}(L_y/2) = \phi_A^{total}(-L_y/2) = 0 \quad (4.1a)$$

$$\phi_B^{total}(L_y/2) = \phi_B^{total}(-L_y/2) = 0 \quad (4.1b)$$

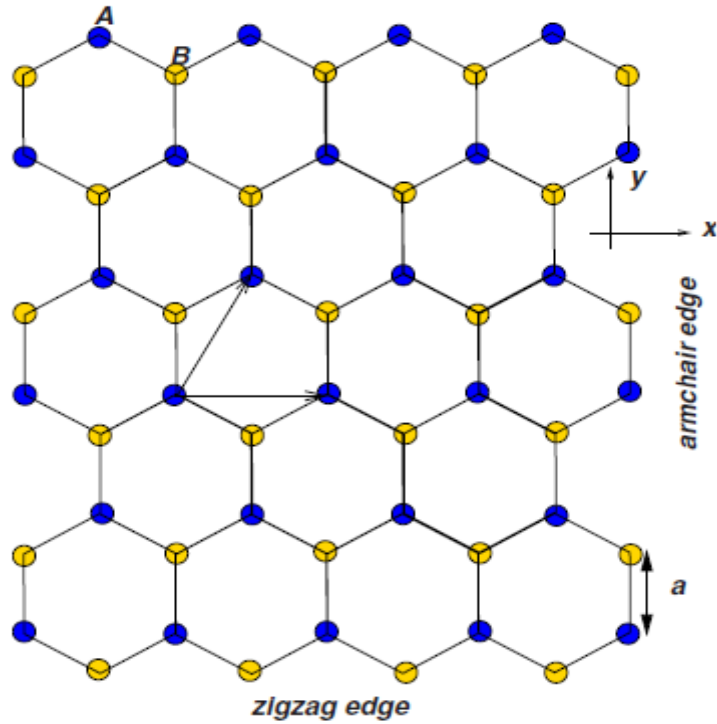


Fig (4.2):Exemplificação das bordas da tira de grafeno

É válido que ressaltemos o fato de que em nossa geometria da tira de grafeno na Fig (4.2) o eixo $x(y)$ deveria ser renomeado pelo eixo $y(x)$ assim os eixos x e y da Fig 4.2 ficam paralelos aos eixos x e y da Fig 4.1 respectivamente, esta alteração é por mera conveniência para facilitar o problema a ser tratado.

No modelo de tight-binding nos vizinhos mais próximos o Hamiltoniano perto de pontos de Dirac K e K' tem forma de dois Hamiltonianos de Dirac 2D, para um elétron com sua massa de repouso desprezada são dados por $H = v_f \vec{\sigma} \cdot \hat{p}$ e $H' = v_f \vec{\sigma}^* \cdot \hat{p}$ logo temos esses Hamiltonianos definidos como:

$$H = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y - eBy \\ p_x + ip_y - eBy & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2a)$$

$$H' = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y - eBy \\ p_x - ip_y - eBy & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2b)$$

Sendo (4.2a) o Hamiltoniano relacionado ao ponto de Dirac \bar{K} e (4.2b) é relacionado ao ponto de Dirac \bar{K}' . Onde v_F é a velocidade de Fermi que é aproximadamente 10^6 m/s e p_x e p_y são as componentes do operador de momento. O vetor potencial é pego

no calibre de Landau, $A = (-By, 0, 0)$, e o vetor \vec{q} é definido por $\vec{q}(\prime) = \vec{k} - \vec{K}(\prime)$ assim é fácil ver que $q_x = q'_x$ e pode ser denotado simplesmente por k_x com isso uma função envelope pode ser escrita da seguinte forma.

$$\psi(\vec{r}) = e^{ik_x x} \phi(y) / \sqrt{L_x} \quad (4.3)$$

$$\phi(y) = \begin{pmatrix} A\phi_A(y) \\ B\phi_B(y) \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Das equações (4.1), (4.3) e (4.4) vamos obter:

$$\hbar v_F \left(k_x - \frac{y}{l_0^2} - \frac{\partial}{\partial y} \right) B\phi_B(y) = EA\phi_A \quad (4.5)$$

$$\hbar v_F \left(k_x - \frac{y}{l_0^2} + \frac{\partial}{\partial y} \right) A\phi_A(y) = EB\phi_B \quad (4.6)$$

Onde $l_0 = (\hbar/eB)^{1/2}$ é a comprimento magnético. Pegando o resultado da equação (4.5) e substituindo na (4.6) tomando que $B \neq 0$ teremos.

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \xi^2 + \left(\frac{l_0^2}{\hbar^2 v_f^2} \right) \left[E^2 + \frac{\hbar^2 v_f^2}{l_0^2} \right] \right) \phi_B(\xi) = 0 \quad (4.7)$$

Na equação acima é definida a variável adimensional $\xi = (y - y_0)/l_0$, onde $y_0 = l_0^2 k_x$. Um mesmo procedimento é usado para obtenção das equações do ponto \vec{K}' única diferença os fatores será mostrada mais a frente, primeiro definiremos a função envelope assim como para o ponto \vec{K} .

$$\psi'(\vec{r}) = e^{ik_x x} \phi'(y) / \sqrt{L_x} \quad (4.8)$$

$$\phi'(y) = \begin{pmatrix} A'\phi'_A(y) \\ B'\phi'_B(y) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Logo após isso obteremos as funções obtidas através das equações (4.2b), (4.8) e (4.9).

$$\hbar v_F \left(k_x + \frac{y}{l_0^2} - \frac{\partial}{\partial y} \right) B'\phi'_B(y) = EA'\phi'_A \quad (4.10)$$

$$\hbar v_F \left(k_x + \frac{y}{l_0^2} + \frac{\partial}{\partial y} \right) A'\phi'_A(y) = EB'\phi'_B \quad (4.11)$$

E substituindo o valor de (4.10) em (4.11) obteremos uma equação similar a (4.7).

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi'^2} - \xi'^2 - \left(\frac{l_0^2}{\hbar^2 v_f^2}\right) \left[E^2 + \frac{\hbar^2 v_f^2}{l_0^2}\right]\right) \phi_B(\xi') = 0 \quad (4.12)$$

Devido a mudança no Hamiltoniano relacionado a \vec{K}' percebe-se que as equações relacionadas a ele tem apenas um sinal diferente que se deve a troca dos sinais da componente de momento no Hamiltoniano, e o termo adimensional se torna $\xi' = -(y + l_0^2 k_x x)/l_0$. As equações (4.12) e (4.7) como podemos observar são equações diferenciais de segunda ordem que representam uma função de um cilindro parabólico dada na seguinte forma.

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + \left(p + \frac{1}{2} - z^2/4\right) u = 0 \quad (4.13)$$

Para acharmos um resultado precisaremos que os termos da equação (4.7) fiquem similares aos de (4.13) o mesmo vale para a equação (4.12)

$$u = \phi_B \quad (4.14)$$

$$p = \left(\frac{E l_0}{\sqrt{2} \hbar v_F}\right)^2 \quad (4.15)$$

$$\xi = \beta z \quad (4.16)$$

Após aplicarmos essas substituições teremos.

$$\frac{d^2 \phi_B}{dz^2} - \frac{z^2}{4} \phi_B + [p + 1/2] \phi_B = 0 \quad (4.17)$$

Com essas substituições feitas a forma da equação se torna mais familiar e assumindo essa forma de cilindro parabólico teremos a solução desta equação como.

$$\phi_B = C_1^{(B)} D_p(\sqrt{2}\xi) + C_2^{(B)} D_p(-\sqrt{2}\xi) \quad (4.18)$$

Seguindo o mesmo procedimento para \vec{K}' iremos obter o seguinte resultado apenas com a diferença dos coeficientes de cada termo das equações e a variável adimensional ξ é substituída por ξ' assim teremos.

$$\phi_B' = C_3^{(B)} D_p(\sqrt{2}\xi') + C_4^{(B)} D_p(-\sqrt{2}\xi') \quad (4.19)$$

De maneira geral este é a forma de como se chegar as equações que regem os estados de borda em tira de grafeno em campo magnético quântico lembrando que aqui não foram mostradas as equações para borda zig zag já que para seu estudo é necessário uma melhor análise da geometria do problema, apesar da borda zig zag possuir apenas uma sub-rede predominante como mostrado na figura (4.2) ela apresenta comportamento diferente da armchair tendo estados de superfície mesmo sem campo magnético quântico porém usando método similar pode se chegar em um resultado assim como feito aqui.

Agora a parte analítica do problema está resolvida de maneira geral, agora o resto dos cálculos tem de ser resolvidos de forma numérica e os trataremos com melhor atenção no próximo projeto onde serão introduzidos métodos numéricos para solução de outros problemas que envolvem as equações aqui descritas.

5.CONCLUSÃO

Após o que foi discutido neste relatório é possível observar que apesar de ser um material relativamente novo, grafeno se mostra um material de extremo interesse para as aplicações e principalmente a parte teórica já que como semicondutor ele mostra um espectro de energia incomum e dois tipos de efeitos de bordas assim abrindo um novo horizonte para o estudo de semicondutores e materiais bidimensionais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morosov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, “*Electric field effect in atomically thin carbon films*”, *Science*, **306**, 666-669 (2004).
- [2] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, “*Two-dimensional atomic crystals*”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **102**, 10451-10453 (2005).
- [3] A. K. Geim and K. S. Novoselov, “*The rise of graphene*”, *Nature Materials*, **6**, 183-191 (2007).
- [4] K. S. Novoselov, Z. Jiang, Y. Zhang, S. V. Morozov, H. L. Stormer, U. Zeitler, J. C. Maan, G. S. Boebinger, P. Kim, A. K. Geim, “*Room-temperature Quantum Hall Effect in graphene*”, *Science*, **315**, 1379 (2007).
- [5] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morosov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, “*Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*”, *Nature*, **438**, 197-200 (2005).
- [6] S. V. Morosov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, D. Jiang, and A. K. Geim, “*Strong Suppression of Weak Localization in Graphene*”, *Phys. Rev. Lett.*, **97**, 016801 (2006).
- [7] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, “*The electronic properties of graphene*”, *Reviews of Modern Physics*, **81**, 109-162 (2009).
- [8] S.-H. Park, H.-K. Kim, S.-B. Yoon, C.-W. Lee, D. Ahn, S.-I. Lee, K. C. Roh, and K.-B. Kim, “*Spray-assisted deep-frying process for the in situ spherical assembly of graphene for energy-storage devices*”, *Chemistry of Materials*, **27**, 457-465 (2014).
- [9] P. R. Wallace, “*The band theory of graphite*”, *Phys. Rev.*, **71**, 622-634 (1947).
- [10] L. Brey and H. A. Fertig, “*Edge states and the quantized Hall effect in graphene*”, *Phys. Rev. B*, **73**, 195408 (2006).
- [11] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto, “*Electronic properties of disordered two-dimensional carbon*”, *Phys. Rev. B*, **73**, 125411 (2006).
- [12] D. A. Abanin, P. A. Lee, and L. S. Levitov, “*Spin-filtered edge states and quantum Hall effect in graphene*”, *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 176803 (2006); “*Charge and spin transport at the quantum Hall edge of graphene*”, *Solid State Commun.*, **143**, 77-85 (2007).

[13] V. P. Gusynin, V. A. Miransky, S. G. Sharapov, and I. A. Shovkovy, “*Edge states, mass and spin gaps, and quantum Hall effect in graphene*”, Phys. Rev. B, **77**, 205409 (2008).

[14] O. G. Balev, P. Vasilopoulos, and H. O. Frota, “*Edge magnetoplasmons in wide armchair grapheme ribbons*”, Phys. Rev. B, **84**, 245406 (2011).

[15] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, “*FISICA DO ESTADO SOLIDO*”, Cengage Learning, São Paulo, p. 870 (2011).

[16] C. Kittel, “*INTRODUÇÃO À FÍSICA DO ESTADO SÓLIDO*”, LTC Editora, Oitava Edição, Rio de Janeiro, p. 578 (2006).

Cronograma

Nº	Descrição	Ago	Set	Out	Nov	Dez	Jan	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul
		2015					2016						
1	Estudar os trabalhos pioneiros [1],[2] e [9] sobre grafeno e conhecer as idéias físicas envolvidas nestes estudos, com foco em trabalho teórico [9].	X	X	X	X	X	X	X	X				
2	Estudar bandas da energia de condutância e valência dos semicondutores Si,Ge,GaAs, heteroestruturas semicondutores e estruturas MOS (Si-SiO ₂ -metal, <i>etc</i>). Comparar suas bandas com os do grafeno.	X	X	X	X	X	X	X	X				
3	Baseado no [9] e trabalho de revisão [7], estudar os trabalhos [1-6,10-14] sobre o grafeno com foco em estrutura de bandas de energia e relevantes funções de onda em campo magnético quântico para tiras de grafeno com bordas armchair e zigzag [10,12-14].			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
4	-												X
4a	- Elaboração do Resumo e Relatório Final (atividade obrigatória)						X	X	X	X	X	X	X
4b	- Preparação da Apresentação Final para o Congresso (atividade obrigatória)						X	X	X	X	X	X	X