



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
INSTITUTO DE FÍSICA

**Método das ondas parciais aplicado ao grafeno:
cloaking de impurezas ressonantes e transporte
dependente de spin**

Diego Oliver Daldoce Pereira

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Orientadora: Tatiana Gabriela Rappoport

Rio de Janeiro

Março de 2015

P436 Pereira, Diego Oliver Daldoce

Método das ondas parciais aplicado ao grafeno: *cloaking* de impurezas ressonantes e transporte dependente de spin - Rio de Janeiro: UFRJ/IF, 2015.

xiv, 89f.

Orientadora: Tatiana Gabriela Rappoport

Dissertação (mestrado) - UFRJ / Instituto de Física / Programa de Pós-graduação em Física, 2015.

Referências Bibliográficas: f. 79-89.

1. Grafeno. 2. Espalhamento 2D: ondas parciais. 3. Espalhamento ressonante e *cloaking*. 4. Espalhamento dependente de spin. I. Rappoport, Tatiana Gabriela. II. Pereira, Diego Oliver Daldoce. III. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Programa de Pós-graduação em Física. IV. Método das ondas-parciais aplicado ao grafeno: *cloaking* de impurezas ressonantes e transporte dependente de spin.

Resumo

Método das ondas parciais aplicado ao grafeno: *cloaking* de impurezas ressonantes e transporte dependente de spin

Diego Oliver Daldoce Pereira

Orientadora: Tatiana Gabriela Rappoport

Resumo da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

O grafeno é uma das formas alotrópicas do carbono, cuja estrutura pode ser descrita como uma superfície com espessura de um átomo onde os átomos de carbono formam uma rede hexagonal, caracterizando um formato *honeycomb*. Os elétrons no grafeno se comportam como férmions relativísticos sem massa, gerando um enorme foco nesse material e em suas propriedades eletrônicas peculiares.

Nesse trabalho, estudaremos o controle de propriedades eletrônicas do grafeno a partir de impurezas (átomos) adsorvidas em sua superfície. Analisaremos o problema de espalhamento eletrônico por esses adátomos, que funcionarão como centros espalhadores.

Para estudar esse processo de espalhamento, vamos utilizar o método das ondas parciais. Exato em princípio, esse método é mais útil para baixas energias ou, mais especificamente, quando o comprimento de onda λ é muito grande comparado ao alcance a do potencial espalhador ($\lambda/a \gg 1$). Para o grafeno em si, a aproximação de baixas energias implica trabalhar perto do ponto de Dirac, onde observamos uma relação de dispersão

linear. Nesse método, tomaremos a função de onda incidente como uma onda livre e atentaremos para o limite assintótico da função de onda espalhada, que consistirá também em uma onda livre, apenas diferindo por um deslocamento de fase δ_m , chamado de *phase-shift*, que contém todas as informações sobre o centro espalhador, nos possibilitando encontrar grandezas associadas ao processo de espalhamento, como seção de choque, condutividade, entre outros.

Após a explicação do método, analisaremos dois problemas particulares: o *cloaking* de impurezas ressonantes e o transporte dependente de spin. Modelaremos um "manto de invisibilidade" com características bem específicas ao redor da impureza ressonante, a fim de ocultar suas consequências no processo de espalhamento. Além de encontrarmos situações para uma camuflagem bem eficiente, veremos que uma simples variação de potencial pode levar o sistema formado pela impureza junto com o "manto de invisibilidade" de uma situação de *cloaking* de volta para o regime de espalhamento ressonante, fazendo uma analogia com a óptica.

Além da camuflagem de centros espalhadores ressonantes, estudaremos o espalhamento dependente de spin, necessário para o caso de impurezas magnéticas. Nesse tópico, discutimos a inclusão da dependência de spin no método das ondas parciais e analisaremos outros parâmetros de espalhamento relacionados ao spin, como a polarização longitudinal de um feixe espalhado por um átomo magnético adsorvido na superfície do grafeno.

Palavras-chave: grafeno, método das ondas parciais, espalhamento ressonante, *cloaking*, espalhamento dependente de spin.

Abstract

Partial waves method applied to graphene: cloaking of resonant impurities and spin dependent transport

Diego Oliver Daldoce Pereira

Orientadora: Tatiana Gabriela Rappoport

Abstract da Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Graphene, an allotropic form of carbon, has a structure that can be described as a one atom thick planar surface where the carbon atoms form a honeycomb lattice. The electrons in graphene behave like massless relativistic fermions, generating a huge focus in this material and in its peculiar electronic properties.

In this work, we focus on the control of the electronic properties of graphene with impurities (atoms) adsorbed on its surface. We analyze the electronic scattering problem where the adatoms act as scattering centers.

To study this scattering process, we use the method of partial waves. Exact in principle, this method is most useful for low energies, or more specifically, when the wavelength λ is much larger than the scatterer's potential range a ($\lambda/a \gg 1$). For graphene itself, the low energies approximation implies working near the Dirac point, where a linear dispersion relation is observed. In this method, we take the incident wave function as a free wave and analyze the asymptotic limit of the scattered wave function, which is also a free wave, only differing from the incident wave by a phase-shift δ_m , which contains all the

information about the scattering center, enabling us to find quantities associated with the scattering process, as cross section, conductivity, among others.

After explaining the method, we analyze two specific problems: the cloaking of resonant impurities and spin dependent transport. We model a "cloak of invisibility" around the resonant impurity in order to hide its consequences in the scattering process. In addition to finding conditions for a very effective camouflage, we see that a simple potential variation can take the system from a situation of cloaking back to the resonant scattering regime, making an analogy with similar phenomena in optics.

Besides camouflaging resonant scattering centers, we also study the spin-dependent scattering, which is necessary in the case of magnetic impurities. In this discussion, we include the spin degrees of freedom into the method of partial waves and analyze other scattering parameters related to the spin, like the longitudinal spin polarization of a beam scattered by a magnetic atom adsorbed on the surface of graphene.

Keywords: graphene, partial waves method, resonant scattering, cloaking, spin dependent scattering.

Agradecimentos

A Deus, por ser a minha maior força. Ontem, hoje e sempre.

À minha família, em especial à minha mãe e à minha avó de criação, por toda a paciência, a compreensão e o amor. Um agradecimento especial também ao meu falecido pai, pela mistura de fortaleza e carinho. Todo e qualquer obstáculo vencido por mim são dedicados a vocês.

À professora Dra. Tatiana Rappoport, por ter me apresentado à física do grafeno e por ter me guiado durante a iniciação científica e o mestrado com muita paciência e dedicação. Obrigado por tudo!

Aos professores Dr. Felipe Pinheiro e Dr. Nuno Peres, pelas inúmeras discussões construtivas.

Aos meus amigos, os verdadeiros "gigantes" que funcionaram como um grande suporte para que eu chegasse até aqui. Estou sempre aprendendo com todos vocês e não teria chegado ao final sem o apoio de cada um (não teria a mesma graça também).

Às instituições CNPq, CAPES e FAPERJ, pelo suporte financeiro.

Sumário

Sumário	viii
Lista de Figuras	x
Introdução	1
1 Grafeno	4
1.1 Estrutura Eletrônica	5
1.2 Estrutura Cristalina	6
1.3 <i>Tight-binding</i>	7
1.4 Elétrons livres no grafeno	10
2 Espalhamento 2D: ondas parciais	12
2.1 Caso não relativístico	13
2.1.1 Disco impenetrável	18
2.1.2 Disco com potencial finito	19
2.2 Caso relativístico	21
2.2.1 Disco com potencial finito	25
2.2.2 Disco impenetrável	26
2.2.3 Condutividade do grafeno	27
3 Espalhamento ressonante e <i>cloaking</i>	31
3.1 Regime do espalhamento ressonante	34

3.1.1	Impurezas ou defeitos modelados como um disco de potencial finito	34
3.1.2	Vacâncias: uma nova fonte de espalhamento ressonante	36
3.2	<i>Cloaking</i>	38
3.2.1	Impurezas ou defeitos modelados como um disco de potencial finito	39
3.2.2	Vacâncias	44
4	Espalhamento dependente de spin	49
4.1	Inclusão do grau de liberdade do spin	50
4.1.1	Elétrons livres no grafeno	51
4.1.2	Ondas parciais	52
4.2	Efeito Zeeman local	54
	Considerações finais	61
	Referências Bibliográficas	64

Lista de Figuras

- 1.1 Ilustração de uma folha de grafeno e de como ele estruturalmente funciona como base para as outras estruturas carbônicas. Da esquerda pra direita, temos a formação de um fulereno 0D, de um nanotubo 1D e de grafite 3D. 5
- 1.2 Ilustração dos três orbitais σ no grafeno e do orbital π perpendicular à folha de grafeno [1]. 6
- 1.3 Esquerda: Rede cristalina *honeycomb* do grafeno com a representação dos vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . Direita: Rede recíproca do grafeno com identificação da primeira zona de Brillouin e dos Pontos de Dirac K e K' [2]. . . 7
- 1.4 Bandas π e π^* do grafeno. Na aproximação de baixas energias, as bandas π e π^* são simétricas em relação a $E = 0$. A relação de dispersão linear próximo aos pontos K (pontos brancos) e K' (pontos pretos) é ilustrada pelo cone de Dirac [1]. 10
- 2.1 Ilustração da solução total do espalhamento, representada na equação 2.3. Em vermelho, vemos a onda incidente $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ e, após incidir no centro espalhador, temos a onda cilíndrica divergente e^{ikr}/\sqrt{r} representada em azul. . 15
- 2.2 Esquema de um disco impenetrável, representado pela equação 2.17. . . . 18
- 2.3 Esquema de um disco com potencial finito, representado pela equação 2.23 20
- 2.4 Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 20$ meV, $V_0 = 199$ meV e $a = 10$ nm em função do ângulo de espalhamento θ , considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco de potencial finito. 26

2.5	Seção de choque de transporte σ_T para $V_0 = -221$ meV e $a = 10$ nm em função da energia E do feixe incidente, considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco de potencial finito.	26
2.6	Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 20$ meV e $a = 1$ nm em função do ângulo de espalhamento θ , considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco impenetrável.	27
2.7	Seção de choque de transporte σ_T para $a = 1$ nm em função da energia E do feixe incidente, considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco impenetrável.	27
2.8	Condutividade do grafeno suspenso e não-suspenso em função de V_g . Imagens do topo: condutividade de grafeno suspenso de dois dispositivos diferentes. Dentre as imagens do topo, a da direita corresponde a um dispositivo com $\mu \sim 170000$ cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ , a uma densidade eletrônica $n = 2 \times 10^{11}$ cm ² , enquanto a da esquerda corresponde a um dispositivo com $\mu \sim 200000$ cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ , a uma densidade eletrônica $n = 2 \times 10^{11}$ cm ² . Imagens do fundo: condutividade do grafeno sobre óxido de silício, correspondente a dispositivos com $\mu \sim 10000$ cm ² V ⁻¹ s ⁻¹ . Em todas as imagens foi utilizada a equação 2.48 para ajuste, com n_i sendo o único parâmetro utilizado. Nas legendas, a concentração de impurezas é por célula unitária [3].	30
3.1	Ilustração de um <i>cloaking</i> acústico, estudado a partir da medida da pressão sonora [4].	33
3.2	<i>Phase-shifts</i> para $E = 0.02$ eV e $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0	35

3.3	Seção de choque de transporte σ_T para $E = 0.02$ eV e $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0 considerando as 6 primeiras ondas parciais.	36
3.4	Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 0.02$ eV e $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0 considerando as 6 primeiras ondas parciais.	37
3.5	<i>Phase-shifts</i> para $E = 0.02$ eV e $a = 1$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0	37
3.6	<i>Phase-shifts</i> para $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco impenetrável.	38
3.7	Esquema dos potenciais no problema do <i>cloaking</i>	39
3.8	Eficiência do <i>cloaking</i> de um disco para $E = 0.02$ eV, $R_1 = 10$ nm e $V_1 = -114$ meV considerando as 6 primeiras ondas parciais.	41
3.9	Eficiência do <i>cloaking</i> de um disco nos mesmos parâmetros que a figura 3.8 com $R_2 = 20$ nm.	41
3.10	Eficiência do <i>cloaking</i> de um disco para $R_1 = 10$ nm, $R_2 = 20$ nm e $V_1 = -114$ meV considerando as 6 primeiras ondas parciais.	42
3.11	Eficiência do <i>cloaking</i> de um disco nos mesmos parâmetros que a figura 3.10 com $V_2 = 286$ meV.	42
3.12	Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 0.02$ eV, $R_1 = 10$ nm, $V_1 = -114$ meV e $R_2 = 20$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais no caso do <i>cloaking</i> de um disco.	43
3.13	Eficiência do <i>cloaking</i> de uma vacância para $E = 2$ meV e $R_1 = 1$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais.	45
3.14	Eficiência do <i>cloaking</i> de uma vacância para $E = 1$ meV, $R_1 = 1$ nm e $R_2 = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais.	45

3.15	Eficiência do <i>cloaking</i> de uma vacância para $R_1 = 1$ nm e $R_2 = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais.	46
3.16	Eficiência do <i>cloaking</i> de uma vacância nos mesmos parâmetros que a figura 3.15 com $V_2 = 87$ meV.	46
3.17	Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 20$ meV, $R_1 = 1$ nm e $R_2 = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais no caso do <i>cloaking</i> de uma vacância.	48
4.1	Esquema de um efeito Zeeman local, representado pela equação 4.13.	55
4.2	Seção de choque de transporte σ_T para $E = 20$ meV e $a = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.	57
4.3	Polarização de spin longitudinal P_S^T para $E = 20$ meV considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.	57
4.4	Polarização de spin longitudinal P_S^T para $a = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.	58
4.5	Polarização de spin longitudinal P_S^T para os mesmos parâmetros que a figura 4.4 com $V_0 = 186$ meV.	59
4.6	Distribuição angular da polarização de spin $P(\theta)$ para $V_0 = 225$ meV $a = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.	59
4.7	Distribuição angular da polarização de spin $P(\theta)$ para os mesmos parâmetros que a figura 4.6 com $E = 18$ meV.	60

Introdução

É fato bem conhecido que a base de toda a química orgânica e da matéria-prima para a vida que conhecemos é o carbono. Esse elemento químico, devido à flexibilidade de suas ligações, forma um número ilimitado de sistemas baseados em carbono com diferentes estruturas e uma ampla variedade de propriedades físicas. Dentre esses sistemas, temos alguns formados somente por átomos de carbono; são eles o diamante, o grafite, o grafeno, os fulerenos e os nanotubos.

Desde a obtenção do grafeno pelo método de esfoliação mecânica usando uma *Scotch tape* [5] realizado por *Novoselov* e *Geim* em 2004, o que lhes rendeu o prêmio Nobel em 2010, este material tornou-se muito atrativo para a comunidade científica devido às suas inúmeras propriedades peculiares. Para baixas energias, veremos que a equação que descreverá o transporte eletrônico no grafeno é a equação relativística de Dirac [6–8], permitindo que fenômenos quânticos relativísticos sejam estudados em experimentos de laboratório [9].

O grafeno é um material com altas perspectivas de aplicação tecnológica na indústria eletrônica, já que suas propriedades de condução podem ser controladas pela ação de campos elétricos aplicados através de *gates* e pelo fato de ser um filme estável e com espessura de uma camada atômica.

Uma outra maneira de controlar propriedades do grafeno é através da adsorção de átomos em sua superfície, chamados de adátomos. Essas impurezas sobre a superfície do grafeno constituem uma fonte de controle sobre o fluxo eletrônico, limitando a mobilidade dos portadores, e alteram a estrutura eletrônica, podendo gerar espalhamento coulomb-

biano [10, 11], alterar interações elétron-fóton [12], mudar o potencial químico [10, 11], entre outros [13].

Após considerarmos impurezas adsorvidas na superfície do grafeno, se faz necessário estudar o que acontece com os elétrons ao serem espalhados por esses adátomos. Para o cálculo das propriedades desses sistemas, vamos utilizar o método da expansão em ondas parciais, mais útil para situações de baixa energia, regime que será considerado ao longo desse trabalho.

Nossa motivação é estudar o espalhamento eletrônico no grafeno através de impurezas adsorvidas na sua superfície. Veremos que esses centros espalhadores podem ser modelados de formas específicas, a fim de encontrarmos parâmetros importantes associados ao problema de espalhamento sobre cada um dos tipos de impurezas adsorvidas que serão estudadas.

Ao longo do capítulo 1, veremos alguns aspectos do grafeno, como suas estruturas eletrônica e cristalina e sua figura de dispersão $E(\vec{k})$ através do método *tight-binding*. Mostraremos que a forma assumida pelo espectro de energia no regime de baixas energias nos leva ao uso da equação de Dirac para o movimento de elétrons nesse regime, também chamado de aproximação do cone de Dirac. Além disso, resolveremos a equação de Dirac para um elétron livre, mostrando sua energia e função de onda correspondente.

No capítulo 2, apresentaremos o desenvolvimento a ser utilizado para resolver o problema de espalhamento: o método das ondas parciais. Introduziremos os aspectos desse método para os casos não-relativístico e relativístico, mostrando algumas diferenças entre ambos os regimes para o caso bi-dimensional. Além disso, apresentaremos alguns aspectos do espalhamento eletrônico por discos de potencial finito e impenetrável, que são modelos utilizados para modelar determinados tipos de impurezas adsorvidas na superfície do grafeno.

Com o objetivo de controlar o fluxo eletrônico no grafeno, no capítulo 3 veremos que os potenciais espalhadores apresentados no capítulo anterior induzirão o chamado

regime ressonante do espalhamento sob algumas condições específicas. Nesse regime, o centro espalhador pode ser entendido como uma "armadilha" para o elétron incidente, induzindo à ideia de ressonância, já que vemos uma grande ampliação do espalhamento nessa situação a partir do "confinamento" do elétron dentro do centro espalhador. Ainda no capítulo 3, introduziremos uma ideia de camuflar o centro espalhador ressonante, a fim de suprimir suas consequências no problema de espalhamento. Utilizando um tipo de "manto de invisibilidade" ao redor do potencial espalhador inicial, veremos também que uma mudança de potencial pode levar o sistema da situação de *cloaking* de volta ao regime ressonante, e vice-versa. Os resultados apresentados nesse capítulo podem ser encontrados na referência [14], que se trata de um manuscrito produzido a partir desse trabalho.

Por fim, no capítulo 4, trataremos de um processo de espalhamento dependente de spin. Veremos as consequências da inclusão do spin na equação de Dirac e no método das ondas parciais e utilizaremos como exemplo um potencial espalhador sob a forma de um efeito Zeeman local ao longo da direção z , um modelo possível para adsorbatos magnéticos.

Capítulo 1

Grafeno

O grafeno, objeto principal do trabalho, é composto por uma mono-camada de átomos de carbono dispostos numa estrutura cristalina bidimensional (≈ 1 nm de espessura) em formato de favo de mel (ou *honeycomb*). Basicamente, temos um material com a espessura de um átomo onde os átomos de carbono ficam arrumados segundo um padrão hexagonal, obtendo uma rede cristalina perfeita. Do ponto de vista estrutural, o grafeno pode ser entendido como base para as outras estruturas puramente carbônicas, como podemos ver na figura 1.1.

O grafeno é o material mais fino conhecido e também o mais forte. Ele se comporta como semicondutor sem *gap* devido à sua estrutura de banda [2]. No grafeno, os portadores de carga possuem alta mobilidade intrínseca, massa efetiva zero e podem percorrer micrômetros sem serem espalhados, proporcionando uma alta condutividade elétrica mesmo à temperatura ambiente [2, 6, 7] ou com pequenas imperfeições. Essa alta mobilidade proporciona um difícil controle do fluxo eletrônico, um dos problemas que tentaremos contornar ao longo desse trabalho. Para baixas energias, os portadores se comportam como férmions relativísticos sem massa com uma velocidade constante, independente do momento [7], chamada de velocidade de Fermi v_F , aproximadamente 300 vezes menor que a velocidade da luz c [2].

Neste capítulo, serão apresentadas algumas propriedades do grafeno, como suas estruturas eletrônica e cristalina. Também aplicaremos o método *tight-binding* com o objetivo

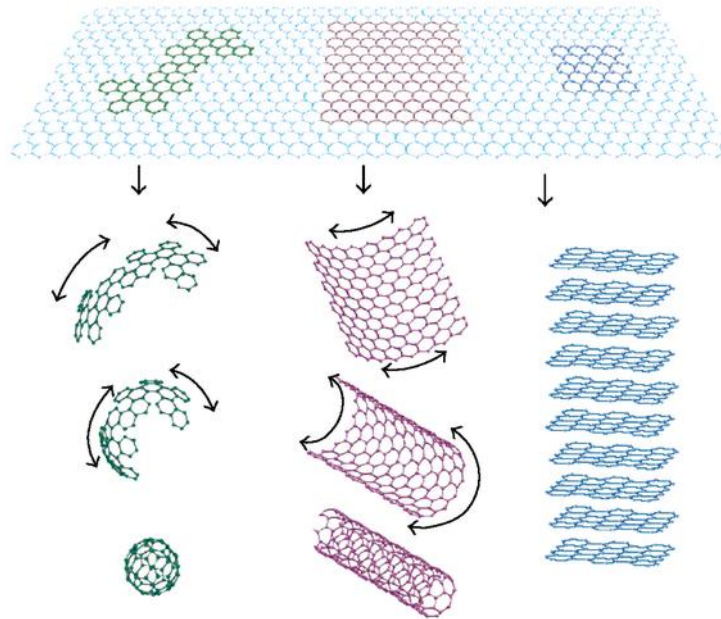


Figura 1.1: Ilustração de uma folha de grafeno e de como ele estruturalmente funciona como base para as outras estruturas carbônicas. Da esquerda pra direita, temos a formação de um fulereno 0D, de um nanotubo 1D e de grafite 3D.

de encontrar a dispersão eletrônica do grafeno e estudar seu comportamento a baixas energias. Por fim, também resolveremos o problema de um elétron livre na superfície do grafeno utilizando a equação de Dirac para encontrar seus auto-valores de energia e auto-vetores correspondentes.

1.1 Estrutura Eletrônica

Um átomo de carbono possui seis elétrons distribuídos nos orbitais atômicos da seguinte forma, segundo o diagrama de Pauling: $1s^2$, $2s^2$ e $2p^2$. Os elétrons do orbital $1s$ são essencialmente inertes e não contribuem para as ligações químicas com outros átomos. No grafeno, os orbitais $2s$, $2p_x$ e $2p_y$ hibridizam-se para formar três novos orbitais planares, chamados sp^2 , em que cada um deles contém um elétron. Os orbitais sp^2 de átomos diferentes hibridizam-se, levando à formação das ligações σ , que formam um ângulo de 120° entre elas e são responsáveis pela estrutura hexagonal da rede do grafeno [2]. As ligações químicas dos átomos de carbono no grafeno são dadas por esses três orbitais, enquanto

que as propriedades mecânicas do grafeno, tais como rigidez, resistência e maleabilidade, são determinadas pelas características dessas ligações. Por último, temos o orbital p_z , que é perpendicular ao plano formado pela folha de grafeno. Esses orbitais p_z hibridizam-se junto a outros orbitais de outros átomos para formar ligações covalentes π , onde cada orbital p_z contribui com um elétron [1], formando um sistema *half-filled*. Os orbitais π são responsáveis pelas propriedades eletrônicas peculiares no grafeno (ver figura 1.2).

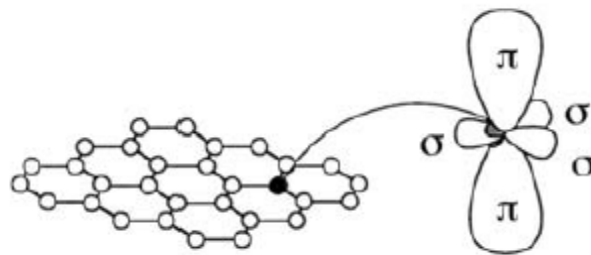


Figura 1.2: Ilustração dos três orbitais σ no grafeno e do orbital π perpendicular à folha de grafeno [1].

1.2 Estrutura Cristalina

O grafeno possui flexibilidade estrutural, o que se reflete em suas propriedades eletrônicas. A hibridização sp^2 produz uma estrutura trigonal no plano com uma ligação entre átomos de carbonos que possuem uma separação de $a_{CC} = 0,142$ nm [2]. Portanto, a rede do grafeno pode ser interpretada como duas redes triangulares sobrepostas, ou ainda como uma única rede triangular com cada célula unitária contendo dois átomos, A e B (figura 1.3). Vale lembrar que do ponto de vista químico são dois átomos idênticos.

Voltando à rede cristalina em si, podemos escrever os vetores primitivos da rede como:

$$\vec{a}_1 = \frac{a_{CC}(3, \sqrt{3})}{2} \quad \text{e} \quad \vec{a}_2 = \frac{a_{CC}(3, -\sqrt{3})}{2} \quad (1.1)$$

Se usarmos as condições de periodicidade e a teoria das redes de Bravais, podemos encontrar os vetores da rede recíproca:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi(1, \sqrt{3})}{3a_{CC}} \quad e \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi(1, -\sqrt{3})}{3a_{CC}}, \quad (1.2)$$

que estão representados na figura 1.3. Também podemos identificar os pontos K e K' da primeira zona de Brillouin. Importantes na física do grafeno, esses pontos são chamados de pontos de Dirac e podem ser localizados no espaço recíproco segundo os vetores:

$$\vec{K} = \frac{2\pi}{3a_{CC}} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad e \quad \vec{K}' = \frac{2\pi}{3a_{CC}} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \quad (1.3)$$

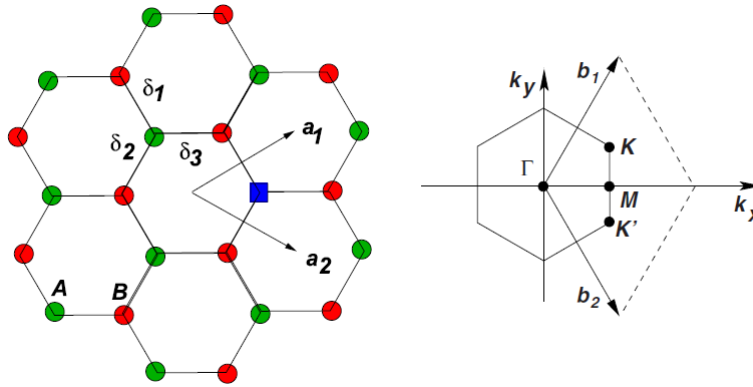


Figura 1.3: Esquerda: Rede cristalina *honeycomb* do grafeno com a representação dos vetores primitivos \vec{a}_1 e \vec{a}_2 . Direita: Rede recíproca do grafeno com identificação da primeira zona de Brillouin e dos Pontos de Dirac K e K' [2].

A existência de um *gap* zero no pontos de Dirac $K(K')$ vem da necessidade de simetria da rede hexagonal de carbono com dois sítios A e B diferentes, mas equivalentes um para o outro por simetria. Se esses sítios tiverem átomos diferentes de carbono, então a energia E_{2p} do sítio será diferente e, portanto, a energia de dispersão irá mostrar um *gap* de energia entre as bandas π e π^* .

1.3 *Tight-binding*

Em Física da Matéria Condensada, as propriedades eletrônicas são determinadas pela natureza do espectro do último nível preenchido, cuja energia define o nível de Fermi.

Portanto, a física do grafeno é determinada pelo espectro de energia relacionado com o topo da banda de valência e com o fundo da banda de condução.

Podemos calcular a relação de dispersão do grafeno utilizando a aproximação do modelo *tight-binding* junto com a aproximação de "primeiros vizinhos", que consiste no problema de um elétron na presença de dois núcleos atômicos, considerando somente a possibilidade de tunelamento entre esses dois sítios. As bandas formadas no gráfico da relação de dispersão $E(\vec{k})$, que existem por conta dos orbitais π , são as responsáveis pelas propriedades eletrônicas e óticas desse sólido. Dessa forma, utilizamos como base as funções de Bloch construídas a partir dos orbitais atômicos p_z .

Como sabemos, o grafeno pode ser entendido como duas redes triangulares, a aproximação de "primeiros vizinhos" consistirá na possibilidade de tunelamento entre sítios de redes diferentes. Por exemplo, se escolhermos um sítio da rede representada por átomos verdes na figura 1.3, os primeiros vizinhos consistem em átomos da rede representada por átomos vermelhos. Podemos identificar a representação dos primeiros vizinhos através dos vetores $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ e $\vec{\delta}_3$, que são os vetores que conectam as duas redes [15].

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a_{CC}}{2}(-1, \sqrt{3}) = \frac{1}{3}(\vec{a}_1 - 2\vec{a}_2) \quad (1.4)$$

$$\vec{\delta}_2 = \frac{a_{CC}}{2}(-1, -\sqrt{3}) = \frac{1}{3}(\vec{a}_2 - 2\vec{a}_1) \quad (1.5)$$

$$\vec{\delta}_3 = a_{CC}(1, 0) = \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \quad (1.6)$$

Como os primeiros vizinhos são átomos da outra rede, o Hamiltoniano para a segunda quantização do modelo *tight-binding*, responsável pelo movimento do elétrons no grafeno, é dado por [2]:

$$H = -t \sum_{\langle n,m \rangle} a_n^\dagger b_m + b_m^\dagger a_n, \quad (1.7)$$

onde n e m são índices de vetores que indicam a posição do elétron na rede.

Para diagonalizar o Hamiltoniano escrito na equação 1.7, podemos introduzir, para cada uma das sub-redes do grafeno, os operadores de criação [2]:

$$a_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n} \alpha_k^\dagger \quad (1.8)$$

e

$$b_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_n + i\delta_3} \beta_k^\dagger, \quad (1.9)$$

onde \vec{R}_n é o vetor associado a algum ponto da rede real e N_c representa o número de células unitárias. Também necessitamos dos operadores de aniquilação a_n e b_n , que consistem nos respectivos complexos conjugados dos apresentados nas equações 1.8 e 1.9.

Pela definição dos operadores criação e aniquilação nas equações 1.8 e 1.9, tomamos a sub-rede de átomos A como base a fim de resolver o problema de auto-valores e encontrar relação de dispersão $E(\vec{k})$:

$$E_\pm(\vec{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\vec{k})}, \quad (1.10)$$

onde

$$f(\vec{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a_{CC}) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a_{CC}\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a_{CC}\right) \quad (1.11)$$

sendo que o sinal + está relacionado com a banda de condução e o sinal – está relacionado com a banda de valência. Portanto, o espectro de energia originado pelos orbitais π possui duas bandas de energia que estão representadas na figura 1.4.

Se considerarmos baixos valores de energia, podemos expandir a equação 1.11 próximo dos pontos K e K' (equação 1.3) como $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$, com $|\vec{q}| \ll |\vec{K}|$:

$$E_\pm(\vec{q}) \simeq \pm \hbar v_F |\vec{q}| + O[(q/K)^2], \quad (1.12)$$

onde \vec{q} é o momento medido relativo ao pontos de Dirac e v_F é a velocidade de Fermi [2].

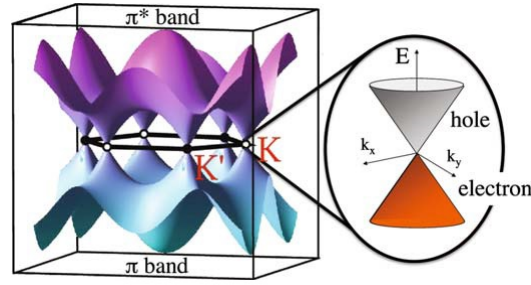


Figura 1.4: Bandas π e π^* do grafeno. Na aproximação de baixas energias, as bandas π e π^* são simétricas em relação a $E = 0$. A relação de dispersão linear próximo aos pontos K (pontos brancos) e K' (pontos pretos) é ilustrada pelo cone de Dirac [1].

A energia de dispersão linear dada pela equação 1.12 é similar à energia de partículas ultrarrelativísticas, o que ainda não é suficiente para a utilização da equação de Dirac sem o termo de massa para o problema de um elétron no grafeno. Ainda devemos realizar uma expansão dos auto-vetores do operador Hamiltoniano no modelo *tight-binding* (equação 1.7) em torno de \vec{K} e \vec{K}' . Após essa expansão, encontramos que o operador Hamiltoniano se resumirá à forma procurada.¹

1.4 Elétrons livres no grafeno

Como mencionado ao longo deste capítulo, na aproximação do cone de Dirac (baixas energias), os elétrons no grafeno se comportam como férmions relativísticos sem massa com velocidade de Fermi v_F . Logo, segundo a teoria de Dirac, teremos um Hamiltoniano da seguinte forma:

$$\mathcal{H}_0 = -i\hbar v_F (\tau_z \sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y), \quad (1.13)$$

onde $v_F \approx c/300$, $\vec{\sigma}$ e $\vec{\tau}$ representam matrizes de Pauli, com $\sigma_z = \pm 1$ ($\tau_z = \pm 1$) descrevendo estados em cada uma das duas sub-redes A-B (em $K - K'$). Como, ao longo de todo o trabalho desenvolvido, supomos um decaimento suave do potencial espalhador em relação ao parâmetro de rede, podemos, sem perda nenhuma de generalidade, considerar

¹para mais detalhes, consultar as referências [2, 16].

$\tau_z = +1$, trabalhando somente com o cone K .

Ao abordarmos o problema de auto-valores $\mathcal{H}_0\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$, podemos reescrevê-lo na equação na forma matricial, com o objetivo de facilitar a compreensão, já que $\Psi(\vec{r})$ representa uma função de onda na forma de um spinor de duas componentes, $\psi_A(\vec{r})$ e $\psi_B(\vec{r})$. A cada componente desse spinor teremos um spin associado, que chamaremos de iso-spin.

Utilizando os operadores momento $\hat{p}_i = -i\hbar\partial_{x_i}$, e as conhecidas expressões para as matrizes de Pauli σ_i , ficamos com:

$$v_F \begin{bmatrix} 0 & (\hat{p}_x - i\hat{p}_y) \\ (\hat{p}_x + i\hat{p}_y) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_A(\vec{r}) \\ \psi_B(\vec{r}) \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_A(\vec{r}) \\ \psi_B(\vec{r}) \end{bmatrix}. \quad (1.14)$$

Como solução, temos os seguintes auto-valores e seus respectivos auto-vetores, já normalizados:

$$E = \pm v_F |\vec{p}| \rightarrow \Psi(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta_{\vec{p}}} \end{bmatrix}, \quad (1.15)$$

onde $\theta_{\vec{p}} = \arg(p_x + ip_y)$ e os sinais de positivo e negativo presentes na energia e na função de onda encontradas estão associados às partes de elétron ($E > 0$) e buracos ($E < 0$) do espectro.

Justificado o uso da equação de Dirac sem o termo de massa e resolvido o problema de um elétron na superfície do grafeno, podemos avançar para o estudo do problema de espalhamento eletrônico. Veremos como potenciais escalares podem modificar o espectro de energia e as funções de onda no caso relativístico e também no caso não-relativístico (Schrödinger).

Capítulo 2

Espalhamento 2D: ondas parciais

É bem conhecido que uma partícula movendo-se sob a ação de um potencial central não sofre nenhum torque em relação à origem do potencial, e, portanto, observa-se a conservação do momento angular. No caso quântico, temos a quantização do momento angular, de modo que o espalhamento não muda o número quântico m associado ao momento angular no caso bi-dimensional. A expansão em ondas parciais consiste em uma abordagem do tipo "dividir para conquistar", onde se expandem as funções de onda incidente e espalhada em auto-estados do momento angular. Como a parte angular desta base não é afetada pelo espalhamento, após essa análise, podemos estudar a parte radial do espalhamento.

Na prática, podemos ver que ele é mais útil para situações de espalhamento a baixas energias ou, mais especificamente, se o comprimento de onda λ é grande comparado com o alcance a do potencial espalhador em questão ($a/\lambda \ll 1$). Também veremos que, ao analisar o limite assintótico da onda espalhada, o efeito da interação com o centro espalhador consistirá apenas em um deslocamento de fase da onda incidente por um fator δ_m , chamado de *phase-shift*.

No caso do grafeno, a aplicação do método de ondas parciais pode ser estendida a várias situações. Entre elas, podemos descrever o espalhamento eletrônico por um potencial Coulombiano [17, 18]. Nesse caso, vemos diferenças na seção de choque dependendo do sinal relativo entre o portador de carga e a impureza Coulombiana.

Também podemos utilizar a expansão em ondas parciais para descrever o espalhamento eletrônico por um disco de potencial finito através de uma analogia com o espalhamento Mie (óptica) [19], já que a presença do centro espalhador permite o aparecimento de efeitos de interferência e confinamento a partir de um controle realizado por uma porta de potencial, sugerindo uma forte analogia do espalhamento de luz por uma esfera.

Um dos principais trabalhos decorrente da aplicação do método das ondas parciais no grafeno é a descrição da condutividade dc utilizando centros espalhadores ressonantes. Além disso, também é demonstrado que o resultado obtido é consistente com outros métodos de solução de problemas de espalhamento, como equação de Lippmann-Schwinger e matriz- T [20].

O método de ondas parciais também pode ser estendido ao caso de espalhamento dependente de spin, onde podemos utilizá-lo, por exemplo, para o estudo do problema de relaxação de spin no grafeno [21, 22] e para analisar o efeito Hall de spin induzido por impurezas ressonantes [23].

Neste capítulo, faremos uma revisão do método de ondas parciais para o problema de espalhamento eletrônico bi-dimensional. Consideraremos o espalhamento de um elétron por um potencial escalar induzido por uma única impureza adsorvida na superfície para os casos não-relativístico e relativístico, mostrando algumas diferenças entre essas duas situações. Por fim, faremos uma pequena aplicação do método das ondas parciais ao calcular a condutividade σ do grafeno em função do *gate* aplicado.

2.1 Caso não relativístico

Normalmente, os livros possuem uma discussão bem elaborada do problema de espalhamento para o caso tridimensional [24, 25]. Aqui, como tratamos de grafeno, vamos construir uma linha de raciocínio em torno do problema bidimensional [17] também no regime não-relativístico.

Primeiramente, com o objetivo de encontrar a solução completa do problema de espa-

lhamento $\phi(\vec{r})$, partiremos da equação de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}). \quad (2.1)$$

A função de onda $\phi(\vec{r})$ da equação de Schrödinger em 2.1 representa a chamada solução completa do problema de espalhamento para ondas estendidas ou para o espectro contínuo. Antes de resolver a equação de fato, vamos fazer uma análise preliminar da solução procurada, a fim de entender melhor seu significado físico. Para isso, vamos impor algumas condições de contorno características de um problema de espalhamento sobre $\phi(\vec{r})$, a fim de limitar as possibilidades de resposta, pois, se reescrevermos a equação de Schrödinger da forma

$$\left(\nabla^2 + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\vec{r})\right)\phi(\vec{r}) = 0, \quad (2.2)$$

podemos ter uma grande variedade de soluções.

A ideia inicial é que a única onda incidente deve ser aquela associada ao feixe incidente ($\phi_{inc}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$). Por exemplo, se analisarmos o limite assintótico da solução para $|\vec{r}| \rightarrow \infty$, a única onda incidente deve ser $\phi_{inc}(\vec{r})$; todas as demais ondas devem se comportar como ondas emergentes, ilustrando o efeito do espalhamento. Supondo que $V(\vec{r})$ decaia suficientemente rápido nesse limite, a equação 2.2 se aproxima da equação de ondas livres $(\nabla^2 + k^2)\phi(\vec{r}) = 0$ para $|\vec{r}| \rightarrow \infty$.

As soluções desta equação, que são representadas por ondas emergentes, se comportam, nesse limite assintótico, como ondas cilíndricas divergentes $f_k(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}/\sqrt{r}$. Portanto, a solução desejada deve ser da forma

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f_k(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{r}}. \quad (2.3)$$

Para facilitar o entendimento, podemos observar um pequeno esquema da solução completa do espalhamento $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ na figura 2.1.

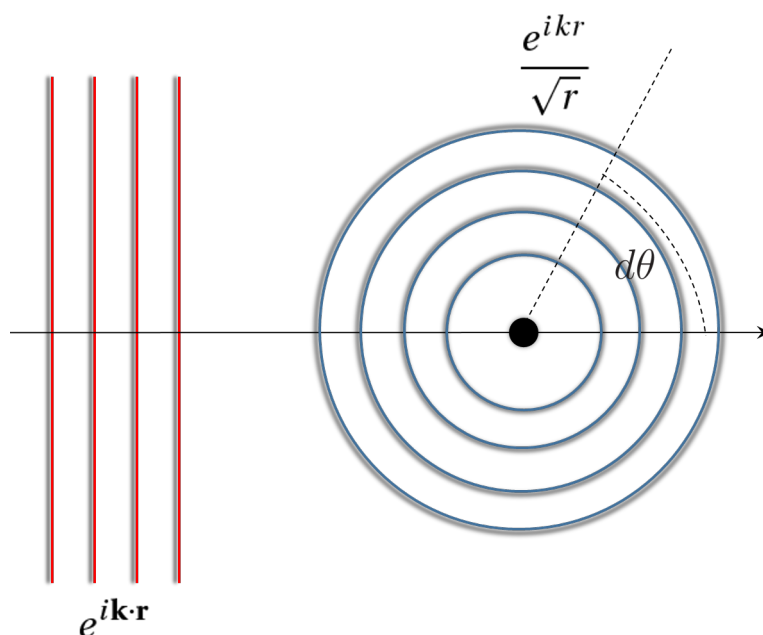


Figura 2.1: Ilustração da solução total do espalhamento, representada na equação 2.3. Em vermelho, vemos a onda incidente $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ e, após incidir no centro espalhador, temos a onda cilíndrica divergente e^{ikr}/\sqrt{r} representada em azul.

A fim de encontrarmos de fato a solução completa do espalhamento para um sistema bidimensional, escreveremos o Laplaciano em coordenadas polares sem a dependência da função de onda $\phi(\vec{r})$ em relação à coordenada z . Além disso, se utilizarmos a suposição de um potencial com simetria radial ($V(\vec{r}) = V(r)$), podemos utilizar o método de separação de variáveis, a fim de encontrar a solução da equação 2.1 na forma $\phi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$. Feito isso, encontramos as seguintes equações diferenciais para $R(r)$ e $\Theta(\theta)$:

$$\frac{d^2\Theta(\theta)}{d\theta^2} + m^2\Theta(\theta) = 0 \implies \Theta(\theta) = e^{\pm im\theta} \quad (2.4)$$

e

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \left(k^2(r) - \frac{m^2}{r^2} \right) R(r) = 0, \quad (2.5)$$

onde

$$k^2(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(r)). \quad (2.6)$$

Podemos facilmente identificar, no caso de ausência de potencial, que a solução da equação 2.5 consiste nas funções de Bessel $J_m(kr)$ e $Y_m(kr)$. Se considerarmos que o potencial decai suficientemente rápido para grandes distâncias do centro espalhador ($r \rightarrow \infty$), veremos que, nesse limite, observaremos o comportamento de uma onda plana. Logo, podemos encontrar a solução completa do problema de espalhamento:

$$\phi(r, \theta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (A_m J_m(kr) + B_m Y_m(kr)) e^{im\theta}. \quad (2.7)$$

Supondo uma onda incidente, por exemplo, na direção x , e utilizando a expansão de Jacobi-Anger para expandir em termos de $J_m(kr)$, temos:

$$\phi_{inc}(\vec{r}) = e^{ikx} = e^{ikr \cos(\theta)} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(kr) e^{im\theta}. \quad (2.8)$$

Como discutido previamente, procuramos analisar o espalhamento segundo o limite assintótico da onda espalhada, o que nos permite reescrever a função de Bessel segundo esse limite nas equações 2.7 e 2.8, o que nos deixa com:

$$\phi(r, \theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \cos\left(kr - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m\right) x e^{im\theta}, \quad (2.9)$$

onde temos C_m como a nova constante de normalização e

$$\delta_m = \arctan\left(-\frac{B_m}{A_m}\right), \quad (2.10)$$

e com

$$\phi_{inc}(r, \theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m e^{im\theta} \cos\left(kr - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (2.11)$$

Ao compararmos as equações 2.9 e 2.11, podemos notar que, após considerarmos baixas energias e analisarmos o efeito do centro espalhador a longas distâncias dele, o único efeito do espalhamento sobre a onda incidente consiste no surgimento de um fator de fase δ_m ,

que chamaremos oportunamente de *phase-shift*. Além disso, podemos separar cada uma dessas expressões em ondas cilíndricas convergentes (e^{-ikr}/\sqrt{r}) e divergentes (e^{ikr}/\sqrt{r}). Como o espalhamento não pode afetar as amplitudes das ondas cilíndricas convergentes contidas na onda incidente, visto que os efeitos do espalhamento são notados pelas ondas que divergem dele do centro espalhador, podemos determinar C_m e, conseqüentemente, $\phi_{esp}(r, \theta)$:

$$\phi_{esp}(r, \theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-ie^{-i\delta_m} \sin(\delta_m) e^{im\theta}) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}. \quad (2.12)$$

Como já discutido, conhecemos a forma da função de onda espalhada em função da amplitude de espalhamento, o que nos possibilita encontrar a expansão de $f_k(\theta)$ em função das ondas parciais:

$$f_k(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-ie^{-i\delta_m} \sin(\delta_m) e^{im\theta}). \quad (2.13)$$

Além da amplitude de espalhamento, podemos ter as seções de choque total e de transporte em função das ondas parciais:

$$\sigma(k) \equiv \int_0^{2*\pi} |f_k(\theta)|^2 d\theta \implies \sigma(k) = \frac{4}{k} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sin^2(\delta_m) \quad (2.14)$$

e

$$\sigma_T(k) \equiv \int_0^{2*\pi} (1 - \cos(\theta)) |f_k(\theta)|^2 d\theta \implies \sigma_T(k) = \frac{2}{k} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sin^2(\delta_{m+1} - \delta_m). \quad (2.15)$$

Lembrando que a seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}(\theta)$ também é um importante parâmetro do problema em questão, pois fornece a distribuição angular do espalhamento. Ela é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\theta}(\theta) = |f_k(\theta)|^2. \quad (2.16)$$

Vemos que as grandezas associadas à análise do problema de transporte podem ser calculadas em função dos *phase-shifts* δ_m . A seguir, abordaremos dois exemplos de potenciais onde aplicaremos o método das ondas parciais, a fim de encontrar a seção de choque de transporte σ_T e outros parâmetros do problema de espalhamento eletrônico.

2.1.1 Disco impenetrável

Nesse exemplo (figura 2.2), temos um potencial definido como:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > a \\ \infty, & r \leq a \end{cases}. \quad (2.17)$$

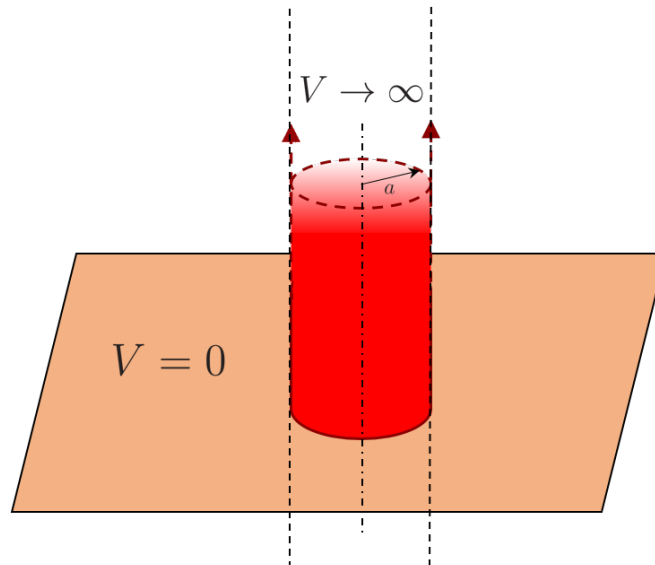


Figura 2.2: Esquema de um disco impenetrável, representado pela equação 2.17.

A partir da forma do potencial, teremos como condição de contorno que a função de onda se anule em $r = a$. Como já sabemos a solução completa do problema de espalhamento, temos que:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} (A_m J_m(ka) + B_m Y_m(ka)) e^{im\theta} = 0. \quad (2.18)$$

A continuidade da função de onda em $r = a$ que nos permite encontrar a razão $-B_m/A_m$ e, conseqüentemente, os *phase-shifts* de acordo com a equação 2.10:

$$\delta_m = \arctan \left(\frac{J_m(ka)}{Y_m(ka)} \right). \quad (2.19)$$

Por conta da trivialidade desse exemplo, podemos encontrar uma expressão bem simples para a seção de choque total utilizando a equação 2.19 junto com a equação 2.14:

$$\sigma(k) = \frac{4}{k} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{J_m^2(ka)}{J_m^2(ka) + Y_m^2(ka)}, \quad (2.20)$$

onde $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E$.

Como trabalharemos com baixas energias, é conveniente observar esse limite assintótico na expressão 2.20. Após análise da equação 2.19, podemos ver que o *phase-shift* de maior contribuição a baixas energias é o de ordem $m = 0$. Logo, se tomarmos somente ele para o cálculo da seção de choque, ficamos com:

$$\sigma(k) \approx \frac{4}{k} \left(\frac{J_0^2(ka)}{J_0^2(ka) + Y_0^2(ka)} \right). \quad (2.21)$$

Após análise dos δ_m , podemos utilizar a expressão das funções de Bessel $J_n(x)$ e $Y_n(x)$ quando temos $x \rightarrow 0$. Feito isso, obtemos limite assintótico da expressão de $\sigma(k)$ para baixas energias:

$$\sigma(k) \approx \frac{4}{k} \left(\frac{\pi^2}{\pi^2 + 4 \ln^2 \left(\frac{\gamma_E ka}{2} \right)} \right), \quad (2.22)$$

onde $\ln(\gamma_E) \simeq 0.577 \dots$ é a constante de Euler.

2.1.2 Disco com potencial finito

Seguindo os mesmos passos do problema tratado anteriormente, podemos escrever que o potencial deste caso (ver figura 2.3) tem a forma:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > a \\ V_0, & r \leq a \end{cases}. \quad (2.23)$$

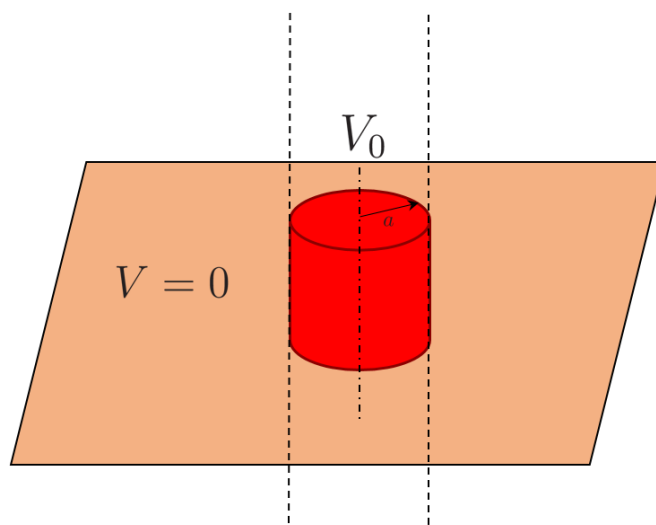


Figura 2.3: Esquema de um disco com potencial finito, representado pela equação 2.23

Porém, nessa situação, teremos duas condições de contorno, que correspondem à continuidade da função de onda e de sua derivada em $r = a$. Lembrando que as funções Y_m divergem na origem, basta aplicarmos essas condições de contorno, a fim de obtermos duas equações:

$$\begin{aligned} \phi(r \rightarrow a^+, \theta) = \phi(r \rightarrow a^-, \theta) &\implies A_m J_m(k_{\text{out}} a) + B_m Y_m(k_{\text{out}} a) = C_m J_m(k_{\text{in}} a) \\ \phi'(r \rightarrow a^+, \theta) = \phi'(r \rightarrow a^-, \theta) &\implies A_m J'_m(k_{\text{out}} a) + B_m Y'_m(k_{\text{out}} a) = C_m J'_m(k_{\text{in}} a) \end{aligned} \quad (2.24)$$

nos possibilitando encontrar a razão $-B_m/A_m$ e, conseqüentemente, δ_m :

$$\delta_m = \arctan \left(\frac{J'_m(k_{\text{out}} a) J_m(k_{\text{in}} a) - J'_m(k_{\text{in}} a) J_m(k_{\text{out}} a)}{Y'_m(k_{\text{out}} a) J_m(k_{\text{in}} a) - J'_m(k_{\text{in}} a) Y_m(k_{\text{out}} a)} \right), \quad (2.25)$$

onde

$$k_{\text{out}}^2 = 2\mu E / \hbar^2 \quad (2.26)$$

e

$$k_{\text{in}}^2 = 2\mu (E - V_0) / \hbar^2. \quad (2.27)$$

A partir das equações 2.16 e 2.14, podemos, respectivamente, avaliar o comportamento das seções de choque diferencial e total em função dos parâmetros do problema de acordo com o encontrado nas equações 2.25 e 2.26.

2.2 Caso relativístico

Como explicado na seção 1.4, o grafeno, na aproximação de baixas energias, é regido sobre a equação de Dirac. Logo, fazendo um paralelo com o caso não-relativístico tratado na seção 2.1, utilizaremos a base dos auto-estados encontrada na equação 1.15 junto com o Hamiltoniano de Dirac, procurando encontrar os parâmetros do problema de espalhamento de acordo com o método das ondas parciais.

Aqui no caso relativístico, temos que ambos o iso-spin $\frac{1}{2}\vec{\sigma}$ e o momento angular $\widehat{\mathcal{L}}_z = -i\partial_\theta$ não comutam com o Hamiltoniano da equação 1.13 [17]:

$$\left[\widehat{\mathcal{L}}_z, \mathcal{H}_0\right] = i\vec{\sigma} \times \vec{p}, \quad \left[\frac{1}{2}\widehat{\sigma}_z, \mathcal{H}_0\right] = -i\vec{\sigma} \times \vec{p}. \quad (2.28)$$

Logo, um estado não pode ser representado por esses valores. Porém, ao olharmos para a equação 2.28, notamos que o chamado "momento iso-spin-orbital" $\widehat{j} = \widehat{\mathcal{L}}_z + \frac{1}{2}\widehat{\sigma}_z$ em relação ao eixo z é conservado.

Com o objetivo de analisar alguns aspectos das componentes do spinor da onda cilíndrica, podemos definir um 'ansatz' e utilizá-lo na equação de Dirac:

$$\psi_m(\vec{r}) = \begin{pmatrix} F(r) \Theta_m(\theta) \\ iG(r) \Theta_{m+1}(\theta) \end{pmatrix}. \quad (2.29)$$

O fator i presente na equação 2.29 é escolhido em função de uma conveniência futura.

Definido $\psi_m(\vec{r})$, onde $\Psi(\vec{r}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(\vec{r})$, podemos voltar ao problema de auto-valor, porém para cada uma das m ondas parciais separadamente, ficando com $\mathcal{H}\psi_m(\vec{r}) = E\psi_m(\vec{r})$, com \mathcal{H} definido por $\mathcal{H}_0 + V(r)$, onde \mathcal{H}_0 é dado pela equação 1.13 e $V(r)$ é um potencial axialmente simétrico. Após escrever os operadores de momento em coordenadas

polares junto com o formalismo matricial e utilizar o método de separação de variáveis, podemos encontrar a solução de Θ_m como o que está representado na equação 2.4 e encontrar duas equações acopladas para $F(r)$ e $G(r)$:

$$\frac{dF(r)}{dr} - \frac{m}{r}F(r) + \frac{i}{\hbar v_F}(E - V(r))G(r) = 0 \quad (2.30)$$

e

$$\frac{dG(r)}{dr} + \frac{(m+1)}{r}G(r) - \frac{i}{\hbar v_F}(E - V(r))F(r) = 0. \quad (2.31)$$

No caso de ausência do potencial $V(r)$, podemos desacoplar o sistema formado pelas equações 2.30 e 2.31, obtendo:

$$\frac{d^2F(r)}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dF(r)}{dr} + \left(k^2 - \frac{m^2}{r^2}\right)F(r) = 0 \quad (2.32)$$

e

$$\frac{d^2G(r)}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{dG(r)}{dr} + \left(k^2 - \frac{(m+1)^2}{r^2}\right)G(r) = 0, \quad (2.33)$$

onde

$$k = \frac{|E|}{\hbar v_F}. \quad (2.34)$$

Após uma mudança de variáveis $\rho = kr$, podemos identificar facilmente que as soluções das equações 2.33 e 2.34 são as funções de Bessel $J_m(kr)$ e $Y_m(kr)$. Como explicado na seção 2.1, estamos interessados em analisar os efeitos do espalhamento a uma distância bem grande do centro espalhador, onde a função de onda certamente consiste em uma onda livre. Portanto, após a normalização e uma soma sobre os spinores de ondas cilíndricas $\psi_m(\vec{r})$, que são auto-vetores de $\hat{j} = \hat{\mathcal{L}}_z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z$ com auto-valor $j = m + \frac{1}{2}$ ¹, acabamos de encontrar a solução completa do problema de espalhamento:

¹mesmo $\psi_m(\vec{r})$ sendo auto-vetor de $\hat{j} = \hat{\mathcal{L}}_z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}_z$ com auto-valor $j = m + \frac{1}{2}$, permaneceremos com os somatórios a seguir sobre o número quântico m .

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (A_m J_m(kr) + B_m Y_m(kr)) \Theta_m(\theta) \\ \pm i \sum_{m=-\infty}^{\infty} (A_m J_{m+1}(kr) + B_m Y_{m+1}(kr)) \Theta_{m+1}(\theta) \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Utilizando as expressões assintóticas das funções de Bessel consistente com o limite assintótico da função de onda espalhada, podemos reescrever a equação 2.35 de uma forma já conhecida:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{r}} \begin{pmatrix} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \cos\left(kr - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m\right) \Theta_m(\theta) \\ \pm \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m \cos\left(kr - \frac{(m+1)\pi}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m\right) \Theta_{m+1}(\theta) \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

onde os *phase-shifts* δ_m são definidos pela equação 2.10.

Como discutido na seção anterior, sabemos que a solução completa do espalhamento representa a soma das funções de onda incidente e espalhada. A função de onda incidente já foi encontrada em $\Psi(\vec{r})$, já que ele representa a solução para um elétron livre na superfície do grafeno. Se tomarmos o eixo incidente do elétron como sendo o eixo x , ficamos com:

$$\Psi_{inc}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{ikx} \Rightarrow \Psi_{inc}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{ikr \cos(\theta)}. \quad (2.37)$$

Após a expansão em ondas parciais (Jacobi-Anger) feita na equação 2.8, seguida da aproximação de baixas energias (limite assintótico de $J_m(kr)$) ficamos com:

$$\Psi_{inc}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos\left(kr - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) e^{im\theta} \\ \pm \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{m+1} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \cos\left(kr - \frac{(m+1)\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Novamente, vemos que a diferença entre a função de onda incidente e a solução completa do espalhamento no limite assintótico é resumida basicamente ao fator de fase δ_m . Podemos dizer que toda a informação ocorrida no processo de espalhamento está contida nos *phase-shifts*.

Sabemos também que a solução completa do espalhamento consiste na adição da função de onda incidente (equação 2.37), já escolhida na direção x , com a espalhada. Uti-

lizando os mesmos argumentos apresentados anteriormente, podemos reescrever a equação 2.2 para o caso relativístico por simples analogia [3, 17]:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} e^{ikr \cos(\theta)} + f_k(\theta) \frac{1}{\sqrt{-2ir}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta_k} \end{pmatrix} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (2.39)$$

Mais uma vez, temos o acréscimo de um fator $\sqrt{-i} = e^{-i\pi/4}$ por simples conveniência.

Após introduzirmos as expansões 2.38 e 2.36 na equação 2.39, e lembrando da discussão anterior sobre o espalhamento não afetar a parte convergente da função de onda, podemos encontrar C_m e, em seguida, a expressão da amplitude de espalhamento $f_k(\theta)$ em função das ondas parciais [17, 20]:

$$f_k(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\delta_m} \sin(\delta_m) e^{im\theta}. \quad (2.40)$$

Essa expressão encontrada para a amplitude de espalhamento fornece os mesmo resultados encontrados nas equações 2.14 e 2.15 para as seções de choque total e transporte.

Voltando às equações diferenciais acopladas 2.30 e 2.31, podemos notar que as funções $F(r)$ e $G(r)$ podem ser relacionadas a partir de $F_m(r) = F_{-(m+1)}(r)$, o que se manterá para os *phase-shifts*, como veremos adiante. Portanto, se utilizarmos que $\delta_m = \delta_{-(m+1)}$ na equação 2.40:

$$f_k(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} 2e^{i\theta/2} \sum_{m=0}^{\infty} e^{i\delta_m} \sin(\delta_m) \cos\left(\left(m - \frac{1}{2}\right)\theta\right). \quad (2.41)$$

Na expressão 2.41 temos que a amplitude de espalhamento é sempre nula para $\theta = \pi$ ($\cos(m\pi - \frac{\pi}{2}) = 0$), nos trazendo como conclusão que o grafeno, no regime que estamos trabalhando, não possui retro-espalhamento, mais conhecido como *backscattering* (ver figura 2.4). Esse é um dos resultados que justifica sua excelente condutividade à temperatura zero.²

²Para detalhes mais aprofundados sobre ondas parciais no grafeno, veja as referências [3, 17, 20].

2.2.1 Disco com potencial finito

Voltando ao potencial representado pela equação 2.23 e ilustrado pela figura 2.3, teremos que aplicar a condição de contorno da continuidade do spinor $\Psi(r, \theta)$ em $r = a$. Porém, essa condição de contorno já fornece duas equações, o que é suficiente para encontrar a razão $-B_m/A_m$ e, conseqüentemente, os *phase-shifts* δ_m . Utilizando a expressão 2.35 nas duas regiões, teremos:

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{c} \sum_{m=-\infty}^{\infty} (A_m J_m(k_{\text{out}}a) + B_m Y_m(k_{\text{out}}a)) \Theta_m(\theta) \\ \lambda(E) i \sum_{m=-\infty}^{\infty} (A_m J_{m+1}(k_{\text{out}}a) + B_m Y_{m+1}(k_{\text{out}}a)) \Theta_{m+1}(\theta) \end{array} \right) \\ & = \left(\begin{array}{c} \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m J_m(k_{\text{in}}a) \Theta_m(\theta) \\ \lambda(E - V_0) i \sum_{m=-\infty}^{\infty} C_m J_{m+1}(k_{\text{in}}a) \Theta_{m+1}(\theta) \end{array} \right), \end{aligned} \quad (2.42)$$

o que nos permite encontrar a expressão para δ_m :

$$\delta_m = \arctan \left(\frac{\lambda(E) J_m(k_{\text{in}}a) J_{m+1}(k_{\text{out}}a) - \lambda(E - V_0) J_m(k_{\text{out}}a) J_{m+1}(k_{\text{in}}a)}{\lambda(E) J_m(k_{\text{in}}a) Y_{m+1}(k_{\text{out}}a) - \lambda(E - V_0) Y_m(k_{\text{out}}a) J_{m+1}(k_{\text{in}}a)} \right), \quad (2.43)$$

com

$$\begin{aligned} k_{\text{out}} &= |E|/\hbar v_F \\ k_{\text{in}} &= |E - V_0|/\hbar v_F \end{aligned} \quad (2.44)$$

e

$$\begin{aligned} \lambda(E) &= \text{sgn}(E) \\ \lambda(E - V_0) &= \text{sgn}(E - V_0) \end{aligned} \quad (2.45)$$

Agora, com as expressões 2.43, 2.44 e 2.45, é possível avaliar o comportamento das seções de choque diferencial, total ou de transporte (equações 2.16, 2.14 e 2.15, respectivamente) em função dos parâmetros do problema.

Podemos ver na figura 2.4 que, para um dado V_0 , a seção de choque diferencial tem seu valor máximo em $\theta = 0$, que é a direção original do feixe incidente, e se anula em $\theta = \pi$, confirmando a ausência de *backscattering*, que foi deduzida na equação 2.41. Além disso, vemos na figura 2.5 que a seção de choque de transporte é bem pequena para

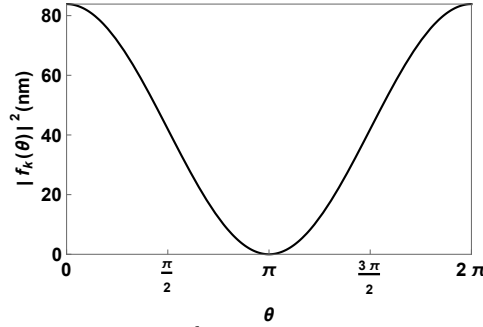


Figura 2.4: Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 20$ meV, $V_0 = 199$ meV e $a = 10$ nm em função do ângulo de espalhamento θ , considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco de potencial finito.

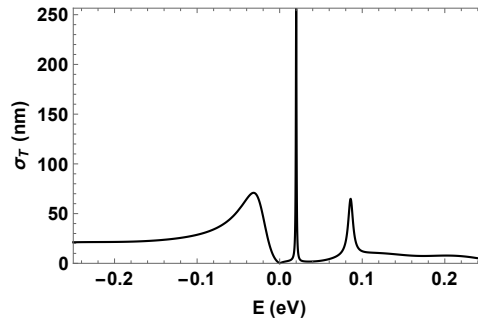


Figura 2.5: Seção de choque de transporte σ_T para $V_0 = -221$ meV e $a = 10$ nm em função da energia E do feixe incidente, considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco de potencial finito.

quase todo o espectro energético, mas para alguns valores específicos de E , temos um aumento bem significativo em σ_T . Essa situação é chamada de espalhamento ressonante, que discutiremos melhor no capítulo 3.

2.2.2 Disco impenetrável

A forma do potencial (equação 2.17 e figura 2.2) faz com que as duas componentes do spinor $\Psi(r, \theta)$ se anulem na interface $r = a$. Porém, utilizando a expressão 2.35 e igualando a zero, teremos duas equações semelhantes à equação 2.18, bastando somente uma das duas para encontrar δ_m , que assumirá a mesma forma do caso não-relativístico (equação 2.19). Uma vez com a expressão de δ_m , podemos avaliar a seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ (equação 2.16), a seção de choque total σ (equação 2.14) e a seção de choque de transporte σ_T , assim como fizemos no caso do disco potencial finito.

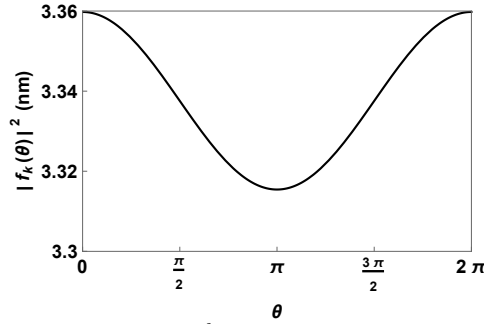


Figura 2.6: Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 20$ meV e $a = 1$ nm em função do ângulo de espalhamento θ , considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco impenetrável.

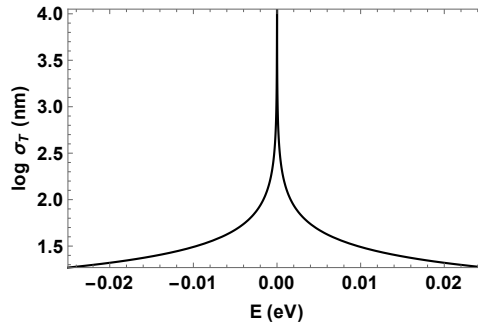


Figura 2.7: Seção de choque de transporte σ_T para $a = 1$ nm em função da energia E do feixe incidente, considerando as 6 primeiras ondas parciais para o caso de um disco impenetrável.

Vemos que, no caso do disco impenetrável, temos o aparecimento do *backscattering* (figura 2.6). Isso ocorre pois o disco impenetrável, descrito pela equação 2.17, quebra a simetria $\delta_m = \delta_{-(m+1)}$, que foi necessária para a dedução da equação 2.41. Essa simetria entre os *phase-shifts* provém da simetria entre as sub-redes triangulares do grafeno, discutida no capítulo 1. Mesmo com $\frac{d\sigma}{d\theta}(\theta = \pi) \neq 0$, ainda temos o valor máximo da seção de choque diferencial em $\theta = 0$, ou seja, na direção inicial do feixe incidente. Quanto ao comportamento da seção de choque de transporte σ_T , vemos que o cenário que chamamos de espalhamento ressonante acontece somente para $E = 0$.

2.2.3 Condutividade do grafeno

Após mostrarmos como obter a seção de choque de transporte no grafeno, podemos utilizar a teoria de transporte de Boltzmann para calcular a condutividade do grafeno a

baixas energias, onde temos $k_F a \ll 1$. Primeiramente, podemos expressar o tempo de relaxação $\tau(k)$ em função da seção de choque de transporte σ_T a partir da relação $1/\tau(k) = n_i v_F \sigma_T(k) / A_c$ [26], onde n_i é a concentração de impurezas adsorvidas à superfície do grafeno e A_c é a área da célula unitária da rede do grafeno. Utilizando novamente a teoria de transporte de Boltzmann, podemos expressar a condutividade $\sigma(k_F)$ em função de $\tau(k)$ [26], o que nos permite expressar $\sigma(k_F)$ em função da seção de choque de transporte:

$$\sigma(k_F) = e^2 v_F^2 \frac{\tau(k)}{A_c} \rho(E_F) = e^2 v_F \frac{\rho(E_F)}{n_i \sigma_T(k_F)}. \quad (2.46)$$

Na aproximação de baixas energias, podemos dizer que o *phase-shift* δ_0 associado à onda s é o dominante na contribuição para a seção de choque de transporte representada pela equação 2.15, o que nos dá $\sigma_T(k_F a \ll 1) \approx 4 \sin^2(\delta_0) / k_F$.

Impurezas ressonantes em $E \sim 0$ podem ser modeladas por discos impenetráveis, já que a seção de choque de ambos apresenta um pico em $E = 0$. Nesse caso, se considerarmos esse tipo de impurezas, podemos utilizar as formas assintóticas de J_m e Y_m na equação 2.19 para $k_F a \ll 1$ e obtermos uma expressão assintótica para o *phase-shift* dominante: $\delta_0 \approx \pi/2 \ln(k_F a)$ [3, 27]. Juntando estes resultados com as expressões da densidade de estados $\rho(E_F)$ e da área da célula unitária A_c do grafeno [2], podemos encontrar, para a condutividade do grafeno:

$$\sigma(k_F) = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\sqrt{3}a_0^2}{4\pi^2} \frac{k_F^2}{n_i} \ln^2(k_F a). \quad (2.47)$$

Como dito no capítulo 1, temos a grande necessidade de controlar a densidade eletrônica no grafeno, e isso pode ser feito através da porta voltagem de um transistor de efeito de campo (FET³), feito de óxido de silício. Sabendo que esse dispositivo pode ser aproximado para um capacitor de espessura b , podemos dizer através da eletrostática básica que

³do inglês *Field Effect Transistor*

o campo elétrico é dado por $E_{\text{cap}} = en/\epsilon_0\epsilon$, onde n é a densidade eletrônica na superfície do grafeno, que funciona como uma das placas do capacitor, e ϵ é a permissividade relativa do óxido de silício. O potencial da porta é relacionado com o campo do capacitor a partir de $E_{\text{cap}} = V_g/b$, o que nos dá para a densidade eletrônica $n = \epsilon_0\epsilon V_g/b = \alpha V_g$, onde α ($\simeq 7.2 \times 10^{10} \text{V}^{-1} \text{cm}^{-2}$) é um valor a partir dos valores da espessura do capacitor (~ 3000 nm) e da permissividade relativa do óxido de silício ($\epsilon = 3.9$). O momento de Fermi é obtido como $k_F = \sqrt{\alpha\pi V_g}$, um resultado a partir da contagem do número de estados no espaço \vec{k} com momento igual a k_F [3, 28]. A partir desse resultado, podemos substituir a expressão para k_F na equação 2.47 e obter:

$$\sigma(k_F) = \frac{e^2}{\hbar} \frac{3\sqrt{3}a_0^2}{4\pi} \frac{\alpha V_g}{n_i} \ln^2\left(\sqrt{\alpha\pi V_g} a\right). \quad (2.48)$$

O resultado da equação 2.48 é válido somente para quando o momento de Fermi é maior que $k_F \gtrsim \epsilon_{\text{min}}/\hbar v_F$ e mostra uma condutividade com uma dependência com a voltagem V_g . A seguir, temos uma figura que compara a equação 2.48 com os pontos experimentais obtidos, mostrando que a condutividade do grafeno é bem modelada pela presença de impurezas ressonantes.

Além do cálculo da condutividade do grafeno, veremos a utilização do método das ondas parciais no regime de espalhamento ressonante e na situação do *cloaking* da impureza nesse regime (capítulo 3). Além disso, no capítulo 4 veremos uma extensão desse método ao caso de espalhamento dependente de spin, mostrando a abordagem do problema de espalhamento eletrônico por um potencial dependente de spin.

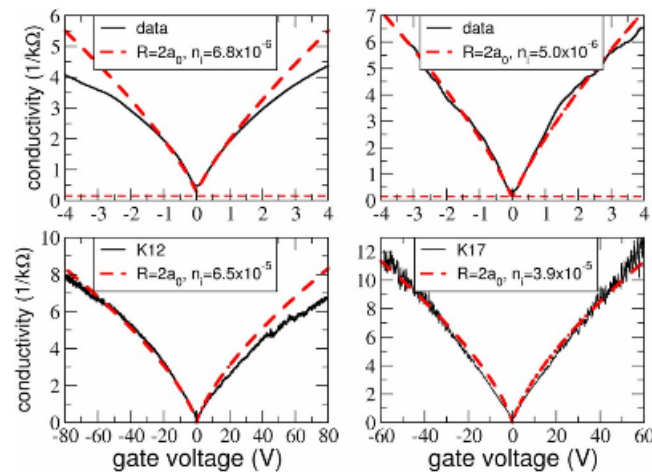


Figura 2.8: Condutividade do grafeno suspenso e não-suspenso em função de V_g . Imagens do topo: condutividade de grafeno suspenso de dois dispositivos diferentes. Dentre as imagens do topo, a da direita corresponde a um dispositivo com $\mu \sim 170000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, a uma densidade eletrônica $n = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, enquanto a da esquerda corresponde a um dispositivo com $\mu \sim 200000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$, a uma densidade eletrônica $n = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Imagens do fundo: condutividade do grafeno sobre óxido de silício, correspondente a dispositivos com $\mu \sim 10000 \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. Em todas as imagens foi utilizada a equação 2.48 para ajuste, com n_i sendo o único parâmetro utilizado. Nas legendas, a concentração de impurezas é por célula unitária [3].

Capítulo 3

Espalhamento ressonante e *cloaking*

As analogias entre luz e elétrons são conhecidas por originarem uma infinidade de fenômenos físicos interessantes em matéria condensada. Efeitos de interferência, tais como localização de Anderson [29] e ressonâncias Fano [30] são apenas alguns exemplos dos efeitos que têm sido observados tanto em matéria condensada quanto em sistemas ópticos. Na última década, o advento dos metamateriais e do isolamento do grafeno foram promovendo a descoberta de fenômenos fundamentais curiosos e dispositivos com base na analogia entre a luz e elétrons.

As excitações eletrônicas de baixa energia do grafeno são descritas por férmions de Dirac, o que nos leva à relação de dispersão linear, semelhante ao caso fotônico [31]. Essa semelhança entre os tópicos em questão tem sido explorada no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos em analogia com a fotônica, como divisores de feixes, guias de onda e interferômetros Fabry-Perot no grafeno balístico [32, 33]. Dispositivos baseados em grafeno análogos a aplicações ópticas fundamentadas em metamateriais, tais como lentes perfeitas, também foram propostos [34, 35].

Avanços no campo dos metamateriais [36] têm permitido o desenvolvimento de mantos eletromagnéticos para alcançar invisibilidade e, conseqüentemente, também têm estimulado a busca de seus análogos eletrônicos. Entre as formas existentes para alcançar a invisibilidade, pode-se destacar o método de transformação de coordenadas [37–39] e a técnica de espalhamento de cancelamento [40–47]. O método de transformação de coor-

denadas requer metamateriais com anisotropia e perfis não homogêneos, que são capazes de modificar a trajetória da radiação eletromagnética em torno de uma dada região do espaço, tornando-a invisível para um observador externo. Este método foi experimentalmente realizado pela primeira vez para micro-ondas [38], tendo sido estendido para frequências visíveis e infravermelhos [48, 49]. Extensões deste método para ondas materiais existem [50–53], provando que é possível redirecionar o fluxo de probabilidade em torno de um centro espalhador.

No entanto, assim como no caso eletromagnético, estes análogos eletrônicos necessitam de camadas de camuflagem com parâmetros de materiais peculiares, como potenciais com perfis anisotrópicos e/ou valores infinitos para a massa efetiva, impondo limitações para implementações práticas em sistemas de matéria condensada. Como alternativa, a técnica de cancelamento de espalhamento para ondas eletromagnéticas contornou muitos destes empecilhos em termos de requisitos de metamaterial. Utiliza-se uma camada plasmônica homogênea e isotrópica em que o vetor de polarização induzida está fora de fase em relação ao campo elétrico, de modo que a contribuição em fase dada pelo objeto camuflado pode ser parcialmente ou totalmente cancelada [40, 41, 44, 45]. A técnica de espalhamento de cancelamento foi experimentalmente implementada para micro-ondas [42, 46], sendo estendida para o caso acústico [54] e de ondas materiais [55–57].

Uma das propostas de *cloaking*, baseada na expansão de ondas parciais [55] e mais tarde estendida para grafeno [58], demonstra que nanopartículas adsorvidas em um semicondutor e com um tamanho comparável ao comprimento da onda incidente podem ser "invisíveis" para um feixe de elétrons incidentes [55]. Para conseguir este efeito a contribuição das duas primeiras ondas parciais deve desaparecer em simultâneo, de modo que a seção de choque de transporte possa ser menor do que 0,01% do que a original.

Nesse trabalho, procuramos atingir a camuflagem de um centro espalhador eletrônico colocando um envoltório com propriedades bem específicas ao redor dele, funcionando como uma capa de invisibilidade ao ocultar suas informações no processo de espalhamento.

Para ilustrar esse processo de camuflagem, podemos analisar a sequência de imagens mostrada a seguir (figura 3.1), que exemplifica o caso de um *cloaking* acústico.

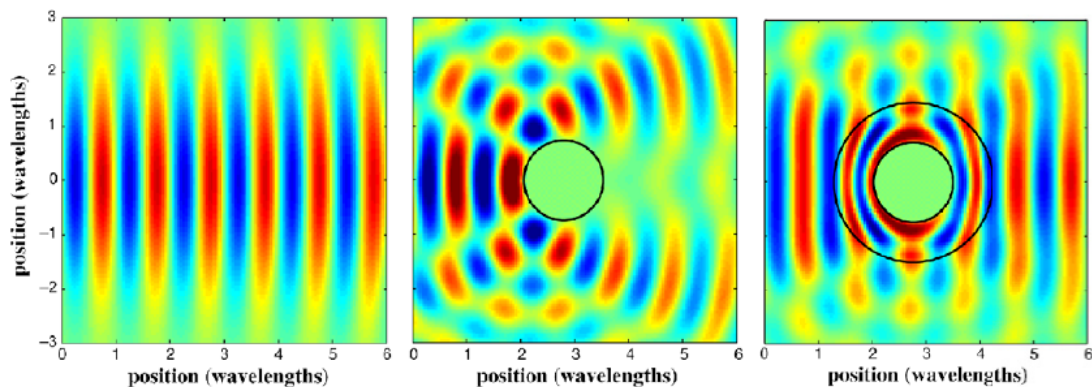


Figura 3.1: Ilustração de um *cloaking* acústico, estudado a partir da medida da pressão sonora [4].

Na primeira imagem, temos a ilustração de uma onda livre no espaço, sem a presença de um centro espalhador. Já na segunda, vemos o processo de espalhamento dessa onda através de um corpo qualquer, onde vemos que o feixe incidente que tínhamos inicialmente teve claramente seu "formato" modificado. Por fim, na terceira imagem, vemos a introdução de um invólucro ao redor do centro espalhador inicial. Além disso, vemos que a adição dessa "capa" faz com que a onda espalhada apresente a mesma forma da incidente, camuflando, assim, a informação do centro espalhador inicial, ou seja, realizando o *cloaking* do mesmo. Ao longo da apresentação dos resultados, vamos encontrar algumas das propriedades específicas desse "manto de invisibilidade" para encontrarmos o cenário de *cloaking* do centro espalhador inicial, que no nosso caso é uma impureza adsorvida na superfície do grafeno.

No capítulo 2, mais precisamente nas figuras 2.5 e 2.7, vemos que a seção de choque de transporte no grafeno para um problema de um disco de potencial, finito ou infinito, com raio a é naturalmente bem pequena ao longo do espectro energético do feixe, visto que os portadores de carga possuem alta mobilidade sobre sua superfície, como resultado da supressão do *backscattering*. Porém, para alguns valores de E , esses átomos adsorvidos

ou vacâncias, proporcionam um grande aumento de algumas ordens de magnitude em σ_T , proporcionando o cenário que chamamos de espalhamento ressonante (seção 3.1) perto do ponto de Dirac [3, 59], já que continuaremos a trabalhar com baixas energias.

Nesse capítulo, combinaremos a ideia de um *cloaking* eletrônico com as propriedades eletrônicas peculiares do grafeno, com o objetivo de propor um esquema eficiente para atingir a "invisibilidade eletrônica" de centros espalhadores ressonantes. Veremos que podemos mudar o cenário de espalhamento de uma situação ressonante para o de uma invisível com pequenas variações de potencial, fazendo uma analogia com a óptica e o comportamento "*comblike*" em centros espalhadores revestidos [60].

Para alcançar o cenário de camuflagem, vamos introduzir um anel de potencial ao redor das impurezas ou vacâncias ressonantes, que podem ser aproximadas para um disco de potencial V_0 ou infinito, respectivamente. Nas seções 3.2.1 e 3.2.2, variaremos o potencial do anel e seu raio externo com o objetivo de suprimir os efeitos dos centros espalhadores ressonantes no processo de espalhamento ($\sigma_T \sim 0$), tornando-os "invisíveis" ao feixe de elétrons incidente, procurando fazer uma drástica redução na seção de choque de transporte, já que manteremos o cenário de alta seção de choque de transporte para as impurezas iniciais.

3.1 Regime do espalhamento ressonante

3.1.1 Impurezas ou defeitos modelados como um disco de potencial finito

Adátomos na superfície do grafeno podem ser modelados de acordo com o esquema representado na figura 2.3, para o qual já temos um problema de espalhamento bem estruturado na seção 2.2.1.

A partir dos resultados encontrados nas equações 2.43, 2.44 e 2.45 no espalhamento em um disco de potencial V_0 , podemos avaliar o problema a partir das seções de choque diferencial, total ou de transporte (equações 2.16, 2.14 e 2.15, respectivamente). Porém,

para entendermos melhor o regime de espalhamento ressonante, vamos, primeiramente, observar o comportamento dos *phase-shifts*.

Para um elétron incidente com energia E sobre o potencial mostrado na figura 2.3, podemos modificar o potencial V_0 para produzir um espalhamento ressonante, que, efetivamente, faz com que o disco funcione como uma armadilha para o elétron, intensificando a seção de choque. Em relação aos *phase-shifts*, observamos esse comportamento para os $\delta_m = \pm\pi/2$, como podemos ver na figura 3.2

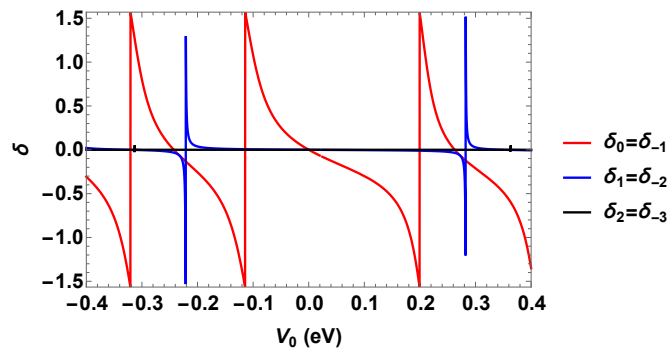


Figura 3.2: *Phase-shifts* para $E = 0.02$ eV e $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0 .

Podemos ver na figura 3.2 os *phase-shifts* correspondentes às 6 primeiras ondas parciais, já que temos a simetria $\delta_m = \delta_{-(m+1)}$. Além disso, vemos também que a maior contribuição vem dos *phase-shifts* de ordem $\delta_0 = \delta_{-1}$ para baixas energias, que é o regime trabalhado. Por último, podemos notar as diversas ressonâncias dos diferentes δ_m ao longo da variação do potencial do disco V_0 .

Depois da análise dos δ_m , podemos estudar o comportamento da seção de choque de transporte σ_T e vemos que os picos da figura 3.3 ocorrem exatamente nos mesmos valores de V_1 correspondente às ressonâncias dos *phase-shifts*, vistos na figura 3.2, caracterizando o regime de espalhamento ressonante.

Para 199 meV e -114 meV como valores do potencial do disco, vemos picos largos na seção de choque de transporte por conta das ressonâncias dos *phase-shifts* de menor ordem, δ_0 e δ_{-1} , que são iguais. Em contrapartida, para 282 meV e -221 meV vemos

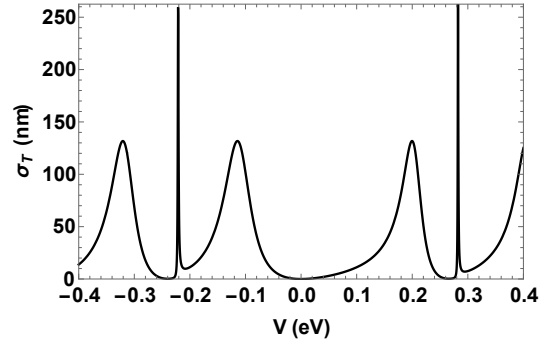


Figura 3.3: Seção de choque de transporte σ_T para $E = 0.02$ eV e $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0 considerando as 6 primeiras ondas parciais.

picos maiores, porém mais estreitos, que estão associados aos modos δ_1 e δ_{-2} , que são os próximos na ordem de contribuição e também são iguais. Além disso, podemos perceber que os picos associados aos modos $m = 1, -2$ apresentam assimetria, comportamento semelhante a uma ressonância do tipo Fano [30].

Agora, analisando a seção de choque diferencial (equação 2.16), podemos observar a distribuição angular do processo de espalhamento. Mesmo variando o potencial V_0 na figura 3.4, podemos constatar o que já foi demonstrado na equação 2.41: a ausência de *backscattering*. Além disso, podemos constatar a diferença entre as intensidades de espalhamento de acordo com a direção observada em relação ao feixe incidente. Esse fenômeno se intensifica no regime ressonante, onde vemos um aumento em todas as direções, mas com um valor diferente para a seção de choque diferencial em cada uma delas, o que nos dá uma ideia de algum tipo de espalhamento direcional.

Após o comportamento angular, vamos investigar o efeito das mudanças no tamanho do disco a no comportamento dos δ_m . Olhando para as figuras 3.5 e 3.2, concluímos que o aumento na ordem de grandeza do raio do potencial traz, para uma energia fixa E , as ressonâncias dos *phase-shifts* para valores menores do potencial V_0 .

3.1.2 Vacâncias: uma nova fonte de espalhamento ressonante

Outra possibilidade para induzir espalhamento ressonante no grafeno é a criação de vacâncias que proporcionam um aumento do modo $m = 0$ das ondas parciais [61–63].

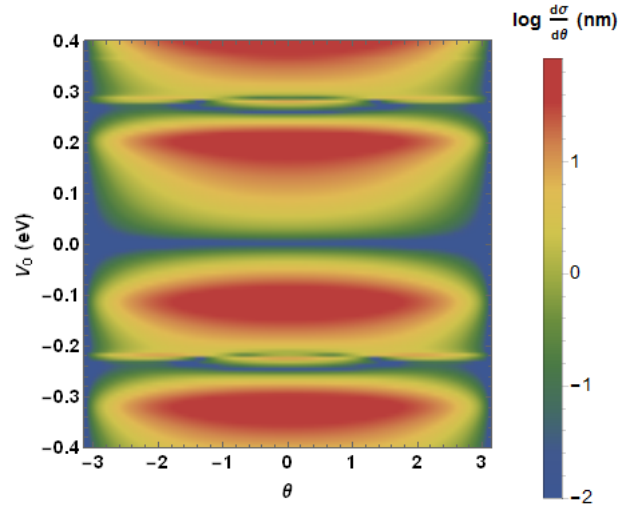


Figura 3.4: Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 0.02$ eV e $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0 considerando as 6 primeiras ondas parciais.

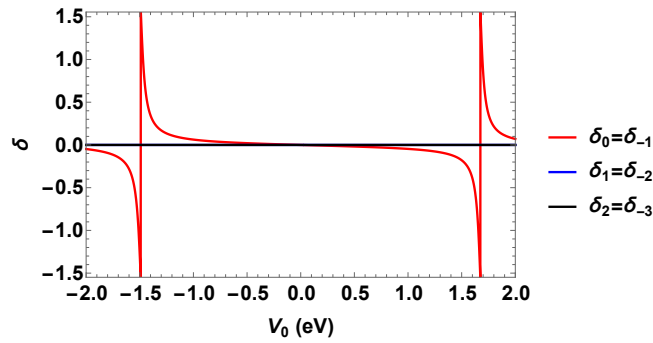


Figura 3.5: *Phase-shifts* para $E = 0.02$ eV e $a = 1$ nm no caso de espalhamento por um disco com potencial V_0 .

Essas vacâncias podem ser conseguidas através de irradiação de íons de alta energia, um método que permite a incorporação controlada de centros espalhadores ressonantes, possibilitando a mudança de propriedades elétricas, magnéticas e mecânicas do grafeno [64, 65].

Uma vacância no grafeno consiste em um "buraco" com bordas *zig-zag* [20, 66], que pode ser modelada como o disco impenetrável esquematizado na figura 2.2, para o qual já temos a equação que define o *phase-shift* (equação 2.19, com $k = |E|/\hbar v_F$). Como discutido na seção 2.2.2, neste caso temos a quebra de simetria de sub-rede ($\delta_m \neq \delta_{-(m+1)}$), o que resulta em uma maior contribuição do *phase-shift* δ_0 para a seção de choque [65],

como podemos ver na figura 3.6.

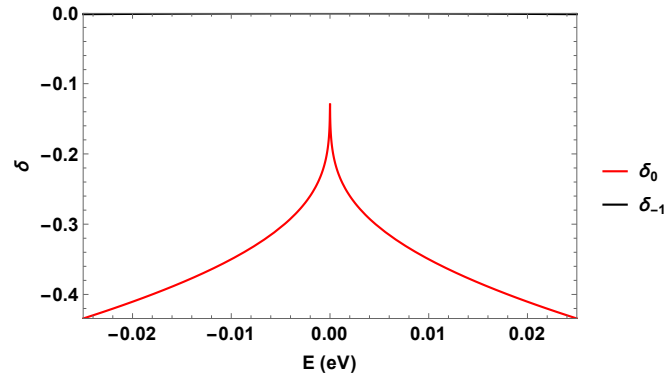


Figura 3.6: *Phase-shifts* para $a = 10$ nm no caso de espalhamento por um disco impenetrável.

Por fim, vimos também na seção 2.2.2 que o único cenário ressonante existente ocorre para $E \rightarrow 0$ (figura 2.7).

3.2 *Cloaking*

Uma das propostas experimentais para um *cloaking* já conhecidas é um disco de potencial eletrostático imerso em um gás de elétrons bidimensional, funcionando como um centro espalhador ou como uma nano-partícula bidimensional efetiva, onde, junto a isso, temos um outro anel de potencial, que é utilizado para implementar a situação de *cloaking*, concluindo que nano-partículas presentes em um material semiconductor podem ser "invisíveis" para um feixe de elétrons incidentes [55]. Essa mesma ideia foi estendida ao grafeno [58] junto com a aproximação de ondas parciais, possibilitando estudar cenários que facilitem a situação da "invisibilidade" das impurezas que induzem o cenário de espalhamento ressonante.

Nesse trabalho, também mostraremos a camuflagem de impurezas ressonantes. Modelando-as como um disco de potencial finito ou infinito, utilizaremos o método das ondas parciais, a fim de reduzir a seção de choque de transporte σ_T na situação de ressonância, onde vemos o seu aumento em algumas ordens de grandeza.

3.2.1 Impurezas ou defeitos modelados como um disco de potencial finito

Como é difícil isolar uma única impureza, propomos simular uma impureza ressonante através de um disco de potencial V_0 de alguns nanômetros de raio. Em seguida, manteremos o potencial original V_0 (agora chamado de V_1) e incluiremos um novo potencial V_2 em um anel de raios a (agora chamado de R_1) e R_2 funcionando como um "manto de invisibilidade", a fim de suprimir os efeitos do cenário ressonante (ver figura 3.7). A ideia básica é variar os valores de V_2 de maneira que a contribuição dos *phase-shifts* seja reduzida drasticamente, a fim de reduzir a seção de choque de transporte. Diferentemente do caso do gás de elétrons bidimensional [55], onde temos que modificar V_1 e V_2 para obtermos $\delta_0 = \delta_1 = 0, \pm\pi$, que são os principais contribuintes nessa situação, no caso do grafeno, será suficiente diminuir a contribuição de apenas um dos principais *phase-shifts*, que são os $m = 0, -1$, pois estes são iguais por consequência da simetria de sub-rede.

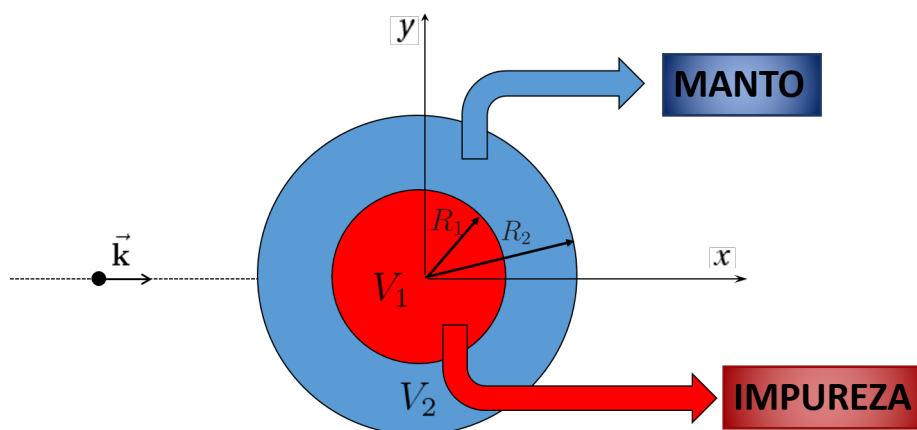


Figura 3.7: Esquema dos potenciais no problema do *cloaking*.

Como ilustrado na figura 3.7, devemos escrever a função de onda segundo a equação 2.35 para três regiões, ao invés de duas. Logo, também teremos duas condições de contorno de fronteira ao invés de uma.

Fora dos potenciais (região 3), para $r > R_2$, temos

$$\Psi_m^3(r, \theta) = A_m \begin{pmatrix} J_m(k_3 r) e^{im\theta} \\ i\lambda_3 J_{m+1}(k_3 r) e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix} + B_m \begin{pmatrix} Y_m(k_3 r) e^{im\theta} \\ i\lambda_3 Y_{m+1}(k_3 r) e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

enquanto que para $R_2 < r < R_1$ (região 2), temos

$$\Psi_m^2(r, \theta) = C_m \begin{pmatrix} J_m(k_2 r) e^{im\theta} \\ i\lambda_2 J_{m+1}(k_2 r) e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix} + D_m \begin{pmatrix} Y_m(k_2 r) e^{im\theta} \\ i\lambda_2 Y_{m+1}(k_2 r) e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

e, por fim, para $r < R_1$ (região 1), ficamos com

$$\Psi_m^1(r, \theta) = E_m \begin{pmatrix} J_m(k_1 r) e^{im\theta} \\ i\lambda_1 J_{m+1}(k_1 r) e^{i(m+1)\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= |E - V_1|/\hbar v_F \\ k_2 &= |E - V_2|/\hbar v_F \\ k_3 &= |E|/\hbar v_F \end{aligned} \quad (3.4)$$

e

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \text{sgn}(E - V_1) \\ \lambda_2 &= \text{sgn}(E - V_2) . \\ \lambda_3 &= \text{sgn}(E) \end{aligned} \quad (3.5)$$

As condições de contorno $\Psi_m^3(R_2, \theta) = \Psi_m^2(R_2, \theta)$ e $\Psi_m^1(R_1, \theta) = \Psi_m^2(R_1, \theta)$ dão origem a um sistema de quatro equações. Podemos resolvê-lo e determinar a razão B_m/A_m e, conseqüentemente, os *phase-shifts* δ_m , de acordo com a equação 2.10.

Primeiramente, escolhemos V_1 com o objetivo de maximizar a seção de choque de transporte inicial, o que está relacionado com o espalhamento ressonante através do disco de raio R_1 . Depois disso, para alcançar os efeitos do *cloaking*, vamos variar o potencial do anel V_2 e seu raio R_2 a fim de obter uma seção de choque efetivamente nula. Vamos começar com a situação demonstrada na figura 3.4 junto com a análise feita na seção 3.1.1. A partir dela, trabalharemos com o anel de potencial e veremos o quanto conseguimos suprimir da informação dos centros espalhadores ressonantes nessas situações particulares.

Dentre as situações ressonantes apresentadas na seção 3.1.1 temos que o cenário mais eficiente também ocorre para $V_1 = -114$ meV. Para analisá-lo, utilizaremos um parâmetro chamado de eficiência do *cloaking*, que consiste na razão entre seções de choque de transporte com e sem o anel de potencial (σ_T/σ_{T0}).

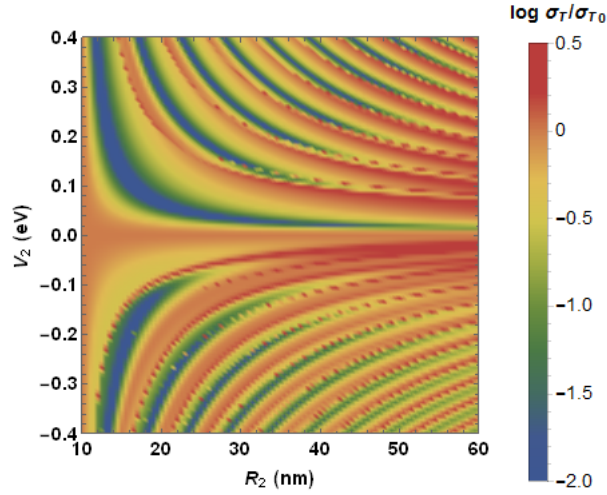


Figura 3.8: Eficiência do *cloaking* de um disco para $E = 0.02$ eV, $R_1 = 10$ nm e $V_1 = -114$ meV considerando as 6 primeiras ondas parciais.

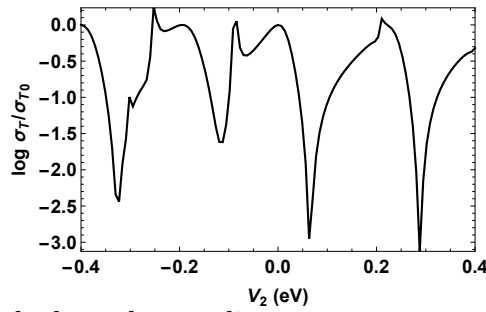


Figura 3.9: Eficiência do *cloaking* de um disco nos mesmos parâmetros que a figura 3.8 com $R_2 = 20$ nm.

Obtemos uma máxima eficiência do *cloaking* na ordem de 10^{-5} para $V_2 = 399$ meV e $R_2 = 11,7$ nm, fazendo necessário um anel de potencial com espessura de 1,7 nm. Apesar do fato de geometrias com estes tamanhos serem difíceis de fabricar, felizmente existem algumas regiões no espaço de parâmetros que proporcionam uma camuflagem muito eficaz para valores mais realistas de R_2 e V_2 , visto que conseguimos reduzir a seção de choque de transporte de $\sigma_{T0} = 131,8$ nm para o centro espalhador ressonante ($V_2 = 0$)

em até 3 ordens de grandeza para $R_2 = 20$ nm, ilustrando um cenário em que a impureza ressonante e o manto estão dentro das possibilidades experimentais [58], já que é necessário trabalhar com tamanhos da ordem de dezenas de nanômetros.

Na figura 3.9, podemos ver grandes oscilações no valor da seção de choque de transporte em função do potencial do anel, onde vemos uma mudança do regime do espalhamento eletrônico, do ressonante para a camuflagem, simplesmente com a mudança do valor do potencial V_2 .

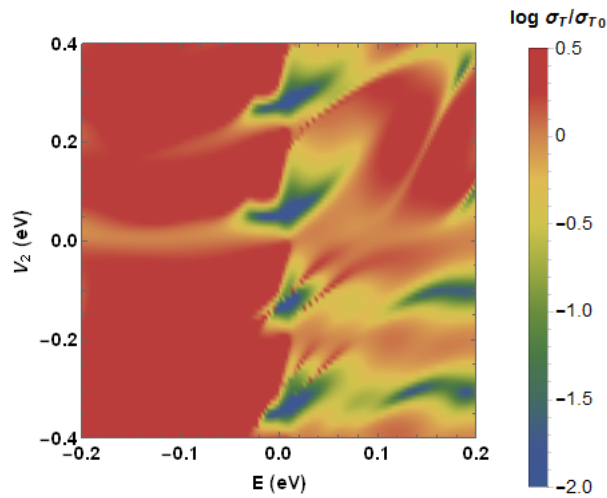


Figura 3.10: Eficiência do *cloaking* de um disco para $R_1 = 10$ nm, $R_2 = 20$ nm e $V_1 = -114$ meV considerando as 6 primeiras ondas parciais.

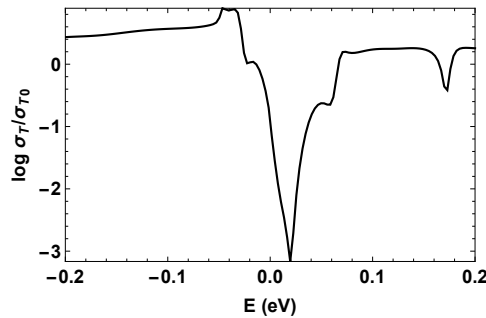


Figura 3.11: Eficiência do *cloaking* de um disco nos mesmos parâmetros que a figura 3.10 com $V_2 = 286$ meV.

Agora, para um valor fixo de R_2 , vamos variar a energia E do feixe incidente junto com o potencial do anel V_2 . Feito isso, podemos ver na figura 3.10 que o *cloaking* é mais

eficiente a baixas energias, perto do ponto de Dirac, que é uma das condições adotada em todo o trabalho. Além disso, também vemos que o *cloaking* é mais favorecido para valores positivos de E , visto que não vemos quase nenhuma situação de "invisibilidade" para o espectro negativo. Por fim, se fixarmos V_2 , podemos ver na figura 3.11 que a camuflagem em função da energia tem seu valor mínimo exatamente em $E = 0.02$ meV, que era o valor de energia que utilizamos no cenário ressonante.

Agora, vamos analisar o comportamento angular do espalhamento a partir da seção de choque diferencial, dada pela equação 2.16 em função dos *phase-shifts* δ_m , que são encontrados a partir do sistema formado pelas condições de contorno. Para isso, vamos mapear $\frac{d\sigma}{d\theta}$ em função do ângulo de espalhamento θ e do potencial do anel V_2 .

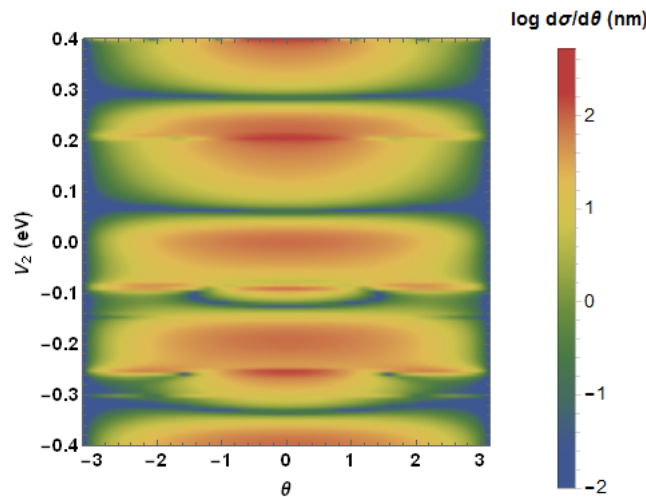


Figura 3.12: Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 0.02$ eV, $R_1 = 10$ nm, $V_1 = -114$ meV e $R_2 = 20$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais no caso do *cloaking* de um disco.

Em uma análise preliminar da figura 3.12, podemos ver que ainda possuímos o fenômeno chamado anteriormente de espalhamento direcional, quando temos diferenças significativas ao longo dos valores da seção de choque diferencial de acordo com o ângulo do espalhamento θ . Porém, no cenário do *cloaking*, isso é muito mais interessante, pois nos permite suprimir a informação fornecida pelo centro espalhador inicial de acordo com a direção através da qual olhamos para o feixe espalhado. Por exemplo, na figura 3.12, onde

escolhemos a situação ressonante para $V_1 = -114$ meV, vemos diferença nos valores de $\frac{d\sigma}{d\theta}$ em até quatro ordens de grandeza para um dado valor de V_2 . Em outras situações de espalhamento ressonantes apresentadas anteriormente também podemos ver diferença de acordo com o ângulo de espalhamento, mas de uma maneira menos expressiva. Por fim, podemos ver que a manutenção da simetria entre as sub-redes ($\delta_m = \delta_{-(m+1)}$) nos leva, mais uma vez, à ausência de retro-espalhamento, já que a cor azul na figura 3.12 implica $\log \frac{d\sigma}{d\theta} \leq -2$.

3.2.2 Vacâncias

Como a ressonância no caso do espalhamento sobre uma vacância ocorre para $E = 0$ (figura 2.7), trabalharemos com a energia E do feixe incidente perto do ponto de Dirac, onde ainda temos um alto valor para a seção de choque de transporte σ_T . Além disso, podemos utilizar tamanhos menores para o raio R_1 do disco impenetrável, pois, do ponto de vista experimental, podemos alcançar vacâncias da ordem de 1 nm de forma controlada.

Similar ao que foi feito anteriormente, manteremos o disco impenetrável e incluiremos um novo potencial V_2 em um anel de raios R_1 e R_2 ($R_2 > R_1$) e o utilizaremos para camuflar o centro espalhador, a fim de reduzir a seção de choque de transporte ($\sigma_T \sim 0$). Porém, por conta da quebra da simetria de sub-rede ($\delta_m \neq \delta_{-(m+1)}$), modificaremos os valores de V_2 e R_2 para atingir $\delta_0 = 0, \pm\pi$, já que este modo é o que mais contribui para o processo do espalhamento.

Também teremos duas condições de contorno: $\Psi_m^3(R_2, \theta) = \Psi_m^2(R_2, \theta)$ e $\Psi_m^2(R_1, \theta) = \Psi_m^1(R_1, \theta) = 0$ que nos levam a um sistema de equações que nos permite encontrar a razão B_m/A_m , e, conseqüentemente, os *phase-shifts* δ_m .

Nesse caso, o comportamento da seção de choque de transporte é bem similar ao analisado anteriormente na seção 3.2.1. A eficiência da camuflagem em função de V_2 e R_2 também será mais eficiente para um anel de potencial com espessura entre 1 – 5 nm, que são bem difíceis de implementar. Porém, a figura 3.13 mostra cenários de um *cloaking*

bem eficiente para anéis mais espessos, com $R_2 \sim 10 - 20$ nm. Na figura 3.14, também em analogia com o caso anterior, também vemos grandes oscilações no valor de σ_T , indo de um cenário de forte espalhamento para uma omissão do centro espalhador, com R_2 fixo e igual a 10 nm e variações em V_2 .

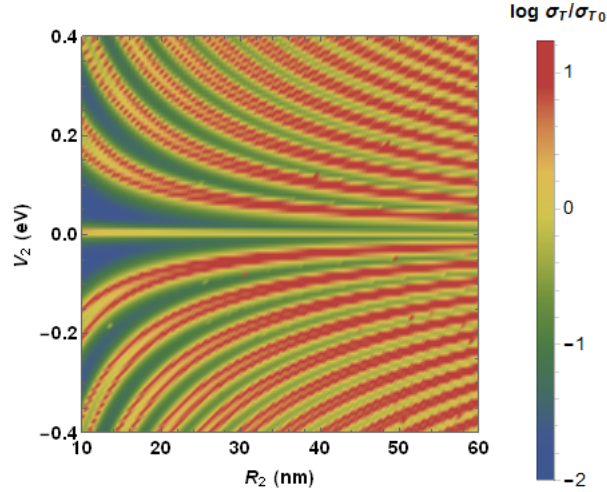


Figura 3.13: Eficiência do *cloaking* de uma vacância para $E = 2$ meV e $R_1 = 1$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais.

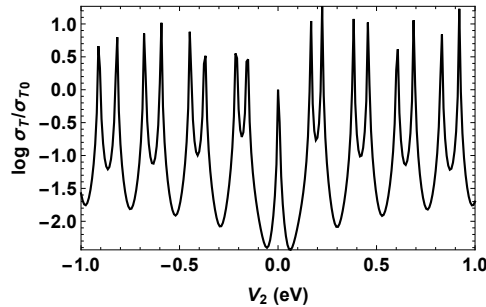


Figura 3.14: Eficiência do *cloaking* de uma vacância para $E = 1$ meV, $R_1 = 1$ nm e $R_2 = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais.

Esta "proximidade" entre estados de forte espalhamento com invisíveis também existe em sistemas de fotônica, onde a seção de choque de espalhamento de multi-camadas de capas plasmônicas podem apresentar esse chamado comportamento "*comblike*" [60]. No nosso trabalho, temos um comportamento semelhante na seção de choque de transporte em função do potencial externo, e não como uma função do comprimento de onda

incidente, como no caso fotônico. Este resultado permite modificar drasticamente o espalhamento de elétrons no grafeno, variando um parâmetro externo.

Uma importante diferença entre os casos do disco e da vacância é a dependência da eficiência do *cloaking* com a energia E . No primeiro cenário, vimos a redução da seção de choque de transporte em 3 ordens de grandeza para um valor específico de energia onde a ressonância estava localizada. No caso da vacância, a ressonância está sempre situada no ponto de Dirac e a camuflagem do centro espalhador ocorre somente nas proximidades de $E = 0$, como podemos ver na figura 3.15

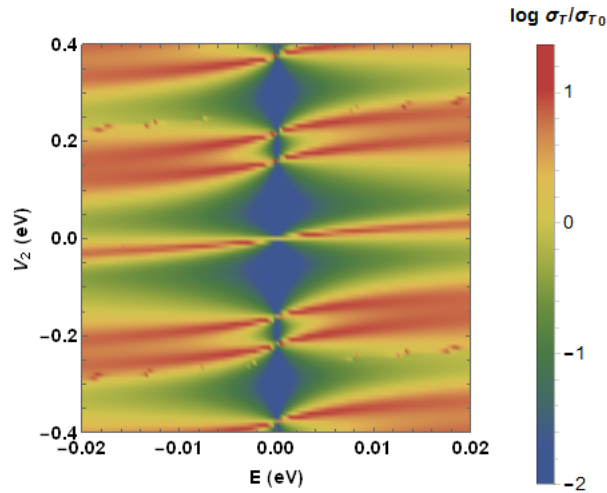


Figura 3.15: Eficiência do *cloaking* de uma vacância para $R_1 = 1$ nm e $R_2 = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais.

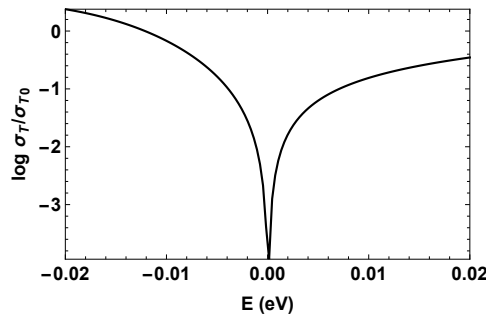


Figura 3.16: Eficiência do *cloaking* de uma vacância nos mesmos parâmetros que a figura 3.15 com $V_2 = 87$ meV.

Para energias bem próximas do ponto de Dirac, o *cloaking* pode ser bem eficiente, como mostrado na figura 3.16. Porém, para os valores de energia discutidos no caso

anterior, a seção de choque de transporte apresenta uma redução de apenas 10% do seu valor original, sem o anel de potencial.

Considerando apenas a primeira onda parcial, é possível obter uma expressão simplificada para a situação de *cloaking* máximo ($\delta_0 = 0$) no ponto de Dirac ($E = 0$). A condição se reduz a

$$J_1(x) Y_0(\alpha x) - J_0(\alpha x) Y_1(x) = 0, \quad (3.6)$$

onde $x = \frac{|V_2 R_2|}{\hbar v_F}$ e $\alpha = \frac{R_1}{R_2}$. A equação 3.6 é satisfeita por uma sequência de valores de x para um dado valor $\alpha < 1$. Tomando limite $x \gg 1$, a equação 3.6 assume a forma

$$\cos[x(1 - \alpha)] \approx 0, \quad (3.7)$$

cuja solução é

$$x = \frac{(2n + 1)\pi}{2(1 - \alpha)}, \quad (3.8)$$

com $n = 0, 1, 2, \dots$, apresentando um resultado consistente com as figuras 3.13 e 3.15.

Novamente, vamos finalizar a análise pela distribuição angular do espalhamento através do estudo da seção de choque diferencial, dada pela equação 2.16.

Na figura 3.17 vemos novamente a permanência do *backscattering*, consequência direta de $\delta_0 \neq \delta_{-1}$. Uma outra diferença em relação ao caso anterior é a perda da "simetria de espelho" em relação à linha $\theta = 0$. Porém, mesmo com essas duas diferenças bem significativas, continuamos com o chamado espalhamento direcional, ou seja, grandes diferenças entre valores da seção de choque diferencial ao longo da variação de θ , mas com um certo grau de aleatoriedade, visto que a distribuição angular não apresenta nenhum padrão aparente.

Ao longo da seção 3.2, mostramos como obter o *cloaking* de impurezas ressonantes em função dos parâmetros de cada uma das situações apresentadas, disco de potencial e

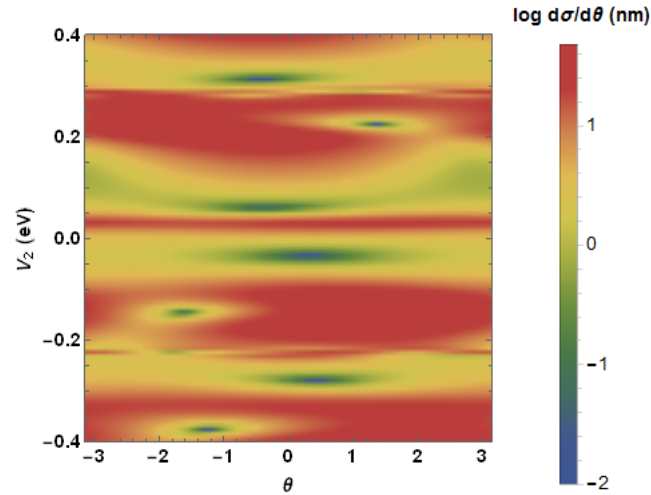


Figura 3.17: Seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\theta}$ para $E = 20$ meV, $R_1 = 1$ nm e $R_2 = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais no caso do *cloaking* de uma vacância.

vacância. Mostramos também que uma simples variação de potencial pode levar o sistema da situação de camuflagem de volta para o regime de espalhamento ressonante. Além desses aspectos analisados, é possível fazer uma abordagem mais profunda em cada caso a fim de investigar a existência de uma relação entre os parâmetros da impureza ressonante e do "manto de invisibilidade" que possa levar à situação de *cloaking* e também mostrar que esses resultados são robustos sob a presença de desordem no potencial aplicado [14].

Capítulo 4

Espalhamento dependente de spin

A spintrônica busca a utilização do grau de liberdade do spin dos elétrons para novas maneiras de armazenamento de informação, controle do fluxo eletrônico e fabricação de portas lógicas [67]. Atualmente, existe um grande interesse em dispositivos lógicos de spin [68, 69] para alta velocidade, baixo consumo de energia, e transistores de spin [70] para reconfiguração lógica. Para esse propósito, um grande desafio é desenvolver um canal de transporte de spin adequado com significativos "tempo de vida" e comprimento de difusão do spin. O grafeno é um material muito promissor para ser utilizado como um canal de spin, visto que o transporte de spin acontece em temperatura ambiente com comprimentos de difusão de vários micrômetros [71–76]. Além disso, o grafeno tem muitas propriedades físicas interessantes que também o tornam muito atraente para a spintrônica, incluindo concentração de portadores controlável a partir de portas de potencial e alta mobilidade eletrônica [2, 28].

Na última década, houve vários avanços significativos no ramo da spintrônica no grafeno. Entre elas, podemos citar, através da indução de impurezas magnéticas no grafeno, a observação do efeito Hall de spin [77]. Propriedades dependentes de spin podem ser introduzidas no grafeno de várias formas, entre elas a deposição de adátomos magnéticos [78] e as junções ferromagneto/grafeno (F/Gr), sendo estas últimas muito utilizadas no estudo de injeção de spin no grafeno [79]. Além dos já citados, um dos principais segmentos da spintrônica é o estudo da relaxação de spin, sendo seu estudo realizado para uma

monocamada de grafeno ou para duas camadas [74, 75] e também a partir do regime de espalhamento ressonante por impurezas magnéticas [80].

A questão de fazer o grafeno ser magnético, ou somente introduzir momentos magnéticos em um primeiro momento, é de grande importância, principalmente com o objetivo de controlar o magnetismo através de um parâmetro externo, como uma variação de potencial ou dopagem, por exemplo. Atualmente, existem muitos estudos teóricos e experimentais a respeito de momentos magnéticos no grafeno como resultado de vacâncias [81–83], átomos adsorvidos na superfície do grafeno (hidrogênio e flúor) [81, 83–86], átomos pesados (elementos $3d$, $4d$ e $5d$) [87, 88] e dopagem molecular [86, 89].

O acoplamento spin-órbita é responsável por inibir efeitos de coerência de spin, sendo normalmente responsável pelo processo de relaxação spin. Porém, esse acoplamento também pode levar a muitos fenômenos interessantes, como o efeito Hall de spin [90], o efeito Hall quântico de spin [78, 91], efeito Hall quântico anômalo [92], tunelamento de Klein dependente de spin [93], entre outros.¹

Nesse capítulo, veremos uma extensão do problema de um elétron livre na superfície do grafeno (seção 1.4) e do método das ondas parciais no caso relativístico (seção 2.1) a partir da inclusão do grau de liberdade do spin. Além disso, como vemos que os efeitos de spin em um problema de espalhamento podem ser observados através de impurezas magnéticas, consideraremos um adátomo modelado como um efeito Zeeman local, tratando o problema de espalhamento eletrônico através desse potencial dependente de spin.

4.1 Inclusão do grau de liberdade do spin

No caso da equação de Dirac, a principal diferença entre o caso não relativístico é que o operador Hamiltoniano, representado na equação 1.13, já apresenta um iso-spin associado a cada uma das componentes da função de onda $\Psi(\vec{r})$. Portanto, a inclusão da

¹Para mais aspectos teóricos ou experimentais relacionados à spintrônica no grafeno, veja a referência [94].

dependência do spin faz com que a função de onda procurada como auto-valor do Hamiltoniano dependente de spin possua quatro componentes.

4.1.1 Elétrons livres no grafeno

Como recordado anteriormente, para o grafeno puro, temos o seguinte Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}_0 = v_F \begin{pmatrix} 0 & (\widehat{p}_x - i\widehat{p}_y) \\ (\widehat{p}_x + i\widehat{p}_y) & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

onde $\widehat{p}_i = -i\hbar\partial_{x_i}$. Escolhendo os auto-estados da componente \widehat{S}_z como base, faremos o produto tensorial de I na equação 4.1 a fim de encontrarmos o operador Hamiltoniano após a inclusão do grau de liberdade do spin. Feito isso, encontramos:

$$\mathcal{H}_{0\text{spin}} = I \otimes \mathcal{H}_0 = v_F \begin{pmatrix} 0 & (\widehat{p}_x - i\widehat{p}_y) & 0 & 0 \\ (\widehat{p}_x + i\widehat{p}_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (\widehat{p}_x - i\widehat{p}_y) \\ 0 & 0 & (\widehat{p}_x + i\widehat{p}_y) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

Vemos que a adição explícita do operador de spin faz com que a dimensão do Hamiltoniano aumente. Intuitivamente, agora temos um spinor de duas componentes para cada uma das componentes de spin, o que resulta em função de onda $\Psi(\vec{r})$ de quatro componentes, como já havíamos discutido anteriormente. Utilizando o operador encontrado na equação 4.2, agora chamado de \mathcal{H}_0 , podemos montar o problema de auto-valor $\mathcal{H}_0\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$:

$$\begin{aligned} v_F \begin{pmatrix} 0 & (\widehat{p}_x - i\widehat{p}_y) & 0 & 0 \\ (\widehat{p}_x + i\widehat{p}_y) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(\widehat{p}_x - i\widehat{p}_y) \\ 0 & 0 & -(\widehat{p}_x + i\widehat{p}_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_A^+(\vec{r}) \\ \psi_B^+(\vec{r}) \\ \psi_A^-(\vec{r}) \\ \psi_B^-(\vec{r}) \end{pmatrix} &= \\ &= E \begin{pmatrix} \psi_A^+(\vec{r}) \\ \psi_B^+(\vec{r}) \\ \psi_A^-(\vec{r}) \\ \psi_B^-(\vec{r}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Resolvendo a equação 4.3, a fim de encontrar os auto-vetores $\Psi(\vec{r})$ e seus auto-valores E correspondentes, encontramos, já após a normalização:

$$\begin{aligned} \text{spin up: } E = \pm v_F |\vec{p}| \rightarrow \Psi(\vec{r}) |+\rangle &= \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\theta_{\vec{p}}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \text{spin down: } E = \pm v_F |\vec{p}| \rightarrow \Psi(\vec{r}) |-\rangle &= \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \pm e^{i\theta_{\vec{p}}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde $\theta_{\vec{p}} = \arg(p_x + ip_y)$ e os sinais de positivo e negativo presentes na energia e na função de onda de cada uma das componentes de spin encontradas são correspondentes aos elétrons ($E > 0$) e aos buracos ($E < 0$).

4.1.2 Ondas parciais

Após encontrarmos a solução para elétrons livres no grafeno depois da adição explícita do spin, abordaremos as consequências do spin no método das ondas parciais, desenvolvido no capítulo 2.

Na seção 2.2, mais precisamente na equação 2.29, utilizamos um 'ansatz' para resolver a equação de Dirac. Aqui, seguiremos o mesmo raciocínio, mas para uma função de onda de quatro componentes sem nenhuma componente de spin privilegiada (feixe inicial não-polarizado), o que nos dá:

$$\psi_m(\vec{r}) = \begin{pmatrix} F^+(r) \Theta_m(\theta) \\ iG^+(r) \Theta_{m+1}(\theta) \\ F^-(r) \Theta_m(\theta) \\ iG^-(r) \Theta_{m+1}(\theta) \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Após definirmos $\psi_m(\vec{r})$, lembrando que $\Psi(\vec{r})$ consiste em um somatório sobre as m ondas parciais, podemos voltar ao problema de auto-valor para cada uma das ondas parciais separadamente, ficando com $\mathcal{H}\psi_m(\vec{r}) = E\psi_m(\vec{r})$, onde \mathcal{H} é definido por $\mathcal{H}_0 + V_{spin}(r)$, \mathcal{H}_0 é dado pela equação 4.2 e $V_{spin}(r)$ é um potencial axialmente simétrico, dependente

de spin, mas não mistura estados de spin *up* e spin *down*. Novamente, escrevendo os operadores de momento em função das coordenadas r e θ e utilizando o método de separação de variáveis encontramos a solução de Θ_m como a equação 2.4 e um conjunto de quatro equações diferenciais acopladas para as partes radiais:

$$\frac{dF^\pm(r)}{dr} - \frac{m}{r}F^\pm(r) + \frac{i}{\hbar v_F}(E - V_{spin}(r))G^\pm(r) = 0 \quad (4.6)$$

e

$$\frac{dG^\pm(r)}{dr} + \frac{(m+1)}{r}G^\pm(r) - \frac{i}{\hbar v_F}(E - V_{spin}(r))F^\pm(r) = 0. \quad (4.7)$$

A partir daqui, podemos proceder exatamente da mesma forma que o desenvolvimento de ondas parciais na seção 2.2 do capítulo 2 e obtermos duas equações para a amplitude de espalhamento $f_k(\theta)$ (equação 2.40), uma para cada uma das componentes de spin:

$$f_k^\pm(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\delta_m^\pm} \sin(\delta_m^\pm) e^{im\theta}, \quad (4.8)$$

onde δ_m^\pm representa o *phase-shift* associado a cada uma das componentes de spin.

A equação 4.8 possibilita que tenhamos taxas de espalhamento diferentes para spin *up* e spin *down*, o que resulta em uma polarização final ao longo do eixo z para o feixe espalhado caso $f_k^+(\theta) \neq f_k^-(\theta)$, mesmo com um feixe inicialmente não-polarizado. Tomando como referencial o eixo positivo do eixo z , podemos calcular essa polarização final do feixe como:

$$P(\theta) = \frac{|f_k^+(\theta)|^2 - |f_k^-(\theta)|^2}{|f_k^+(\theta)|^2 + |f_k^-(\theta)|^2}, \quad (4.9)$$

onde normalizamos a diferença entre as taxas de espalhamento pela soma das mesmas. Além disso, vemos que existe uma dependência angular na equação 4.9, o que nos diz que podemos aferir uma polarização diferente de acordo com o ângulo de espalhamento.

Como podemos analisar as amplitudes de espalhamento de cada componente de spin separadamente, é bem intuitivo pensar que a soma das contribuições de spin *up* e spin

down constituem a seção de choque diferencial do problema:

$$\frac{d\sigma^\pm}{d\theta}(\theta) = |f_k^\pm(\theta)|^2 \longrightarrow \frac{d\sigma}{d\theta}(\theta) = \frac{d\sigma^+}{d\theta}(\theta) + \frac{d\sigma^-}{d\theta}(\theta). \quad (4.10)$$

Logo, considerando as duas contribuições, podemos analisar os outros parâmetros do espalhamento já conhecidos, como a seção de choque total (equação 2.14) e a seção de choque de transporte (equação 2.15), ou ainda calcular cada um desses parâmetros para cada uma das componentes de spin.

Fazendo analogia a $\sigma(k)$ e a $\sigma_T(k)$, também temos um parâmetro de espalhamento associado à integral angular da diferença $|f_k^+(\theta)|^2 - |f_k^-(\theta)|^2$, que chamaremos de polarização de spin total $P_s(k)$ e polarização de spin longitudinal $P_s^T(k)$:

$$P_s(k) \equiv \frac{\oint (|f_k^+(\theta)|^2 - |f_k^-(\theta)|^2) d\theta}{\oint (|f_k^+(\theta)|^2 + |f_k^-(\theta)|^2) d\theta} \quad (4.11)$$

e

$$P_s^T(k) \equiv \frac{\oint (|f_k^+(\theta)|^2 - |f_k^-(\theta)|^2) (1 - \cos(\theta)) d\theta}{\oint (|f_k^+(\theta)|^2 + |f_k^-(\theta)|^2) (1 - \cos(\theta)) d\theta}. \quad (4.12)$$

Este mesmo formalismo também pode ser aplicado para estudar as propriedades de transporte dependente de spin no grafeno no caso de espalhamento eletrônico por impurezas que apresentam acoplamento spin-órbita [21–23, 95].

Após a inclusão da dependência de spin na resolução do problema de elétrons livres sobre a superfície do grafeno e no método das ondas parciais, vamos abordar um exemplo de impureza magnética adsorvida, possibilitando o seu tratamento como um potencial dependente de spin.

4.2 Efeito Zeeman local

O efeito Zeeman consiste no efeito da separação de linhas espectrais de mesma energia em resposta à aplicação de um campo magnético externo. Dentre as abordagens desse

efeito, estaremos considerando aqui o "efeito Zeeman normal" no caso de uma observação feita ao longo de uma direção paralela a \vec{B} , onde teremos o desdobramento em duas componentes. Tratando da impureza magnética em si, consideraremos um efeito Zeeman local ao longo da direção do eixo z , fazendo analogia à aplicação de um campo magnético \vec{B} nessa direção, nos possibilitando modelar esse centro espalhador da seguinte forma:

$$V_{spin}(r) = \begin{cases} 0, & r > a \\ V_0 \hat{\sigma}_z, & r \leq a \end{cases} . \quad (4.13)$$

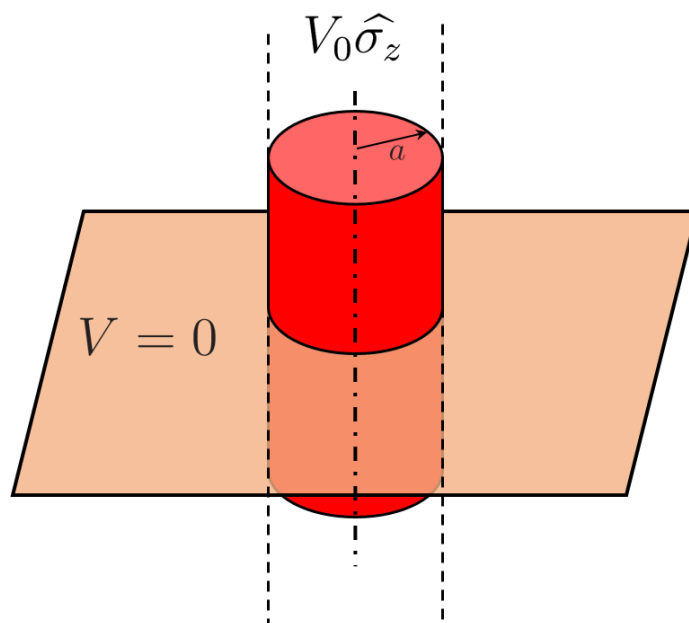


Figura 4.1: Esquema de um efeito Zeeman local, representado pela equação 4.13.

Para um elétron (ou buraco) incidente com spin *up* ao longo do eixo z , o potencial funciona como uma barreira, ao passo de que, para uma incidência com spin *down* ao longo do mesmo eixo, temos um poço. Para essas duas possibilidades, já sabemos como escrever a expansão da função de onda em ondas parciais e aplicar a continuidade na interface, a fim de encontrar os *phase-shifts*, necessários para avaliar os parâmetros do espalhamento. Já que o potencial tratado não proporciona inversão de spin (*spin flip*), obtemos quatro equações a partir de $\Psi(r \rightarrow a^+, \theta) = \Psi(r \rightarrow a^-, \theta)$, sendo duas exclusivamente para cada componente de spin:

$$\begin{aligned}
 A_m^\pm J_m(k_{out}a) + B_m^\pm Y_m(k_{out}a) &= C_m^\pm J_m(k_{in}^\pm a) \\
 i\lambda(E) (A_m^\pm J_{m+1}(k_{out}a) + B_m^\pm Y_{m+1}(k_{out}a)) &= i\lambda(E \mp V_0) C_{m+1}^\pm J_{m+1}(k_{in}^\pm a)
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

o que nos permite encontrar expressões para os *phase-shifts* δ_m^\pm para cada uma das componentes de spin:

$$\delta_m^\pm = \arctan \left(\frac{\lambda(E) J_m(k_{in}^\pm a) J_{m+1}(k_{out}a) - \lambda(E \mp V_0) J_m(k_{out}a) J_{m+1}(k_{in}^\pm a)}{\lambda(E) J_m(k_{in}^\pm a) Y_{m+1}(k_{out}a) - \lambda(E \mp V_0) Y_m(k_{out}a) J_{m+1}(k_{in}^\pm a)} \right), \tag{4.15}$$

com

$$\begin{aligned}
 k_{out} &= |E|/\hbar v_F \\
 k_{in}^\pm &= |E \mp V_0|/\hbar v_F
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

e

$$\begin{aligned}
 \lambda(E) &= \text{sgn}(E) \\
 \lambda(E \mp V_0) &= \text{sgn}(E \mp V_0) .
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

A partir das expressões dos *phase-shifts* na equação 4.15, juntamente com as equações 4.16 e 4.17, podemos avaliar os parâmetros do espalhamento, seja analisando as sequências do espalhamento de cada uma das componentes de spin separadamente ou observando o processo como um todo, considerando as duas contribuições.

Como a interação do potencial descrito pela equação 4.13 pode acontecer de duas maneiras, uma pra cada componente de spin, teremos dois conjuntos de ressonâncias associadas a essa impureza magnética. Conseqüentemente, teremos mais picos na seção de choque de transporte, metade associados ao caso em que teremos uma barreira de potencial (spin *up*) e outra metade relacionados com a situação de um poço (spin *down*) como podemos ver na figura 4.2.

Além das ressonâncias provocadas por cada uma das situações, podemos ver também que a seção de choque de transporte do processo total de espalhamento atinge a situação de

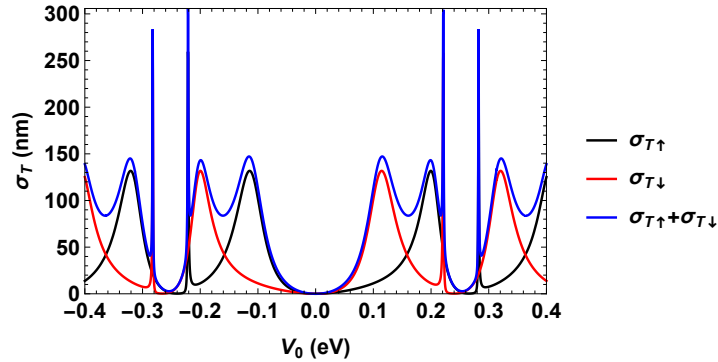


Figura 4.2: Seção de choque de transporte σ_T para $E = 20$ meV e $a = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.

espalhamento ressonante mais vezes, sofrendo aumentos de algumas ordens de grandeza, o que é um dos objetivos da adsorção de átomos na superfície do grafeno.

Após analisarmos o regime de espalhamento ressonante, podemos variar os parâmetros do centro espalhador em questão, como V_0 e a , ou a energia E do feixe incidente e investigar seus efeitos sobre σ_T , mas teríamos um comportamento semelhante aos citados na seção 3.1.1. Logo, vamos explorar os fenômenos relacionados ao spin, e como os parâmetros da impureza magnética podem afetar a polarização que aparece após o processo de espalhamento de um feixe inicialmente não-polarizado.

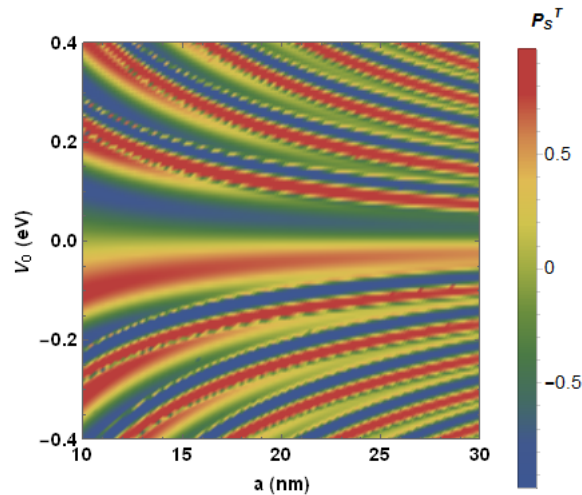


Figura 4.3: Polarização de spin longitudinal P_s^T para $E = 20$ meV considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.

Analisando a figura 4.3, vemos que se considerarmos um feixe inicialmente não-polarizado com uma dada energia incidente E e estivermos interessados em obter uma determinada polarização para o feixe espalhado através da impureza magnética modelada como um efeito Zeeman local, podemos investigar a presença de um par de valores para a intensidade do potencial V_0 e para o raio a que fornecerão a polarização desejada.

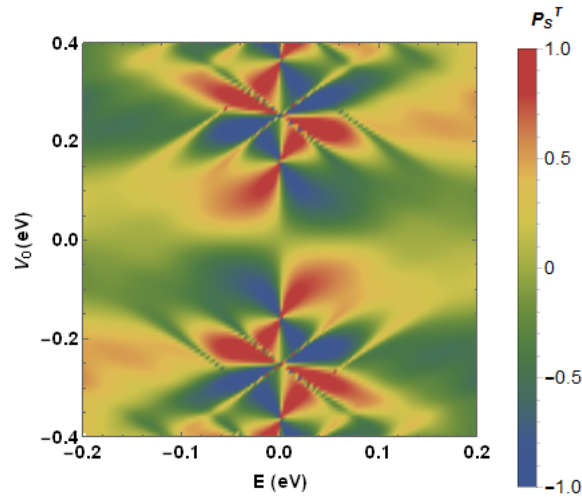


Figura 4.4: Polarização de spin longitudinal P_S^T para $a = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.

Seria ideal a existência da possibilidade de variar a intensidade do potencial durante o processo de espalhamento, a fim de atingir a polarização final desejada, mas, do ponto de vista experimental, isso é inviável para impurezas magnéticas. Logo, é intuitivo pensar em variar a intensidade da energia E do feixe incidente. Na figura 4.4, vemos que a faixa de oscilação de P_S^T é mais ampla perto do ponto de Dirac, a baixas energias, onde vemos algumas situações em que a polarização de spin longitudinal muda de sinal com uma variação de energia em torno de alguns meV (ver figura 4.5).

Ao observar as figuras 4.4 e 4.5, podemos notar uma certa simetria com o eixo $E = 0$, visto que as partes positiva e negativa são opostas, ou seja, $P_S^T(E, V, a) = -P_S^T(-E, V, a)$.

Semelhantemente às seções anteriores, terminaremos nossa análise através da distribuição angular, mas, nesse caso, da polarização, dada pela equação 4.9. Nessa análise,

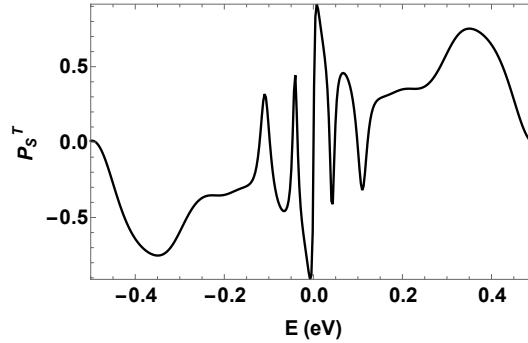


Figura 4.5: Polarização de spin longitudinal P_S^T para os mesmos parâmetros que a figura 4.4 com $V_0 = 186$ meV.

vemos uma "polarização direcional", fazendo com que valores diferentes de $P(\theta)$ sejam observados de acordo com o ângulo de espalhamento θ . Ou seja, mesmo com um feixe inicialmente não-polarizado, um efeito Zeeman local descrito pela equação 4.13 faz com que o feixe espalhado possa ser polarizado ou não, dependendo do ângulo de detecção.

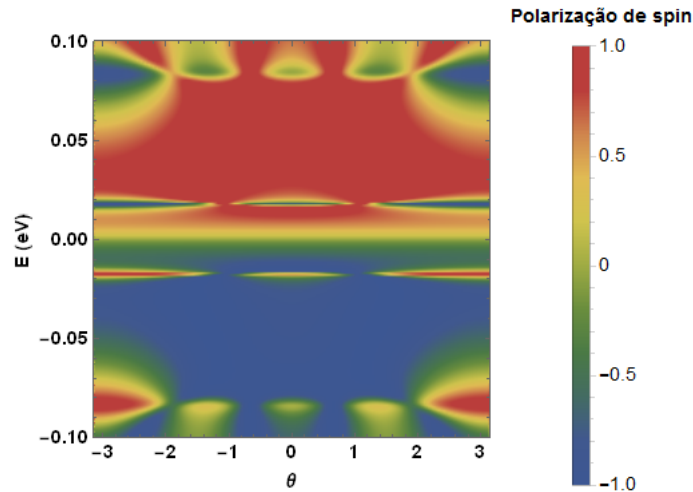


Figura 4.6: Distribuição angular da polarização de spin $P(\theta)$ para $V_0 = 225$ meV $a = 10$ nm considerando as 6 primeiras ondas parciais de cada componente de spin para o caso de um efeito Zeeman local.

Por fim, podemos ver que perto do cone de Dirac encontramos uma pequena faixa de valores para E , onde podemos ver a inversão do sinal da polarização de acordo com o ângulo de espalhamento (ver figura 4.7).

Ao observar as figuras 4.6 e 4.7, continuamos a observar a simetria já observada em relação ao eixo $E = 0$, visto que $P(E, V, a, \theta) = -P(-E, V, a, \theta)$, mas também observamos

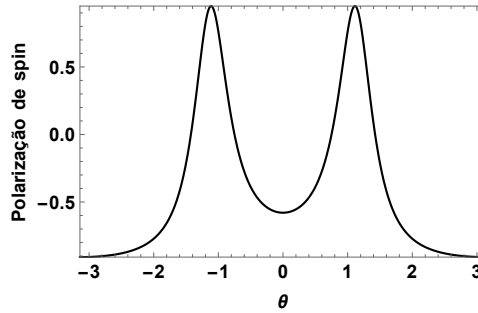


Figura 4.7: Distribuição angular da polarização de spin $P(\theta)$ para os mesmos parâmetros que a figura 4.6 com $E = 18$ meV.

que $P(E, V, a, \theta) = P(E, V, a, -\theta)$. Por fim, ao analisar a figura 4.7, podemos encontrar $P(\theta = 0) \neq 0$, o que evidencia a quebra da simetria de inversão temporal por conta do potencial espalhador dependente de spin.

Vemos que as limitações no tratamento de impurezas magnéticas fazem com que o único parâmetro experimental que pode ser modificado seja a energia E do feixe incidente. Logo, analogamente ao que foi discutido na seção 3.2, seria interessante introduzir um "manto" sob a forma de um anel de potencial, a fim de obtermos controle sobre os parâmetros do espalhamento a partir da aplicação de um *gate*, o que já se mostrou bem eficiente no capítulo 3. Isso nos permitiria modificar $P(\theta)$ e P_S^T para uma dada impureza magnética sem a necessidade de alterar o feixe incidente.

Considerações finais

Nesse trabalho, foram estudadas algumas propriedades do grafeno, entre elas o fato de os elétrons se comportarem em sua superfície como férmions relativísticos sem massa, possibilitando a sua descrição através da equação de Dirac [2, 3]. Resolvendo o problema de um elétron no grafeno, vemos algumas diferenças entre os auto-valores de energia e seus auto-vetores correspondentes em relação ao caso não-relativístico. Entre elas, temos o fato de a função de onda apresentar um "iso-spin", fazendo com ela seja constituída de duas componentes.

Desenvolvemos o método de ondas parciais a fim de estudar o transporte eletrônico no grafeno por impurezas adsorvidas em sua superfície, que funcionaram como centros espalhadores. Considerando a incidência de uma onda plana e observando a onda espalhada em um limite assintótico fora do alcance do potencial espalhador, vemos que esta última se reduz também a uma onda plana semelhante à incidente, diferindo apenas pela adição de um fator de fase, chamado de *phase-shift*, que contém todas as informações do centro espalhador.

Utilizando essa aproximação para os casos relativístico e não-relativístico, estudamos o espalhamento eletrônico por um disco de potencial finito e por um disco impenetrável em ambas as ocasiões [17], apresentando algumas diferenças entre elas, a exemplo da ausência de *backscattering* ou retro-espalhamento no caso do espalhamento eletrônico por um disco de potencial finito na superfície do grafeno. Também no regime relativístico, fizemos também uma aplicação da utilização do método das ondas parciais para o cálculo da condutividade no grafeno, mostrando a sua dependência com a voltagem aplicada e

que ela pode ser estudada através da presença de impurezas ressonantes [3, 28].

Considerando uma impureza no regime de espalhamento ressonante, introduzimos um "manto de invisibilidade" modelado como um anel de potencial ao seu redor, a fim de suprimirmos seus efeitos no processo de espalhamento. Para determinados valores do potencial e do raio externo do anel, observamos uma redução em até 5 ordens de grandeza no valor original da seção de choque de transporte no caso da impureza ressonante modelada sob a forma de um disco de potencial finito, enquanto que no caso do *cloaking* da vacância, modelada por um disco impenetrável, observamos uma redução em até 3 ordens de grandeza.

Vimos também que variações no potencial do anel em torno de alguns meV podem levar o processo de espalhamento eletrônico da situação de camuflagem de volta para o regime de espalhamento ressonante, e vice-versa. Essas oscilações no comportamento da seção de choque de transporte σ_T em função do "manto" formam uma analogia aos sistemas "comblike" presentes na óptica, onde podemos mudar o regime de espalhamento através da variação de um parâmetro externo. Por fim, também observamos variações na intensidade da seção de choque diferencial de acordo com o ângulo de espalhamento observado, o que chamamos de espalhamento direcional. Essas oscilações no comportamento de $\frac{d\sigma}{d\theta}$ de acordo com θ permitem a supressão da informação fornecida pelo centro espalhador inicial de acordo com a direção de análise do feixe espalhado.

Adicionamos o grau de liberdade do spin ao problema de um elétron livre no grafeno, o que resulta em mudanças na função de onda, que passa a apresentar quatro componentes. Consideramos o espalhamento eletrônico por uma impureza magnética modelada como um "efeito Zeeman local", procurando analisar parâmetros de espalhamento dependentes de spin, a exemplo da polarização longitudinal P_S^T e da distribuição angular da polarização $P(\theta)$. Ao analisarmos a primeira, vemos que o espalhamento de um feixe inicialmente não-polarizado através desse potencial Zeeman implica em uma polarização no feixe espalhado. Com isso, podemos investigar as características da impureza, a fim

de obter uma determinada polarização. Por fim, ao observar o comportamento de $P(\theta)$, vemos oscilações com relação a θ , o que implica em uma "polarização direcional".

Como projetos futuros, podemos estender a ideia de introduzir um "manto" ao redor do centro espalhador no caso de impurezas magnéticas, já que seus parâmetros são difíceis de controlar. Assim, poderíamos modificar a polarização longitudinal do feixe espalhado a partir de variações no potencial do anel, ou seja, com um parâmetro externo. Podemos ainda utilizar esse mecanismo também no caso de impurezas que proporcionem acoplamento spin-órbita.

Referências Bibliográficas

- [1] S. M M Dubois, Z. Zanolli, X. Declerck, and J. C. Charlier. Electronic properties and quantum transport in Graphene-based nanostructures. *Eur. Phys. J. B*, 72:1–24, 2009. x, 6, 10
- [2] a. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M R Peres, K. S. Novoselov, and a. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81(March):109–162, 2009. x, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 28, 49, 61
- [3] N. M R Peres. Colloquium: The transport properties of graphene: An introduction. *Rev. Mod. Phys.*, 82(September):2673–2700, 2010. xi, 24, 28, 29, 30, 34, 61, 62
- [4] Steven a. Cummer and David Schurig. One path to acoustic cloaking. *New J. Phys.*, 9, 2007. xi, 33
- [5] K. S. Novoselov, a. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and a. a. Firsov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306(October):666–669, 2004. 1
- [6] A K Geim. Graphene: status and prospects. *Science*, 324(June):1530–1534, 2009. 1, 4
- [7] a K Geim, K S Novoselov, Geim A. K., and Novoselov K. S. The rise of graphene. *Nat. Mater.*, pages 183–191, 2007. 4

- [8] Andrey K. Geim and Allan H. MacDonald. Graphene: Exploring carbon flatland. *Phys. Today*, 60(8):35–41, 2007. 1
- [9] Tapash Chakraborty. Graphene, Nobel Prize and All that Jazz. 2, 2010. URL <http://arxiv.org/abs/1011.0444>. 1
- [10] K. Pi, K. M. McCreary, W. Bao, Wei Han, Y. F. Chiang, Yan Li, S. W. Tsai, C. N. Lau, and R. K. Kawakami. Electronic doping and scattering by transition metals on graphene. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 80(June):1–5, 2009. 2
- [11] J.-H. Chen, C. Jang, S. Adam, M. S. Fuhrer, E. D. Williams, and M. Ishigami. Charged-impurity scattering in graphene. *Nat. Phys.*, 4:377–381, 2008. 2
- [12] J. L. McChesney, Aaron Bostwick, Taisuke Ohta, Thomas Seyller, Karsten Horn, J. González, and Eli Rotenberg. Extended van hove singularity and superconducting instability in doped graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 104(April):1–4, 2010. 2
- [13] Victor W. Brar, Regis Decker, Hans-Michael Solowan, Yang Wang, Lorenzo Maserati, Kevin T. Chan, Hoonkyung Lee, Caglar O. Girit, Alex Zettl, Steven G. Louie, Marvin L. Cohen, and Michael F. Crommie. Gate-Controlled Ionization and Screening of Cobalt Adatoms on a Graphene Surface. *Nat. Phys.*, 7(October 2010):19, 2010. 2
- [14] Diego Oliver, Jose H Garcia, Tatiana G Rappoport, N M R Peres, and Felipe a Pí-nheiro. Cloaking Resonant Scatterers and Tuning Electron Flow in Graphene. pages 1–11, 2015. URL <http://arxiv-web3.library.cornell.edu/abs/1502.02119>. 3, 48
- [15] N M R Peres. The transport properties of graphene. *J. Phys. Condens. Matter*, 21:10, 2009. 8

- [16] Cristina Bena and Gilles Montam Baux. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New J. Phys.*, 11, 2009. 10
- [17] D. S. Novikov. Elastic scattering theory and transport in graphene. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 76:1–17, 2007. 12, 13, 21, 24, 61
- [18] Vitor M. Pereira, Johan Nilsson, and a. H. Castro Neto. Coulomb impurity problem in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 99(October):2–5, 2007. 12
- [19] R. L. Heinisch, F. X. Bronold, and H. Fehske. Mie scattering analog in graphene: Lensing, particle confinement, and depletion of Klein tunneling. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 87:1–5, 2013. 13
- [20] Aires Ferreira, J. Viana-Gomes, Johan Nilsson, E. R. Mucciolo, N. M R Peres, and a. H. Castro Neto. Unified description of the dc conductivity of monolayer and bilayer graphene at finite densities based on resonant scatterers. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 83:1–22, 2011. 13, 24, 37
- [21] D. Huertas-Hernando, F. Guinea, and Arne Brataas. Spin-orbit-mediated spin relaxation in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 103(October):1–4, 2009. 13, 54
- [22] H. Ochoa, a. H. Castro Neto, and F. Guinea. Elliot-yafet mechanism in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 108(May):1–5, 2012. 13
- [23] Aires Ferreira, Tatiana G. Rappoport, Miguel a. Cazalilla, and a. H. Castro Neto. Extrinsic spin hall effect induced by resonant skew scattering in Graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 112(February):1–5, 2014. 13, 54
- [24] J R Taylor. *Scattering Theory: the quantum theory on nonrelativistic collisions*. 1972. 13
- [25] R H Landau. *Quantum Mechanics II - A Second Course in Quantum Theory*. 2 edition, 2004. 13

- [26] J. M. Ziman. *Principles of the Theory of Solids*. 2 edition, 1971. 28
- [27] T. Stauber, N. M R Peres, and F. Guinea. Electronic transport in graphene: A semiclassical approach including midgap states. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 76:1–10, 2007. 28
- [28] S. Das Sarma, Shaffique Adam, E. H. Hwang, and Enrico Rossi. Electronic transport in two-dimensional graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 83(June):407–470, 2011. 29, 49, 62
- [29] Diederik S Wiersma. Disordered photonics. *Nat. Photonics*, 7(February):188–196, 2013. 31
- [30] Andrey E. Miroshnichenko, Sergej Flach, and Yuri S. Kivshar. Fano resonances in nanoscale structures. *Rev. Mod. Phys.*, 82(September):2257–2298, 2010. 31, 36
- [31] K S Novoselov, a K Geim, S V Morozov, D Jiang, M I Katsnelson, I V Grigorieva, S V Dubonos, and a a Firsov. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, 438(November):197–200, 2005. 31
- [32] Fan Ming Zhang, Ying He, and Xi Chen. Guided modes in graphene waveguides. *Appl. Phys. Lett.*, 94(2009):1–4, 2009. 31
- [33] Peter Rickhaus, Romain Maurand, Ming-Hao Liu, Markus Weiss, Klaus Richter, and Christian Schönenberger. Ballistic interferences in suspended graphene. *Nat. Commun.*, 4:2342, 2013. 31
- [34] Vadim V Cheianov, Vladimir Fal’ko, and B L Altshuler. The focusing of electron flow and a Veselago lens in graphene p-n junctions. *Science*, 315(January 2006):1252–1255, 2007. 31
- [35] Mário G. Silveirinha and Nader Engheta. Spatial delocalization and perfect tunneling of matter waves: Electron perfect lens. *Phys. Rev. Lett.*, 110(May):1–5, 2013. 31

- [36] Nikolay I. Zheludev and Yuri S. Kivshar. From metamaterials to metadevices. *Nat. Mater.*, 11(11):917–924, 2012. 31
- [37] Ulf Leonhardt. Optical conformal mapping. *Science*, 312(June):1777–1780, 2006. 31
- [38] D Schurig, J J Mock, B J Justice, S a Cummer, J B Pendry, a F Starr, and D R Smith. Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies. *Science*, 314 (November):977–980, 2006. 32
- [39] J B Pendry, D Schurig, and D R Smith. Controlling electromagnetic fields. *Science*, 312(5):1780–1782, 2006. 31
- [40] Andrea Alù and Nader Engheta. Achieving transparency with plasmonic and metamaterial coatings. *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, 72:1–9, 2005. 31, 32
- [41] Andrea Alù and Nader Engheta. Plasmonic and metamaterial cloaking: physical mechanisms and potentials. *J. Opt. A Pure Appl. Opt.*, 10:093002, 2008. 32
- [42] Brian Edwards, Andrea Alù, Mário G. Silveirinha, and Nader Engheta. Experimental verification of plasmonic cloaking at microwave frequencies with metamaterials. *Phys. Rev. Lett.*, 103(October):1–4, 2009. 32
- [43] Dmitry S. Filonov, Alexey P. Slobozhanyuk, Pavel a. Belov, and Yuri S. Kivshar. Double-shell metamaterial coatings for plasmonic cloaking. *Phys. Status Solidi - Rapid Res. Lett.*, 6(1):46–48, 2012.
- [44] Pai Yen Chen, Jason Soric, and Andrea Alù. Invisibility and cloaking based on scattering cancellation. *Adv. Mater.*, 24:281–304, 2012. 32
- [45] W. J M Kort-Kamp, F. S S Rosa, F. a. Pinheiro, and C. Farina. Spontaneous emission in the presence of a spherical plasmonic metamaterial. *Phys. Rev. A - At. Mol. Opt. Phys.*, 87:1–7, 2013. 32

- [46] D. Rainwater, A. Kerkhoff, K. Melin, J. C. Soric, G. Moreno, and A. Alù. Experimental verification of three-dimensional plasmonic cloaking in free-space. *New J. Phys.*, 14, 2012. 32
- [47] N. A. Nicorovici, R. C. McPhedran, and G. W. Milton. Optical and dielectric properties of partially resonant composites. *Phys. Rev. B*, 49(12):8479–8482, 1994. 31
- [48] Jason Valentine, Jensen Li, Thomas Zentgraf, Guy Bartal, and Xiang Zhang. An optical cloak made of dielectrics. *Nat. Mater.*, 8(7):568–571, 2009. 32
- [49] Tolga Ergin, Nicolas Stenger, Patrice Brenner, John B Pendry, and Martin Wegener. Three-dimensional invisibility cloak at optical wavelengths. *Science*, 328:337–339, 2010. 32
- [50] Shuang Zhang, Dentcho a. Genov, Cheng Sun, and Xiang Zhang. Cloaking of matter waves. *Phys. Rev. Lett.*, 100(March):1–4, 2008. 32
- [51] Allan Greenleaf, Yaroslav Kurylev, Matti Lassas, and Gunther Uhlmann. Approximate quantum cloaking and almost-trapped states. *Phys. Rev. Lett.*, 101(November):1–4, 2008.
- [52] De Hone Lin. Cloaking spin-1/2 matter waves. *Phys. Rev. A - At. Mol. Opt. Phys.*, 81:1–7, 2010.
- [53] De Hone Lin. Cloaking two-dimensional fermions. *Phys. Rev. A - At. Mol. Opt. Phys.*, 84(September):1–7, 2011. 32
- [54] Matthew D Guild, Andrea Alù, and Michael R Haberman. Cancellation of acoustic scattering from an elastic sphere. *J. Acoust. Soc. Am.*, 129(March 2011):1355–1365, 2011. 32

- [55] Bolin Liao, Mona Zabarjadi, Keivan Esfarjani, and Gang Chen. Cloaking core-shell nanoparticles from conducting electrons in solids. *Phys. Rev. Lett.*, 109(September): 1–5, 2012. 32, 38, 39
- [56] Romain Fleury and Andrea Alù. Exotic properties and potential applications of quantum metamaterials. *Appl. Phys. A*, pages 781–788, 2012.
- [57] Romain Fleury and Andrea Alù. Quantum cloaking based on scattering cancellation. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 87:1–6, 2013. 32
- [58] Bolin Liao, Mona Zabarjadi, Keivan Esfarjani, and Gang Chen. Isotropic and energy-selective electron cloaks on graphene. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 88:1–6, 2013. 32, 38, 42
- [59] T. O. Wehling, S. Yuan, a. I. Lichtenstein, a. K. Geim, and M. I. Katsnelson. Resonant scattering by realistic impurities in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 105(July):3–6, 2010. 34
- [60] Francesco Monticone, Christos Argyropoulos, and Andrea Alù. Multilayered plasmonic covers for combl-like scattering response and optical tagging. *Phys. Rev. Lett.*, 110(March):1–5, 2013. 34, 45
- [61] Vitor M. Pereira, F. Guinea, J. M B Lopes Dos Santos, N. M R Peres, and a. H. Castro Neto. Disorder induced localized states in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 96 (JANUARY):27–30, 2006. 36
- [62] Guy Trambly De Laissardière and Didier Mayou. Conductivity of graphene with resonant and nonresonant adsorbates. *Phys. Rev. Lett.*, 111(October):1–5, 2013.
- [63] Alessandro Cresti, Frank Ortmann, Thibaud Louvet, Dinh Van Tuan, and Stephan Roche. Broken symmetries, zero-energy modes, and quantum transport in disordered

- graphene: From supermetallic to insulating regimes. *Phys. Rev. Lett.*, 110(May):1–5, 2013. 36
- [64] Jian Hao Chen, W. G. Cullen, C. Jang, M. S. Fuhrer, and E. D. Williams. Defect scattering in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 102(June):1–4, 2009. 37
- [65] Florian Banhart, Jani Kotakoski, and Arkady V. Krasheninnikov. Structural defects in graphene. *ACS Nano*, 5(1):26–41, 2011. 37
- [66] F. Guinea. Models of electron transport in single layer graphene. *J. Low Temp. Phys.*, 153(May):359–373, 2008. 37
- [67] Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma. Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys.*, 76(April):323–410, 2004. 49
- [68] H Dery, P Dalal, ? Cywi?ski, and L J Sham. Spin-based logic in semiconductors for reconfigurable large-scale circuits. *Nature*, 447(May):573–576, 2007. 49
- [69] Hanan Dery, Hui Wu, Berkehan Ciftcioglu, Michael Huang, Yang Song, Roland Kawakami, Jing Shi, Ilya Krivorotov, Igor Žutić, and Lu J. Sham. Nanospintronics based on magnetologic gates. *IEEE Trans. Electron Devices*, 59(1):259–262, 2012. 49
- [70] Supriyo Datta and Biswajit Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl. Phys. Lett.*, 56(1990):665–667, 1990. 49
- [71] Nikolaos Tombros, Csaba Jozsa, Mihaita Popinciuc, Harry T Jonkman, and Bart J van Wees. Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature. *Nature*, 448(August):571–574, 2007. 49
- [72] Wei Han, K. Pi, K. M. McCreary, Yan Li, Jared J I Wong, a. G. Swartz, and R. K. Kawakami. Tunneling spin injection into single layer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 105 (OCTOBER):3–6, 2010.

- [73] P. J. Zomer, M. H D Guimarães, N. Tombros, and B. J. Van Wees. Long-distance spin transport in high-mobility graphene on hexagonal boron nitride. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 86:2–5, 2012.
- [74] T. Y. Yang, J. Balakrishnan, F. Volmer, a. Avsar, M. Jaiswal, J. Samm, S. R. Ali, a. Pachoud, M. Zeng, M. Popinciuc, G. Güntherodt, B. Beschoten, and B. Özyilmaz. Observation of long spin-relaxation times in bilayer graphene at room temperature. *Phys. Rev. Lett.*, 107(July):5–8, 2011. 50
- [75] Wei Han and R. K. Kawakami. Spin relaxation in single-layer and bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 107(July):1–4, 2011. 50
- [76] Bruno Dlubak, Marie-Blandine Martin, Cyrile Deranlot, Bernard Servet, Stéphane Xavier, Richard Mattana, Mike Sprinkle, Claire Berger, Walt a. De Heer, Frédéric Petroff, Abdelmadjid Anane, Pierre Seneor, and Albert Fert. Highly efficient spin transport in epitaxial graphene on SiC. *Nat. Phys.*, 8(7):557–561, 2012. 49
- [77] Jayakumar Balakrishnan, Gavin Kok Wai Koon, Ahmet Avsar, Yuda Ho, Jong Hak Lee, Manu Jaiswal, Seung-Jae Baeck, Jong-Hyun Ahn, Aires Ferreira, Miguel a. Cazalilla, Antonio H. Castro Neto, and Barbaros Özyilmaz. Giant spin Hall effect in graphene grown by chemical vapour deposition. *Nat. Commun.*, 5:4748, 2014. 49
- [78] Conan Weeks, Jun Hu, Jason Alicea, Marcel Franz, and Ruqian Wu. Engineering a Robust Quantum Spin Hall State in Graphene via Adatom Deposition. *Phys. Rev. X*, 1(2011):1–15, 2011. 49, 50
- [79] P. Lazić, G. M. Sipahi, R. K. Kawakami, and Igor Žutić. Graphene spintronics: Spin injection and proximity effects from first principles. *Phys. Rev. B*, 90:085429, 2014. 49
- [80] Denis Kochan, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Spin relaxation mechanism in

- graphene: Resonant scattering by magnetic impurities. *Phys. Rev. Lett.*, 112(March): 1–5, 2014. 50
- [81] Oleg V. Yazyev and Lothar Helm. Defect-induced magnetism in graphene. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 75(January):1–5, 2007. 50
- [82] R. R. Nair, M. Sepioni, I-Ling Tsai, O. Lehtinen, J. Keinonen, a. V. Krasheninnikov, T. Thomson, a. K. Geim, and I. V. Grigorieva. Spin-half paramagnetism in graphene induced by point defects. *Nat. Phys.*, 8(3):199–202, 2012.
- [83] Kathleen M. McCreary, Adrian G. Swartz, Wei Han, Jaroslav Fabian, and Roland K. Kawakami. Magnetic moment formation in graphene detected by scattering of pure spin currents. *Phys. Rev. Lett.*, 109(November):1–5, 2012. 50
- [84] a. J M Giesbers, K. Uhlířová, M. Konečný, E. C. Peters, M. Burghard, J. Aarts, and C. F J Flipse. Interface-induced room-temperature ferromagnetism in hydrogenated epitaxial graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 111(OCTOBER):1–5, 2013.
- [85] D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, and a. I. Lichtenstein. Hydrogen on graphene: Electronic structure, total energy, structural distortions and magnetism from first-principles calculations. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 77:1–7, 2008.
- [86] Jeongmin Hong, Elena Bekyarova, Ping Liang, Walt a. de Heer, Robert C. Haddon, and Sakhrat Khizroev. Room-temperature Magnetic Ordering in Functionalized Graphene. *Sci. Rep.*, 2, 2012. 50
- [87] E. J G Santos, D. Sánchez-Portal, and a. Ayuela. Magnetism of substitutional Co impurities in graphene: Realization of single π vacancies. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 81:1–6, 2010. 50
- [88] Hongbin Zhang, Cesar Lazo, Stefan Blügel, Stefan Heinze, and Yuriy Mokrousov.

- Electrically tunable quantum anomalous hall effect in graphene decorated by 5d transition-metal adatoms. *Phys. Rev. Lett.*, 108(February):1–5, 2012. 50
- [89] R R Nair, I-L Tsai, M Sepioni, O Lehtinen, J Keinonen, a V Krasheninnikov, a H Castro Neto, M I Katsnelson, a K Geim, and I V Grigorieva. Dual origin of defect magnetism in graphene and its reversible switching by molecular doping. *Nat. Commun.*, 4(May):2010, 2013. 50
- [90] Jayakumar Balakrishnan, Gavin Kok Wai Koon, Manu Jaiswal, a. H. Castro Neto, and Barbaros Özyilmaz. Colossal enhancement of spin-orbit coupling in weakly hydrogenated graphene. *Nat. Phys.*, 9(5):284–287, 2013. 50
- [91] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum Spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95(November):1–4, 2005. 50
- [92] Wang Kong Tse, Zhenhua Qiao, Yugui Yao, a. H. MacDonald, and Qian Niu. Quantum anomalous Hall effect in single-layer and bilayer graphene. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 83:1–8, 2011. 50
- [93] Ming Hao Liu, Jan Bundesmann, and Klaus Richter. Spin-dependent Klein tunneling in graphene: Role of Rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, 85:1–9, 2012. 50
- [94] Wei Han, Roland K. Kawakami, Martin Gmitra, and Jaroslav Fabian. Graphene spintronics. *Nat. Nanotechnol.*, 9(October):794–807, 2014. 50
- [95] a. H. Castro Neto and F. Guinea. Impurity-induced spin-orbit coupling in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 103(July):1–4, 2009. 54