UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências

Departamento de Física

Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores

---

Andrey Chaves

Orientador: Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

13 de Dezembro de 2010

Andrey Chaves

Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores

Tese de doutorado apresentada ao Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Física.

Orientador:
Prof. Dr. Gil de Aquino Farias

Co-orientador:
Prof. Dr. François M. Peeters

Doutorado em Física
Departamento de Física
Centro de Ciências
Universidade Federal do Ceará.

Fortaleza – CE

13 de Dezembro de 2010

Tese de doutorado sob o título Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores, defendida por Andrey Chaves e aprovada em 13 de Dezembro de 2010, em Fortaleza, Ceará, pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Gil de Aquino Farias
Departamento de Física - UFC
Orientador

Prof. Dr. François Maria Leopold Peeters
Departamento de Física - UFC
Department of Physics - University of Antwerp,
Belgium
Co-orientador

Prof. Dr. Milorad Milošević
Department of Physics - University of Antwerp,
Belgium

Prof. Dr. Eudenilson Lins de Albuquerque
Departamento de Biofísica e Farmacologia -
Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Prof. Dr. Fernando Lázaro Freire Jr.
Departamento de Física - Pontifícia Universidade
Católica do Rio de Janeiro

"Minha infância foi uma infância de menino pobre, mas não tão infeliz, porque eu creio que uma criança pobre, uma criança, enfim, dificilmente pode saber que é infeliz, desde que tenha o carinho de seus pais, e isso não me faltou em casa."

Luiz Gonzaga, quando perguntado por Gonzaguinha sobre sua infância no sertão.

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Dr. Gil de Aquino Farias, por seu apoio, confiança, competência e dedicação na orientação não só deste trabalho, mas de todos os meus trabalhos desde a graduação. Cabe aqui também agradecer ao Prof. Alexander de King Freire (*in memoriam*), pois sem sua importante co-orientação até o fim do meu mestrado, quando comecei a desenvolver os métodos matemáticos usados neste trabalho, esta tese não teria sido possível. Não menos importantes foram o apoio e a colaboração dos professores François Peeters e Milorad Milošević durante o período em que trabalhei na Universiteit Antwerpen (Bélgica), onde aprendi praticamente tudo que expus aqui sobre vórtices em supercondutores, além de diversos métodos matemáticos e computacionais que foram extremamente úteis para o desenvolvimento deste trabalho e que serão certamente essenciais em meus trabalhos futuros.

Aos professores do Departamento de Física da UFC, em especial aos professores Nilson Sena de Almeida, Renan Landim e Raimundo Nogueira da Costa Filho, pela importante contribuição que deram para minha formação acadêmica, tanto através das disciplinas de graduação e pós-graduação, como durante as discussões sobre meus trabalhos de pesquisa. Um agradecimento especial também aos professores João Milton Pereira Jr. e Jeanlex Soares de Sousa, que sempre estiveram prontos para me ajudar, tirar minhas dúvidas e discutir sobre os meus resultados relacionados a grafeno e semicondutores, respectivamente.

Aos professores José Soares de Andrade Jr. e André Auto, por terem sugerido e dado todo o suporte inicial aos meus trabalhos sobre vórtices em supercondutores.

Aos professores Robson Ferreira, da École Normale Supérieure (Paris), e Marcos Henrique Degani, por terem me ensinado todos os detalhes e fundamentos do método *split-operator*, o qual pude expandir e utilizar exaustivamente para a obtenção de diversos resultados presentes neste trabalho.

Aos amigos e companheiros de trabalho da Universiteit Antwerpen. À Lucia Komendova, ao Mohammad Zarenia e ao Lucian Covaci, em especial, tanto pela amizade e companheirismo, quanto pela colaboração fundamental que tiveram no desenvolver dos

trabalhos que aqui apresento.

Aos colegas de laboratório e todos os meus amigos da UFC, pelas boas conversas nas horas vagas e pelos vários momentos de diversão que compartilhamos.

Aos meus amigos que têm estado sempre presentes na minha vida, especialmente ao Delano, à Natasha, à Diana, ao Diego, ao Leco, à Amanda e à Fanny, pelos muitos momentos de lazer, pelas boas risadas e pelas longas e divertidas conversas que sempre tivemos.

À minha família, pelo apoio incondicional em todos os momentos. Em especial, à Luciana, pelo amor e amizade, plenamente correspondidos, e por ter me incentivado e me feito companhia por um bom tempo quando estive longe de casa. O apoio deles sempre foi uma motivação fundamental para a minha carreira profissional.

Aos membros da banca, pela leitura crítica desta tese, por comparecerem à minha defesa e por darem sugestões importantes para o aprimoramento deste trabalho.

Ao prof. Josué e todo o grupo administrativo do Departamento de Física da UFC, pelo esforço incansável para o desenvolvimento do nosso departamento.

Finalmente, agradeço à CAPES, à UFC, ao PRONEX/CNPq/FUNCAP, à FCPC, à FWO-Vl e ao programa bilateral entre Brasil e Flanders (Bélgica), e a todos os outros órgãos que me deram apoio financeiro para a realização dos trabalhos e apresentação dos mesmos em congressos nacionais e internacionais.

Resumo

Este trabalho se divide em duas partes. Na primeira, analisamos a evolução temporal de pacotes de onda em sistemas de baixa dimensionalidade. Para isso, resolvemos a equação de Schrödinger dependente do tempo a partir do método *split-operator*, que é de fácil implementação computacional e permite ser expandido para sistemas com mais dimensões. Calculamos os autoestados e a evolução temporal de pacotes de onda em fios T e em anéis quânticos com canais de injeção. Na presença de um campo magnético externo, verificamos as oscilações Aharonov-Bohm nos coeficientes de transmissão e reflexão do anel. Analisando-se as projeções das funções de onda transmitidas sobre as subbandas do poço quântico que descreve os canais, observa-se que a função de onda sai do anel na mesma subbanda em que entrou, apesar de ela acessar as outras subbandas dentro da região do anel. A presença de um campo magnético induz um fase sobre estas projeções, podendo ser usado para ajustar a subbanda de saída da função de onda. Um efeito parecido também pode ser obtido considerando-se uma assimetria no potencial do anel. Desenvolvemos também uma variação do método para tratar de Hamiltonianos com efeitos Zeeman e spin-órbita. Verificamos que os resultados obtidos pelo método que desenvolvemos estão de acordo com os resultados analíticos para o efeito Zeeman em pontos quânticos semicondutores.

Adaptamos também o método *split-operator* para estudar sistemas baseados em grafeno, nos modelos tight-binding e contínuo (de Dirac). Primeiramente, fazemos uma breve análise dos autoestados em anéis quânticos, comparando os resultados obtidos por cada modelo. Depois disso, verificamos com o nosso método a existência de um movimento trêmulo das funções de onda em grafenos (*zitterbewegung*). Observamos que na presença de um campo magnético, o zitterbewegung torna-se permanente. Além disso, mostramos que a presença de um gap de energia devido a um substrato pode intensificar as oscilações. Em ambos os casos a detecção experimental deste efeito seria facilitada. Demonstramos também que o efeito de uma deformação na rede do grafeno, causada por uma tensão externa, sobre o elétron equivale a um campo pseudo-magnético, capaz de reproduzir todas as características correspondentes a um campo externo, como os níveis de Landau e o zitterbewegung persistente. Além disso, mostramos como utilizar os efeitos de tensão como um filtro de vales em grafeno. Na presença de barreiras de potencial, estudamos dois efeitos bastante interessantes em monocamadas de grafeno: o paradoxo de Klein e a lei de Snell para o tunelamento de elétrons.

Na segunda parte desta tese, calculamos o potencial de interação entre vórtices em supercondutores volumétricos dentro da teoria de Ginzburg-Landau (GL), o que é de extrema importância para futuros estudos de dinâmica de vórtices. Para isso, desenvolvemos um conjunto de equações diferenciais acopladas para o potencial vetor e para o parâmetro de ordem, tendo como vínculo um número fixo de vórtices posicionados em pontos à nossa escolha, onde a combinação entre os vórtices formando um vórtice gigante é naturalmente permitida. Obtemos os potenciais de interação entre um vórtice e

outro vórtice, um vórtice gigante e um antivórtice para ambos os casos tipo-I e tipo-II. Nossos resultados numéricos estão em bom acordo com as expressões analíticas para separações maiores entre vórtices, as quais estão disponíveis em vários trabalhos anteriores na literatura. Propomos novas expressões (empíricas) válidas para qualquer distância de interação, as quais são ajustadas aos nossos dados numéricos para diversos valores do parâmetro de GL. Em seguida, utilizando os métodos numéricos e analíticos descritos em detalhes para supercondutores de uma banda, demonstramos e discutimos sobre a complexidade do comportamento resultante de dois condensados de pares de Cooper em supercondutores de duas bandas. As propriedades do sistema acoplado dependem das propriedades de cada banda de maneira não-trivial, a ponto do seu comportamento poder ser não só diferente, como até mesmo oposto ao dos condensados individuais. Com isso, discutimos a possibilidade de se ajustar este comportamento como função dos parâmetros microscópicos e da temperatura, o que é relevante para a compreensão das propriedades de materiais estudados recentemente (MgB_2, pnictides), de supercondutores em nanoescala, como também dos futuros compostos artificiais.

Abstract

This work has two parts. In the first one, we analyze the time evolution of wave packets in low dimensional systems. The time dependent Schrödinger equation is solved by means of the *split-operator* technique, which is easy to be computationally implemented and expanded to systems with more dimensions. We calculate the eigenstates and time evolution of wave packets in T-wires and quantum rings with injection channels. In the presence of an external magnetic field, the Aharonov-Bohm oscillations in the transmission and reflection coeficients of the quantum ring are verified. By analyzing the projections of the transmitted wave function on the subbands of the quantum wells describing the injection channels, we observe that the incoming and outgoing wave functions are in the same subband, although the other subband states can be accessed inside the ring region. The presence of a magnetic field induces a phase shift on these projections, which can be used for tunning the subband of the outgoing wave function. A similar effect can also be obtained by considering an asymmetric ring potential. We have also derived a variant of the *split-operator* method that allows one to deal with Zeeman and spin-orbit Hamiltonians. We verify that the results obtained by the method we developed are in good agreement with the analytical results for the Zeeman effect in semiconductor quantum dots.

We have also adapted the *split-operator* method to the study of graphene-based systems, within the tight-binding and continuum (Dirac) models. First, we briefly analyze the eigenstates of graphene quantum rings, comparing the results obtained by each model. Further, we verify the existence of a trembling motion of the wave function in graphene (*zitterbewegung*). We observe that in the presence of a magnetic field, the zitterbewegung becomes permanent. Besides, we demonstrate that the presence of an energy gap due to a substrate-induced potential may intensify the oscillations. In both cases, the experimental detection of this effect would be improved. We also demonstrate that the effect of strain on the electrons behavior in graphene is similar to that of a pseudo-magnetic field, capable of reproducing all the features related to an external field, such as the Landau levels and the persistent zitterbewegung. Moreover, we demonstrate how such strain effects can be used to produce valley filtering in graphene. In the presence of electrostatic potential barriers, we study two interesting effects in graphene monolayers: the Klein paradox and the Snell law for the electron tunneling.

In the second part of this thesis, we calculate the interaction potential between vortices in bulk superconductors within the Ginzburg-Landau (GL) theory, which is of importance for future vortex dynamics studies. We derived a set of coupled differential equations for both the vector potential and the order parameter, considering a number of fixed vortices positioned in chosen points of a plane as a constraint, where the merger of vortices into a giant-vortex is naturally allowed. We have obtained the interaction potentials between a vortex and another vortex, a giant-vortex and an antivortex, for both type-I and type-II cases. Our numerical results exhibit good agreement with the analytical

expressions for larger vortex-vortex separations available in previous work in the literature. We propose new (empirical) expressions valid for any interaction distance, which are fitted to our numerical data for several values of the GL parameter. Further, using the same numerical and analytical methods described in details for single-band superconductors, we demonstrate and discuss the complexity of the resulting behavior of two Cooper pairs condensates in two-band superconductors. The properties of the coupled system depend on those of each band in a non-trivial way, and their behavior might be not only different, but even opposite to the one of the individual condensates. Therefore, we discuss the possibility of tunning this behavior as a function of the microscopical parameters and temperature, which is of relevance for the understanding of the properties of recently studied materials, such as MgB_2 and the iron pnictides, of nanoscale superconductors, as well as of the futuristic artificial composites.

Sumário

Lista de Figuras p. xiv

1 Introdução p. 30

1.1 Semicondutores . . . . . p. 31

1.1.1 Modelo da massa efetiva . . . . . p. 36

1.1.2 Interação spin-órbita . . . . . p. 39

1.2 Grafeno . . . . . p. 42

1.2.1 Modelo *tight-binding* e a equação de Dirac . . . . . p. 43

1.3 Efeito Aharonov-Bohm . . . . . p. 49

1.4 Vórtices em supercondutores e o modelo de Ginzburg-Landau . . . . . p. 53

1.4.1 Supercondutores de duas bandas . . . . . p. 58

1.5 Objetivos e estrutura da Tese . . . . . p. 59

2 Evolução temporal - O método *split-operator* p. 62

2.1 Hamiltonianos que não envolvem spin . . . . . p. 64

2.2 Hamiltonianos do tipo *tight-binding* . . . . . p. 66

2.3 Hamiltonianos que envolvem spin . . . . . p. 70

2.3.1 Hamiltoniano de Dirac para o grafeno . . . . . p. 72

2.4 Evolução em tempo real . . . . . p. 73

2.4.1 Condições de contorno . . . . . p. 74

2.5 Evolução em tempo imaginário: obtendo autoestados . . . . . p. 76

3 Estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade p. 78

3.1 Fios T . . . . . p. 81

3.2 Anéis quânticos . . . . . p. 86

3.2.1 Estados localizados induzidos pela geometria do sistema . . . . p. 87

3.2.2 Evolução temporal para B = 0 . . . . . p. 88

3.2.3 Evolução temporal para B diferente de zero . . . . . p. 92

3.3 Anel assimétrico: efeitos de um potencial Gaussiano e de uma impureza p. 101

3.4 Influência da rugosidade sobre as oscilações Aharonov-Bohm da energia p. 106

3.5 Efeitos Zeeman e spin-órbita em pontos quânticos . . . . . p. 110

4 Estruturas baseadas em grafeno p. 116

4.1 Espectro de energia em anéis quânticos de grafeno . . . . . p. 116

4.1.1 Comparação com o modelo contínuo . . . . . p. 121

4.2 Evolução temporal de pacotes de onda em grafeno . . . . . p. 127

4.2.1 Polarização inicial do pseudo-spin e *zitterbewegung* . . . . . p. 128

4.2.2 Efeito da massa sobre o *zitterbewegung* . . . . . p. 136

4.2.3 Tunelamento de Klein . . . . . p. 139

4.2.4 Campos magnéticos externos e induzidos por tensão . . . . . p. 148

4.2.5 Filtro de vales . . . . . p. 152

4.2.6 Efeitos de campos externos e pseudo-magnéticos sobre o *Zitterbewegung*: oscilações permanentes . . . . . p. 156

5 Interação entre vórtices em supercondutores p. 159

5.1 O caráter assintótico do potencial entre vórtices . . . . . p. 160

5.2 Equações de Ginzburg-Landau para vórtices fixos . . . . . p. 164

5.3 Resultados numéricos e funções de fitting . . . . . p. 166

5.3.1 Interação vórtice-vórtice . . . . . p. 167

5.3.2 Interação vórtice-vórtice gigante . . . . . p. 174

5.3.3 O problema de três vórtices . . . . . p. 179

5.3.4 Interação vórtice-antivórtice . . . . . p. 183

5.4 Interação entre vórtices em supercondutores de duas bandas . . . . . p. 189

5.4.1 A definição do caráter tipo-I/tipo-II . . . . . p. 190

5.4.2 Equações de Ginzburg-Landau para vórtices fixos em duas bandas p. 194

5.4.3 Resultados numéricos e a interação do tipo-1.5 . . . . . p. 195

6 Conclusões e perspectivas p. 199

Apêndice A – Artigos publicados relacionados à tese p. 207

Apêndice B – Artigos em andamento p. 208

Apêndice C – Artigos publicados não relacionados à tese p. 209

Referências p. 210

Lista de Figuras

1 Ilustração que representa (a) um cristal de parâmetro de rede a e (b) seu respectivo potencial V periódico. . . . . p. 32

2 Gráfico qualitativo que mostra o comportamento de E como função (a) do parâmetro Δ e (b) do vetor de onda k, na primeira zona de Brillouin. p. 34

3 (a) Esquema ilustrativo das bandas de energia e do *gap* em um semicondutor, mostrando em azul as bandas preenchidas a $T = 0$ K, incluindo a de valência, e em cinza as que não estão ocupadas a esta temperatura, como a banda de condução. (b) Ilustração mostrando a excitação de um elétron (-), que passa da banda de valência (BV) para a de condução (BC), deixando assim um estado desocupado (+) na primeira. . . . . p. 35

4 Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com *gaps* E_{gap}^{B} e E_{gap}^{W} diferentes, onde as bandas de condução e valência apresentam degraus de potencial com alturas V_e e V_h, respectivamente. . . . . p. 35

5 Estrutura cristalina de uma monocamada de grafeno, cujo parâmetro de rede é a, mostrando a superposição das duas sub-redes A e B. . . . . p. 42

6 Estrutura de bandas de uma monocamada de grafeno. . . . . p. 45

7 Esquema de um experimento de fenda dupla na presença de um solenóide longo (círculo cinza), que gera um campo magnético **B** em seu interior. As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons passam, e as setas sólidas mostram a direção do potencial vetor **A**. . . p. 49

8 Autoestados de um elétron em um anel quântico ideal como função do fluxo magnético. . . . . p. 52

9 Efeito Meissner: um material que apresenta comportamento normal a temperaturas $T > T_C$ passa a repelir campos magnéticos quando se torna supercondutor para $T < T_C$. . . . . p. 54

10 Diagrama de fases $H - T$ para um supercondutor do tipo-I (mercúrio) e um do tipo-II (nióbio-estanho). Os campos magnéticos definidos como B_c, B_{c1} e B_{c2} são os campos críticos que delimitam as regiões onde o sistema é puramente supercondutor, onde há estado misto e onde o sistema é normal. [91] . . . . . p. 57

11 Esboço da matriz pentadiagonal proveniente do modelo TB para uma rede bidimensional ou, equivalente, do esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva em duas dimensões. A matriz é toda nula, exceto na diagonal e nas sub-diagonais representadas pelas linhas sólidas e tracejadas, respectivamente. Cada bloco consiste de uma matriz quadrada de ordem I, o número de linhas de sítios da rede. Existem J blocos, onde J é o número de colunas de sítios da rede. Assim, o número total de elementos na matriz H_{TB} em duas dimensões é $I \times I \times J \times J$ . . . . . p. 68

12 Perfis de potencial para (a) anéis e (b) fios T, considerando-se conexões (em cima) simples e (em baixo) suaves. As conexões suaves são descritas por círculos de raio $R_s = 300$ Å. A espessura dos canais em ambos os sistemas é $W = 100$ Å e o raio médio dos anéis é $R_{av} = 600$ Å. O potencial é definido como $V(x, y) = 0$ na região interna do anel e dos canais (azul) e V_e fora (branco). . . . . p. 79

13 Diagrama de energia versus vetor de onda k_x para um canal (linhas sólidas). As energias dos três pacotes de onda considerados, ε_1, ε_2 e ε_3 (linhas tracejadas grossas) estão mostradas. As espessuras das distribuições de k_x e E do pacote de onda inicial estão representadas pelas ondas vertical e horizontal, respectivamente. O vetor de onda $k_3^{(1)}$ está relacionado com a energia ε_3 na subbanda do estado fundamental, enquanto $k_3^{(2)}$ é para a mesma energia, mas na subbanda do primeiro estado excitado. . . . . p. 81

14 Energias dos quatro primeiros autoestados de uma junção de um fio T como o mostrado na Fig. 12 (b), como função do raio do círculo que descreve a conexão suave entre os canais, para espessuras $W = 100$ Å. Os insets mostram o módulo quadrado das funções de onda dos estados ligados. . . . . p. 82

15 Corrente de probabilidade dependente do tempo, calculada nos canais vertical (preta, pontilhada) e horizontal (vermelha, sólida) de um fio T de espessura $W = 100$ Å , a uma distância 1400 Å do centro da junção, considerando conexões com ângulo reto e com $R_s = 300$ Å . Em (a), dois valores para a energia do pacote de onda foram considerados, ε_1 e ε_2, enquanto em (b), consideramos ε_3 nas subbandas $k_3^{(1)}$ e $k_3^{(2)}$. . . . . p. 83

16 (a) Tempos de transmissão calculados para uma partícula clássica movendo-se em um fio T (black circles) e o instante onde o valor máximo de J_T ocorre no canal vertical (red triangles), como funções da energia do pacote de onda ε, para canais de espessura $W = 100$ Å , considerando conexões simples (ângulo reto). (b) Correntes médias na primeira ($\langle J_x^{(1)} \rangle$, preta) e segunda ($\langle J_x^{(2)} \rangle$, vermelha) subbandas como função da energia do pacote de onda ε . . . . . p. 84

17 (a) Probabilidade de transmissão como função da energia do pacote de onda inicial ε (na primeira subbanda) para um fio T com canais $W = 100$ Å , considerando-se vários valores para o raio R_s das conexões suaves. (b) Raiz quadrada das energias dos picos e vales para cada curva mostrada em (a). As curvas são ajustes lineares para os resultados numéricos (símbolos). Tipos de curva similares em (a) e (b) correspondem ao mesmo R_s . . . . . p. 85

18 (a) Função de onda do estado fundamental (o estado fundamental e o primeiro excitado são praticamente degenerados com funções de onda simétrica e anti-simétrica), considerando conexões simples entre o canal e o anel. Funções de onda (b) do estado fundamental e (c) do segundo estado excitado, para conexões suaves. As linhas pretas ilustram os limites dos perfis de potencial, que são os mesmos da Fig 12 (a). . . . . p. 87

19 Evolução temporal das projeções da função de onda sobre o estado fundamental (preto) e primeiro estado excitado (vermelho) de um poço quântico de espessura $W = 100$ Å , calculadas em três pontos diferentes do sistema: canal esquerdo, braço superior do anel e canal direito. O pacote de onda é injetado na primeira subbanda e tem energia (a) ε_1, (b) ε_2 e (c) ε_3. . . . . p. 90

20 O mesmo que a Fig. 19 (c), mas considerando agora um pacote de onda de energia ε_3 na segunda subbanda, com $k_3^{(2)}$. . . . . p. 91

21 Evolução temporal das projeções da função de onda sobre as subbandas do estado fundamental (preta), primeiro estado excitado (vermelha) e segundo estado excitado (azul) de um poço quântico de espessura $W = 100$ Å , calculadas no braço superior do anel, considerando-se um pacote de onda para um estado na segunda subbanda, com energia 430 meV. . p. 92

22 Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel. O pacote de onda inicial está na primeira subbanda, tem largura $\sigma = 200$ Å e energia (a) ε_1 e (b) ε_2. . . . . p. 93

23 Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel. O pacote de onda inicial tem largura $\sigma = 200$ Å , energia ε_3 e está (a) na primeira subbanda, com vetor de onda $k_3^{(1)}$, ou (b) na segunda subbanda, com vetor de onda $k_3^{(2)}$. . . . . p. 94

24 Corrente de probabilidade dependente do tempo, calculada em três pontos: canal esquerdo, braço superior do anel e canal direito, para pacotes de onda com energia ε_1 (preta, sólida), ε_2 (vermelha, tracejada) e ε_3 (azul, pontilhada). Em cada gráfico, para tempos acima das linhas verticais pontilhadas (400 fs para o canal esquerdo e 600 fs para o braço superior e para o canal direito), os valores estão multiplicados por 10, para facilitar a visualização. . . . . p. 95

25 Probabilidades de transmissão T para pacotes de onda com energia ε_1 (preta, tracejada) e ε_2 (vermelha, pontilhada) na primeira subbanda, e com energia ε_3 na primeira (azul, sólida) e segunda (verde, tracejada-pontilhada-pontilhada) subbandas, como funções do campo magnético, considerando conexões (a) simples e (b) suaves. . . . . p. 96

26 Probabilidades de transmissão T para pacotes de onda com energia $\varepsilon = 140$ (preta), 160 (vermelha) e 170 meV (azul), como funções do campo magnético, considerando-se conexões (a) de ângulo reto (simples) e (b) suaves entre os canais e o anel. . . . . p. 98

27 Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel, sob um campo magnético $B = 0.18$ T, aplicado perpendicularmente ao plano do anel. O pacote de onda inicial tem largura $\sigma = 200$ Å , energia ε_3 e está na (a) primeira e na (b) segunda subbanda. . . . . p. 99

28 Contribuições $< J_x^{(j)} >$ das subbandas dos estados fundamental (preta, tracejada), primeiro excitado (vermelha, pontilhada) e segundo excitado (verde, tracejado-pontilhado) para a corrente de transmissão, como função do campo magnético B, calculadas no canal da direita, considerando-se pacotes de onda com energia ε_3 na (a) primeira e (b) segunda subbandas, e (c) com energia $\varepsilon = 430$ meV na segunda subbanda. A linha sólida azul é a soma das contribuições das três subbandas, $< J_x^{(1)} > + < J_x^{(2)} > + < J_x^{(3)} >$. . . . . p. 101

29 (a),(d) Probabilidade de transmissão como função da profundidade V_G do potencial Gaussiano, para pacotes de onda com energia ε_3 na primeira ($k_3^{(1)}$) e segunda ($k_3^{(2)}$) subbandas, considerando-se anéis quânticos com conexões simples (painéis da esquerda) e suaves, com $R_s = 300$ Å (painéis da direita). Dois valores de campo magnético B são considerados: 0 T (sólida) e 0.18 T (pontilhada). (b),(e) Contribuições $< J_x^{(1)} >$ e $< J_x^{(2)} >$, da primeira e segunda subbanda, respectivamente, para a corrente total, considerando-se um pacote de onda inicialmente na primeira subbanda, com $k_3^{(1)}$. (c),(f) Contribuições $< J_x^{(1)} >$ e $< J_x^{(2)} >$ para um pacote de onda inicialmente na segunda subbanda, com $k_3^{(2)}$. As linhas $< J_x^{(1)} >$ e $< J_x^{(2)} >$ para $B = 0.18$ T (pontilhada) foram deslocadas por +0.5, para ajudar a visualizar os resultados (exceto em (c), onde elas foram deslocadas por +1.0). . . . . p. 103

30 Probabilidade de transmissão como função do campo magnético para pacotes de onda com energia (a) ε_2 e (b) ε_3 na primeira subbanda ($k_3^{(1)}$), considerando anéis quânticos com conexões canal-anel suaves R_s = 300 Å, para vários valores de profundidade V_G do potencial Gaussiano: 0 (preta, sólida), 10 (vermelha, tracejada), 20 (azul, pontilhada), 30 (verde, tracejada-pontilhada) e 40 V (amarela, tracejada-pontilhada-pontilhada). As últimas quatro curvas foram deslocadas de maneira a ajudar a visualização dos resultados e o tamanho do deslocamento está indicado no topo de cada curva. . . . . p. 105

31 Probabilidades de transmissão para um pacote de onda com energia ε_2, como funções do campo magnético, considerando-se conexões suaves entre os canais e o anel, na presença de (a) uma impureza, localizada a três distâncias diferentes z_{imp1} do plano do anel: 1 Å (preta, sólida), 100 Å (vermelha, tracejada) e 400 Å (azul, pontilhada) , e (b) duas impurezas, considerando-se distâncias $z_{imp1} = 1$ Å e $z_{imp2} = 1$ Å (preta, sólida) ou $z_{imp2} = 100$ Å (vermelha, tracejada). . . . . p. 106

32 Perfis de potencial para (a) um anel ideal e para anéis com rugosidade nas superfícies (b) interna, (c) externa, e em (d) ambas as superfícies, considerando-se $R_i = 140$ Å, $R_e = 240$ Å, $\Gamma = 2$ Å e $L_c = 10$ Å. . . . . p. 107

33 (a) Espectro de energia do elétron e (b) energias de transição do estado fundamental (sólida) para o primeiro (tracejada), segundo (pontilhada) e terceiro (tracejada-pontilhada) estado exitado, como função do campo magnético para um anel de superfícies ideais, considerando-se $\overline{R_i} = 140$ Å e $\overline{R_o} = 240$. . . . . p. 108

34 Espectro de energia do elétron como função do campo magnético em um anel quântico com rugosidade nas superfícies (a) interna, (b) externa e (c) em ambas as superfícies, considerando-se $L_c = 5$ Å, para $\Gamma = 2$ Å (sólida) e $\Gamma = 10$ Å (pontilhada). . . . . p. 109

35 Espectro de energia do elétron como função do campo magnético em um anel com rugosidade nas superfícies (a) interna, (b) externa e (c) em ambas as superfícies, considerando-se $L_c = 20$ Å, para $\Gamma = 2$ Å (sólida) e $\Gamma = 10$ Å (pontilhada). . . . . p. 110

36 Energias de transição do estado fundamental para o primeiro e segundo estados excitados, como função do campo magnético no anel com rugosidade nas superfícies interna (pontilhada), externa (tracejada) e em ambas as superfícies (sólida), considerando-se $L_c = 5$ Å, para (a) $\Gamma = 2$ Å e (b) $\Gamma = 10$ Å. . . . . p. 111

37 Energias dos quatro primeiro autoestados de um ponto quântico plano circular de raio R = 100 Å, como função do campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano. . . . . p. 113

38 Componente z de spin como função do tempo em um ponto quântico sob um campo magnético aplicado paralelamente ao plano do ponto, considerando-se apenas efeito Zeeman, para funções inicialmente com spin "up" (preta) ou "down" (vermelha) . . . . . p. 114

39 Esquema dos anéis hexagonais (a) armchair e (b) zigzag, assim como o (c) anel circular, considerados nesta seção. As primeiras duas geometrias são caracterizadas pelo número de anéis de carbono $N_E(N_I)$ na borda exterior (interior), enquanto a última é caracterizada pela largura W e raio médio R. . . . . p. 117

40 Espectro de energia como função do fluxo magnético através de um único hexágono de carbono para o anel quântico hexagonal armchair mostrado esquematicamente na Fig. 1(a), considerando-se duas espessuras do anel: (a) $N_E = 15$, $N_I = 10$ e (b) $N_E = 15$, $N_I = 3$. Este espectro é simétrico com relação a $E = 0$. . . . . p. 118

41 Espectro de nergia como função do fluxo magnético passando por a penas um hexágono de carbono, para o anel quântico hexagonal mostrado esquematicamente na Fig. 40(b), considerando-se duas espessuras do anel: (a) $N_E = 15$, $N_I = 10$ e (b) $N_E = 15$, $N_I = 9$. No (primeiro) último caso, as bordas zigzag internas e externas estão (anti-) alinhadas, como ilustrado nas inserções. O espectro de energia é simétrico com relação a $E = 0$. . . . . p. 119

42 Espectro de energia como função do fluxo magnético através de um único hexágono de carbono para (a) o anel circular mostrado esquematicamente na Fig. 39(c), e (b) para um anél quântico formado por um potencial dependente do sítio dado pela Eq. (4.1), com suavidade $S = 10$ Å e altura $M_0 = 1$ eV. Em ambos os casos, o raio médio do anel é $R = 80$ Å e a espessura é 60 Å . O espectro é simétrico com relação a $E = 0$. . . . p. 120

43 (a) Anel quântico armchair hexagonal (pontos pretos) considerado no cálculo TB, com $N_E = 15$ e $N_I = 10$, junto com o anel unidimensional $R \approx 47$Å (curva vermelha) considerado no modelo simplificado. (b) Espectro de energia obtido através do modelos simplificado (sólida) e TB (tracejada) como função do fluxo magnético que atravessa o anel circular vermelho ilustrado em (a). Curvas com cores diferentes representam índices de momento angular l diferentes. Os resultados do modelo TB com um termo de massa de fundo $M = 0.5E_0$ são também comparados com aqueles do modelo simplificado para este caso. . . . . p. 123

44 Níveis de energia com l=-10, . . . ,10 de um anel quântico ideal de grafeno como função do raio R do anel, para campos magnéticos (a) B_0=0 T e (b) $B_0 = 3$ T, considerando-se um termo de massa M =50 meV.p. 125

45 (a) Níveis de energia do anel quântico ideal de grafeno como função do campo magnético externo, considerando-se $M = 2E_0$ e $R = 50$ nm. A curva preta representa o estado fundamental. (b) Valor esperado de $\langle L_z \rangle/\hbar$ para o estado fundamental como função do campo magnético para ambos os vales K (preta, tracejada) e K' (preta, tracejada-pontilhada). Os valores esperados de $\langle S_z \rangle/\hbar$ para o vale K (K') são mostrados na inserção superior (inferior) da figura. A curva azul sólida representa o valor esperado de $\langle J_z \rangle$, que é o mesmo para ambos os vales. . . . . p. 126

46 Densidade de corrente angular nos vales (a) K e (b) K' de um anel quântico de grafeno como função do campo magnético para o estado fundamental ilustrado pela curva preta na Fig. 45(a) . . . . . p. 127

47 (a) Esboço da rede hexagonal do grafeno, feita de duas redes triangulares superpostas A e B. Os átomos são indexados como $\{n, m\}$ de acordo com seus índices de linha e coluna n e m, respectivamente. (b) Rede recíproca do grafeno, com pontos de Dirac K (preto) e K' (cinza), onde a área definida pelos vetores recíprocos $\vec{b}_1 = (-2\pi/3a_0, \sqrt{3})$ e $\vec{b}_2 = (4\pi/3a_0, 0)$ representa a primeira zona de Brillouin do grafeno. Os índices para cada ponto de Dirac são explicados no texto. . . . . p. 129

48 (a) Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda após uma evolução temporal de $t = 40$ fs, para três valores diferentes do parâmetro adimensional $k_y^0 d$. (b) Valor experado da posição e (c) velocidade na direção y como função do tempo. Os resultados obtidos através do modelo TB (de Dirac) são apresentados como curvas (símbolos), para $k_y^0 d = 1$ (sólida, círculos), 2 (tracejada, triângulos) e 4 (pontilhada, quadrados) . p. 130

49 Velocidades finais para os pacotes de onda Gaussianos da Eq. (4.7), com pseudo-spin $c_1 = c_2 = 1$ e momento $\vec{q} = (0, k_y^0) + K$ como função (a) do momento relativo k_y^0, para espessuras $d = 50$ Å , 100 Å e 200 Å , e (b) da espessura d, para momenta $k_y^0 = 0.01$ Å $^{-1}$, 0.02 Å $^{-1}$ e 0.04 Å $^{-1}$. Os símbolos (curvas) são obtidos pelo modelo TB (de Dirac). Em (b), os resultados do modelo de Dirac para $k_y^0 = 0.02$ Å $^{-1}$ (tracejada) e 0.04 Å $^{-1}$ (sólida) estão multiplicados por 0.985 e 0.97, respectivamente. . . p. 131

50 (a) Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda após uma evolução temporal de $t = 40$ fs, para três configurações iniciais de pseudo-spin $[c_1, c_2]^T$ e momento $\vec{q}_0$: 1) $[1, 0]^T$, $k_x^0 = 0$ e $k_y^0 d = 4$; 2) $[1, i]^T$, $k_x^0 = 0$ e $k_y^0 d = 4$; e 3) $[1, i]^T$, $k_x^0 d = 4$, $k_y^0 = 0$. (b) Valor esperado de x obtido pelo modelo TB para os pacotes de onda iniciais 1 (sólida), 2 (tracejada) e 3 (pontilhada) como função do tempo. Os resultados obtidos pelo modelo de Dirac, após a rotação de coordenadas apropriada (ver texto), são mostrados como círculos, triângulos e quadrados, respectivamente. A inserção mostra a trajetória do pacote de onda obtida pelo modelo TB para o pacote de onda inicial 3. . . . . p. 133

51 (a) Valor esperado da velocidade como função do tempo, para pacotes de onda com $k_y^0 = k_x^0 = 0$ e pseudo-spinor $[1,1]^T$ (sólida) e $[1,i]^T$ (círculos) no ponto de Dirac $K = (0, 4\pi/3\sqrt{3}a_0)$ (ponto 2 na Fig. 47(b)), e $[1,1]^T$ (triângulos) em $K' = (2\pi/3a_0, 2\pi/3\sqrt{3}a_0)$ (ponto 1 na Fig. 47(b)). As componentes x e y da velocidade no último caso são mostradas pelas curvas tracejada e pontilhada, respectivamente. . . . . p. 134

52 Valor esperado da velocidade na direção y como função do tempo, para diferentes valores do potencial relacionado à massa $M_0 = 0$ (sólida), 10 (tracejada), 50 (pontilhada) e 100 meV (tracejada-pontilhada). O pacote de onda inicial tem energia média $E = 100$ meV e largura $d = 200$ Å . A inserção mostra as velocidades obtidas por $\frac{d\langle y\rangle}{dt}$ (curva) e $\langle\sigma_y\rangle$ (símbolos) para o caso $M_0 = 0$. . . . . p. 137

53 Valor esperado da posição em x e y como função do tempo para um pacote de onda com energia $E = 100$ meV e largura $d = 100$ Å sendo espalhado por uma barreira de massa cujo gap resultante é $M_0 = 300$ meV. A barreira é suave, possuindo uma interface linear de largura w_s. p. 138

54 Esquema que ilustra o tunelamento de Klein: um elétron em um cone de Dirac, delimitado pelas linhas cinzentas, com energia E (linha vermelha tracejada) menor que a altura do degrau de potencial V_0 (linha preta), pode se propagar na região do degrau como um buraco, se sua incidência for normal ao degrau. A curva à direita do gráfico representa a distribuição de energia do pacote de onda Gaussiano considerado neste trabalho, com largura $\Delta E = \hbar v_F \Delta k$. . . . . p. 140

55 Probabilidades de encontrar o elétron nas regiões 1 (P_1, preto) e 2 (P_2, vermelho), como função do tempo, para $V = 0$ (a), 110 meV (b) e 250 meV (c). Dois valores são considerados para a largura do pacote de onda: $d = 150$ Å (sólida) e 250 Å (pontilhada) . . . . . p. 141

56 Probabilidade de encontrar o elétron após a região da barreira (P_2) como função do tempo e do potencial V_0, para $E = 100$ meV e $d = 150$ Å (a) e 250 Å (b). . . . . p. 142

57 Curvas de nível da função de onda refletida por um degrau de potencial $V_0 = 110$ meV em três instantes diferentes. A área hachurada do plano, delimitada pela linha pontilhada horizontal, corresponde à região de potencial não nulo. O pacote de onda inicial tem energia $E = 100$ meV, largura $d = 150$ Å e se propaga na direção y. . . . . p. 143

58 Curvas de nível do módulo quadrado (em cima) e da parte real (em baixo) da secção transversal em $x = 0$ da função de onda como função do tempo. Consideramos uma barreira de potencial $V = V_0\Theta(\mathsf{y})$, para três valores de V_0. A linha tracejada horizontal determina o limite da barreira de potencial. A inserção mostra o módulo quadrado da secção transversal da função de onda $|\Psi(0, \mathsf{y})|^2$ em $t = 170$ fs para $V_0 = 110$ meV.p. 144

59 Velocidade de um pacote de onda que se propaga na direção y com $E = 100$ meV e $d = 200$ Å, tunelando através de uma barreira de potencial $V = V_0\Theta(\mathsf{y})$, para dois valores da altura do potencial: $V_0 = 0$ (preta, sólida) e -250 meV (vermelha, tracejada). . . . . p. 145

60 Evolução temporal do módulo quadrado da função de onda em um degrau de potencial $V_0 = 200$ meV, considerando-se um pacote de onda inicial com energia $E = 100$ meV propagando-se em uma direção que forma um ângulo de incidência $\theta_i = \pi/4$. O degrau de potencial começa em $\mathsf{y} = 0$ e segue para $\mathsf{y} > 0$. As linhas vermelhas representam os caminhos percorridos por um feixe de luz refratado em um metamaterial com este mesmo índice de refração (negativo). . . . . p. 146

61 Curvas de nível do módulo quadrado das funções de onda para $t = 0$ (círculos pretos) e 500 fs (vermelha) em uma monocamada de grafeno com uma barreira de potencial $V = 200$ meV de espessura $e = 500$ Å, considerando-se um pacote de onda inicial com energia $E = 100$ meV propagando-se em uma direção que forma um ângulo de incidência $\theta_i = \pi/4$. As linhas pontilhadas delimitam a barreira e as linhas tracejadas mostram os caminhos para os feixes de luz incidente e refratado em uma lâmina de faces paralelas de mesma espessura e índice de refração. . . . p. 147

62 (a) Potencial (b) e média temporal para um pacote de onda com energia $E = 300$ meV movendo-se em um potencial do tipo tabuleiro de xadrez, com condições de contorno periódicas. Em (a), quadrados vermelhos (brancos) têm $V = 600$ (0) meV. Em (b), a média temporal da função de onda é plotada em escala logarítmica, onde o vermelho (branco) representa um valor mais alto (baixo). . . . . p. 148

63 (a) Esboço de uma folha de grafeno tensionada: consideramos uma amostra retangular de largura W e altura L, flexionada como um arco de círculo de raio R. A folha de grafeno não tensionada é mostrada como círculos abertos, para comparação. (b) Barreira magnética induzida por tensão, obtida flexiondando-se a rede do grafeno apenas na região $y \geq 0$. O número de átomos da rede foi reduzido em ambas as figuras, em comparação com as redes estudadas neste trabalho, apenas para facilitar a visualização. . . . . p. 149

64 Trajetórias do pacote de onda no plano $x - y$, obtidas pelo método TB, para um momento inicial $k_y^0 = 0.02$ Å^{-1} em torno dos pontos K (símbolos) e K' (curves), para (a) um grafeno não tensionado com uma barreira magnética de altura $B = 5$ T (sólida, círculos), 7 T (tracejada, triângulos) e 10 T (pontilhada, quadrados), e para (b) uma folha de grafeno flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1$ μm (sólida, círculos), 0.8 μm (tracejada, triângulos) e 0.6 μm (pontilhada, quadrados), considerando $B = 0$ T. Em (b), símbolos e curvas coincidem para cada valor de R. . . . . p. 151

65 (a) Trajetórias no plano $x-y$ para pacotes de onda com momento inicial $k_y^0 = 0.02$ Å^{-1} em torno de K (símbolos) e K' (curvas), considerando-se uma folha de grafeno flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1$ μm e um campo magnético externo $B = 0$ T (aberto, sólida) e 4.9 T (fechado, tracejada). As curvas azuis finas mostram os resultados para duas outras intensidades de campo magnético externo para o pacote em K. (b) Probabilidade de se encontrar a partícula em $y \geq 0$ como função do tempo, para pacotes de onda com as mesmas configurações que em (a). p. 153

66 Probabilidade de se encontrar o elétron na região do filtro $y \geq 0$, para um pacote de onda inicial dado por uma combinação de distribuições Gaussianas em torno de ambos os pontos K e K' de Dirac, para três valores diferentes de β, que representa a componente em K do pacote de onda. . . . . p. 154

67 Trajetórias obtidas pelo modelo de Dirac para pacotes de onda nos vales K e K', considerando-se $E = 100$ meV e $d = 200$ Å, em um sistema que apresenta uma barreira pseudo-magnética $B = 2.5$ T, delimitada pela linha horizontal pontilhada em $y = 0$. Os pacotes se propagam inicialmente formando um ângulo $\pi/4$ com relação à normal, ou seja, o pseudo-spinor é considerado como $c_1 = 1$ e $c_2 = e^{i\pi/4}$. A área hachurada representa a região onde o campo magnético é não-nulo ($\mathsf{y} > 0$). . . . . p. 155

68 Radiação do dipolo magnético como função do tempo para pacotes de onda com pseudo-spinor inicial $[1, 1]^T$ em K (preta) e K' (vermelha), considerando-se uma folha de grafeno (a) na ausência de tensão e campos magnéticos, (b) sob um campo magnético $B = 4.9$ T aplicado uniformemente, (c) flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1\mu$m (ver Fig. 63) e (d) com ambos o campo magnético uniforme $B = 4.9$ T e a flexão $R = 1\mu$m. Curvas sólidas (tracejadas) são os resultados para a componente ε_y (ε_x). . . . . p. 157

69 Força de interação vórtice-vórtice Ω obtida numericamente como função da separação d entre vórtices, para vários valores de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ nos regimes (a) tipo-II e (b) tipo-I. (c) Separação crítica d_c (quadrados, escala da direita) e extremo Ω_{max} (triângulos, escala da esquerda), que correspondem respectivamente à posição e à amplitude do pico de força, como funções do parametro de Ginzburg-Landau. As funções de fitting para d_c e Ω_{max} são mostradas pelas curvas sólidas. . . . . p. 167

70 Comparação entre as forças de interação V-V como função da separação d obtidas pelo método numérico (símbolos) e pelas expressões assintóticas (curvas) das Eqs. (5.15, 5.16), para $\mu = 1.7$ (a) e $\mu = 0.6$ (b). As forças são mostradas em escala log_{10} e os valores dos parâmetros de ajuste p, q, γ e δ são dados em cada painel. . . . . p. 169

71 (a) Comparação entre as forças de interação V-V como função da separação d obtidas pelo método numérico (símbolos) e pela função de fitting (curvas) dada pela Eq. (5.17). As curvas sólidas (tracejadas) e os triângulos (quadrados) são os resultados para $\mu = 0.6$ (1.7). (b-c) Os resultados para cada valor de μ são mostrados separadamente em escala logarítmica, para enfatizar os pequenos desvios entre a função de fitting e os dados numéricos. . . . . p. 170

72 Parâmetros de ajuste (símbolos) da Eq. (5.17) como função de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ para o caso V-V. As curvas são funções de fitting dadas pelas Eqs. (5.18) para $\eta_i(\mu)$ $(i = 1 - 4)$, em três intervalos diferentes: $0 < \mu < 0.5$, $0.5 < \mu < 1$ e $1 < \mu$. A inserção mostra uma ampliação dos resultados para η_4 para os maiores valores de μ. . . . . p. 171

73 Força de interação vórtice-vórtice gigante Ω obtida numericamente como função da separação d, para vários valores de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ nos regimes (a) tipo-II e (b) tipo-I. (c) Separação crítica d_c (quadrados, escala da direita) e extremo Ω_{max} (triângulos, escala da esquerda), que correspondem respectivamente à posição e à amplitude do pico de força, como funções do parametro de Ginzburg-Landau. As funções de fitting para d_c e Ω_{max} são mostradas pelas curvas sólidas. . . . . p. 175

74 Comparação entre a força de interação V-GV como função da separação d, obtida pelo método numérico (símbolos) e pelas expressões analíticas (curvas) das Eqs. (5.15, 5.16), para $\mu = 1.7$ (a) and $\mu = 0.6$ (b). As forças são mostradas em escala log_{10} e os valores dos parâmetros de ajuste p, q, γ e δ são dados em cada figura. . . . . p. 176

75 (a) Comparação entre as forças de interação V-V como função da separação d obtidas pelo método numérico (símbolos) e pela função de fitting (curvas) dada pela Eq. (5.17). As curvas sólidas (tracejadas) e os triângulos (quadrados) são os resultados para $\mu = 0.6$ (1.7). Os resultados para cada valor de μ são também mostrados separadamente em escala logarítmica, para enfatizar os pequenos desvios entre a função de fitting e os dados numéricos: (b) $\mu = 1.7$; (c) $\mu = 0.6$. . . . . p. 177

76 Parâmetros de ajuste $\eta_{i=1-4}$ (símbolos) da Eq. (5.17) como função de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ para o caso V-GV. As curvas mostram o ajuste de $\eta_i(\mu)$ dado pelas Eqs. (5.18a-d) para três intervalos diferentes, definidos no texto como intervalo 1 ($0 < \mu < 0.5$), intervalo 2 ($0.5 < \mu < 1$) e intervalo 3 ($1 < \mu$). . . . . p. 179

77 Energia da interação entre três vórtices localizados nos vértices de um triângulo equilátero como função do comprimento do lado d do triângulo, obtidos pelo ansatz de três vórtices (tracejada) e pela interação entre pares (sólida), isto é, por $E_{int}(d) = 3E_{int}^{pair}(d)$, para $\mu = 0.8$ e 1.7. . . . . p. 181

78 Curvas de nível da amplitude do parâmetro de ordem para os casos indicados na Fig. 77, ou seja, considerando-se $\mu = 0.8$ (1.7) e $d = 3.2\lambda$ (1.8λ), obtidas para dois (a, c) e três (b, d) vórtices interagentes. . . . p. 182

79 (a) Energia e (b) força (valor absoluto) da interação V-AV como função da separação d, para $\mu = 0.6$ (triângulos) e 1.7 (quadrados). Os símbolos fechados (abertos) são os resultados obtidos através do processo numérico de relaxação aumentando-se (diminuindo-se) gradualmente d de 0 a 15 λ (de 15 λ a 0). Uma histerese é observada em torno de uma separação crítica d_E, como indicado pelas setas, e a solução representada pelos símbolos abertos é estável apenas para $d > d_A$. (c) Separações críticas d_E (quadrados) e d_A (triângulos) obtidas numericamente como função do parâmetro de Ginzburg-Landau μ, junto com suas funções de fitting (curvas). . . . . p. 184

80 Super-corrente (em cima) e amplitude do parâmetro de ordem (em baixo) ao longo da direção da aproximação entre o vórtice e o antivórtice x, para separações V-AV indicadas pelas setas na Fig. 10 (b), ou seja, $d = 9.2\lambda$ (5.2 λ), para $\mu = 0.6$ (1.7). Curvas pretas (cinzas) se referem aos estados representados pelos símbolos abertos (fechados) na Fig. 79 (b). . . . . p. 185

81 Funções de fitting (curvas) para os parâmetros Δ_1 e Δ_2 na Eq. (5.21), para a força de interação V-AV em $d > d_E$, como função do parâmetro de Ginzburg-Landau $\mu = \sqrt{2}\kappa$. Os dados da Tabela 5 são mostrados como símbolos, para comparação. . . . . p. 188

82 Energia da interface normal-supercondutor como função da razão entre densidades de estado parciais nos dois condensados (a), e as energias de interação vórtice-vórtice como função da distância entre vórtices (b-d) para cada escolha de parâmetros indicada. A força de interação de curto alcance muda de comportamento quando a energia de superfície muda de sinal. . . . . p. 194

83 Diagrama de fases da interação de longo alcance para um cristal MgB_2, variando-se a temperatura e a razão entre (a) as velocidades de Fermi e (b) entre as densidades de estados parciais de cada banda. A linha preta separa as regiões de atração e repulsão em longo alcance. A linha branca mostra os pontos onde E_S muda de sinal positivo para negativo à medida que as razões aumentam. . . . . p. 196

84 (a) Diagrama de fase $(v_1/v_2, n_1/n_2, T)$ da interação de longo alcance entre vórtices para LiFeAs, onde $\kappa_1 = 2.4$. [183] A isosuperfície ilustrada representa $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$, em outras palavras, o ponto de mudança do comportamento de longo alcance. (b-d) Cortes de (a) nos planos $T = 0.9\,T_C$, $v_1/v_2 = 0.722$, e $n_1/n_2 = 1.384$. Curvas pretas (brancas) correspondem a $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$ $(E_S = 0)$. . . . . p. 197

1 Introdução

Nesta Tese, pretendemos demonstrar e discutir resultados que constituem-se de contribuições para um amplo leque de assuntos que têm sido bastante discutidos no meio científico nos últimos anos: estudamos os autoestados e a evolução temporal de pacotes de onda em nanoestruturas baseadas em grafeno e em semicondutores, o que envolve temas como o efeito Aharonov-Bohm, [1] o acoplamento spin-órbita em semicondutores, [2, 3] o movimento trêmulo da posição do elétron sob certas condições, conhecido como *zitterbewegung*, [4] o tunelamento de Klein e o aprisionamento de elétrons em grafeno, [5] os efeitos de tensão em uma monocamada de grafeno e a possibilidade de se manipular os vales eletrônicos, [6] etc. Além disso, estudamos também a interação entre vórtices em supercondutores. Na verdade, a nossa motivação para estudar este tema e o interesse renovado neste tipo de estudo que podemos perceber atualmente no meio científico deve-se, em grande parte, aos resultados experimentais recentemente publicados por Moshchalkov *et al.* [7], onde demonstrou-se que em uma amostra de MgB_2 pode-se obter uma estrutura de vórtices bastante incomum, a qual sugere que a interação entre os vórtices neste material é repulsiva a curto alcance e atrativa a longo alcance. Desde então, uma intensa discussão tem sido feita na literatura sobre a existência deste tipo de interação não-monotônica entre vórtices. (ver, por exemplo, [8]) Neste contexto, contribuímos com a discussão demonstrando como se obter o potencial de interação entre vórtices de uma forma bem geral e analisando a possibilidade de se encontrar a interação não-monotônica em MgB_2 que explicaria os resultados experimentais da Ref. [7].

Devido ao grande número de assuntos diferentes a serem abordados, dividimos este capítulo introdutório em diferentes seções, nas quais daremos o embasamento teórico para o estudo de cada tema. No caso das heteroestruturas semicondutoras, abordaremos o problema usando a teoria da massa efetiva [9], enquanto para o grafeno, usaremos os dois modelos conhecidos para a descrição deste sistema: o contínuo [10] e o tight-binding, [11] fazendo uma comparação entre os resultados obtidos por cada método. Já no caso dos

vórtices em supercondutores, utilizaremos o modelo fenomenológico de Ginzburg-Landau. [12] A seguir, explicaremos em detalhes os modelos citados para cada caso.

1.1 Semicondutores

As estruturas semicondutoras de dimensionalidade reduzida, como poços, fios, pontos e anéis quânticos, têm sido objeto de intensos estudos por muitos anos, onde diversas aplicações tecnológicas para tais estruturas foram encontradas. [13, 14, 15] Particularmente, devido às suas propriedades físicas e aplicações em dispositivos opto-eletrônicos, os pontos quânticos semicondutores auto-crescidos têm atraído bastante atenção nos últimos anos. Vários grupos de pesquisa têm feito estudos teóricos e experimentais sobre as propriedades ópticas dessas estruturas sob campos elétricos e magnéticos aplicados. [16, 17] Curiosamente, durante o processo de crescimento destes pontos, alguns grupos de pesquisa observaram que, em certas amostras, o topo do ponto pode ceder, resultando em uma nova nano-estrutura em forma de anel. Viu-se então a possibilidade de se estudar uma nova estrutura, que combina as propriedades conhecidas dos pontos quânticos auto-crescidos com as peculiaridades provenientes da topologia destes anéis quânticos. Com isso, diversos trabalhos também foram publicados recentemente na literatura sobre o espectro de energia e as propriedades de transporte destes anéis, onde o principal interesse neste tipo de sistema tem sido o fato de que na presença de campos magnéticos externos, eles apresentam oscilações na condutividade [18, 19] e nos níveis de energia [20, 21], devido ao chamado efeito Aharonov-Bohm (AB), [22] sobre o qual iremos discutir em detalhes mais adiante. Nesta seção, demonstraremos algumas das principais propriedades das estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade e desenvolveremos o modelo e as ferramentas teóricas que utilizaremos nos capítulos seguintes para o estudo destes sistemas.

Em um sólido, temos um grande número de átomos próximos uns dos outros, de maneira que os elétrons de um átomo estão sujeitos à interação com átomos vizinhos, o que torna bastante complicado o cálculo exato dos estados eletrônicos nestes sistemas. Porém, podemos fazer algumas aproximações para tentar entender, ao menos qualitativamente, o que ocorre com os estados eletrônicos em cristais. A Fig. 1 ilustra estas aproximações: consideraremos que os núcleos atômicos são fixos, com posições conhecidas na rede cristalina, e observaremos o comportamento de um só elétron, sendo todos os outros considerados parte integrante dos íons que criam um potencial periódico [23, 24].

Consideremos primeiro o problema como sendo composto por vários poços de potencial

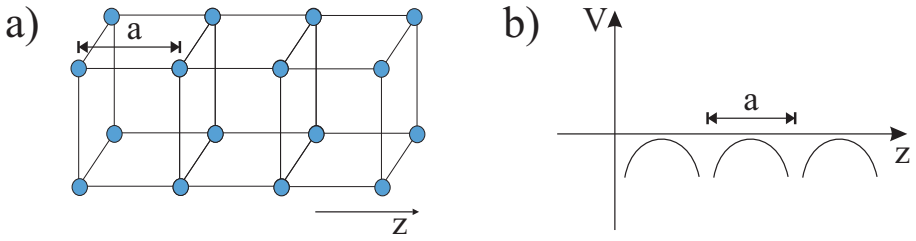

Figura 1: Ilustração que representa (a) um cristal de parâmetro de rede a e (b) seu respectivo potencial V periódico.

infinito (sítios) igualmente espaçados na direção z. O estado fundamental desse sistema é composto por uma partícula completamente localizada em um dos sítios. Chamaremos $|n\rangle$ o estado localizado no n-ésimo sítio, e $H|n\rangle = E_0|n\rangle$. Como os poços de potencial são idênticos e não interagem entre si, E_0 possui infinitos estados degenerados, cada um localizado em um sítio diferente.

Podemos tratar a translação nos pontos da rede como uma operação de simetria discreta, representada pelo operador $\tau(a)$ [25], dado por

$$\tau(a) = exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right) \tag{1.1}$$

De fato, podemos obter esta forma para o operador translação simplesmente expandindo-se em série de Taylor uma função de onda transladada $\psi(x+a)$ em torno do ponto inicial x:

$$\psi(x+a) = \psi(x) + \frac{d}{dx}\psi(x)a + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)a^2 + ...$$

$$= \left[1 + \frac{i}{\hbar}a\hat{p} + \left(\frac{i}{\hbar}a\right)^2\hat{p}^2 + ...\right]\psi(x) = exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{p}a\right)\psi(x). \tag{1.2}$$

Como devemos ter $\tau(a)\psi(x) = \psi(x+a)$, verifica-se que a forma da Eq. (1.1) para o operador translação é adequada.

Os estados $|n\rangle$ não são autoestados do operador de translação, uma vez que $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$. Porém, este operador comuta com o Hamiltoniano, logo, deve haver estados que sejam autoestados de $\tau(a)$ e H simultaneamente. Pode-se verificar facilmente que os estados

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{in\theta}\,|n\rangle, \tag{1.3}$$

onde θ é um parâmetro real com $-\pi \leq \theta \leq \pi$, satisfazem esta condição.

Consideremos agora uma situação onde temos potenciais de confinamento finitos nos

sítios. Neste caso, permanece a relação $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$ e os elementos da diagonal do Hamiltoniano na base dos $|n\rangle$, isto é, $\langle n|H|n\rangle = E_0$, são todos iguais, uma vez que os sítios ainda são todos iguais. Porém, não devemos esperar agora que $|n\rangle$ seja autoestado de H, já que neste caso as barreiras de potencial são finitas e as partículas em um sítio podem acessar sítios vizinhos por tunelamento. Assim, o Hamiltoniano na base $|n\rangle$ deve apresentar termos não-nulos fora da diagonal.

Consideremos então a aproximação conhecida como *tight-binding*, onde os únicos termos do Hamiltoniano que interessam são aqueles que envolvem sítios vizinho, e os elementos que envolvem sítios distantes são desprezados. Definindo $\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta$ e aplicando o operador H em uma função $|\theta\rangle$ como a da Eq. (1.3), levando em conta a interação apenas com primeiros vizinhos, temos

$$H|\theta\rangle = E_0 \sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta \sum e^{in\theta}|n+1\rangle - \Delta \sum e^{in\theta}|n-1\rangle$$

$$= (E_0 - 2\Delta cos\theta)|\theta\rangle, \tag{1.4}$$

onde encontramos que os autovalores do Hamiltoniano (que não devem depender da escolha da base) neste caso formam uma banda contínua de energia entre $E_0 - 2\Delta$ (quando $\theta = 0$) e $E_0 + 2\Delta$ (quando $\theta = \pm\pi$). O significado físico do parâmetro θ pode ser entendido se analisarmos a projeção de $|\theta\rangle$ no espaço das posições, onde encontramos este parâmetro como $\theta = ka$, sendo k o vetor de onda do elétron e a o parâmetro de rede [25]. Com isso, temos

$$E(k) = E_0 - 2\Delta cos(ka). \tag{1.5}$$

Como θ varia de $-\pi$ a π, temos k variando de $-\pi/a$ a π/a. Esta região de k é conhecida como "primeira zona de Brillouin". A Fig. 2(a) mostra qualitativamente o comportamento de E como função do parâmetro Δ, que está relacionado com a interação entre um sítio e seus primeiros vizinhos. Podemos observar que, à medida que Δ aumenta, a degenerescência do estado E_0 é levantada, levando à formação de uma banda de energia, representada pela região cinza no gráfico. Na Fig. 2(b), mostramos a forma da curva de dispersão definida pela Eq. (1.5), na primeira zona de Brillouin.

Com este tratamento bastante simples, pudemos observar uma característica bastante importante dos cristais: a presença do potencial periódico gerado pela rede cristalina é responsável pelo aparecimento de bandas de energias contínuas e finitas. O aparecimento das bandas de energia, o qual demonstramos para E_0, não ocorre apenas no estado fundamental, mas em todos os níveis de energia do sistema [23]. De fato, o cálculo exato

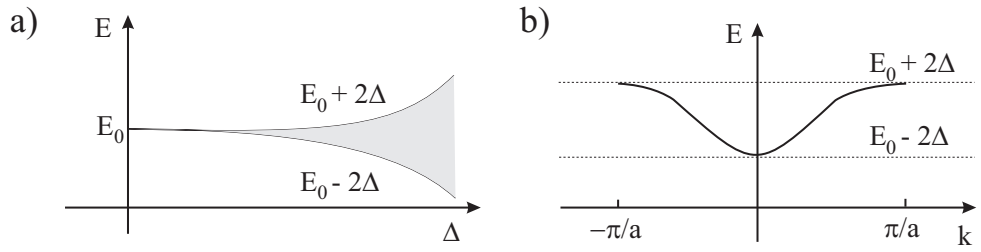

Figura 2: Gráfico qualitativo que mostra o comportamento de E como função (a) do parâmetro Δ e (b) do vetor de onda k, na primeira zona de Brillouin.

da estrutura de bandas de um material requer um modelo mais detalhado, além de uma matemática bem mais sofisticada. No Capítulo seguinte, iremos desenvolver um pouco mais a idéia do modelo tight-binding, mostrando como encontrar autoestados numericamente a partir deste método, como expandi-lo para mais dimensões, etc.

Em materiais semicondutores a $T = 0$ K, os elétrons preenchem todas as bandas de energia, até a última, a qual é chamada "banda de valência". Quando a temperatura aumenta, os elétrons podem ser excitados e ganhar energia suficiente para passar para a banda seguinte, chamada "banda de condução", contribuindo assim para a condutividade do material. A região entre o mínimo da banda de condução e o máximo da banda de valência, onde não existem estados de energia permitidos, é conhecida como "*gap*". Um elétron na banda de valência precisa ser excitado, no mínimo, com a energia do *gap* para que haja uma transição desta banda para a de condução. Em semicondutores, o *gap* de energia assume valores relativamente pequenos, o que faz com que estes materiais apresentem condutividade significativa à temperatura ambiente. O esquema da Fig. 3(a) ilustra as bandas de energia em um semicondutor, onde mostramos as bandas de valência e de condução, assim como o *gap* que as separa. Quando um elétron passa para a banda de condução, ele deixa um estado desocupado na banda de valência, chamado buraco, como ilustrado na Fig. 3(b). Este estado vazio se comporta como uma partícula de carga positiva.

Os métodos de crescimento mais antigos possibilitavam o crescimento de cristais de alta qualidade, porém era bastante difícil, com estes métodos, mudar abruptamente de material durante o processo de crescimento. As técnicas mais atuais, como a epitaxia de feixe molecular (MBE, do inglês *molecular beam epitaxy*) e a deposição de vapor químico (CVD, do inglês *chemical vapor deposition*), permitem o crescimento de estruturas compostas por dois ou mais materiais semicondutores diferentes, formando o que chamamos de heteroestruturas [26]. Uma vez que os *gaps* de energia entre os materiais que compõem estas junções são geralmente diferentes, as bandas de condução e valência nestes sistemas

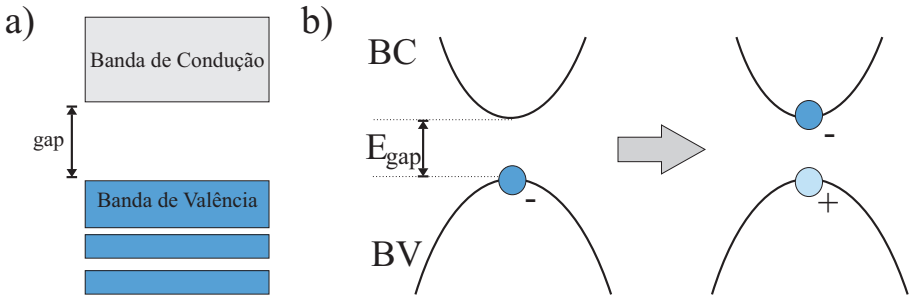

Figura 3: (a) Esquema ilustrativo das bandas de energia e do *gap* em um semicondutor, mostrando em azul as bandas preenchidas a $T = 0$ K, incluindo a de valência, e em cinza as que não estão ocupadas a esta temperatura, como a banda de condução. (b) Ilustração mostrando a excitação de um elétron (-), que passa da banda de valência (BV) para a de condução (BC), deixando assim um estado desocupado (+) na primeira.

geram degraus de potencial para elétrons e buracos. A Fig. 4 apresenta um esquema que mostra estas bandas em uma junção entre dois materiais semicondutores intrinsecamente diferentes (heterojunção), formando degraus de potencial de altura V_e, para o elétron na banda de condução, e V_h, para o buraco na banda de valência. As alturas destes potenciais são também conhecidas como *band offsets* [27, 28, 29].

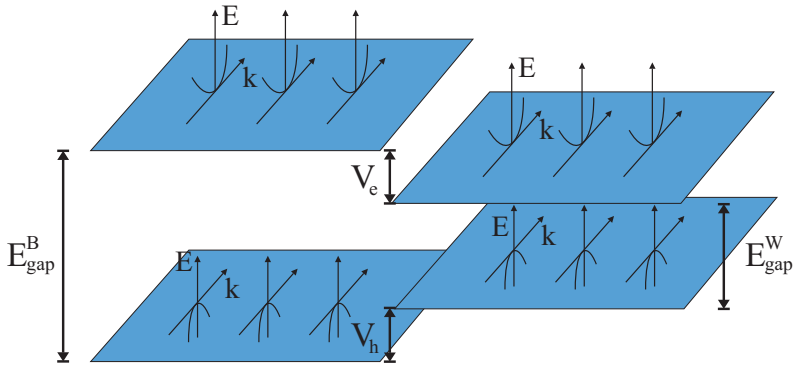

Figura 4: Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondutores com *gaps* E^B_{gap} e E^W_{gap} diferentes, onde as bandas de condução e valência apresentam degraus de potencial com alturas V_e e V_h, respectivamente.

Observando o esquema da Fig. 4, é fácil perceber que em uma heteroestrutura formada por uma camada de um material de *gap* menor E^W_{gap}, crescida entre duas camadas de outro material de *gap* maior E^B_{gap}, teremos a formação de poços ou barreiras de potencial para os portadores, que confinam ou limitam o movimento dos elétrons a uma certa região do espaço. O crescimento de materiais de *gap* menor com diversas geometrias, imersos num matriz de *gap* maior, já foi relatado em vários artigos experimentais na literatura [30, 31, 32]. No Capítulo 3, estudaremos os casos onde os elétrons em heteroestruturas semicondutoras têm seu movimento limitado a uma região no formato de um anel e de um fio em forma de T.

1.1.1 Modelo da massa efetiva

O modelo da massa efetiva, descrito nesta subseção, nos permite estudar elétrons em semicondutores considerando-se um sistema que consiste de uma quasi-partícula livre, mas com uma massa efetiva diferente da massa do elétron. Numa heteroestrutura semicondutora, este sistema deve contar ainda com um potencial devido aos descasamentos das bandas de cada material, como explicado acima, e em cada material a massa efetiva da quasi-partícula deve assumir um valor diferente. Em outras palavras, pretendemos estudar um sistema composto por um elétron sob a influência dos vários poços de potencial que constituem a rede atômica do material através de um problema equivalente, no qual uma quasi-partícula de mesma carga que o elétron (na banda de condução), mas com uma massa efetiva diferente, está livre dos potenciais dos átomos da rede. Neste problema equivalente, toda a informação da rede de átomos do material está contida apenas no fato de que a massa desta quasi-partícula é diferente da massa do elétron livre. A seguir, usaremos o teorema da massa efetiva para demonstrar formalmente que estes dois problemas são equivalentes.

Os autoestados do Hamiltoniano de um sistema submetido a um potencial periódico, como o da rede cristalina, podem ser escritos na forma de Bloch como $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\mathbf{r})$, onde $u_k(\vec{r})$ é uma função com a mesma periodicidade da rede [25]. Substituindo esta forma de $\psi(\vec{r})$ na equação de Schrödinger para um potencial periódico $V(\vec{r})$, encontramos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r}) = \left[\frac{1}{2m}(\vec{p}+\hbar\vec{k})^2 + V(\vec{r})\right] u_k(\vec{r}) = E(\vec{k})u_k(\vec{r}), \tag{1.6}$$

que pode ser reescrita como

$$(H_0 + H_1 + H_2)u_k(\vec{r}) = E(\vec{k})u_k(\vec{r}) \tag{1.7}$$

onde

$$H_0 = \left[\frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{r})\right], \tag{1.8a}$$

$$H_1 = \frac{\hbar}{m}\vec{p}\cdot\vec{k} \tag{1.8b}$$

e

$$H_2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \tag{1.8c}$$

Seja H_0 o Hamiltoniano de um sistema não perturbado, que descreve nosso problema para $k = 0$, tratando os termos H_1 e H_2 como perturbações. Temos então uma base $u_0^n(\vec{r})$ formada pelos autoestados de H_0, com autoenergias $E^n(0)$. Da teoria das perturbações,

a energia do estado n, corrigida até a segunda ordem, é dada por

$$E^n(\vec{k}) = E^n(0) + \langle u_0^n|H_1 + H_2|u_0^n\rangle + \sum_{l\neq n} \frac{|\langle u_0^l|(H_1+H_2)|u_0^n\rangle|^2}{E^n(0) - E^l(0)}, \tag{1.9}$$

onde a soma em l é sobre todas as bandas, exceto a banda de índice n.

Substituindo na Eq. (1.9) as expressões para H_1 e H_2, dadas respectivamente pelas Eqs. (1.8b) e (1.8c), encontramos

$$E^n(\vec{k}) = E^n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{l\neq n} \frac{|\vec{k}\cdot\langle u_0^l|\vec{p}|u_0^n\rangle|^2}{E^n(0) - E^l(0)}. \tag{1.10}$$

Podemos reescrever a Eq. (1.10) na forma

$$E^n(\vec{k}) = E^n(0) + \frac{\hbar^2}{2}\vec{k}\cdot\left(\frac{1}{m^*_{\alpha,\beta}}\right)\cdot\vec{k}, \tag{1.11}$$

onde o tensor massa efetiva $m^*_{\alpha,\beta}$ para a banda de índice n, é definido como

$$m^*_{\alpha,\beta} = \left[\frac{\delta_{\alpha,\beta}}{m} + \frac{2}{m^2}\sum_{l\neq n}\frac{\langle u_0^l|p_\alpha|u_0^n\rangle\langle u_0^l|p_\beta|u_0^n\rangle}{E^n(0) - E^l(0)}\right]^{-1}. \tag{1.12}$$

O caráter tensorial encontrado para a massa efetiva reflete o fato de que o sistema pode possuir diferentes distribuições atômicas em cada direção do espaço real, de forma que o valor da massa efetiva em cada direção pode ser diferente.

Se conhecermos a priori a estrutura de bandas do material, podemos também utilizar um método alternativo, bem mais simples que a Eq.(1.12), para obtermos a massa efetiva. Fazendo-se a expansão em série de Taylor da n-ésima banda de energia $E^n(\vec{k})$ em torno de $k = 0$, obtemos

$$E^n(\vec{k}) = E^n(0) + \sum_\alpha \frac{\partial E^n}{\partial k_\alpha}k_\alpha + \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}k_\alpha k_\beta. \tag{1.13}$$

Comparando-se o termo de segunda ordem desta expansão com o da Eq. (1.11),

$$\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}k_\alpha k_\beta = \frac{1}{2}\vec{k}\cdot\left(\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}\right)\cdot\vec{k} = \frac{\hbar^2}{2}\vec{k}\cdot\left(\frac{1}{m^*_{\alpha,\beta}}\right)\cdot\vec{k}, \tag{1.14}$$

encontramos finalmente

$$\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \frac{\hbar^2}{m^*_{\alpha,\beta}}, \tag{1.15}$$

ou seja, a massa efetiva é dada simplesmente pelo inverso da derivada segunda da energia

$$m^*_{\alpha,\beta} = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}}. \tag{1.16}$$

A partir desta equação, podemos ver claramente que as massas efetivas de cada banda e em cada direção não necessariamente são as mesmas, como mencionado anteriormente. De fato, esta expressão poderia ser encontrada de uma forma ainda menos sofisticada, a partir de argumentos bem simples: assumindo que uma força aplicada à quasi-partícula de massa m^* num sistema isotrópico [1] leve a uma equação de Newton $F = ma = dp/dt \Rightarrow m^* \partial v_g/\partial t = \hbar \partial k/\partial t$, onde $v_g = d\omega/dk$ é a velocidade de grupo e $\omega = E/\hbar$, temos $m^* \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial E}{\partial k} = \hbar \frac{\partial k}{\partial t}$, onde usamos a regra da cadeia na derivada do lado esquerdo da equação para encontrar $m^* \frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\frac{\partial k}{\partial t} = \hbar \frac{\partial k}{\partial t}$ e, finalmente, $m^* = \hbar^2 / (\partial^2 E/\partial k^2)$, que é simplesmente a forma isotrópica da Eq. (1.16) para uma banda.

O termo de segunda ordem na Eq. (1.11) pode ser identificado como a relação de dispersão encontrada a partir da equação de Schrödinger para um Hamiltoniano onde o potencial periódico não está explícito. Porém, a massa da partícula nesta equação deve ser a massa efetiva definida pela Eq. (1.12) ou, equivalentemente, Eq. (1.16). Finalmente, podemos agora ver a equivalência entre os problemas i) de um elétron sob influência dos infinitos átomos do material e ii) de uma partícula livre de massa efetiva diferente daquela do elétron, como queríamos demonstrar. Desta forma, para estudarmos o confinamento e a propagação das funções de onda dos elétrons em heteroestruturas semicondutoras, consideraremos simplesmente sua massa efetiva como sendo dada pela curvatura da banda de condução, e assumiremos explicitamente no Hamiltoniano apenas o potencial gerado pelo descasamento entre as bandas dos materiais. Esta aproximação é conhecida como "aproximação da massa efetiva" , e a Eq. (1.12) é chamada de "teorema da massa efetiva"[9].

Note que, devido ao fato de que diferentes materiais compondo uma heteroestrutura possuem diferentes valores de massa efetiva, resultados bastante curiosos podem ser obtidos através da variação da massa efetiva com a posição na direção ao longo da heteroestrutura. Claramente, os níveis de energia mudam se considerarmos a mudança de massas efetivas, mas além disso, se adicionarmos um confinamento na direção perpendicular à da heteroestrutura, esta variação de massas com a posição pode afetar fortemente o descasamento entre as bandas. Por exemplo, nossos trabalhos anteriores [34, 35] mostram

[1] Por simplicidade, consideraremos um sistema isotrópico com uma só banda, mas esta idéia pode ser adaptada para sistemas anisotrópicos com mais bandas de maneira trivial.

que se considerarmos um fio quântico cilíndrico, imerso em uma região de potencial infinito, composto por uma heteroestrutura na direção longitudinal, uma combinação dos efeitos do confinamento radial com a mudança de massas efetivas na direção longitudinal faz com que o potencial efetivo da heteroestrutura sobre o elétron seja um poço (tipo-I) ou uma barreira (tipo-II), dependendo do raio do sistema. Na verdade, se a heteroestrutura apresentar uma transição abrupta entre os materiais, podemos até mesmo ajustar o raio de modo a obtermos um elétron praticamente livre na direção longitudinal, apesar da presença de uma heteroestrutura! [33] No caso de interfaces graduais, podemos ter ainda outra fase de confinamento: para um certo intervalo de valores de raio, o elétron pode estar confinado até mesmo nas interfaces entre os materiais! [34] As Refs. [34, 35] também mostram que podemos combinar ainda o efeito de um campo magnético externo na direção paralela ao fio para obtermos mudanças de confinamento semelhantes. Porém, uma análise mais detalhada deste tipo de comportamento está, de certa forma, fora do escopo desta Tese e por isso, no decorrer deste trabalho, iremos apenas aplicar o modelo da massa efetiva ao estudo do confinamento dos elétrons e da propagação de pacotes de onda em heteroestruturas semicondutoras comuns, sugerindo o estudo detalhado deste efeito curioso de confinamento como uma leitura adicional, que pode ser encontrada no Apêndice C.

1.1.2 Interação spin-órbita

As tecnologias utilizadas em dispositivos eletrônicos atualmente (em geral, baseadas em Si), usam o fluxo binário de cargas elétricas para facilitar comunicações entre diferentes dispositivos microeletrônicos, os quais expressam dados na forma de bits binários, onde 0's e 1's correspondem à ausência e presença de cargas elétricas, respectivamente. A miniaturização obedecendo à famosa Lei de Moore, que diz que microprocessadores devem dobrar sua potência a cada 18 meses, tem levado a um crescimento exponencial da quantidade de informação guardada em um microprocessador. Porém, é comum ouvir-se dizer que "nenhum crescimento exponencial é para sempre", e neste caso não é diferente: o paradigma de Moore deve enfrentar um fim próximo quando o tamanho de um único bit aproximar-se da escala atômica. Uma questão essencial é se é possível ou não continuar a miniaturização nos padrões atuais. Existem algumas sugestões para o aprimoramento dos dispositivos através de multi-funcionalidades, por exemplo, combinando-se o processamento e o armazenamento de dados em uma única unidade de um dispositivo eletrônico, através do uso do grau de liberdade de spin do elétron. Isso nos leva a um tema bastante discutido atualmente no meio científico: a spintrônica.

O acoplamento spin-órbita em pontos quânticos semicondutores tem sido tema de muitos estudos recentes, pois este efeito é de fundamental importância para a spintrônica. [3] Este acoplamento acontece devido ao fato de que um campo elétrico para um elétron em movimento, no referencial do elétron, é visto efetivamente como um campo magnético, que pode interferir no seu spin. O principal objetivo dos estudos sobre interações spin-órbita é o de encontrar maneiras de se ajustar estas interações e, assim, manipular os spins dos elétrons em pontos quânticos. [36] O entendimento da dinâmica de spins em pontos quânticos poderia facilitar futuramente o desenvolvimento da computação quântica e da comunicação quântica.[37] O grau de liberdade do spin é talvez até mais vantajoso do que a carga do elétron porque, diferentemente da carga, o spin não se acopla ao ruído eletromagnético e, assim, tem um tempo de coerência maior.[38] Dada a importância óbvia dos estados de spin do elétron em nanoestruturas, um conhecimento aprimorado do acoplamento SO em estados eletrônicos de estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade, como pontos e anéis quânticos, é essencial para o desenvolvimento das tecnologias citadas.

Os dois principais mecanismos de acoplamento entre o spin e a órbita do elétron são descritos pelos Hamiltonianos de Rashba-Bychkov e Dresselhaus. [2] O primeiro aparece em estruturas com um potencial de confinamento assimétrico, de forma que a assimetria no potencial pode ser descrita por um campo elétrico efetivo perpendicular ao movimento do elétron no plano. Do ponto de vista do próprio elétron, este campo elétrico na verdade é visto como um campo magnético no plano, mas perpendicular ao vetor de onda $\vec{k}$ do elétron. A interação Zeeman efetiva do spin do elétron com este "campo magnético"levanta a degenerescência do spin, resultando em uma separação de energias isotrópica proporcional a $\vec{k}$, mesmo para $B = 0$. Consideremos uma partícula de massa efetiva m^* movendo-se no plano com velocidade $\vec{v} = \hbar\vec{k}/m^*$ sob um campo elétrico $\vec{E} = E_0\hat{z}$. No referencial do elétron, este campo transforma-se um campo magnético efetivo [2]

$$\vec{B}_{eff} = -\frac{1}{2}\left(\vec{k} \times \vec{E}\right). \tag{1.17}$$

Temos agora o acoplamento do spin do elétron com este campo de forma similar ao do efeito Zeeman:

$$H_R = \vec{\mu} \cdot \vec{B}_{eff} = -\frac{e\hbar^2}{4m^{*2}}\vec{\sigma} \cdot \left(\vec{k} \times \vec{E}\right) = \frac{e\hbar^2}{4m^{*2}}\vec{E} \cdot \left(\vec{k} \times \vec{\sigma}\right) = \alpha_R(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x), \tag{1.18}$$

onde podemos controlar a constante de acoplamento $\alpha_R = \frac{e\hbar^2}{4m^{*2}}E_0$ simplesmente variando a componente z do campo elétrico E_0 ou, equivalentemente, a assimetria do potencial de

[2] Considerando a velocidade da luz $c = 1$

confinamento nesta direção.

Já o mecanismo de Dresselhaus vem da correção de menor ordem para a parabolicidade da banda de condução no modelo da massa efetiva para materiais sem simetria de inversão, como por exemplo, os cristais zinc-blend. Esta correção é dada por $H_{corr} = \alpha'_D \vec{\sigma} \cdot \vec{\Omega}/2$, onde

$$\Omega_x = k_x(k_y^2 - k_z^2) \qquad \Omega_y = k_y(k_z^2 - k_x^2) \qquad \Omega_z = k_z(k_x^2 - k_y^2) \tag{1.19}$$

e α'_D é uma constante que depende do gap e da massa efetiva do material. [39] Nos casos que estudaremos, o sistema é praticamente bidimensional, de forma que temos $\langle k_z \rangle = 0$ e $\langle k_z^2 \rangle = 2m^* \epsilon_z / \hbar^2$, onde ϵ_z é a energia do confinamento na direção z, perpendicular ao plano. Assim, temos $H_{corr} = H_D + H_{D3}$, com

$$H_D = \alpha_D(-\sigma_x k_x + \sigma_y k_y) \tag{1.20a}$$

$$H_{D3} = \frac{\alpha'_D}{2}(\sigma_x k_x k_y^2 - \sigma_y k_y k_x^2) + h.c., \tag{1.20b}$$

onde definimos $\alpha_D = \alpha'_D \langle k_z^2 \rangle / 2$. Note que o mecanismo de Dresselhaus é mais difícil de ser controlado por meios externos, já que ele não depende de campos aplicados como o mecanismo de Rashba, mas da própria estrutura cristalina do material, a qual define o gap e a massa efetiva e, consequentemente, α'_D. Ainda assim, existe um parâmetro controlável para a intensidade do acoplamento α_D, que é a energia do confinamento vertical ϵ_z, a qual pode ser ajustada variando-se a largura e a altura do potencial de confinamento nesta direção. Em geral, o termo cúbico de Dresselhaus H_{D3} tem energia muito menor que o termo H_D, principalmente se o confinamento na direção z for muito forte, portanto, no decorrer desta tese, iremos considerar apenas H_D, descartando o termo cúbico.

Em pontos e anéis quânticos semicondutores, ambos os mecanismos de Dresselhaus e Rashba podem aparecer, um devido ao material utilizado na composição destas estruturas, o outro devido à variação da composição do material dentro do ponto, que gera uma assimetria no potencial de confinamento, [17] ou até mesmo devido a um campo elétrico aplicado na direção z. Além dos efeitos spin-órbita, vale lembrar que temos também um outro efeito ainda mais trivial que acopla um campo magnético externo ao spin: o efeito Zeeman, descrito pelo Hamiltoniano $H_Z = g\mu \overrightarrow{B} \cdot \overrightarrow{S}$. É interessante estudarmos até que ponto um efeito pode influenciar mais que o outro, e o papel destes efeitos sobre o espectro de energia e sobre os autoestados do spin em pontos quânticos semicondutores. Sendo assim, neste trabalho, mostraremos como podemos aplicar a técnica *split-operator* no estudo dos efeitos Zeeman e spin-órbita em estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade.

1.2 Grafeno

Um problema bastante estudado recentemente é o do comportamento de elétrons sobre folhas de grafeno. O grafeno é um cristal de carbono bidimensional que foi obtido pela primeira vez em 2004 através de uma clivagem micromecânica do grafite [40]. Os primeiros estudos teóricos sobre grafeno foram feitos no fim dos anos quarenta, como uma primeira aproximação para o grafite [41].

Os átomos do grafeno estão dispostos em uma rede hexagonal, que é usualmente tratada como duas sub-redes A e B superpostas. A Fig. 5 mostra a rede cristalina do grafeno e a disposição das sub-redes A e B. Na verdade, a necessidade de se considerar duas sub-redes diferentes vem do fato de que a rede hexagonal do grafeno não é uma rede de Bravais; em outras palavras, não podemos definir, para um só sítio, dois vetores de base que possam ser combinados linearmente gerando qualquer outro sítio da rede. Porém, uma rede triangular possui tal característica e, por isso, diz-se que a célula unitária do grafeno possui dois sítios (átomos de carbono), a partir dos quais podemos criar vetores de base e descrever todo o sistema como uma superposição de duas sub-redes triangulares deslocadas e superpostas, denominadas A e B. Como podemos ver na Fig. 5, a simetria da rede do grafeno é C_{6v}, de forma que as direções x e y do plano Cartesiano não são equivalentes neste caso. Na verdade, na rede ilustrada na Fig. 5, os átomos nestas direções estão organizados em estruturas chamadas de zigzag (na direção x) e armchair (na direção y).

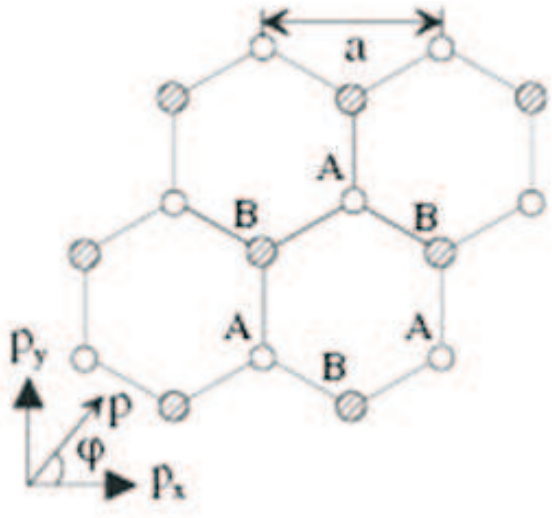

Figura 5: Estrutura cristalina de uma monocamada de grafeno, cujo parâmetro de rede é a, mostrando a superposição das duas sub-redes A e B.

A descrição teórica do comportamento dos elétrons neste sistema pode ser feita através

de um modelo tight-binding (TB) ou, caso consideremos apenas os estados de menor energia em uma folha de grafeno infinita, de um modelo contínuo, no qual os elétrons são descritos por quasi-partículas que obedecem à equação de Dirac, como explicaremos em detalhes a seguir.

1.2.1 Modelo tight-binding e a equação de Dirac

A rede hexagonal de átomos de carbono que forma o grafeno pode ser descrita pelo Hamiltoniano

$$H_{TB} = \sum_i (\epsilon_i + M_i) c_i^\dagger c_i + \sum_{<i,j>} \left(\tau_{ij} c_i^\dagger c_j + \tau_{ij}^* c_i c_j^\dagger \right), \tag{1.21}$$

onde $c_i(c_i^\dagger)$ aniquila (cria) um elétron no sítio i, com energia ϵ_i, e a soma é tomada apenas entre sítios primeiros vizinhos i e j, com parâmetro de hopping τ_{ij}. O efeito de um campo magnético externo pode ser introduzido no modelo TB incluindo-se uma fase nos parâmetros de hopping de acordo com a substituição de Peierls $\tau_{ij} \rightarrow \tau_{ij} \exp\left[i\frac{e}{\hbar} \int_j^i \vec{A} \cdot d\vec{l} \right]$, onde $\vec{A}$ é o potencial vetor que descreve o campo magnético. [121] Para um campo magnético $\vec{B} = B\hat{z}$, escolhemos convenientemente o gauge de Landau $\vec{A} = (0, Bx, 0)$, de forma que a fase de Peierls torna-se zero na direção y e $\exp\left[i\frac{e}{\hbar} \int_j^i \vec{A} \cdot d\vec{l} \right] = \exp\left[i\frac{2\pi x}{3a} \frac{\Phi}{\Phi_0} \right]$ na direção x, onde $a = 1.42$ Å é o parâmetro de rede do grafeno, $\Phi_0 = h/e$ é o fluxo quântico magnético e $\Phi = 3\sqrt{3}a^2 B/2$ é o fluxo através de um único hexágono de carbono. Qualquer tipo de tensão externa sobre a folha de grafeno reflete-se em uma variação da distância interatômica entre os sítios i e j como $\Delta a_{ij} = a_{ij} - a_0$, onde a_{ij} é a distância entre estes sítios após a tensão. A mudança das distâncias interatômicas afeta a energia de hopping entre os sítios, que se torna [42] $\tau_{ij} \rightarrow \tau_{ij}\,(1 + 2\Delta a_{ij}/a_0)$. Uma expressão similar pode ser obtida expandindo-se a Eq. (13) da Ref. [43] em série de Taylor e descartando-se termos de ordem superior em Δa_{ij}, isto é, considerando-se deformações pequenas. O termo M_i consiste de um potencial dependente do sítio, o qual assume um valor M_0 (-M_0) em sítios da rede A (B). Artigos recentes têm sugerido uma maneira de se obter um potencial como este experimentalmente, depositando uma rede de grafeno sobre um substrato específico. [44] Aliás, este tipo de potencial foi demonstrado em um trabalho experimental recente, [45] onde mostrou-se como usá-lo no controle do gap da estrutura de bandas do grafeno.

Podemos reescrever convenientemente a Eq. (1.21) levando em conta as duas sub-redes triangulares que compõem a rede hexagonal do grafeno. Por simplicidade, escolhemos

$B = 0$, $M_i \equiv 0$ e $\epsilon_i \equiv 0$, de forma que

$$H_{TB} = \tau \sum_{<i,j>} \left(a_i^\dagger b_j + b_j^\dagger a_i \right), \tag{1.22}$$

onde a_m ($a_m^\dagger$) e b_m ($b_m^\dagger$) aniquilam (criam) um elétron no m-ésimo sítio das sub-redes A e B, respectivamente. Para uma rede infinita, podemos fazer a transformada de Fourier do Hamiltoniano H_{TB}, que leva a

$$H_{TB} = \tau \sum_k \left[g\left(\vec{k}\right) a_k^\dagger b_k + g^*\left(\vec{k}\right) b_k^\dagger a_k \right], \tag{1.23}$$

onde o fator de estrutura $g\left(\vec{k}\right)$ é dado por

$$g\left(\vec{k}\right) = e^{-ik_x a} + 2e^{ik_x a/2} \cos\left(k_y a\sqrt{3}/2\right). \tag{1.24}$$

O Hamiltoniano na Eq. (1.23) pode ser escrito numa forma matricial

$$H_{TB} = \begin{pmatrix} 0 & \tau g\left(\vec{k}\right) \\ \tau g^*\left(\vec{k}\right) & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.25}$$

escrevendo-se os estados dos elétrons através dos vetores $[a_k \quad b_k]^T$ e $[a_k^\dagger \quad b_k^\dagger]^T$. Diagonalizando este Hamiltoniano, encontramos um espectro de energia dado por

$$E\left(\vec{k}\right) = \pm\tau \sqrt{3 + 2\cos\left(k_y a\sqrt{3}\right) + 4\cos\left(k_x \frac{3a}{2}\right)\cos\left(k_y \frac{a\sqrt{3}}{2}\right)}, \tag{1.26}$$

que apresenta seis cones que se cruzam na energia $E = 0$, dos quais apenas dois não são equivalentes, posicionados no espaço recíproco em [10, 46]

$$\overrightarrow{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right) \qquad \overrightarrow{K'} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \tag{1.27}$$

como mostrado na Fig. 6. Na vizinhança de cada um destes pontos, a energia depende quase linearmente do vetor de onda $\vec{k}$, o que sugere que o elétron nesta região do espaço recíproco comporta-se como uma quasi-partícula sem massa descrita pelo Hamiltoniano de Dirac, onde a relação de dispersão também é linear. Para demonstrar isso, iremos expandir em série de Taylor o fator de estrutura $g(\vec{k})$ em torno do ponto $\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right)$, definindo as coordenadas do "espaço de Dirac"como $k'_x = k_x - \frac{2\pi}{3a}$ e $k'_y = k_x + \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}$. Mantendo apenas os termos até a primeira ordem em k_x e k_y, obtemos

$$g\left(\vec{k}\right) = \frac{3a}{2}\left(k'_x - ik'_y\right)\left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{3a}{2}\left(k'_x - ik'_y\right)e^{-i\frac{5\pi}{6}}. \tag{1.28}$$

Fazendo-se o mesmo processo para $\vec{K}'$, encontramos também uma forma bastante parecida

$$g\left(\vec{k}\right) = \frac{3a}{2}\left(-k'_x - ik'_y\right)\left(\frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{3a}{2}\left(-k'_x - ik'_y\right)e^{-i\frac{\pi}{6}}, \tag{1.29}$$

mas que mostra a inequivalência entre os vales, devido aos sinais + e - em frente a k_x no primeiro e segundo casos, respectivamente. As exponenciais complexas em cada caso podem ser incorporadas como uma fase nas funções de onda. Porém, no capítulo 4, mostraremos que estas exponenciais podem também desempenhar um papel importante quando definimos a priori as coordenadas espaciais no modelo TB e queremos comparar nossos resultados com aqueles provenientes do modelo contínuo que estamos desenvolvendo nesta Seção.

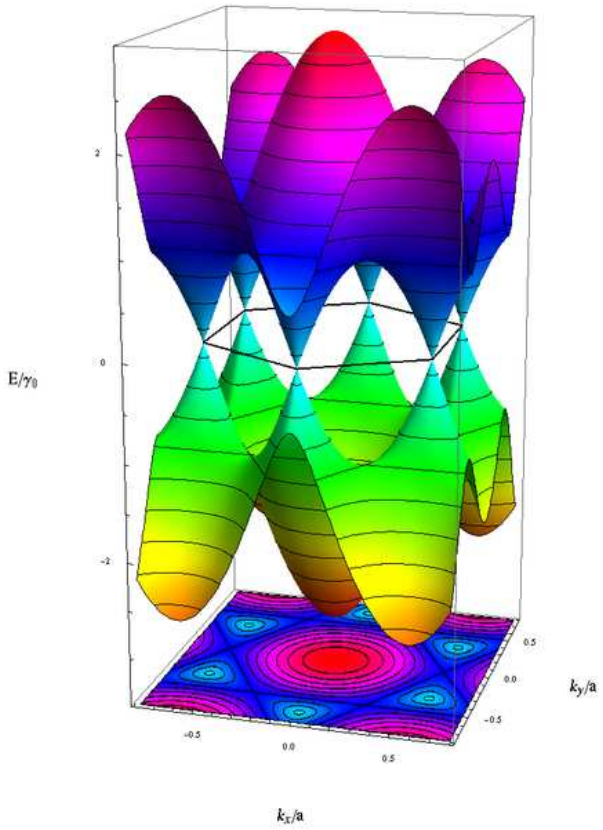

Figura 6: Estrutura de bandas de uma monocamada de grafeno.

Substituindo agora as Eqs. (1.28) e (1.29) no Hamiltoniano da Eq. (1.25), obtemos finalmente o Hamiltoniano aproximado para o sistema

$$H_D^{\pm} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \pm k_x - ik_y \\ \pm k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.30}$$

onde $v_F = 3\tau a/2\hbar$ é a velocidade de Fermi e os sinais + e - referem-se a elétrons de

baixa energia em torno de K e K', respectivamente. O procedimento que leva a $H_D^{\pm}$ pode ser facilmente repetido na presença de campos magnéticos $\vec{B}$ e potenciais externos V e dependentes do sítio M, levando a um Hamiltoniano ainda mais geral para o ponto K

$$H_D = \left[v_F \vec{\sigma} \cdot (\vec{\mathbf{p}} + e\vec{A}) + V(\vec{r})\mathbf{I} + \tau M(\vec{r})\sigma_z \right], \tag{1.31}$$

onde $\mathbf{I}$ é a matriz identidade, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ é o vetor de Pauli e as funções de onda são pseudo-spinores $\Psi = [\Psi_A, \Psi_B]^T$, com $\Psi_{A(B)}$ sendo a probabilidade de se encontrar o elétron na sub-rede A (B). [3] Note que esta é exatamente a forma do Hamiltoniano de Dirac para uma partícula de velocidade v_F, ao invés da velocidade da luz, onde o potencial dependente do sítio M_i no Hamiltoniano TB da Eq. (1.21) é introduzido no Hamiltoniano de Dirac na como um potencial relacionado à massa $M(\vec{r})$, o qual é multiplicado por um fator $\tau = 1$ (-1) para o cone K (K') na Eq. (1.31). A massa da partícula na equação de Dirac é responsável pela abertura de um gap no seu espectro de energia, o que explica o gap encontrado na Ref. [45] para uma monocamada de grafeno submetida a um potencial dependente do sítio.

Em resumo, acabamos de demonstrar que, quando consideramos elétrons com baixas energias, o problema de um elétron sob a influência apenas do potencial devido aos infinitos átomos de carbono que compõem o grafeno torna-se equivalente ao problema de uma quasi-partícula livre sem massa obedecendo à equação de Dirac. A este modelo aproximado, damos o nome de modelo contínuo ou modelo de Dirac para o grafeno. Note que o que fizemos aqui foi bem similar ao que foi feito para semicondutores na seção anterior: tínhamos um problema complicado de ser estudado, devido à presença dos muitos átomos; para simplificá-lo, construímos um problema equivalente mais simples, comparável ao problema original dentro de certas condições. No caso dos semicondutores, este problema equivalente consiste de uma partícula livre de massa efetiva $m^*_{\alpha,\beta}$ obedecendo a equação de Schrödinger; já no caso do grafeno, o problema equivalente consiste de um férmion de Dirac livre e sem massa, com velocidade v_F e cujo pseudo-spin representa sua distribuição sobre as redes A e B do grafeno. [4]

Um dos fatores que fazem o grafeno tão atrativo para pesquisa é a dinâmica de elétrons neste material. Várias características interessantes são provenientes da descrição de Dirac para os elétrons no grafeno. [47] Por exemplo, para uma incidência completamente normal a uma barreira de potencial, este elétron pode tunelar pela barreira com probabilidade

[3] Um Hamiltoniano similar pode ser encontrado para K' de maneira trivial.

[4] Obviamente, podemos acrescentar uma massa artificialmente a este férmion, usando o potencial dependente do sítio, como mencionamos no texto.

1. Este efeito, chamado "paradoxo de Klein", está relacionado com o fato dos eletrons no grafeno apresentarem um espectro com energias negativas e positivas, de forma que quando o elétron atinge a barreira, ele penetra-a e aparece na região da barreira como um buraco, de energia negativa. Com isso, torna-se bastante difícil o controle do comportamento do elétron através de potenciais elétricos em grafeno, e a criação de potenciais confinantes nestas estruturas, como pontos quânticos, [48] não é tão óbvia. Apesar disso, na literatura, trabalhos teóricos têm falado sobre a existência de estados quasi-ligados, isto é, estados localizados com um tempo de vida bastante longo, em pontos quânticos em grafeno. [5, 49, 50] Neste trabalho, estudaremos o tunelamento de Klein através da evolução temporal de um pacote de onda numa monocamada de grafeno com barreiras de potencial, sugerindo também uma estrutura onde poderiam ser encontrados estados quasi-ligados.

Uma maneira alternativa de se confinar elétrons em grafeno consiste em aplicar-se um perfil do potencial dependente do sítio M_i com uma geometria desejada, de forma a abrir um gap no espectro de energia em determinadas regiões do grafeno onde $M_0 \neq 0$, [51, 52] confinando assim o elétron apenas à região $M_0 = 0$. Esse tipo de potencial é normalmente usado para simular estruturas confinantes em grafeno, como pontos [53] e anéis [54] quânticos no modelo de Dirac, onde o termo de massa induzido por este potencial facilita o tratamento das condições de contorno.

Um efeito bastante interessante que pode ser observado no grafeno é um movimento trêmulo da função de onda que se propaga neste sistema, conhecido como *zitterbewegung*. [55, 56, 57] O fenômeno do *zitterbewegung* foi previsto teoricamente pela primeira vez em 1930 por Schrödinger [58] e, nos últimos anos, o interesse neste tema tem-se renovado. Trabalhos teóricos anteriores têm sugerido algumas formas de se observar o *zitterbewegung* experimentalmente, por exemplo em semicondutores de gap estreito [4], em poços quânticos formados por semicondutores III-V zinc-blende com acoplamento spin-órbita [59] e, mais recentemente, em monocamadas [60] e bicamadas [61] de grafeno. Uma simulação experimental do *zitterbewegung* para elétrons livres relativísticos no vácuo foi feita por Gerritsma et al. [62] através de íons aprisionados. Este fenômeno, que tem sido atribuído a uma interferência entre os estados de energia positiva e negativa no pacote de onda, foi também analisado numericamente e analiticamente nas Refs. [63, 64]. Um dos objetivos do nosso trabalho é verificar a existência destas oscilações através da análise da propagação em tempo real de um pacote de onda em uma monocamada de grafeno. Mostraremos então como campos magnéticos e potenciais externos e dependentes da posição afetam este movimento trêmulo, sugerindo maneiras de se melhorar a

vizualização deste movimento, ainda raramente observado experimentalmente.

Finalmente, um outro tópico que tem sido amplamente estudado nos últimos anos é a engenharia da tensão em grafeno. [65, 66, 67, 68, 69, 70] As propriedades elásticas de nanofitas de grafeno foram estudadas teoricamente por Cadelano *et al.*[71], que estudou o esticamento no plano e as deformações devido a uma flexão fora do plano, combinando teoria da elasticidade e simulações TB. Depois disso, Cocco *et al.*[72] e Lu e Guo [73] mostraram que uma combinação de tensões uniaxial e de cisalhamento com deformações absolutas moderadas podem ser usadas para abrir um gap no espectro de energia do grafeno. Têm sido mostrado recentemente que formas específicas de tensão produzem um campo pseudo-magnético no grafeno, que não quebra a simetria de reversão temporal e que aponta em direções opostas para elétrons movendo-se em torno dos pontos K e K'. [42] Espera-se que este campo magnético induzido por tensão produza níveis de Landau e, consequentemente, o efeito Hall quântico, mesmo na ausência de campos magnéticos externos! [6, 74] Níveis de Landau devido a campos pseudo-magnéticos induzidos por tensão foram observados recentemente através de microscopia de tunelamento (STM) em nano-bolhas em uma folha de grafeno, onde estimou-se que a magnitude do campo pseudo-magnético encontrado está em torno de 300 T. [75] Guinea *et al.*, [76] demonstrou teoricamente que uma flexão no plano de uma folha de grafeno leva a um campo praticamente uniforme e perpendicular à camada. Estudaremos o movimento de um pacote de onda em uma folha de grafeno sob este tipo de tensão. Note que o campo pseudo-magnético em nosso modelo descrito nesta seção não é introduzido artificialmente considerando-se um potencial vetor adicional na fase de Peierls, mas aparece naturalmente após as mudanças nas distâncias interatômicas devido à tensão.

Em resumo, mostramos que o grafeno consiste de um material interessantíssimo, tanto do ponto de vista da ciência, por nos proporcionar a possibilidade de se simular em laboratório efeitos relativísticos, como o tunelamento de Klein e o zitterbewegung, como também do ponto de vista da tecnologia, por ser um material resistente, perfeitamente bidimensional, e que traz ainda dois novos graus de liberdade manipuláveis para a eletrônica: os vales [77] e o pseudo-spin. Nos capítulos que seguem, utilizaremos os modelos TB e de Dirac para fazermos um estudo mais detalhado do movimento de pacotes de onda em sistemas livres de qualquer potencial, ou na presença de diversos tipos de barreira. Analisaremos o tunelamento de Klein em barreiras de potencial, assim como o espalhamento de pacotes de onda em barreiras magnéticas [78] e pseudo-magnéticas [42], e em barreiras construídas através de um termo de massa, como explicado acima.

1.3 Efeito Aharonov-Bohm

Nos capítulos que seguem, iremos estudar elétrons em anéis quânticos sob um campo magnético aplicado. Sendo assim, é interessante fazermos primeiramente uma discussão sobre o efeito Aharonov-Bohm (AB), que consiste de um problema fundamental na mecânica quântica. Este problema tem sido intensivamente estudado, tanto experimentalmente [79, 19, 30, 80] como teoricamente [81, 1, 82, 83, 84, 85].

A Fig. 7 mostra um esquema de um experimento de fenda dupla, onde feixes de elétrons passam pelas fendas e geram um padrão de interferência sobre um anteparo. Entre as duas fendas, posiciona-se um solenóide cilíndrico longo, o qual gera um campo magnético **B** em seu interior, porém, sem gerar campo magnético na região externa a ele, de forma que os elétrons que passam ao redor do solenóide estão em uma região de campo magnético nulo.

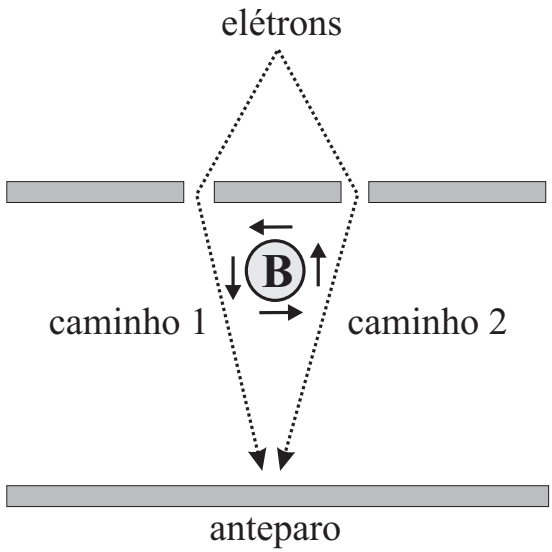

Figura 7: Esquema de um experimento de fenda dupla na presença de um solenóide longo (círculo cinza), que gera um campo magnético **B** em seu interior. As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons passam, e as setas sólidas mostram a direção do potencial vetor **A**.

Apesar da ausência de campo magnético na região pela qual os elétrons passam, existe ainda um potencial vetor **A** nesta região, tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$, o que faz com que o momento do elétron neste sistema assuma a forma $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A}$. Se temos um campo magnético no solenóide na forma $\mathbf{B} = B\hat{k}$, o potencial vetor pode ser escrito como $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\widehat{e_\theta}$ (gauge simétrico), como já foi dito anteriormente. Este potencial vetor está representado na Fig. 7 pelas setas sólidas ao redor do solenóide. Observa-se que, para o feixe que percorre o caminho 1, o potencial vetor **A** aponta para a mesma direção

que o momento **p** dos elétrons, enquanto para o caminho 2, estes vetores têm direções contrárias. Com isso, os elétrons que passam pelo caminho 1 possuem um momento final diferente daqueles que passam pelo caminho 2, e isso faz com que ocorra uma variação no padrão de interferência gerado no anteparo. A esta diferença de momento entre os feixes que passam pelos dois caminhos distintos, que ocorre devido à presença de um potencial vetor e é responsável por uma variação no padrão de interferência observado no anteparo, dá-se o nome de efeito Aharonov-Bohm. Mais especificamente, quando o fluxo magnético na região entre dois caminhos 1 e 2 que o elétron pode percorrer atinge um valor $\phi = (n + 1/2)\phi_0$, onde n é um inteiro e $\phi_0 = h/e$ é o fluxo elementar, as funções de onda que percorrem os dois caminhos interferem destrutivamente ao se encontrarem, levando a um valor mínimo na transmissão deste elétron. Assim, a transmissão em função do fluxo magnético apresenta uma oscilação periódica, de período ϕ_0, conhecida como oscilação AB para a transmissão. Este efeito já foi observado para elétrons propagando-se através de um anel quântico em diversos trabalhos na literatura, tanto teóricos [1] como experimentais [79].

Além das oscilações que ocorrem na transmissão, uma outra oscilação, também costumeiramente chamada de oscilação AB, pode também ser observada nos autoestados de um elétron em um anel quântico sob um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do anel. Isto pode ser verificado facilmente considerando-se um anel ideal, isto é, de potencial infinito e de espessura muito pequena, de forma que um elétron confinado neste sistema possua liberdade apenas no movimento em θ, enquanto o raio $\rho = R$ e a posição $z = 0$ (coordenadas cilíndricas) estão fixos. Esta situação representa um modelo simplificado para descrever anéis quânticos que podem ser produzidos experimentalmente, por exemplo, através do crescimento de heteroestruturas semicondutoras [5], cortando-se uma folha de grafeno na forma de um anel, ou gerando-se um potencial de forma anular relacionado a um termo de massa em grafeno, que pode induzido pela simetria cristalina do substrato. Em um trabalho anterior [86], sugerimos ainda uma forma alternativa de se obter um sistema como esse, que consiste em formar uma cavidade na forma de um anel em um substrato e então cubrir esta cavidade com He líquido. Efeitos de tensão sobre o He líquido fazem com que a sua superfície apresente uma curvatura, formando um sistema que pode ser aproximado como um anel quântico de confinamento parabólico. Aplicando-se um campo elétrico na direção perpendicular, podemos então confinar o elétron nesta direção, fazendo com que o mesmo possa se mover apenas na direção angular do sistema

[5] Um anel quântico semicondutor pode ser obtido durante o crescimento de pontos quânticos autoformados, onde o topo do ponto quântico cede, formando uma estrutura de geometria anular, que depois é coberta pelo mesmo material que compõe o substrato.

sobre o ponto de mínima altura da superfície do He líquido. Mais detalhes sobre as oscilações AB no espectro de energia deste sistema podem ser vistos no Apêndice C desta Tese.

O Hamiltoniano que descreve elétrons em um anel quântico ideal, obedecendo a equação de Schrödinger, é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2}{d\theta^2} - \frac{i\hbar\omega_c}{2}\frac{d}{d\theta} + \frac{1}{8}m\omega_c^2 R^2, \tag{1.32}$$

podendo ser facilmente reescrito como

$$H = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left[-i\frac{d}{d\theta} + \frac{\phi}{\phi_0}\right]^2. \tag{1.33}$$

As autofunções deste Hamiltoniano são facilmente encontradas como $\psi(\theta) = exp[in\theta]/\sqrt{2\pi}$, onde $n = 0, \pm1, \pm2, ...$ é o momento angular, e as autoenergias como

$$E_n(\phi) = \frac{\hbar^2}{2mR^2}\left[n + \frac{\phi}{\phi_0}\right]^2. \tag{1.34}$$

É fácil perceber que estas energias em função de ϕ são parábolas com mínimos em $\phi = -n\phi_0$. Este espectro de energia, mostrado na Fig. 8, mostra que o estado fundamental do elétron apresenta uma oscilação AB com período ϕ_0, assim como a oscilação na transmissão que mencionamos anteriormente. Note também que há uma troca de momento angular no estado fundamental para fluxos $\phi = (n + 1/2)\phi_0$.

Nesta descrição simples que fizemos do efeito Aharonov-Bohm, escolhemos um gauge específico para o potencial vetor **A**: o gauge simétrico. Porém, descrições mais formais deste problema podem ser facilmente encontradas na literatura [26], onde é mostrado que este efeito não depende da escolha do gauge para o potencial vetor.

Note que este caráter oscilatório do espectro de energia como função do campo magnético não ocorre apenas no caso específico de um anel quântico, mas em qualquer sistema onde uma região central do espaço real é proibida para o elétron. Por exemplo, as oscilações AB do espectro de energia também podem ser encontradas em um fio quântico core-shell, onde temos um fio cilíndrico coberto por um material diferente (ver exemplo deste efeito no Apêndice C). No caso de um fio de Si coberto por SiGe, temos um sistema que consiste de um poço cilíndrico para o buraco, mas de uma barreira cilíndrica para o elétron, [6] o qual está confinado na borda do fio interno apenas devido à interação Coulom-

[6] Esta situação, conhecida como "alinhamento de bandas do tipo-II"ocorre devido ao *band-offset* da heteroestrutura composta por estes materiais.

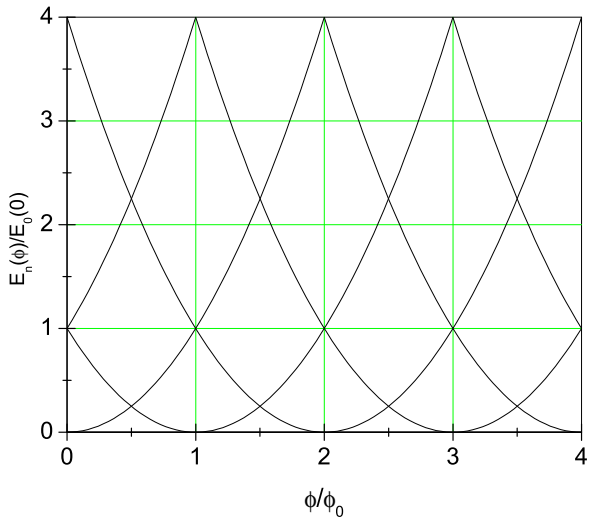

Figura 8: Autoestados de um elétron em um anel quântico ideal como função do fluxo magnético.

biana com o buraco. [14] Neste caso, a energia do exciton (par elétron-buraco) também oscila com o campo magnético devido a um efeito similar ao AB para anéis quânticos. [34] Recentemente, este tipo de efeito foi observado experimentalmente não em fios, mas em um ponto quântico com este tipo de alinhamento de bandas. [87]

Em um trabalho teórico anterior, feito por Szafran e Peeters [1], um sistema canal-anel foi modelado por um potencial de confinamento parabólico de espessura $2\lambda \simeq 40$ nm e raio $R = 132$ nm. O efeito da força de Lorentz sobre a injeção dos elétrons no anel foi investigado, assim como a influência da forma do anel sobre as oscilações AB presentes nas probabilidades de transmissão e reflexão. Uma injeção assimétrica de elétrons nos braços superior e inferior do anel resultou em um efeito de interferência menor e, consequentemente, em uma redução na amplitude das oscilações AB [88]. Nessa aproximação, os canais e o anel foram definidos efetivamente como unidimensionais, isto é, o campo magnético não pode desviar as funções de onda nos canais e no anel, e a deflexão de Lorentz é ativa apenas na região da junção. Além disso, o elétron nesse caso está preso à subbanda de menor energia, de forma que as subbandas de maior energia não são levadas em conta.

Nossa aproximação teórica é similar à das Refs. [1] e [88], onde injetamos um pacote de onda Gaussiano no anel a partir do canal esquerdo e calculamos numericamente sua evolução temporal, resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo. Esta

aproximação nos permite encontrar os coeficientes de transmissão e reflexão, além de possibilitar encontrar estados ligados nas junções, quando propagamos a função de onda em tempo imaginário. Nossa aproximação também permite considerar anéis e canais com espessura e barreiras de potencial finitas, além de permitir que a função de onda que está se propagando acesse outras subbandas.

No decorrer desta tese, mostraremos também como utilizar a idéia proposta nesta subseção para o estudo das oscilações AB das energias dos autoestados de anéis quânticos ideais baseados em grafeno, onde os elétrons são descritos como quasi-partículas que obedecem a equação de Dirac. Neste caso, iremos analisar em que situação a aproximação do anel ideal produz uma descrição apropriada do sistema, comparando os resultados obtidos por esta aproximação àqueles provenientes de um modelo tight-binding para estes sistemas.

1.4 Vórtices em supercondutores e o modelo de Ginzburg-Landau

A supercondutividade foi descoberta em 1911 no laboratório de Leiden, por Heike Kamerlingh Onnes, o primeiro a conseguir liquefazer o hélio. Ele estudava a resistência elétrica de várias substâncias à temperatura do He líquido, quando notou que a resistência do mercúrio caía rapidamente para zero à temperatura crítica 4.2K. As mesmas propriedades foram observadas em alguns outros metais, como chumbo e estanho. Este novo fenômeno foi chamado de supercondutividade. Antes de 1933, considerava-se que a supercondutividade era simplesmente uma condutividade perfeita. Porém, em 1933, Meissner e Ochsenfeld perceberam que, além disso, um campo magnético externo é expulso de uma amostra originalmente normal quando ela é resfriada além de sua temperatura crítica, como ilustrado na Fig. 9. Este efeito é conhecido até hoje como o efeito Meissner. Somente cerca de 20 anos depois da descoberta da supercondutividade, a primeira teoria sobre este fenômeno foi desenvolvida: em 1935, os irmãos London mostraram a primeira teoria fenomenológica que descreve o mecanismo de supercondutividade, a qual mostrou-se ser válida, em condições extremas, para descrição de vórtices, que são linhas de defeitos no supercondutor que carregam um fluxo magnético quantizado. [89] Porém, a teoria de London considerava os vórtices como partículas puntuais, o que não era completamente verdade: imaginava-se que o vórtice deveria ter um núcleo de tamanho finito, com uma estrutura interna. Neste contexto, em 1950 Landau e Ginzburg propuseram uma das teorias fenomenológicas mais bem sucedidas da história, [8] capaz de descrever muitos

dos comportamentos observados em supercondutores. Ela não só engloba os trabalhos feitos por F. London e H. London [89] na explicação do efeito Meissner, como também foi usada para postular alguns fenômentos bastante notáveis, como a formação de vórtices dispostos na rede triangular de Abrikosov [90] em supercondutores. Ginzburg e Landau derivaram esta teoria fenomenologicamente, antes da teoria microscópica BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) de supercondutividade ser desenvolvida, e muitos anos depois Gorkov mostrou que a teoria de Ginzburg-Landau pode ser encontrada naturalmente a partir da teoria BCS.

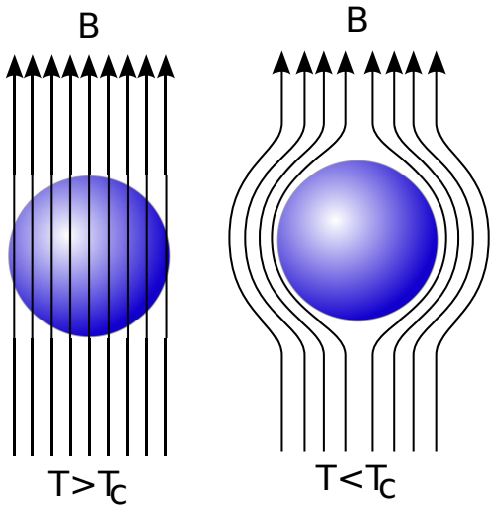

Figura 9: Efeito Meissner: um material que apresenta comportamento normal a temperaturas $T > T_C$ passa a repelir campos magnéticos quando se torna supercondutor para $T < T_C$.

Em sua teoria fenomenológica, Ginzburg e Landau introduziram a função de onda $\Psi(\vec{r})$ dos elétrons supercondutores como um parâmetro de ordem que é não-nulo para $T < T_C$ e nulo para $T > T_C$, descrevendo uma transição de fase de segunda ordem. A teoria BCS explicou a supercondutividade como sendo proveniente do acoplamento de elétrons em pares de Cooper. Assim, o parâmetro de ordem de Ginzburg-Landau relaciona-se com a densidade de elétrons supercondutores n_s como $|\Psi(\vec{r})|^2 = n_s/2$. A teoria de Ginzburg-Landau (GL), baseia-se na teoria de London para transições de fase de segunda ordem, onde a energia livre é expandida em uma série de potências do parâmetro de ordem. A expansão é feita em torno da temperatura crítica T_C e, por isso, a teoria de GL só é válida na vizinhança deste ponto. No decorrer desta Tese, porém, iremos mostrar também alguns resultados provenientes da extrapolação desta teoria para temperaturas mais baixas. A densidade de energia livre de Gibbs em torno de T_C é expandida como

$$G_s = G_n + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 + \frac{\hbar^2}{2m^*}\left|\left(\vec{\nabla} - \frac{ie^*}{\hbar c}\vec{A}\right)\Psi\right|^2 + \frac{H^2}{8\pi} - \frac{\vec{H}-\vec{H}_0}{4\pi}\cdot\vec{H}_0, \qquad (1.35)$$

onde $m^* = 2m_0$ e $e^* = 2e$ são a massa e a carga dos pares de Cooper, respectivamente, $\vec{H}$ é o campo magnético em um certo ponto do supercondutor e G_n é a densidade de energia livre para o estado normal na ausência de campo aplicado. Quando um campo magnético é aplicado, temos $G_{nH} = G_n + H_0^2/8\pi$, com $H_0^2/8\pi$ sendo a densidade de energia magnética.

A primeira parte da Eq. (1.35) representa a expansão da densidade de energia livre em um supercondutor homogêneo sem campo aplicado e próximo à temperatura crítica $T_{C0} = T_C(H_0 = 0)$,

$$G_n + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4, \tag{1.36}$$

onde α e β são coeficientes característicos de cada material. O parâmetro α depende da temperatura e a supercondutividade ocorre somente para $\alpha < 0$,[7] enquanto β é sempre positivo e constante. A partir da Eq. (1.36), a densidade de pares de Cooper que corresponde ao mínimo de energia livre para $T < T_{C0}$ pode ser calculado como $|\Psi|^2 = -\alpha/\beta$. A segunda parte da Eq. (1.35) corresponde à energia cinética dos pares de Cooper

$$\frac{\hbar^2}{2m^*}\left|\left(\vec{\nabla} - \frac{ie^*}{\hbar c}\vec{A}\right)\Psi\right|^2, \tag{1.37}$$

enquanto a terceira, $H^2/8\pi$, é simplesmente a densidade de energia magnética. A quarta e última parte,

$$-\frac{\vec{H} - \vec{H}_0}{4\pi} \cdot \vec{H}_0 \tag{1.38}$$

representa a redução do campo magnético devido a uma possível penetração do campo no supercondutor. Uma penetração deste tipo em certo ponto do supercondutor representa um defeito na supercondutividade (e, consequentemente, no efeito Meissner) e, com isso, devemos ter também $|\Psi|^2 = 0$ neste ponto, devido à ausência de pares de Cooper. Esta é a linha de defeitos à qual demos o nome de vórtice nos parágrafos anteriores.

A energia total do sistema é encontrada simplesmente integrando-se a densidade de energia livre de Gibbs da Eq. (1.35) em todo o volume do supercondutor. Lembre-se, porém, que Ψ e $\vec{A}$ são funções do espaço real, e a forma destas funções influencia na energia encontrada após a integração. Por outro lado, sabemos que Ψ e $\vec{A}$ não podem assumir qualquer forma: elas devem ser tais que a energia total $\mathcal{F}$ do sistema seja mínima. Assim, devemos então minimizar a energia total $\mathcal{F}$ através das variáveis Ψ e $\vec{A}$; em outras palavras, Ψ e $\vec{A}$ devem obedecer às equações de Euler-Lagrange para o funcional de energia dado pela Eq. (1.35). As equações de Euler-Lagrange para este funcional são comumente

[7] Isto vale para supercondutores de uma banda. Mostraremos que é possivel haver supercondutividade com $\alpha > 0$ em supercondutores de duas bandas, devido ao acoplamento de Josephson.

chamadas de "Equações de Ginzburg-Landau", cuja forma geral é dada por

$$\alpha\Psi + \beta|\Psi|^2\Psi - \frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\vec{\nabla} - i\frac{e^*}{\hbar c}\vec{A}\right)^2\Psi = 0 \tag{1.39a}$$

$$\vec{j}_s = -\frac{ie^*\hbar}{2m^*}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right) - \frac{e^{*2}}{m^*c}|\Psi|^2\vec{A}, \tag{1.39b}$$

onde a corrente supercondutora é

$$\vec{j}_s = \frac{c}{4\pi}\vec{\nabla}\times\vec{\nabla}\times\vec{A}. \tag{1.40}$$

Finalmente, o modelo de Ginzburg-Landau introduz duas escalas de comprimento que são peças chave para a definição do caráter do supercondutor: i) o comprimento de coerência $\xi = \hbar/\sqrt{2m^*|\alpha|}$, que indica o comprimento típico sobre o qual o valor do parâmetro de ordem pode variar; e ii) a profundidade de penetração $\lambda = \sqrt{m^*c^2\beta/4\pi e^{*2}|\alpha|}$, a qual representa o comprimento típico sobre o qual o campo magnético pode variar. Estas expressões para escalas de comprimento ξ e λ podem ser facilmente derivadas a partir das Eqs. (1.39a) e (1.39b), respectivamente. O parâmetro de Ginzburg-Landau $\kappa = \lambda/\xi$ é de fundamental importância para determinarmos o comportamento dos vórtices no supercondutor: em 1957, Abrikosov [90] calculou as propriedades de supercondutores com $\kappa > 1/\sqrt{2}$ através da teoria de Ginzburg-Landau e encontrou o chamado "estado misto", onde unidades quantizadas de fluxo magnético penetram o supercondutor, através de vórtices, formando uma rede regular. Esta rede triangular de fluxos, que corresponde à configuração de menor energia obtida resolvendo-se as Eqs. (1.39a) e (1.39b) para $\kappa > 1/\sqrt{2}$, é conhecida como a rede de vórtices de Abrikosov. Note que os vórtices encontrados por Abrikosov na teoria de GL apresentam um núcleo finito, o que não é possível de se obter pela teoria de London. A partir daí, descobriu-se que o parâmetro κ determina o caráter da interação entre os vórtices, de forma que se $\kappa > 1/\sqrt{2}$ ($< 1/\sqrt{2}$) ela é repulsiva (atrativa) e o supercondutor é classificado como sendo do tipo-II (tipo-I). Como os vórtices no tipo-II se repelem, é facil encontrar, em um certo intervalo de campos magnéticos e temperaturas, uma estrutura estável com vórtices formando uma rede de Abrikosov. Já no tipo-I, os vórtices tendem a se atrair, tornando difícil de se encontrar tal estrutura. Isto está ilustrado na Fig. 10.

O potencial de interação entre vórtices tem sido um importante objeto de estudo por muitos anos. Em 1971, Kramer [92] usou o comportamento assintótico dos campos do vórtice longe do seu núcleo no modelo abeliano de Higgs para obter uma expressão analítica para o potencial da interação vórtice-vórtice, o qual foi encontrado como uma

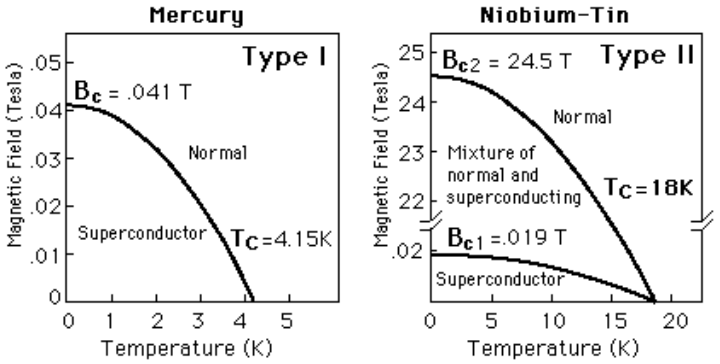

Figura 10: Diagrama de fases $H - T$ para um supercondutor do tipo-I (mercúrio) e um do tipo-II (nióbio-estanho). Os campos magnéticos definidos como B_c, B_{c1} e B_{c2} são os campos críticos que delimitam as regiões onde o sistema é puramente supercondutor, onde há estado misto e onde o sistema é normal. [91]

combinação de funções de Bessel modificadas. Este potencial é atrativo (repulsivo) para sistemas type-I (type-II) , isto é, para um supercondutor com parâmetro de Ginzburg-Landau $\kappa = \lambda/\xi < 1/\sqrt{2}$ ($> 1/\sqrt{2}$), onde λ é a profundidade de penetração e ξ é o comprimento de coerência. Além disso, esta expressão leva a uma energia de interação constante como função da separação entre vórtices para o valor crítico $\kappa = 1/\sqrt{2}$ (também conhecido como ponto de Bogomol'nyi), o que implica que os vórtices não interagem neste caso, ou seja, podemos ter infinitas estruturas de vórtices com a mesma energia. Uma análise detalhada da interação vórtice-vórtice (V-V) foi feita mais tarde por Jacobs and Rebbi, [93] que construíram uma função variacional que descreve dois vórtices separados e obtiveram os parâmetros variacionais que minimizam a energia livre. esta função variacional era capaz de modelar: i) a deformação do núcleo do vórtice quando os vórtices são trazidos para perto um do outro, e ii) a formação de um vórtice gigange [94, 95, 96] quando os vórtices estão superpostos.

A partir daí, muitos trabalhos estudaram aspectos diferentes da interação entre vórtices em supercondutores. Por exemplo, Brandt [97] usou a expressão assintótica para o potencial de interação no estudo das propriedades elásticas da rede de linhas de fluxo em supercondutores do tipo-II. Speight [98] re-derivou o potencial de interação V-V a partir de uma teoria de campos linear descrita por um lagrangeano de duas fontes puntuais singulares localizadas nos centros dos vórtices. MacKenzie *et al.* [99] usou a teoria linear proposta por Speight para obter a interação entre duas cordas separadas em um modelo com dois parâmetros de ordem, que pode ser relevante para cordas cósmicas supercondutoras, [100] para o modelo SO(5) de supercondutividade em altas temperaturas e para sólitons em óptica não-linear. No fim, todas estas aproximações analíticas usam,

ou levam a expressões analíticas que são as mesmas, ou ao menos muito parecidas com aquela derivada por Kramer no limite assintótico. Outros modelos foram apresentados por Mohamed *et al.* [101], que usou uma aproximação perturbativa para calcular a interação V-V interaction em supercondutores com $\kappa \approx 1/\sqrt{2}$ quando a teoria de Ginzburg-Landau (GL) é extendida a baixas temperaturas, e por Hernández e López, [102], que usaram uma aproximação variacional baseada na função-tentativa de Clem [103] para calcular a força entre vórtices. Auzzi *et al.* [104] mostraram recentemente que para a interação entre vórtices não-Abelianos, existem dois outros regimes além dos já conhecidos type-I e type-II: dependendo da orientação relativa, o potencial de interação pode apresentar regiões atrativas e repulsivas no mesmo sistema. Um comportamento similar pode ser obtido em um supercondutor de duas bandas, como mostraremos mais tarde nesta Tese. [105, 106]

1.4.1 Supercondutores de duas bandas

Desde a descoberta dos supercondutores, a questão do controle das suas propriedades eletrônicas de magnéticas e a possibilidade de se alcançar temperaturas e campos críticos ainda maiores sempre esteve em foco nesta linha de pesquisa. Em supercondutores elementares, como Pb, Nb, Al, o manuseio do confinamento quântico particularmente tem mostrado bons resultados, pois a redução das dimensões espaciais leva a um claro aumento dos campos e temperaturas críticas a campos não-nulos, e isto é o que há de mais avançado na pesquisa dos chamados supercondutores mesoscópicos [107]. Em filmes e em supercondutores volumétricos, a padronização das amostras também tem sido uma ferramenta para o aprimoramento da corrente crítica, o que já é de grande relevância tecnológica. Porém, os fenômenos fascinantes descobertos em supercondutores mais complexos (como os de alta temperatura crítica high-T_c) valem-se da combinação e hibridização das propriedades gerais dos componentes. A estrutura de camadas supercondutor-isolante dos cupratos ou a presença de íons magnéticos na rede cristalina dos supercondutores ferromagnéticos são apenas alguns exemplos, que também têm seus análogos fabricados artificialmente em termos de multicamadas com acoplamento de Josephson e híbridos supercondutor-ferromagneto. Em tudo que mencionamos agora, a idéia é bastante clara - combinar propriedades conhecidas dos materiais e obter sistemas híbridos com comportamento aprimorado ou, pelo menos, fundamentalmente interessante.

A mais moderna classe de materiais intrinsecamente híbridos são os supercondutores de dois gaps. Nestes híbridos naturais, os dois condensados de pares de Cooper coexis-

tentes estão acoplados, e ambos contribuem para o comportamento macroscópico aparente do material. Os estudos sobre as propriedades resultantes foram estimulados ainda mais pela descoberta do diborato de magnésio MgB_2 em 2001, com dois grupos claramente diferentes de bandas supercondutoras chamadas σ e π [108]. O MgB_2 é também de grande importância tecnológica devido à sua temperatura crítica relativamente alta, composição química simples e boas propriedades mecânicas. Materiais mais complexos e ainda não entendidos completamentes, como os pnictides, também demonstram supercondutividade de duas bandas [109]. Por outro lado, até os supercondutores mais simples e elementares, como Pb, podem também ter dois gaps [110]. Além disso, eles são sempre efetivamente de muitas bandas quando são reduzidos em uma dimensão até a escala atômica, onde a quantização do espectro de energia dos elétrons para para o movimento perpendicular separa a banda de condução em uma série de subbandas de um elétron [111]. Assim, os materiais supercondutores, dos mais simples aos mais complexos, da baixa à alta temperatura crítica T_c, compreendem condensados de pares de Cooper acoplados, e o principal objetivo do nosso estudo sobre supercondutores de duas bandas no Capítulo 5 é mostrar a influência mútua dos condensados no comportamento magnético híbrido resultante, o qual, como iremos demonstrar, é extremamente não-trivial. Mais especificamente, usaremos os métodos de cálculo do potencial entre vórtices que serão desenvolvidos no decorrer desta tese para demonstrar a existência de interações não-monotônicas em supercondutores de duas bandas. O interesse neste assunto decorre do experimento recente publicado por Moshchalkov *et al.* [7] que, como dissemos no início deste capítulo, sugere que uma interação não-monotônica entre vórtices pode surgir devido aos efeitos combinados das duas bandas neste material. A existência de tal interação não-monotônica tem sido tema de intensa discussão nos últimos dois anos: uma série de artigos foram publicados, alguns concordando [113], outros discordando [114, 115] da existência deste tipo de estado supercondutor, e outros até sugerindo explicações alternativas para o que foi observado experimentalmente. [8]

1.5 Objetivos e estrutura da Tese

Esta tese possui dois objetivos principais: o primeiro deles consiste em desenvolver métodos eficientes para a solução das equações de Schrödinger e Dirac dependentes do tempo, para então aplicá-los no estudo do confinamento e das propriedades de transporte de estruturas de escala nanométrica. No Capítulo 2, mostraremos como resolver estas equações numericamente através do método *split-operator*, danto detalhes sobre este

método e desenvolvendo-o também para sistemas onde o Hamiltoniano é escrito na forma tight-binding ou em termos de matrizes de Pauli. Iremos abordar também o problema das condições de contorno em sistemas onde pretende-se estudar evolução em tempo real e mostramos que uma evolução em tempo imaginário é uma boa ferramenta para obtenção dos autoestados de um Hamiltoniano cujo espectro de energia possui um limite inferior. No Capítulo 3, estudamos diversos tipos de heteroestruturas semicondutoras, onde os elétrons obedecem à uma equação de Schrödinger no modelo de massa efetiva. Aplicamos o método descrito no Capítulo 2 para calcular autoestados e evolução temporal em sistemas compostos por anéis quânticos com canais longitudinais sob campos magnéticos. Uma vez que a junção entre os canais e o anel lembram um sistema de fios em T, iniciamos o capítulo fazendo um estudo dos autoestados e da propagação de pacotes de onda em junções T, para compreender melhor o problema dos anéis. Estudaremos também heteroestruturas onde os efeitos Zeeman e spin-órbita têm um papel importante, e analisaremos a influencia destes termos sobre os autoestados e a evolução temporal de pacotes de onda.

No Capítulo 4 apresentamos os resultados obtidos para o movimento de elétrons sobre uma monocamada de Grafeno, com e sem potenciais externos. Estudaremos o zitterbewegung através dos modelos tight-binding e contínuo, fazendo uma comparação entre os resultados obtidos por cada um, e analisaremos a influência de campos magnéticos e pseudo-magnéticos sobre este efeito. No caso dos campos pseudo-magnéticos, induzidos por tensão, discutiremos a questão da quebra de degenerescência de vales e a possível aplicação de tal efeito como um filtro de vales em grafeno. Investigaremos também o efeito AB sobre o espectro de energia de anéis quânticos de grafeno sob campos magnéticos externos, comparando os resultados do tight-binding com os do modelo do anel ideal descrito anteriormente neste capítulo.

O segundo objetivo desta tese consiste em analisar a interação entre vórtices em supercondutores, com o intuito de entender melhor os resultados obtidos através das equações de Ginzburg-Landau para as estruturas de vórtices. Ao resolver estas equações, obtemos uma estrutura de vórtices interagentes que corresponde ao estado de menor energia do sistema, mas não somos capazes de compreender de maneira profunda o que leva este estado a ser o de menor energia, pois em geral não conhecemos de forma exata (conhecemos apenas a longo alcance, dentro de algumas aproximações) o potencial entre os vórtices. Procurando compreender melhor a interação entre vórtices, desenvolvemos no Capítulo 5 desta tese uma variante das próprias equações de Ginzburg-Landau que nos permite obter o potencial entre vórtices em supercondutores volumétricos para quaisquer separação e

vorticidade dos vórtices interagentes e para qualquer valor do parâmetro de Ginzburg-Landau κ. Aplicaremos este procedimento para analisar interações entre um vórtice e um outro vórtice (V-V), um vórtice gigante (V-GV) ou um antivórtice (V-AV). Explicaremos também como expandir este método para o estudo de supercondutores de duas componentes e mostraremos como prever de maneira simples qual será o comportamento resultante do potencial entre vórtices nestes sistemas. Com isso, pretendemos demonstrar de maneira teórica a possibilidade de se obter um comportamento não-monotônico do potencial de interação, o qual tem sido chamado de supercondutividade tipo-1.5 e tem sido alvo de intensa discussão em vários trabalhos anteriores na literatura, após sua recente observação experimental. [7]

No Capítulo 6, faremos um resumo dos principais resultados que obtivemos para os sistemas que estudamos nos Capítulos 3, 4 e 5, e daremos sugestões e perspectivas para trabalhos futuros.

Nos apêndices A e B deste trabalho, encontram-se respectivamente os artigos que publiquei e os que estão submetidos ou sendo escritos, os quais resumem os principais resultados que expus nesta tese. No apêndice C, temos os artigos publicados que não estão relacionados diretamente aos temas da tese, mas que são sugeridos como leitura complementar.

2 Evolução temporal - O método split-operator

Neste capítulo, apresentamos de forma detalhada o método *split-operator*, que será utilizado no decorrer deste trabalho para resolver as equações de Schrödinger e Dirac dependentes do tempo para vários tipos de sistema.

A equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\overrightarrow{r},t) = H\Psi(\overrightarrow{r},t) \tag{2.1}$$

tem como solução formal a expressão

$$\Psi(\overrightarrow{r},t+\Delta t) = exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right]\Psi(\overrightarrow{r},t). \tag{2.2}$$

De fato, o operador definido pela exponencial na Eq. (2.2) pode ser facilmente identificado como o operador de evolução temporal, onde o gerador desta "translação" na coordenada temporal é o Hamiltoniano H. Isso pode ser verificado expandindo a função de onda em série de Taylor com relação ao tempo em torno de $t = t_0$, e definindo $\Delta t = t - t_0$:

$$\Psi(\overrightarrow{r},t_0+\Delta t) = \Psi(\overrightarrow{r},t_0) + \left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)_{t=t_0}\Delta t + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}\right)_{t=t_0}\Delta t^2 + ... \tag{2.3}$$

A equação de Schrödinger nos traz $\partial\Psi/\partial t = -(i/\hbar)H\Psi$, portanto,

$$\Psi(\overrightarrow{r},t_0+\Delta t) = \left[1 - \frac{i}{\hbar}H\Delta t + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)^2 + ...\right]\Psi(\overrightarrow{r},t_0). \tag{2.4}$$

Usando a definição da exponencial na Eq. (2.4), encontramos diretamente a Eq. (2.2). Na verdade, qualquer tipo de translação na função de onda pode ser descrita pela exponencial de um "gerador". [25] Por exemplo, note que o procedimento das Eqs. (2.3-2.4) é o mesmo que fizemos na Eq. (1.2) para a coordenada x, onde encontramos um operador

que "translada"a função de onda de x para $x+a$ como $\exp[(-i/\hbar)\hat{p}_x a]$, ou seja, o gerador da translação em x é o momento $\hat{p}_x$. Da mesma forma, na coordenada angular, o gerador é o momento angular $\hat{j}_z$ e, finalmente, no tempo, o gerador é o Hamiltoniano H, como mencionado anteriormente. Conhecendo-se o Hamiltoniano que descreve um certo sistema, podemos então fazer a evolução temporal de qualquer pacote de onda inicial a partir desta equação. Note que a Eq. (2.3) também vale para a equação de Dirac, trocando-se apenas a função de onda por um spinor e considerando-se o Hamiltoniano na forma de Dirac.

Alguns trabalhos na literatura costumam utilizar a chamada "forma de Cayley" para a Eq. (2.2), que consiste em uma aproximação para a exponencial no operador de evolução [116]:

$$exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right]\Psi(\overrightarrow{r},t) \simeq \frac{1+\frac{i}{2\hbar}H\Delta t}{1-\frac{i}{2\hbar}H\Delta t}\Psi(\overrightarrow{r},t) = \Psi(\overrightarrow{r},t+\Delta t), \tag{2.5}$$

de forma que obtém-se

$$\left(1-\frac{i}{2\hbar}H\Delta t\right)\Psi(\overrightarrow{r},t+\Delta t) = \left(1+\frac{i}{2\hbar}H\Delta t\right)\Psi(\overrightarrow{r},t). \tag{2.6}$$

Usando o método de Crank-Nicolson, costuma-se reescrever as derivadas no operador de momento do Hamiltoniano na forma de diferenças finitas, discretizando-se o espaço e as funções que descrevem os potenciais. Desta forma, a função de onda no instante t (conhecida) é discretizada em pontos $i = 1, 2, ...N$, formando uma matriz coluna; a operação do lado direito na Eq. (2.6) é feita, resultando numa nova matriz coluna. A operação do lado esquerdo é reescrita como uma equação matricial, onde as variáveis a determinar são os Ψ_i no instante $t+\Delta t$. Resolvendo-se esta equação matricial sucessivas vezes, obtemos a função de onda a cada instante. Uma complicação deste método aparece quando tratamos de problemas com mais de uma variável espacial: A equação matricial que acabamos de mencionar envolve, para um problema unidimensional, apenas uma matriz tridiagonal. Já para um problema bidimensional, temos uma matriz pentadiagonal em blocos, para um tridimensional, heptadiagonal, e assim por diante. Cada matriz desta pode ocupar bastante memória do computador, por conter muitos termos ou, no mínimo, ser difícil de ser manuseada. O método *split-operator* propõe-se a resolver este problema, fazendo com que um problema com qualquer número de variáveis espaciais possa ser resolvido como uma sequência de problemas unidimensionais, cada um descrito facilmente apenas por uma matriz tridiagonal.

Primeiramente, separamos a exponencial do Hamiltoniano em duas partes, uma envolvendo a energia potencial V e a outra, a energia cinética T. A exponencial de uma soma

$exp[A+B]$ pode ser separada como uma multiplicação de exponenciais $exp[A]exp[B]$ de forma exata apenas quando A e B são números ou quando são operadores que comutam. A exponencial do Hamiltoniano $H = T + V$ presente no operador de evolução temporal não pode ser separada dessa forma, uma vez que T e V não comutam. De forma aproximada, podemos ter

$$exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right] = exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] exp\left[-\frac{i}{\hbar}T\Delta t\right] exp\left[-\frac{i}{2\hbar}H\Delta t\right], \tag{2.7}$$

onde desprezamos termos de ordem Δt^3. [117] Dessa forma, como os termos de exponencial do potencial não envolvem derivadas, podemos multiplicá-los ponto a ponto pela função de onda. Quanto aos termos de energia cinética, usamos ainda a forma de Cayley da Eq. (2.6), porém, como as energias cinéticas em cada direção, T_x, T_y e T_z, comutam entre si, na ausência de campos magnéticos, fazemos $exp[T] = exp[T_x + T_y + T_z] = exp[T_x]exp[T_y]exp[T_z]$, de forma exata. Na presença de campos magnéticos, fazemos ainda assim esta operação, incorrendo em mais um erro de ordem Δt^2. Mostraremos que, apesar disso, considerando-se valores bem pequenos para Δt, conseguimos obter bons resultados, preservando-se as principais características dos sistemas estudados [181].

2.1 Hamiltonianos que não envolvem spin

Iniciamos então com uma função de onda $\Psi(\overrightarrow{r}, t)$ arbitrária, para efetuarmos a operação

$$\Psi(\overrightarrow{r}, t+\Delta t) = exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] exp\left[-\frac{i}{\hbar}T\Delta t\right] exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \Psi(\overrightarrow{r}, t), \tag{2.8}$$

e encontrarmos a função de onda em um instante Δt posterior. Discretizando o espaço, o potencial V e a função de onda $\Psi(\overrightarrow{r}, t) = |\Psi_i >_t$, fazemos primeiro a multiplicação ponto a ponto da função de onda pela exponencial da direita, que envolve V, obtendo

$$\xi_i = exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V_i\Delta t\right] |\Psi_i >_t . \tag{2.9}$$

O próximo passo é efetuar a multiplicação de ξ_i pela exponencial do termo cinético. Uma das maneiras de se fazer tal operação consiste em efetuar uma transformada de Fourier em ξ_i, de maneira a levá-la para o espaço recíproco, onde a expoencial da parte cinética poderia ser simplesmente multiplicada ponto a ponto pela função, assim como fizemos para o termo de potencial, quando este termo e a função de onda estavam ambos no mesmo espaço das posições. Porém, como veremos com mais detalhes a seguir, isso levaria a uma

condição de contorno periódica no problema. Se continuarmos trabalhando no espaço das posições, isto é, sem usar transformadas de Fourier, podemos usar a forma de Cayley da exponencial para chegar a

$$\eta_i = exp\left[-\frac{i}{\hbar}T\Delta t\right]\xi_i = \left(\frac{1+\frac{i}{2\hbar}T\Delta t}{1-\frac{i}{2\hbar}T\Delta t}\right)\xi_i, \tag{2.10}$$

de onde obtemos

$$\left(1-\frac{i}{2\hbar}T\Delta t\right)\eta_i = \left(1+\frac{i}{2\hbar}T\Delta t\right)\xi_i. \tag{2.11}$$

Sendo a energia cinética, na ausência de campos magnéticos, dada por

$$T_n = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_n^2}, \tag{2.12}$$

onde m é a massa da partícula e x_n é uma das variáveis espaciais, usamos a forma de Crank-Nicolson para discretizar as derivadas e chegamos a uma equação matricial equivalente:

$$\begin{pmatrix} B & A & 0 & 0 & 0 \\ A & B & A & 0 & 0 \\ 0 & A & B & A & 0 \\ 0 & 0 & A & B & A \\ 0 & 0 & 0 & A & B \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \vdots \\ \eta_{i-1} \\ \eta_i \\ \eta_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B' & A' & 0 & 0 & 0 \\ A' & B' & A' & 0 & 0 \\ 0 & A' & B' & A' & 0 \\ 0 & 0 & A' & B' & A' \\ 0 & 0 & 0 & A' & B' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \vdots \\ \xi_{i-1} \\ \xi_i \\ \xi_{i+1} \\ \vdots \end{pmatrix}, \tag{2.13}$$

onde os elementos das matrizes são

$$A = -\frac{i\hbar\Delta t}{4m\Delta x_n^2} \qquad B = 1+\frac{i\hbar\Delta t}{2m\Delta x_n^2} \tag{2.14}$$

e

$$A' = \frac{i\hbar\Delta t}{4m\Delta x_n^2} \qquad B' = 1-\frac{i\hbar\Delta t}{2m\Delta x_n^2}, \tag{2.15}$$

com um espaçamento Δx_n na discretização da variável x_n. O lado direito da Eq. (2.13) pode ser multiplicado diretamente, uma vez que já conhecemos os ξ_i para todos os pontos i do grid. Resta agora apenas uma equação matricial para η_i, a qual resolvemos através da subrotina TRIDAG, que pode ser encontrada no *Numerical Recipes*.[119]

Resolvendo esta equação matricial, obtemos η_i e podemos então, finalmente, chegar a função de onda no tempo $t+\Delta t$ a partir da multiplicação direta

$$|\Psi_i>_{t+\Delta t} = exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V_i\Delta t\right]\eta_i. \tag{2.16}$$

Como já dito anteriormente, se o problema tem mais de uma variável espacial, podemos

repetir o procedimento das Eqs. (2.10) a (2.13) para a energia cinética em cada direção. Podemos, dessa forma, resolver um problema de um elétron em um ponto quântico tridimensional, por exemplo, ou dois elétrons num plano, onde teríamos quatro variáveis espaciais, etc. realizando apenas operações com matrizes tridiagonais, uma para cada dimensão, ao invés de termos que fazer uma operação matricial com uma matriz gigantesca, que envolve a discretização em todas as variáveis espaciais, que é o que se faz comumente quando se usa a forma de Cayley sem a técnica *split-operator*.

2.2 Hamiltonianos do tipo tight-binding

No modelo tight-binding, consideramos os sítios atômicos como uma rede de poços de potencial que podem confinar um elétron, o qual apresenta uma probabilidade não-nula de tunelar de um poço a um outro primeiro vizinho. O leitor deve lembrar que já fizemos uma descrição superficial deste modelo na Sec. 1.3, num sistema unidimensional, para demonstrar a existência de bandas de energia em uma rede periódica. Iremos agora expandir desta descrição para casos bidimensionais mais gerais.

Consideremos, por enquanto, uma rede unidimensional de poços quânticos para representar uma linha periódica de átomos. Se as barreiras entre os poços têm altura infinita e o Hamiltoniano do sistema é H_∞, temos $H_\infty|\psi_i\rangle = E_0|\psi_i\rangle$, ou seja, um elétron preso no i-ésimo poço é um autoestado do sistema, com a energia do estado fundamental do poço E_0, para qualquer valor de i. Porém, se temos um valor finito de potencial entre os poços, o elétron pode tunelar de um poço a outro com certa probabilidade. Assim, não podemos mais garantir que $|\psi_i\rangle$ seja um autoestado do sistema, mas podemos estimar que aplicando-se H, o Hamiltoniano do sistema de potenciais finitos, sobre $|\psi_i\rangle$, teríamos algo como

$$H|\psi_i\rangle = ... + \tau_{i-1}|\psi_{i-1}\rangle + E_0|\psi_i\rangle + \tau_{i+1}|\psi_{i+1}\rangle + ..., \tag{2.17}$$

onde τ_j representa a energia de hopping do elétron entre os poços i e j. Note que os estados $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, 2, 3 ...$) que representam um elétron confinado em cada poço são obviamente ortogonais, pois no caso de onde tiramos estes estados, onde as barreiras são infinitas, um elétron não pode ocupar dois sítios ao mesmo tempo. Sendo assim, estes estados formam uma base ortogonal, através da qual podemos escrever qualquer estado do sistema onde o potencial é finito como $|\Psi\rangle = \sum_i a_i|\psi_i\rangle$. Podemos escrever H nesta base e diagonalizá-lo, encontrando assim as autoenergias e os coeficientes a_i dos seus autoestados. Fazer isso com a Eq. (2.17), que contém infinitos termos, não é uma tarefa fácil, mas podemos

considerar que o hopping para primeiros vizinhos tem maior importância, descartando assim os outros termos e chegando a

$$H|\psi_i\rangle \approx \tau_{i-1}|\psi_{i-1}\rangle + E_0|\psi_i\rangle + \tau_{i+1}|\psi_{i+1}\rangle. \tag{2.18}$$

Com isso, se temos a base $|\Psi\rangle = \sum_i a_i|\psi_i\rangle$, o Hamiltoniano H é escrito como

$$H \approx H_{TB} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & E_0 & t_{i-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{i-1} & E_0 & t_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_i & E_0 & t_{i+1} & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & t_{i+1} & E_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{2.19}$$

Se considerarmos uma rede finita de átomos, podemos facilmente resolver o problema numericamente, pois existem várias rotinas computacionais preparadas para diagonalizar matrizes tridiagonais como esta, por exemplo, a rotina IMTQL2 da EISPACK. [119] Podemos também introduzir neste modelo um potencial externo V_i, apenas adicionando um termo V_i à diagonal da matriz Hamiltoniana, ou seja, à energia do elétron no sítio i.

Note que o que fizemos aqui não é tão diferente do que já vimos para o caso do modelo de massa efetiva: se aplicarmos um esquema de diferenças finitas na derivada espacial, temos em primeira aproximação

$$H_{ME}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2}\Psi_{i-1} + \left(\frac{\hbar^2}{m^*\Delta x^2} + V_i\right)\Psi_i - \frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2}\Psi_{i+1}, \tag{2.20}$$

ou seja, a primeira aproximação para o esquema de diferenças finitas no Hamiltoniano de massa efetiva não passa de um modelo tight-binding onde os parâmetros de hopping equivalem a $\tau \equiv -\frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2}$ e as energias dos sítios a $-\frac{\hbar^2}{m^*\Delta x^2} + V_i$. Isso nos dá a primeira indicação de que é possível adaptar o método split-operator também para o modelo tight-binding, uma vez que este é análogo ao modelo de massa efetiva, para o qual desenvolvemos este método facilmente na seção anterior.

Com as ferramentas que desenvolvemos até este ponto, torna-se trivial expandir o método tight-binding para duas dimensões: agora, ao invés de termos um só índice para designar cada poço, teremos dois índices, i e j, que determinam sua posição de maneira única. Por exemplo, em uma rede quadrada, podemos ter i e j definindo respectivamente

a linha e a coluna onde o sítio se encontra. Com isso, a Eq. (2.18) torna-se

$$H|\psi_{ij}\rangle \approx (E_0+V_{ij})|\psi_{ij}\rangle+\tau_{(i-1)j}|\psi_{(i-1)j}\rangle+\tau_{(i+1)j}|\psi_{(i+1)j}\rangle+\tau_{i(j-1)}|\psi_{i(j-1)}\rangle+\tau_{i(j+1)}|\psi_{i(j+1)}\rangle, \tag{2.21}$$

de forma que H_{TB} não pode mais ser escrito como uma matriz tridiagonal, mas sim como uma pentadiagonal em blocos, esboçada na Fig. 11, a qual é análoga à matriz comumente encontrada no caso do modelo de massa efetiva para um sistema bidimensional. [120]

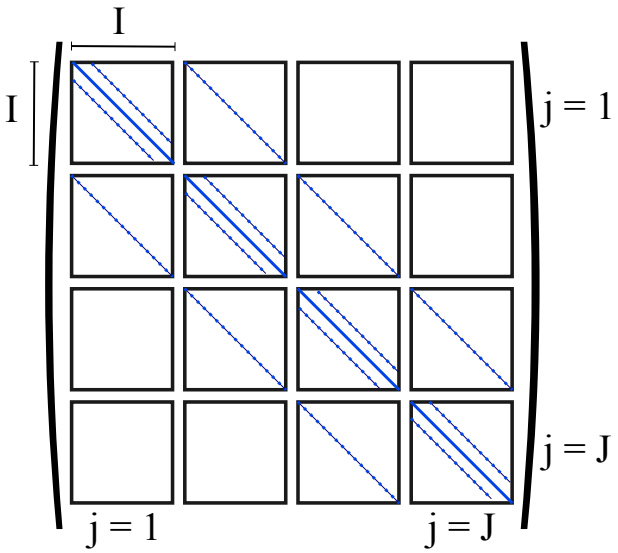

Figura 11: Esboço da matriz pentadiagonal proveniente do modelo TB para uma rede bidimensional ou, equivalente, do esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva em duas dimensões. A matriz é toda nula, exceto na diagonal e nas sub-diagonais representadas pelas linhas sólidas e tracejadas, respectivamente. Cada bloco consiste de uma matriz quadrada de ordem I, o número de linhas de sítios da rede. Existem J blocos, onde J é o número de colunas de sítios da rede. Assim, o número total de elementos na matriz H_{TB} em duas dimensões é $I \times I \times J \times J$

Antes de partirmos para o método split-operator, cabe aqui fazermos alguns comentários adicionais: i) podemos levar em conta um campo magnético externo $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ incluindo-se uma fase de Peierls nos parâmetros de hopping $\tau_{ij} \rightarrow \tau_{ij} \exp\left[i\frac{e}{\hbar}\int_j^i \vec{A}\cdot d\vec{l}\right]$. O modelo tight-binding (TB) com a fase de Peierls é diretamente independente de gauge. Por outro lado, o esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva quando consideramos simplesmente $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$ é dependente do gauge, como discutido na Ref. [121], e a forma correta (independente de gauge) de se incluir um campo magnético neste caso baseia-se na comparação que demonstramos aqui entre o modelo TB e o esquema de diferenças finitas no modelo de massa efetiva. [121] Ao longo desta tese, usaremos a forma independente de gauge sugerida na Ref. [121] para incluir o efeito de um campo magnético externo no modelo da massa efetiva. ii) A Eq. (2.21) não faz distinção alguma

sobre a geometria da rede. Uma rede hexagonal, como a do grafeno, pode ser facilmente descrita por tal equação. Em outras palavras, os Hamiltonianos H_{TB} nas Eqs. (1.21) e (2.21) são equivalentes, somente ajustando-se os parâmetros de hopping para levar em conta que cada átomo da rede liga-se apenas a três átomos vizinhos, ou seja, um dos τ_{ij} na Eq. (2.21) deve ser nulo no caso do grafeno. De fato, no decorrer desta tese, utilizaremos o modelo TB descrito aqui apenas para o caso do grafeno.

Finalmente, desenvolveremos agora o método split-operator para sistemas descritos por um Hamiltoniano do tipo H_{TB} em duas dimensões. Seguindo a idéia das seções anteriores, o Hamiltoniano na Eq. (2.21) pode ser reescrito como

$$H_{TB}|\psi_{nm}\rangle = H_n|\psi_{nm}\rangle + H_m|\psi_{nm}\rangle, \tag{2.22}$$

onde os operadores H_n e H_m são definidos como

$$H_n|\psi_{nm}\rangle = \tau_{n(m+1)}|\psi_{n(m+1)}\rangle + \tau_{n(m-1)}|\psi_{n(m-1)}\rangle + \frac{E_0 + V_{nm}}{2} \tag{2.23a}$$

e

$$H_m|\psi_{nm}\rangle = \tau_{(n+1)m}|\psi_{(n+1)m}\rangle + \tau_{(n-1)m}|\psi_{(n-1)m}\rangle + \frac{E_0 + V_{nm}}{2}, \tag{2.23b}$$

ou seja, o primeiro mantém somente o índice n fixo, enquanto o segundo mantém somente m fixo. Note que, assim como no caso do modelo de massa efetiva, a vantagem de se quebrar o Hamiltoniano em H_n e H_m seguindo as Eqs. (2.22-2.23) está no fato de que os operadores H_n e H_m na Eq. (2.23) podem ser representados por matrizes tridiagonais, que são muito mais fáceis de se manusear que a matriz pentadiagonal que representa o Hamiltoniano completo na Eq. (2.21).

A técnica split-operator pode agora ser aplicada ao Hamiltoniano da Eq. (2.22), de forma que o operador de evolução temporal é aproximado por

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H_{TB}\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t}e^{-\frac{i}{\hbar}H_n\Delta t}e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t} + O(\Delta t^3), \tag{2.24}$$

onde o erro vem da não-comutatividade entre os operadores H_n e H_m. Descartamos o termo $O(\Delta t^3)$ ao considerarmos apenas variações de tempo bem pequenas, $\Delta t = 0.1$ fs. A função de onda propagada é então obtida através da Eq. (2.2), que neste caso torna-se

$$\Psi_{n,m}^{t+\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t}e^{-\frac{i}{\hbar}H_n\Delta t}e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t}\Psi_{n,m}^{t}. \tag{2.25}$$

Esta equação é resolvida em três passos:

$$\eta_{n,m} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t}\Psi_{n,m}^{t}, \tag{2.26a}$$

$$\xi_{n,m} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_n\Delta t}\eta_{n,m}, \tag{2.26b}$$

$$\Psi_{n,m}^{t+\Delta t} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t}\xi_{n,m}. \tag{2.26c}$$

Usando novamente a forma de Cayley para as exponenciais, [116] podemos reescrever Eq. (2.26a) como

$$\eta_{n,m} = e^{-\frac{i}{2\hbar}H_m\Delta t}\Psi_{n,m}^{t} = \frac{1-\frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m}{1+\frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m}\Psi_{n,m}^{t} + O(\Delta t^2), \tag{2.27}$$

o que leva a

$$\left(1+\frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m\right)\eta_{n,m} \approx \left(1-\frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m\right)\Psi_{n,m}^{t}. \tag{2.28}$$

Como conhecemos a função $\Psi_{n,m}^{t}$, a equação matricial Eq. (2.28) pode ser resolvida facilmente, para que obtenhamos $\eta_{n,m}$. Repetimos este procedimento para as outras duas exponenciais nas Eqs. (2.26b) e (2.26c) e, por fim, obtemos $\Psi_{n,m}^{t+\Delta t}$.

Na verdade, a forma da Eq. (2.28) poderia ser também aplicada diretamente ao Hamiltoniano completo H_{TB}, isto é, sem separar os termos H_m e H_n. Porém, como já frisamos, isto levaria a operações entre matrizes pentadiagonais, que são mais difíceis de se manusear que as matrizes tridiagonais na Eq. (2.28). Como o erro produzido pela separação na Eq. (2.25) é menor que o erro produzido pela expansão (necessária) da exponencial dada pela Eq. (2.28), vale a pena separar estes termos para simplificar os cálculos numéricos.

2.3 Hamiltonianos que envolvem spin

Existe uma classe especial de Hamiltonianos que pode ser tratada de uma forma bem simples a partir do método *split-operator*: os Hamiltonianos que dependem de matrizes de Pauli

$$\overrightarrow{\sigma} = \sigma_x\hat{i} + \sigma_y\hat{j} + \sigma_z\hat{k}, \tag{2.29}$$

onde

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.30}$$

Vários Hamiltonianos possuem essa característica, dentre eles, podemos citar o que descreve o efeito Zeeman, $H_Z = 0.5g\mu\overrightarrow{B}\cdot\overrightarrow{\sigma}$, o de Dresselhaus $H_D = 0.5\alpha\overrightarrow{\Omega}(p)\cdot\overrightarrow{\sigma}$ e o que descreve o grafeno no modelo contínuo, $H = v_f\hbar\overrightarrow{k}\cdot\overrightarrow{\sigma} + F(r)v_f^2\sigma_z$, onde $F(r)$ é um termo de massa dependente da posição.

De uma forma bastante geral, se temos um Hamiltoniano que pode ser escrito como

$$H = \overrightarrow{A} \cdot \overrightarrow{\sigma}, \tag{2.31}$$

teremos o operador evolução temporal dado por

$$exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right] = exp\left[-\frac{i}{\hbar}\Delta t\overrightarrow{A}\cdot\overrightarrow{\sigma}\right] = exp\left[-i\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma}\right]. \tag{2.32}$$

O fato de podermos reescrever o operador de evolução temporal dessa forma é interessante, pois assim podemos usar a expansão da exponencial para encontrar

$$exp\left[-i\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma}\right] = \sum_n \frac{(-i\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma})^n}{n!} = \sum_k \frac{(-1)^k(\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma})^{2k}}{(2k)!} - i\sum_k \frac{(-1)^k(\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma})^{2k+1}}{(2k+1)!}. \tag{2.33}$$

Usamos agora duas propriedades conhecidas das operações com matrizes de Pauli: sabendo que $\sigma_i\sigma_i = I$ e $[\sigma_i, \sigma_j]_+ = 0$, onde I é a matriz identidade, temos

$$(\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma})^{2k} = S^{2k}I \qquad\qquad (\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma})^{2k+1} = S^{2k}(\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma}) \tag{2.34}$$

Utilizando agora as propriedades mostradas na Eq. (2.34), reescrevemos a expansão do operador de evolução temporal da Eq. (2.33) como

$$exp\left[-i\overrightarrow{S}\cdot\overrightarrow{\sigma}\right] = \begin{pmatrix} cos(S) & 0 \\ 0 & cos(S) \end{pmatrix} - i\frac{sen(S)}{S}\begin{pmatrix} S_z & S_x - iS_y \\ S_x + iS_y & -S_z \end{pmatrix} = M, \tag{2.35}$$

onde S_i e S são, respectivamente, as componentes e o módulo do vetor $\overrightarrow{S}$ que definimos na Eq. (2.32) anteriormente. Assim, a operação de evolução temporal passa a ser simplesmente uma multiplicação matricial. Além disso, esta forma matricial é uma forma exata do operador de evolução temporal, sem nenhum truncamento na expansão, isto é, considerando-se todos os termos.

Nos casos em que o vetor $\overrightarrow{S}$ é definido como dependente do vetor de onda $\overrightarrow{k}$, teremos problemas para encontrar o módulo S e extrair seu seno e cosseno se estivermos trabalhando no espaço das posições, onde as componentes de $\overrightarrow{k}$ são derivadas no espaço. Sendo assim, nestes casos, trabalharemos no espaço dos momenta, efetuando uma transformada de Fourier nas funções de onda e levando-as para um espaço onde os k_i são números, não derivadas. Desta forma as funções são apenas multiplicadas ponto a ponto pelos elementos das matrizes da Eq. (2.35).

2.3.1 Hamiltoniano de Dirac para o grafeno

Como demonstramos do Cap. 1, o Hamiltoniano tight-binding para o grafeno pode ser reduzido, dentro de certas aproximações, ao Hamiltoniano de Dirac, o qual é bastante semelhante àquele do efeito spin-órbita de Rashba em semicondutores. O Hamiltoniano de Dirac H_D para o grafeno na Eq. (1.31) pode ser separado como $H_D = H_k + H_r$, onde $H_k = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k}$ mantém apenas os termos que dependem do vetor de onda $\vec{k}$, enquanto $H_r = v_F e\vec{\sigma} \cdot \vec{A} + V\mathbf{I} + M\sigma_z$ depende apenas das coordenadas do espaço real x e y. Aplicando-se o método *split-operator* para Hamiltonianos que dependem de spin em H_D, o operador de evolução temporal para este Hamiltoniano pode ser aproximado como

$$\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\left(H_k + H_r\right)\right] \approx$$
$$\exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}H_r\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_k\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}H_r\right] \tag{2.36}$$

com um erro de ordem $O(\Delta t^3)$, devido à não-comutatividade dos operadores envolvidos. Utilizando a Eq.(2.35), reescrevemos estas exponenciais nos espaços real e recíproco, respectivamente, na forma matricial

$$\mathcal{M}_r = \left[\cos(\varrho)\,\mathbf{I} - i\frac{\sin(\varrho)}{\varrho}\begin{pmatrix} \mathsf{M} & \mathsf{A}_x - i\mathsf{A}_y \\ \mathsf{A}_x + i\mathsf{A}_y & -\mathsf{M}\end{pmatrix}\right] e^{-\frac{i\Delta t}{2\hbar}V}, \tag{2.37a}$$

$$\mathcal{M}_k = \cos(\kappa)\mathbf{I} - i\frac{\sin(\kappa)}{\kappa}\begin{pmatrix} 0 & \kappa_x - i\kappa_y \\ \kappa_x + i\kappa_y & 0\end{pmatrix}, \tag{2.37b}$$

onde $\vec{\kappa} = \Delta t v_F \vec{k}$, $\kappa = |\vec{\kappa}| = \Delta t v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\vec{\varrho} = (\mathsf{A}_x, \mathsf{A}_y, \mathsf{M})$, $\varrho = |\vec{\varrho}|$ e definimos as grandezas adimensionais $\vec{\mathsf{A}} = \Delta t v_F e\vec{A}/2\hbar$ e $\mathsf{M} = \Delta t M/2\hbar$. Assim, a evolução temporal do pacote de onda $\Psi_D(x,y) = [\phi_A, \phi_B]^T\Psi(x,y)$ pode ser calculada através de uma série de multiplicações matriciais:

$$\Psi(\vec{r}, t+\Delta t) = \mathcal{M}_r \cdot \mathcal{M}_k \cdot \mathcal{M}_r \Psi(\vec{r}, t) + O(\Delta t^3). \tag{2.38}$$

A multiplicação matricial por $\mathcal{M}_k$ é feita no espaço recíproco tomando-se a transformada de Fourier das funções. Na ausência de campos magnéticos, massa e potenciais externos, temos $\mathcal{M}_r = \mathbf{I}$ e

$$\Psi(\vec{r}, t+\Delta t) = \mathcal{M}_k \Psi(\vec{r}, t), \tag{2.39}$$

onde a multiplicação matricial no espaço recíproco leva a um resultado exato para a evolução temporal do pacote de onda, uma vez que não há nenhum erro induzido por não-comutatividade entre operadores ou matrizes neste caso. Isto mostra que o método

split-operator nos fornece uma maneira de estudarmos a dinâmica dos pacotes de onda em grafeno também dentro do modelo contínuo onde, na presença de campos magnéticos e/ou potenciais externos, podemos controlar a precisão dos resultados diminuíndo Δt, enquanto na ausência deles, o problema é resolvido exatamente por uma simples multiplicação matricial, para qualquer valor de Δt.

2.4 Evolução em tempo real

Nos Capítulos seguintes, estudaremos a propagação em tempo real de pacotes de onda em sistemas de baixa dimensionalidade. Para isso, precisamos definir aqui algumas propriedades físicas que nos interessam, que serão extraídas das funções de onda que estão sendo propagadas nestes sistemas.

As probabilidades de transmissão T e reflexão R são calculadas integrando-se a componente da corrente de densidade de probabilidade na direção da propagação, em dois pontos fixos x_R e x_L, localizados do lado esquerdo e direito do sistema em estudo, respectivamente:

$$T = \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_R, y, t) dy dt \tag{2.40}$$

e

$$R = -\int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_L, y, t) dy dt, \tag{2.41}$$

onde a componente x da corrente de probabilidade é definida como

$$J_x(x, y, t) = -i\frac{\hbar}{2m_e}\left(\Psi^* \frac{\partial}{\partial x}\Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial x}\Psi^*\right) + \frac{e}{m_e} A_x \Psi^* \Psi. \tag{2.42}$$

As integrais nas Eqs. (2.40) e (2.41) são calculadas numericamente até um valor de tempo t bastante alto, fazendo com que o pacote de onda tenha tempo suficiente para passar completamente pelo ponto onde J_x é calculado. Verificamos cuidadosamente que a soma das probabilidades de transmissão e reflexão é sempre $T + R = 1$ com precisão em torno de 0.1%. Os pacotes de onda que passam pelos pontos x_R e x_L movem-se em direções opostas, assim, um sinal negativo é posto na expressão que define R. Em nossos cálculos, o campo magnético é sempre considerado perpendicular ao plano do movimento, isto é, na direção z, e o potencial vetor é escolhido como o gauge de Coulomb $\mathbf{A} = (-y, x, 0)B/2$.

Estudaremos alguns casos onde a função de onda está confinada em uma direção; nestes casos, pretendemos estudar o espalhamento do elétron nas diferente subbandas

formadas devido ao confinamento. Para isso, projetamos a função de onda sobre o j-ésimo autoestado do poço quântico em pontos fixos x_i

$$P_j(x_i,t) =< \Psi|\phi_j >= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x_i,y,t)\phi_j(y)dy$$

Isto define a probabilidade de encontrarmos o elétron na j-ésima subbanda na posição x_i, dividida pelo comprimento do sistema na direção x. Este parâmetro será útil para a análise da influência dos estados da segunda e da terceira subbandas nos pacotes de onda que estão sendo propagados. A contribuição de cada subbanda para a corrente de probabilidade é calculada como

$$J_x^{(j)}(x,t) = -i\frac{\hbar}{2m_e}\left(\overline{P}_j^*\frac{\partial}{\partial x}\overline{P}_j - \overline{P}_j\frac{\partial}{\partial x}\overline{P}_j^*\right), \tag{2.43}$$

onde a função $\overline{P}_j(x,t) =< \phi_j|\Psi >$ representa a parte da função de onda dependente do tempo que está na j-ésima subbanda. A grandeza

$$< J_x^{(j)} >= \int_0^{\infty} dt J_x^{(j)}(x_r,t) \tag{2.44}$$

é a corrente total (ou a corrente média no tempo) na $j-$ésima subbanda que passa pelo canal em $x = x_r$. Note que, uma vez que a função $\overline{P}_j(x,t)$ não está normalizada, $< J_x^{(j)} >$ não pode representar uma probabilidade e, portanto, seu valor pode ser maior que 1. Por fim, a corrente de probabilidade dependente do tempo em um ponto x_i é dada por

$$J_T(x_i,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_i,y,t)dy, \tag{2.45}$$

e será uma boa ferramenta para ajudar a entender a trajetória do pacote de onda sobre a região de propagação. Note, porém, que a corrente de probabilidade dependente do tempo J_T definida na Eq. (2.45) mede apenas a propagação de um pulso em um sistema na ausência de uma tensão, e portanto não é diretamente relacionada a uma corrente estável, mas a uma corrente transiente, que é diferente das correntes definidas em artigos anteriores [122], onde correntes estáveis são obtidas através do método das funções de Green. O método aqui descrito, porém, pode ser também usado para o cálculo de correntes estáveis, como explicado na Ref. [123]

2.4.1 Condições de contorno

Devemos tomar um cuidado especial ao tratar das condições de contorno em problemas onde analisamos a evolução temporal das funções de onda. Note que, em qualquer método

numérico que envolva a geração de um grid discreto para descrever o espaço, este espaço considerado, por maior que seja, é sempre finito, o que significa que qualquer ponto fora daquele espaço não possui um valor de função de onda associado a ele. Em um método numérico de solução da equação de Schrödinger, isto é equivalente a dizer que a função de onda é zero fora daquele espaço, o que, por sua vez, equivale a um potencial infinito naquela região. Ou seja, ao definir um espaço finito para se resolver a equação diferencial, estamos impondo a existência de paredes de potencial infinito na borda do sistema. Isto não seria um problema para o calculo de estados ligados, uma vez que a função de onda, de fato, precisa ser zero nas bordas do sistema, que assumimos que estejam bem distantes da região de confinamento. Porém, numa evolução temporal, quando a função de onda atingir a borda do sistema neste caso, ela irá sofrer uma reflexão que não tem sentido físico, devido a este potencial infinito imposto pelo método.

A questão da escolha da condição de contorno correta nas bordas de um sistema tem sido alvo de diversas pesquisas nos últimos anos. Uma possível maneira de superar este problema seria simplesmente considerar uma região de propagação bastante grande, de forma que o pacote de onda demore muito para atingir a borda, tempo suficiente para que possamos extrair da função de onda as características das quais precisamos. Porém, isso levaria a um custo computacional muito elevado, por isso, várias maneiras alternativas têm sido desenvolvidas a fim de resolver esse problema. Kosloff e Kosloff [124] sugeriram o uso de potenciais absorventes (imaginários) nas bordas, somado ao potencial real do sistema. A presença de um potencial imaginário absorve gradualmente a função de onda antes que ela atinja as paredes do sistema, evitando estas falsas reflexões. Desde este trabalho, diversas formas de potencial imaginário foram sugeridas e analisadas [125, 126]. Uma outra maneira interessante de se resolver este problema foi sugerida por Arnold *et al.* [127], onde condições de contorno discretas e completamente transparentes foram desenvolvidas, baseado no método de Laplace para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo. Porém, este método foi desenvolvido apenas para problemas unidimensionais, usando a forma de Cayley e o procedimento de Crank-Nicolson para resolver a equação. Uma generalização deste método para problemas envolvendo duas dimensões, com um tratamento *split-operator*, seria necessário para a aplicação deste tipo de condição de contorno neste caso. Neste trabalho, consideramos o potencial imaginário sugerido por Manolopoulos [128], que pode ser ajustado de forma a obter-se um sistema livre de reflexões nas bordas e também no início da região de potencial imaginário, para uma grande faixa de energias iniciais. Este potencial imaginário, que depende apenas da direção de

propagação x, é dado por

$$V_{im}(\overline{x}) = -iE_{min}\left(a\overline{x} - b\overline{x}^3 + \frac{4}{(c-\overline{x})^2} - \frac{4}{(c+\overline{x})^2}\right), \tag{2.46}$$

onde $a = 1 - 16/c^3$, $b = (1 - 17/c^3)/c^2$, $c = 2.62206$ e E_{min} é a menor energia do elétron que podemos considerar, a qual pode ser calculada a partir da Eq (2.27) na referência [[128]] como

$$E_{min} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{c}{2(x_2 - x_1)\delta}\right]^2, \tag{2.47}$$

para um potencial imaginário localizado entre x_1 e x_2. O parâmetro de precisão δ é escolhido como 0.2, para obtermos apenas pequenas reflexões em x_1. A variável $\overline{x}$ depende de x como

$$\overline{x} = 2k_{min}\delta/(x - x_1), \tag{2.48}$$

onde $k_{min} = \sqrt{2m_eE_{min}/\hbar^2}$. Com estas expressões, escolhemos x_2 como a borda do sistema e $x_1 = 420$ Å antes da borda, levando a um mínimo de energia inicial $E_{min} \sim 25$ meV. Mais detalhes sobre como esta forma de potencial foi obtida podem ser encontrados no artigo original de Manolopoulos. [128]

Em alguns casos que serão abordados no decorrer desta tese, mostraremos que uma transformada de Fourier para levar o sistema para o espaço recíproco torna mais fácil o estudo do problema. Quando fazemos uma transformada de Fourier nestes sistemas, estamos impondo sobre eles uma condição de contorno periódica. Isto será observado, por exemplo, no caso do grafeno, no Cap. 4. Nos problemas em que usamos transformadas de Fourier, não aplicamos a condição de contorno de potenciais absorventes descrita acima, deixando o sistema com condições de contorno periódicas em todas as direções as quais tratamos no espaço recíproco.

2.5 Evolução em tempo imaginário: obtendo autoestados

Os autoestados de um Hamiltoniano podem ser obtidos através desse método. Para isso, basta propagarmos uma função de onda inicial arbitrária no domínio do tempo imaginário. [129, 130] Uma vez que os autoestados de um Hamiltoniano formam uma base ortogonal completa, qualquer função de onda pode ser escrita como combinação

linear destes autoestados:

$$|\Psi>_t = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\Phi_n> \tag{2.49}$$

onde Φ_n e E_n são, respectivamente, as autofunções e as autoenergias do n-ésimo autoestado. Fazendo $\tau = it$, temos

$$|\Psi>_t = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{-\frac{E_n \tau}{\hbar}} |\Phi_n> = e^{-\frac{E_0 \tau}{\hbar}} \left[a_0 |\Phi_0> + \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-\frac{(E_n - E_0)\tau}{\hbar}} |\Phi_n> \right] \tag{2.50}$$

de forma que, quando $\tau \to \infty$, o termo do estado fundamental na soma se torna fortemente dominante sobre os outros, uma vez que $E_n - E_0 > 0$ para $n > 0$. Assim, iniciando-se com qualquer função de onda inicial, esta função deve convergir para o estado fundamental do sistema à medida que τ aumenta. Da forma das exponenciais, conclui-se que podemos considerar como tempos grandes, nesse caso, aqueles tais que $\tau \gg \hbar/(E_n - E_0)$. Os estados excitados podem ser obtidos através da ortonormalização de Gram-Schmidt: se a função de onda inicial é ortonormal ao estado fundamental, por exemplo, a função de onda do estado fundamental não pode ser incluída na combinação linear que descreve esta função inicial na Eq. (2.49), assim, o termo de menor energia nesta soma é E_1 e então, a função de onda deve convergir para $|\Phi_1>$ quando $\tau \to \infty$. Para obter Φ_2, inicia-se com uma função que é ortonormal a Φ_1 e Φ_0, e assim por diante.

Note que este método de evolução em tempo imaginário não seria eficiente para calcular autoestados em sistemas baseados em grafeno. Isso ocorre porque o Hamiltoniano envolvido na descrição destes sistemas permite encontrar um espectro de energia tanto negativo quanto positivo, de maneira que o estado de menor energia para este Hamiltoniano é o estado de energia $E \to -\infty$, no chamado "mar de Dirac". Sendo assim, uma evolução de qualquer pacote de onda inicial em tempo imaginário deverá convergir para um estado no mar de Dirac, o que não é interessante, pois o que procuramos é o estado de menor valor de energia em módulo.

3 Estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade

Devido a recentes avanços no crescimento de estruturas semicondutoras e da nanolitografia, tem se tornado possível a fabricação de estruturas com anéis quânticos bem definidos, com alta qualidade e com dimensões controláveis. Anéis quânticos semicondutores têm atraído bastante atenção nos últimos anos, pois eles combinam as propriedades ópticas das nanoestruturas auto-crescidas com as características singulares sob campos magnéticos aplicados originadas pela topologia do anel, como o efeito Aharonov-Bohm. [131]

Aplicaremos o método *split-operator*, descrito detalhadamente no Capítulo anterior, no estudo dos autoestados e da evolução temporal de dois tipos diferentes de sistemas: 1) anéis quânticos com canais longitudinais para injeção de elétrons e 2) fios com uma junção em T. Os perfis de potencial para estes dois sistemas estão ilustrados nas Figs. 12 (a) e (b), respectivamente. Mais detalhes sobre estes potenciais serão dados nas seções seguintes sobre cada sistema.

Para a evolução temporal, a função de onda inicial encontra-se confinada em uma região *quasi*-unidimensional, de modo que os autoestados na direção de confinamento são discretos, dando origem a um conjunto discreto de subbandas. Um elétron confinado em um canal *quasi*-unidimensional de espessura W apresenta subbandas de energia dadas por

$$E_n(k_x) = E_n^{(y)} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e}, \tag{3.1}$$

onde $E_n^{(y)} = n^2\pi^2\hbar^2/2m_eW^2$, se V_e é uma barreira de potencial infinito (calculamos $E_n^{(y)}$ numericamente para valores finitos de V_e). Na aproximação que utilizamos neste trabalho, injetamos um pacote de onda Gaussiano, propagando-se na direção x, da esquerda para

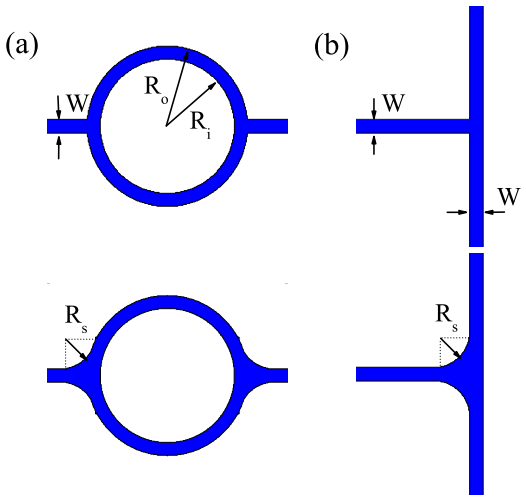

Figura 12: Perfis de potencial para (a) anéis e (b) fios T, considerando-se conexões (em cima) simples e (em baixo) suaves. As conexões suaves são descritas por círculos de raio $R_s = 300$ Å . A espessura dos canais em ambos os sistemas é $W = 100$ Å e o raio médio dos anéis é $R_{av} = 600$ Å . O potencial é definido como $V(x, y) = 0$ na região interna do anel e dos canais (azul) e V_e fora (branco).

a direita, ou seja

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} exp\left[\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} + ik_x^i x\right] \phi_n(y), \tag{3.2}$$

onde $\phi_n(y)$ é a função de onda do n-ésimo autoestado do poço quântico na direção y, e $k_x^i = \sqrt{2m_e\varepsilon_i/\hbar^2}$, com m_e e ε_i representando a massa efetiva e a energia cinética, respectivamente. O parâmetro σ representa a largura do pacote de onda na direção x.

Consideraremos heteroestruturas InGaAs/InAlAs, onde a massa efetiva e o *band-offset* na banda de condução são dados por $m_e = 0.041\ m_0$ e $V_e = 600$ meV, respectivamente. Para um canal com espessura $W = 100$ Å , isto leva a subbandas com energias $E_n^{(y)} \simeq$ 53, 207 e 443 meV, para $n = 0$, 1 e 2, respectivamente. Estes valores para $V_e \to \infty$ são aproximadamente 91.7, 366.8 e 825.3 meV, que podem ser comparados com nossos resultados apenas no que diz respeito ao fato de que $E_1^{(y)} \sim 4E_0^{(y)}$ e $E_2^{(y)} \sim 9E_0^{(y)}$. Isto mostra que é importante considerar a altura finita do potencial nestes sistemas para uma abordagem correta do problema, pois isto altera significativamente a posição das bandas, que é um elemento do qual os resultados dependem fortemente, como mostraremos no decorrer deste Capítulo. Consideraremos um pacote de onda com $x_0 =$ -1100 Å , $\sigma = 200$ Å e $n = 1$ (estado fundamental) ou 2 (primeiro estado excitado) (ver Eq. (3.2)).

Definimos três pacotes de onda iniciais, com energias $\varepsilon_1 = 70$ meV, $\varepsilon_2 = 120$ meV

e $\varepsilon_3 = 180$ meV e $\phi_{n=1}(y)$, isto é, localizados na primeira subbanda. Obtemos a partir deles os valores k_x^i, como ilustrado qualitativamente no diagrama da Fig 13. As subbandas parabólicas de energia do poço quântico de espessura W criado pelos canais estão também mostradas na Figura. Para ε_3, escolhemos de propósito um valor acima da energia mínima da segunda subbanda do poço quântico, que est em torno de 153 meV acima da primeira, a fim de observar a influência desta subbanda no pacote de onda e nas propriedades físicas do sistema. Como ilustrado na Fig 13, dois valores de k_x, definidos como $k_3^{(1)}$ e $k_3^{(2)}$, são possíveis para ε_3, um para cada subbanda. Nossos resultados para ε_3 são com $k_3^{(1)}$ por padrão, exceto quando mencionarmos explicitamente que estamos tratando de um pacote de onda com $k_3^{(2)}$. Como estamos considerando um pacote de onda, a função de onda inicial não possui apenas um valor k_x, mas uma distribuição de k_x's em torno de k_x^i, com espessura Δk_x, como ilustrado na Fig 13. Esta variação em k_x leva a uma distribuição de energias ΔE, que está também ilustrada na Fig 13. Para um pacote inicial dado pela Eq. (3.2), a espessura da onda no espaço k_x pode ser facilmente obtida por uma transformada de Fourier da função de onda

$$\overline{\psi}(k_x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-i(k_x - k_x^i)x_0} e^{-(k_x - k_x^i)^2\sigma^2/2} \phi_n(y). \tag{3.3}$$

Podemos ver facilmente que, no espaço recíproco, a função de onda é também uma Gaussiana, mas com uma largura proporcional a $1/\sigma$. Para os parâmetros escolhidos para este trabalho, tomamos a espessura na metade do valor máximo (*full width at half maximum*, ou FWHM) para calcular $\Delta x = 2\sqrt{2ln2}\sigma \sim 470.96$ Å e $\Delta k_x = 2\sqrt{2ln2}/\sigma \sim 0.011774$ Å $^{-1}$. Com o último, podemos calcular a espessura ΔE da distribuição de energias do pacote de onda :

$$\frac{\hbar^2(k_x^i + \Delta k_x)^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k_x^{i2}}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_x^i \Delta k_x}{m_e} + \frac{\hbar^2 \Delta k_x^2}{2m_e}, \tag{3.4}$$

onde identificamos $\hbar^2 k_x^{i2}/2m_e$ como a energia ε_i e

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k_x^i \Delta k_x}{m_e} + \frac{\hbar^2 \Delta k_x^2}{2m_e}. \tag{3.5}$$

Desta expressão, e com o valor de Δk_x mencionado anteriormente, obtemos $\Delta E \sim 72$, 90 e 108 meV, para ε_1, ε_2 e ε_3, respectivamente.

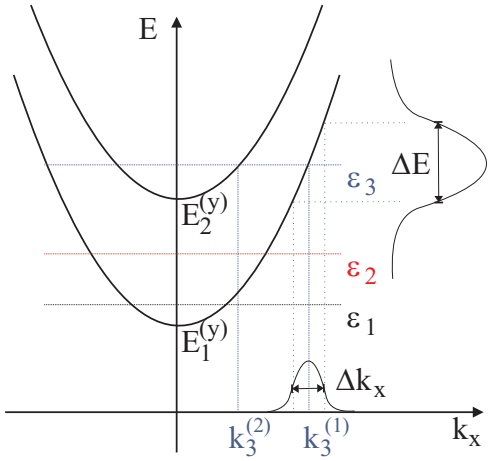

Figura 13: Diagrama de energia versus vetor de onda k_x para um canal (linhas sólidas). As energias dos três pacotes de onda considerados, ε_1, ε_2 e ε_3 (linhas tracejadas grossas) estão mostradas. As espessuras das distribuições de k_x e E do pacote de onda inicial estão representadas pelas ondas vertical e horizontal, respectivamente. O vetor de onda $k_3^{(1)}$ está relacionado com a energia ε_3 na subbanda do estado fundamental, enquanto $k_3^{(2)}$ é para a mesma energia, mas na subbanda do primeiro estado excitado.

3.1 Fios T

A estrutura conhecida como fio T é formada pela junção de dois poços quânticos, ou canais, perpendiculares, como mostra a Fig. 12 (b). Duas conexões diferentes entre estes dois canais serão estudadas: 1) uma conexão com ângulo reto, ou "conexão simples" e 2) conexões suaves (adiabáticas), que são tipicamente encontradas em experimentos. As conexões suaves são descritas por círculos de raio R_s, que são tangentes às paredes de potencial dos canais. Nos exemplos da Fig. 12 (em baixo), os círculos que descrevem a conexão suave têm raio $R_s = 300$ Å. Classicamente, uma partícula neste sistema pode mover-se livremente nos canais, porém, tem sido mostrado que um estado ligado quanticamente pode ser observado neste tipo de potencial. [129] Outros sistemas onde, classicamente, as partículas estariam livres, como potenciais em forma de cruz, fios curvos e cavidades quânticas com canais, também têm sido estudados [132], onde estados quânticos confinados também foram encontrados. A origem destes estados confinados está no fato de que os poços quânticos que formam os canais são responsáveis por um espectro de energia discreto nestas regiões, onde o estado fundamental tem energia não nula. Assim, na intersecção entre os canais, o elétron pode ocupar um estado que possui energia menor que a menor energia do espectro (estado fundamental) dos canais e, com isso, não pode propagar através deles, ficando ligado na região da junção.

Na Fig. 14, os autoestados para fios T com conexões suaves são mostrados como

função do raio R_s do círculo que descreve a conexão, considerando-se canais de largura $W = 100$ Å. Ambos os canais, vertical e horizontal, têm a mesma espessura W. As energias dos autoestados estão divididas pela energia do estado fundamental dos poços quânticos $E_1^{(y)}$, e os raios, pela espessura do canal W. Note que, para uma conexão simples, isto é, para $R_s = 0$ Å, apenas um estado confinado pode ser observado mas, à medida que R_s aumenta, mais estados passam a se localizar na junção. As inserções mostram o módulo quadrado das funções de onda para cada autoestado em $R_s = 400$ Å.

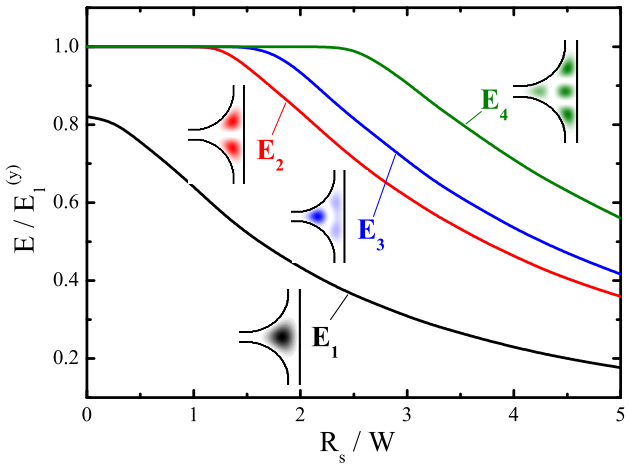

Figura 14: Energias dos quatro primeiros autoestados de uma junção de um fio T como o mostrado na Fig. 12 (b), como função do raio do círculo que descreve a conexão suave entre os canais, para espessuras $W = 100$ Å. Os insets mostram o módulo quadrado das funções de onda dos estados ligados.

Fios T têm atraído bastante atenção também porque estas estruturas possibilitam a construção de transistores que agem sob uma modulação quântica. As propriedades de transporte em fios T foram estudadas de maneira teórica por F. Sols *et al.* [133], onde foram calculadas probabilidades de transmissão como função da energia do elétron incidente e da espessura efetiva do canal perpendicular ao movimento dos elétrons. Na Fig. 15, a corrente de probabilidade dependente do tempo é calculada nos canais horizontal (vermelha, sólida) e vertical (preta, pontilhada), a uma distância de 1400 Å do centro da junção. A corrente de probabilidade no canal horizontal (vertical) está relacionada com a parte refletida (transmitida) do pacote de onda incidente. O pacote de onda inicial começa no canal horizontal, em $x_0 = -1100$ Å. Nos resultados para uma conexão simples, observamos picos bem definidos para os pacotes transmitidos (pontilhada) e refletidos (sólida), quando consideramos ε_1 e ε_2 (Fig. 15 (a)). Uma vez que a distância entre junção e os pontos onde J_T é calculado é a mesma para os canais vertical ou horizontal, ambos os

picos deveriam apresentar máximos no mesmo instante de tempo. Porém, uma pequena diferença, de cerca de 6 fs, entre os máximos de transmissão e reflexão é observada. Além disso, o tempo para uma partícula clássica com energia ε_1 (ε_2) mover-se através destas mesmas distâncias é estimado em cerca de 322 (247) fs, enquanto os tempos onde os picos de transmissão e reflexão ocorrem são ambos menores (maiores). Os tempos para a aproximação clássica são mostrados como linhas verticais pontilhadas na Fig. 15 (cima), para comparação. Uma comparação entre os tempos onde os máximos dos picos de transmissão ocorrem (triângulos vermelhos) e os tempos de transmissão para partículas clássicas (círculos pretos), como função da energia do pacote de onda, em um fio T de espessura $W = 100$ Å, é mostrada na Fig. 16. Observa-se que, para energias maiores que ~ 75 meV, a aproximação clássica subestima o tempo de transmissão nestes sistemas. Para sistemas com uma conexão suave $R_s = 300$ Å, devido a interferências na junção, as funções de onda resultantes não apresentam picos bem definidos em J_T, dessa forma, fica difícil discutir este problema comparando-o com uma partícula clássica neste caso.

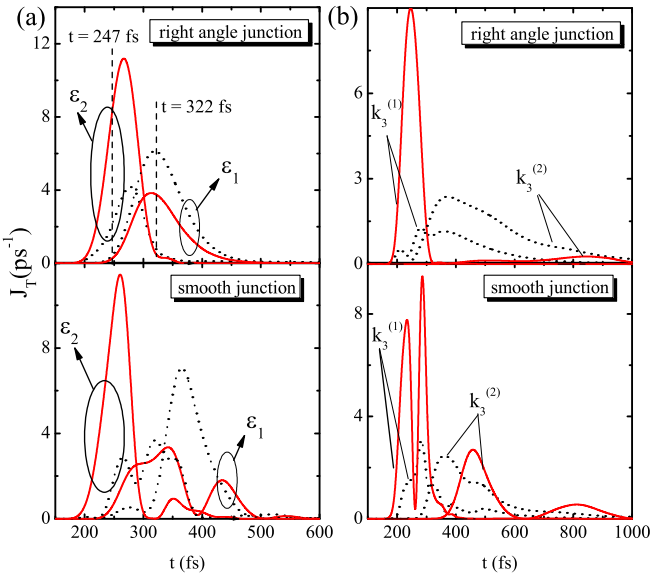

Figura 15: Corrente de probabilidade dependente do tempo, calculada nos canais vertical (preta, pontilhada) e horizontal (vermelha, sólida) de um fio T de espessura $W = 100$ Å, a uma distância 1400 Å do centro da junção, considerando conexões com ângulo reto e com $R_s = 300$ Å. Em (a), dois valores para a energia do pacote de onda foram considerados, ε_1 e ε_2, enquanto em (b), consideramos ε_3 nas subbandas $k_3^{(1)}$ e $k_3^{(2)}$.

A probabilidade de transmissão T como função da energia do pacote de onda ε para um fio T com canais de espessura $W = 100$ Å é mostrada na Fig. 17(a), para diversos valores do raio R_s do círculo que descreve a conexão entre os canais. Note que, no caso

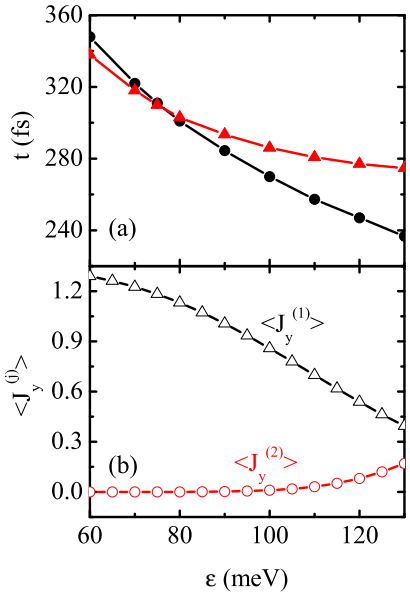

Figura 16: (a) Tempos de transmissão calculados para uma partícula clássica movendo-se em um fio T (black circles) e o instante onde o valor máximo de J_T ocorre no canal vertical (red triangles), como funções da energia do pacote de onda ε, para canais de espessura W = 100 Å , considerando conexões simples (ângulo reto). (b) Correntes médias na primeira ($\langle J_x^{(1)} \rangle$, preta) e segunda ($\langle J_x^{(2)} \rangle$, vermelha) subbandas como função da energia do pacote de onda ε

do fio T, estamos sempre considerando elétrons que estão com energia acima da altura da 'barreira' criada pelos canais para os estados confinados na junção, uma vez que os elétrons incidentes possuem sempre energia acima da primeira subbanda do canal. Sendo assim, não podemos esperar que a transmissão apresente algum tipo de pico de ressonância devido a um estado ligado, pois a energia do elétron incidente é, por definição, maior que a do estado ligado. Observa-se, porém, um comportamento oscilatório como função da energia do pacote de onda, que depende fortemente do raio R_s da conexão, e que é análogo àquele tipicamente encontrado no coeficiente de transmissão para elétrons com energia acima da barreira de potencial em sistemas de barreira dupla. De fato, nossa estrutura de fio T pode ser interpretada como um sistema de duas barreiras quânticas, criadas pela energia (não-nula) do estado fundamental em cada canal, e um poço, localizado na junção, de forma que o pacote de onda que chega pelo canal horizontal tem energias que são, por definição, maiores que as alturas destas barreiras. Para um potencial quadrado unidimensional de largura L e considerando-se elétrons com energia maior que a altura da barreira, uma probabilidade de transmissão máxima é obtida quando metade do comprimento de onda tem a mesma largura que o poço, isto é, quando $n\lambda/2 = L$, resultando em ressonâncias

para energias dadas por

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \tag{3.6}$$

para o n-ésimo pico de transmissão. A partir desta expressão, podemos esperar que $\sqrt{\varepsilon_n}$ aumenta linearmente com n.

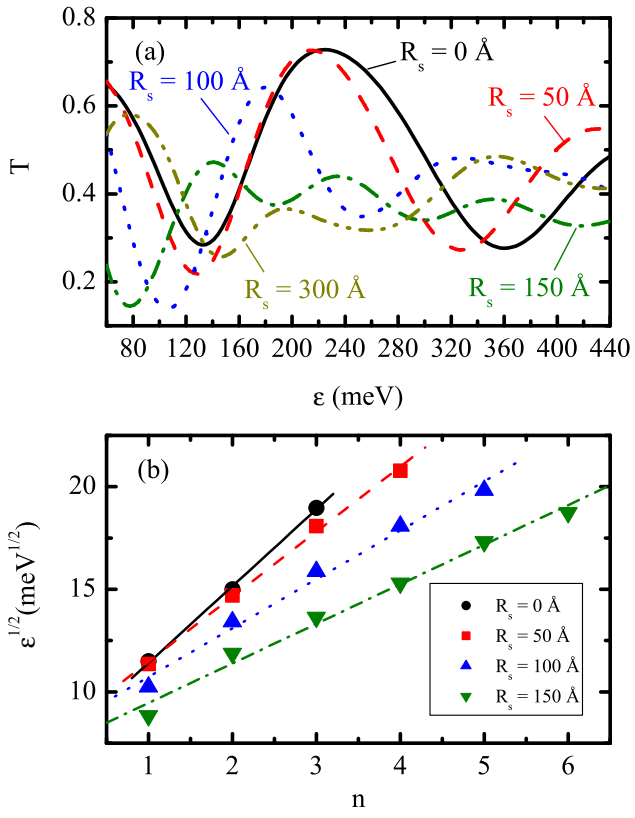

Figura 17: (a) Probabilidade de transmissão como função da energia do pacote de onda inicial ε (na primeira subbanda) para um fio T com canais $W = 100$ Å, considerando-se vários valores para o raio R_s das conexões suaves. (b) Raiz quadrada das energias dos picos e vales para cada curva mostrada em (a). As curvas são ajustes lineares para os resultados numéricos (símbolos). Tipos de curva similares em (a) e (b) correspondem ao mesmo R_s

Esta tendência linear pode ser vista nos nossos resultados para fios T mostrados na Fig. 17 (b), onde a raiz quadrada da energia do pacote de onda $\varepsilon^{1/2}$ para o n-ésimo máximo ou mínimo da probabilidade de transmissão, observado na Fig. 17 (a), é mostrada como símbolos, para vários valores do raio R_s das conexões suaves entre os canais. Na verdade, é óbvio que a analogia entre os nossos fios T e um poço quadrado unidimensional não é perfeita, principalmente quando consideramos conexões suaves. Além disso, estamos tratando de um pacote de onda, não de uma onda plana, de forma que não podemos

esperar que as ressonâncias obtidas através da Eq. (3.6) para um poço quadrado sejam exatamente as mesmas encontradas para um pacote de onda Gaussiano. Mesmo assim, os ajustes lineares para os símbolos na Fig. 17 (b), que são mostrados como curvas, são uma forma interessante de se entender qualitativamente o comportamento das probabilidades de transmissão em fios T, comparando-o com o de um elétron em um poço quântico unidimensional. A partir destes ajustes lineares, podemos estimar o comprimento efetivo do potencial de confinamento na junção do fio T nesta representação de poço quântico. As inclinações s das curvas $\varepsilon^{1/2} \times n$ podem ser obtidas através da Eq. (3.6), para um poço quadrado, como $s = \sqrt{\hbar^2/2m}\pi/L$. Para $R_s = 0$ (preta, sólida), 50 (vermelha, tracejada), 100 (azul, pontilhada) e 150 (verde, tracejada-pontilhada) no fio T, as inclinações das curvas mostradas na Fig. 17(b) correspondem a larguras de poços unidimensionais L de $\sim$ 255.9, 302.4, 402.0 and 496.5 Å, respectivamente. O aumento de L com R_s é intuitivamente esperado por causa do aumento da área da conexão à medida em que R_s aumenta.

3.2 Anéis quânticos

Este sistema consiste de anéis quânticos planares, com canais para injeção de elétrons, de forma que o movimento dos elétrons está vinculado a ocorrer somente sobre o plano (x, y). O Hamiltoniano, escrito na aproximação da massa efetiva, apresenta um potencial definido como $V(x, y) = 0$ dentro do anel e dos canais, e $V(x, y) = V_e$ nas outras regiões, onde V_e é o *band-offset* da banda de condução.

Na Fig. 12 (a), o perfil do potencial para o anel quântico é mostrado. O anel quântico é definido por dois círculos concêntricos de raios $R_i = 550$ Å e $R_o = 650$ Å, de forma que o raio médio do sistema é $R_{av} = (R_i + R_o)/2 = 600$ Å e a espessura é $W = 100$ Å. A mesma espessura W é considerada para os canais esquerdo e direito. Assim como no caso do fio T, duas conexões diferentes entre o canal e o anel serão estudadas: as conexões com ângulo reto, ou "conexões simples" e as conexões suaves. As conexões suaves aqui são também descritas por círculos de raio R_s, que são tangentes às paredes de potencial dos canais e ao círculo externo do anel. Nos exemplos da Fig. 12 (em baixo), os círculos que descrevem a conexão suave também têm raio $R_s = 300$ Å, como no caso da figura para o fio T.

3.2.1 Estados localizados induzidos pela geometria do sistema

Uma vez que as conexões entre os canais e o anel são similares a uma junção de um fio T, é esperado que encontremos dois (degenerados), e apenas dois, estados confinados no sistema canal-anel, já que, neste caso, duas conexões são envolvidas, levando a um par estados simétrico e anti-simétrico. Isto é observado, de fato, para uma conexão simples (com ângulo reto), como mostrado na Fig. 18 (a). Nenhum estado excitado ligado pode ser observado além do estado anti-simétrico praticamente degenerado. A energia de ligação destes estados ligados é encontrada como sendo $E_0 \simeq 46$ meV, a qual está $\simeq 7$ meV abaixo da energia do estado fundamental dos poços quânticos mencionados anteriormente, $E_0^{(y)} \simeq 53$ meV.

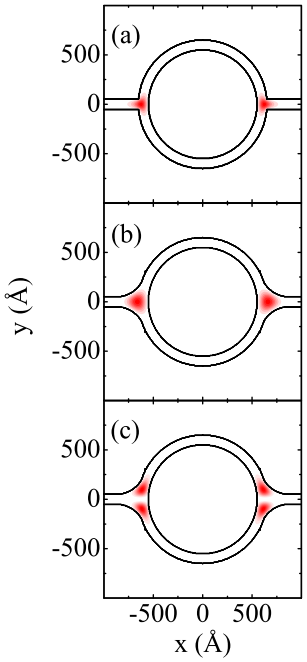

Figura 18: (a) Função de onda do estado fundamental (o estado fundamental e o primeiro excitado são praticamente degenerados com funções de onda simétrica e anti-simétrica), considerando conexões simples entre o canal e o anel. Funções de onda (b) do estado fundamental e (c) do segundo estado excitado, para conexões suaves. As linhas pretas ilustram os limites dos perfis de potencial, que são os mesmos da Fig 12 (a).

Porém, sistemas reais apresentam conexões suaves, ao invés de conexões simples, o que pode levar a uma série de autoestados ligados não-degenerados. Nossos resultados mostram que, com conexões suaves entre o canal e o anel, é possível observar mais estados excitados confinados na junção canal-anel, como está ilustrado nas Fig. 18 (c) e (d), onde

as funções de onda para o estado fundamental e para o segundo estado excitado são mostradas, respectivamente, para um sistema com conexões suaves de $R_s = 300$ Å.

Os resultados encontrados para os autoestados do sistema canal-anel podem ser comparados com aqueles para fios T de espessura $W = 100$ Å, na Fig. 14 da Seção anterior: para uma conexão simples, existe apenas um estado ligado em ambos os sistemas, que possui energia $E_0 = 44$ (46) meV no caso do fio T (canal-anel). Para uma conexão suave, com $R_s = 300$ Å, o fio T apresenta quatro estados ligados, com energias $E_0 \simeq 16$ meV, $E_1 \simeq 33$ meV, $E_2 \simeq 38$ meV e $E_3 \simeq 48$ meV, enquanto o sistema canal-anel apresenta dois pares de estados degenerados, com energias $E_0 = E_1 \simeq 26$ meV e $E_2 = E_3 \simeq 50$ meV.

3.2.2 Evolução temporal para B = 0

Resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo encontramos $\Psi(x, y, t)$. As projeções da função de onda dependente do tempo sobre as subbandas do estado fundamental (preta, P_1) e do primeiro estado excitado (vermelha, P_2) dos canais foram calculadas como função do tempo em três pontos diferentes do sistema: $x_l = -1100$ Å (canal esquerdo), $x_a = 0$ Å (braço superior) e $x_r = 1100$ Å (canal direito). Os resultados estão mostrados nas figuras 19 (a), (b) e (c), para ε_1, ε_2 e ε_3, respectivamente. Alguns fatos interessantes são observados: 1) o elétron é refletido e transmitido através dos canais em pacotes, que são consequência das reflexões nos pontos de intersecção entre o canal e o anel. 2) Nos canais esquerdo e direito, a função de onda está restrita à primeira subbanda, tendo projeção zero sobre o primeiro estado excitado. Porém, dentro do anel, a função de onda é parcialmente espalhada para a segunda subbanda. Para ε_3, esta projeção pode ser dominante e maior que a projeção sobre a subbanda do estado fundamental. Apesar de ε_2 estarem abaixo da segunda subbanda, existe ainda uma pequena projeção P_2 nos braços do anel para estes casos, devido à larga distribuição de k_x's da função de onda inicial. Assim, a função de onda do elétron é parcialmente espalhada para a segunda subbanda na primeira conexão canal-anel, mas é espalhada de volta para a primeira subbanda na segunda conexão canal-anel, levando a uma função de onda de saída apenas na primeira subbanda. Na Fig 20, consideramos um pacote de onda com energia ε_3 centrado em $k_3^{(2)}$, de forma que a projeção P_1 é zero em ambos os canais. Novamente, as projeções P_1 e P_2 são não-nulas dentro dos braços do anel. Apesar de não estar mostrado nas figuras, calculamos também projeções sobre o segundo estado excitado P_3, e encontramos zero para os três casos de energia, dentro dos canais ou dos braços do anel. Porém, como

demonstrado na Fig 21, considerando-se um estado na segunda subbanda com energia 430 meV, que está acima da terceira subbanda do sistema, que está em torno de 390 meV, a projeção P_3 (azul) é não-nula nos braços do anel. Note que os picos em P_2 e P_3 são deslocados para um tempo maior quando comparados com os picos de P_1. Este atraso é consequência do fato de que $k_x^{(1)} > k_x^{(2)} > k_x^{(3)}$, de forma que pacotes de onda em subbandas mais altas movem-se com menor velocidade. Estes resultados mostram que quando tratamos deste problema considerando espessuras finitas, não só permitimos que a função de onda passe a ser refletida pelas paredes de potencial do anel e dos canais, como também fazemos com que ela seja capaz de acessar outras subbandas, somente dentro do anel, como consequência do espalhamento nas junções canal-anel. Na conexão entre o canal de entrada e o anel, o pacote de onda se espalha para outras subbandas se a conservação de energia for satisfeita. Quando parte da onda é espalhada para outras subbandas, esta parte adquire uma diferença de fase π entre suas frações que se propagam através dos braços superior e inferior do anel, levando a uma interferência destrutiva na junção entre o anel e o canal de saída apenas para as subbandas para as quais o pacote foi espalhado, o que explica porque o pacote de onda de saída está somente na subbanda inicial.

Ambas as características citadas podem também ser ilustradas pela evolução temporal das curvas de nível do módulo quadrado da função de onda. Elas estão mostradas nas figuras 22 (a) e (b), para quatro instantes de tempo diferentes, iniciando com pacotes de onda com energia ε_1 e ε_2, respectivamente. As Figs. 23 (a) e (b) são para ε_3 nas subbandas $k_3^{(1)}$ e $k_3^{(2)}$, respectivamente. Estes resultados são todos na ausência de campos magnéticos. Conexões suaves (direita) e com ângulo reto (esquerda) entre o canal e o anel foram consideradas. Para o caso suave, a função de onda exibe um padrão de interferência complicado nas conexões.

A presença dos pulsos observados na Fig. 19, devido às reflexões nos pontos de intersecção entre os canais e o anel, pode ser melhor entendida se analisarmos a corrente de probabilidade dependente do tempo na Fig. 24, calculada sobre os três mesmos pontos, x_l, x_a e x_r, onde as projeções da função de onda foram calculadas anteriormente, para ε_1 (preta), ε_2 (vermelha) e ε_3 (azul). Podemos ver facilmente que existe mais de um pico na corrente de probabilidade nos canais esquerdo e direito. No canal esquerdo, o pico positivo está relacionado com a função de onda inicial, e pelo menos dois picos negativos, separados por um período de corrente de probabilidade nula, são observados. No braço superior do anel, a corrente de probabilidade apresenta picos positivos e negativos, o que significa que a função de onda atravessou o braço do anel em dois sentidos diferentes, ou

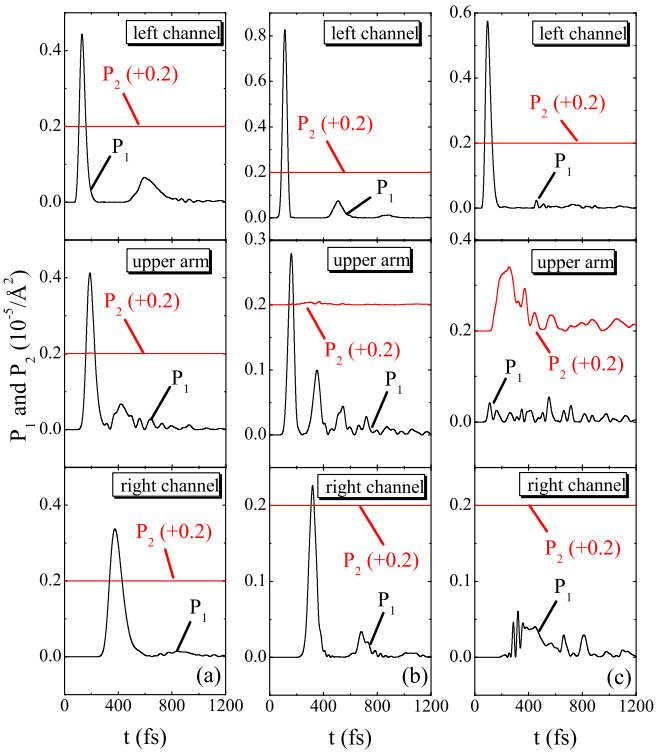

Figura 19: Evolução temporal das projeções da função de onda sobre o estado fundamental (preto) e primeiro estado excitado (vermelho) de um poço quântico de espessura $W = 100$ Å , calculadas em três pontos diferentes do sistema: canal esquerdo, braço superior do anel e canal direito. O pacote de onda é injetado na primeira subbanda e tem energia (a) ε_1, (b) ε_2 e (c) ε_3.

seja, indo e voltando. No canal direito, mais de um pico positivo é observado. Este efeito pode ser entendido se analisarmos a trajetória do pacote de onda através do sistema, que está também ilustrada pelas curvas de nível da função de onda nas Figs. 22 e 23: na primeira junção, parte da função atinge a parede de potencial e volta, contribuindo para a probabilidade de reflexão, enquanto a parte restante passa da junção e percorre o anel (ver Figs. 22 e 23). As partes da função de onda que vêm da primeira junção e que se movem através dos braços superior e inferior do anel interferem na segunda junção, e desta interferência, parte da função de onda é transmitida para o canal direito, dando uma contribuição para a probabilidade de transmissão, enquanto a outra parte volta através dos braços do anel para a primeira junção. De volta à primeira junção, estas ondas interferem novamente, resultando em uma onda que se move de volta ao canal esquerdo, contribuindo assim para a probabilidade de reflexão novamente, enquanto outro par de ondas se move novamente pelos braços superior e inferior do anel, indo em direção à segunda junção, e assim por diante.

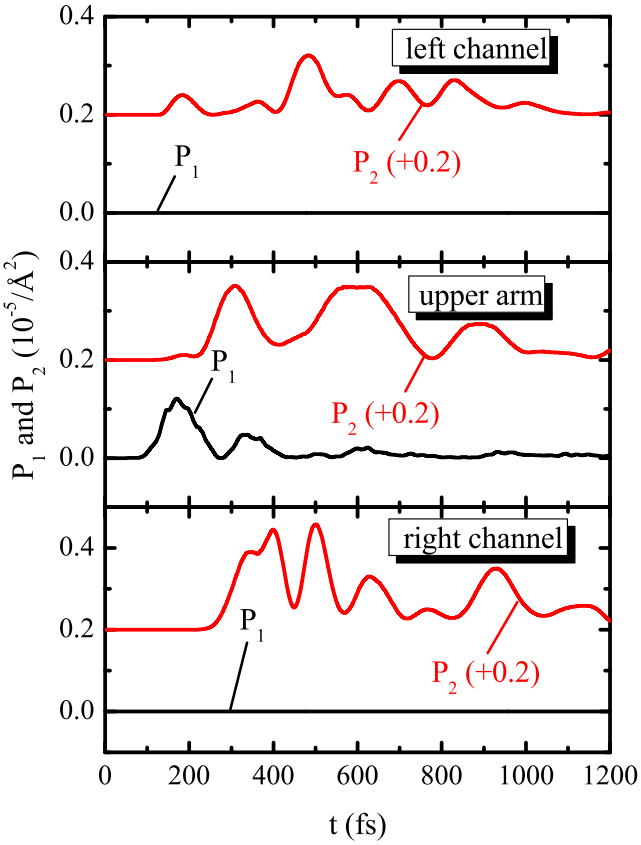

Figura 20: O mesmo que a Fig. 19 (c), mas considerando agora um pacote de onda de energia ε_3 na segunda subbanda, com $k_3^{(2)}$.

Se estimarmos o tempo que uma partícula clássica leva para percorrer estas trajetórias, encontraremos resultados parecidos com os observados no nosso sistema. Para ε_1 (preta, sólida) na Fig. 24, o primeiro pico negativo no canal esquerdo e o primeiro pico positivo no canal direito são encontrados em 128.8 e 371.8 fs, enquanto para uma partícula clássica, os tempos de transmissão e reflexão seriam 129.0 e 372.3 fs, respectivamente. Além disso, em 186.1 fs, um pico positivo no braço superior do anel é observado, o que está de acordo com o tempo encontrado para uma partícula clássica atingir este ponto, que é estimado em 186.2 fs. Para o segundo pacote de reflexão e transmissão, isto é, segundo pico negativo (positivo) no canal esquerdo (direito), que ocorrem em 594.8 fs e 832.2 fs, respectivamente, os tempos para uma partícula clássica seriam um pouco superiores, 615.5 fs para reflexão e 858.7 fs para transmissão. Além disso, o tempo para o segundo pico (negativo) no braço superior é 413.0 fs, enquanto para uma partícula clássica, este tempo é estimado em 429.4 fs. De forma contrária, considerando-se um pacote de onda com energia ε_2, o tempo para reflexão (transmissão) de uma partícula clássica é encontrado como 98.6 (284.3) fs,

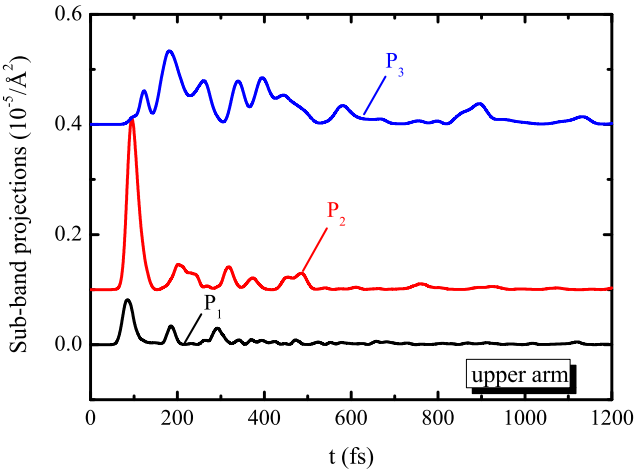

Figura 21: Evolução temporal das projeções da função de onda sobre as subbandas do estado fundamental (preta), primeiro estado excitado (vermelha) e segundo estado excitado (azul) de um poço quântico de espessura $W = 100$ Å, calculadas no braço superior do anel, considerando-se um pacote de onda para um estado na segunda subbanda, com energia 430 meV.

abaixo dos valores encontrados para o primeiro pico negativo (positivo) no canal esquerdo (direito), que ocorre em 112.4 (318.0) fs. O primeiro pico do braço superior ocorre em 161.0 fs, enquanto para uma partícula clássica, este tempo também é subestimado, calculado como 142.2 fs. De fato, valores menores (maiores) para tempos clássicos, considerando-se uma partícula com energia ε_1 (ε_2), foram encontrados também para o sistema do fio T, como mencionado na sub-seção anterior.

As Figs. 7 e 8 ilustram claramente: i) a interferência das ondas nas junções, ii) a transmissão do pacote de onda do canal de injeção para os braços do anel e seu espalhamento de volta a este canal, e iii) a distribuição radial do elétron nos braços do anel, onde observamos que o máximo da função de onda está ou no centro do canal, quando o pacote está na primeira subbanda, ou dividido em dois picos na direção radial, no caso de um elétron propagando na segunda subbanda (ver, por exemplo, $t = 120$ fs nas Figs. 7 (b), 8 (a) e 8 (b)). No segundo caso, o máximo da função de onda traça o caminho clássico de um elétron sendo rebatendo-se nas paredes interna e externa do anel.

3.2.3 Evolução temporal para B diferente de zero

A interferência do pacote de onda observada na sub-seção anterior pode ser influenciada por um fluxo magnético atravessando o anel. A Fig. 25 mostra as probabilidades de

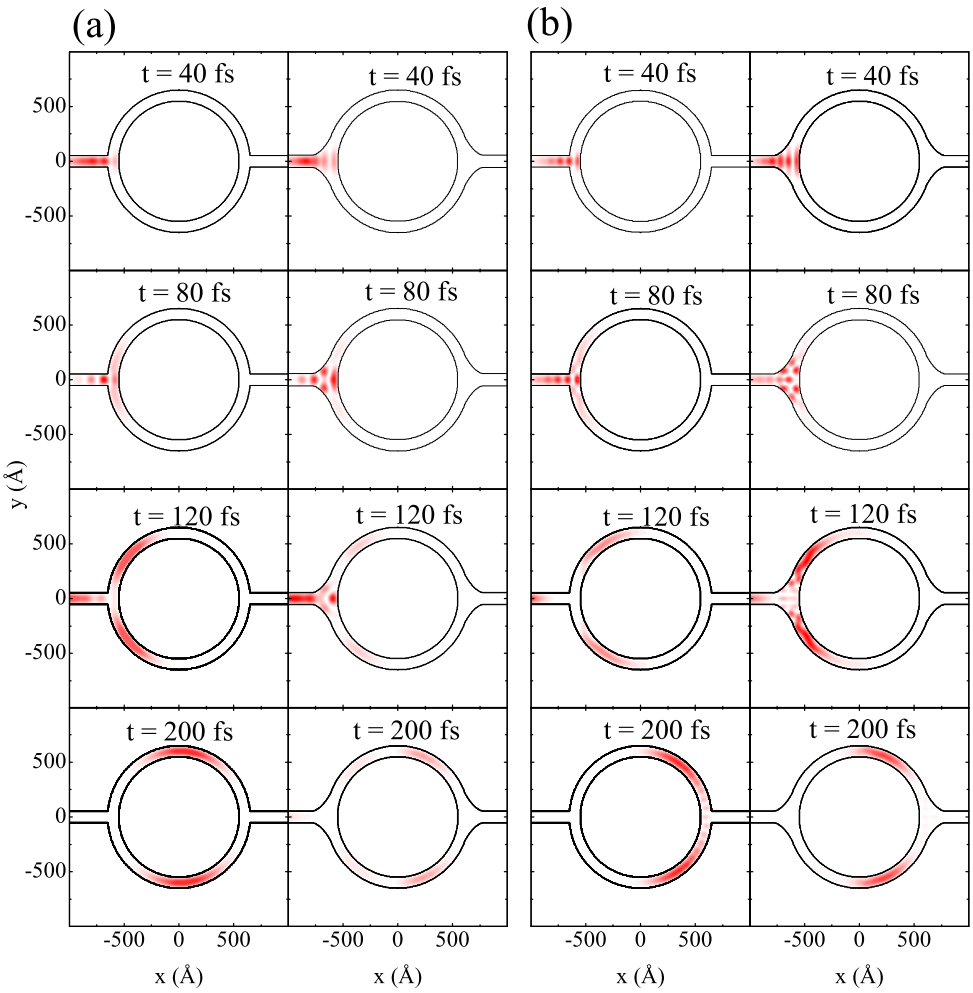

Figura 22: Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel. O pacote de onda inicial está na primeira subbanda, tem largura $\sigma = 200$ Å e energia (a) ε_1 e (b) ε_2.

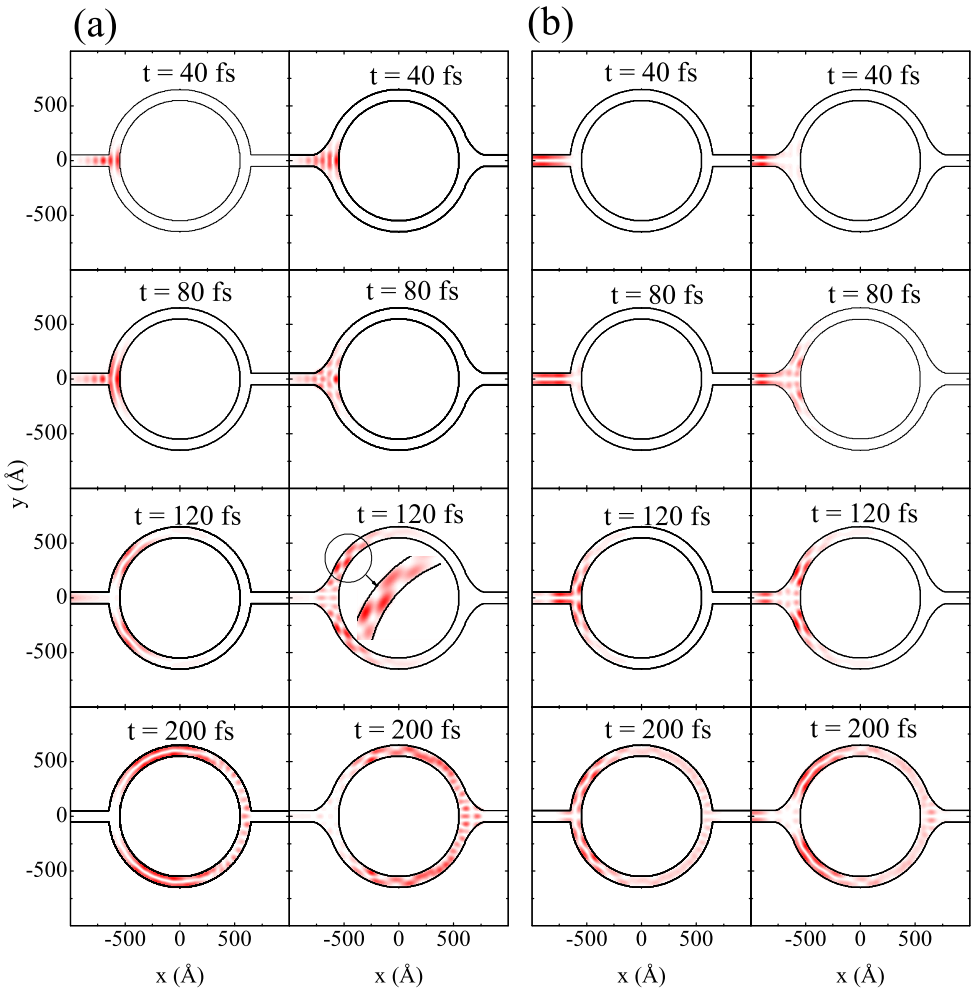

Figura 23: Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel. O pacote de onda inicial tem largura $\sigma = 200$ Å, energia ε_3 e está (a) na primeira subbanda, com vetor de onda $k_3^{(1)}$, ou (b) na segunda subbanda, com vetor de onda $k_3^{(2)}$.

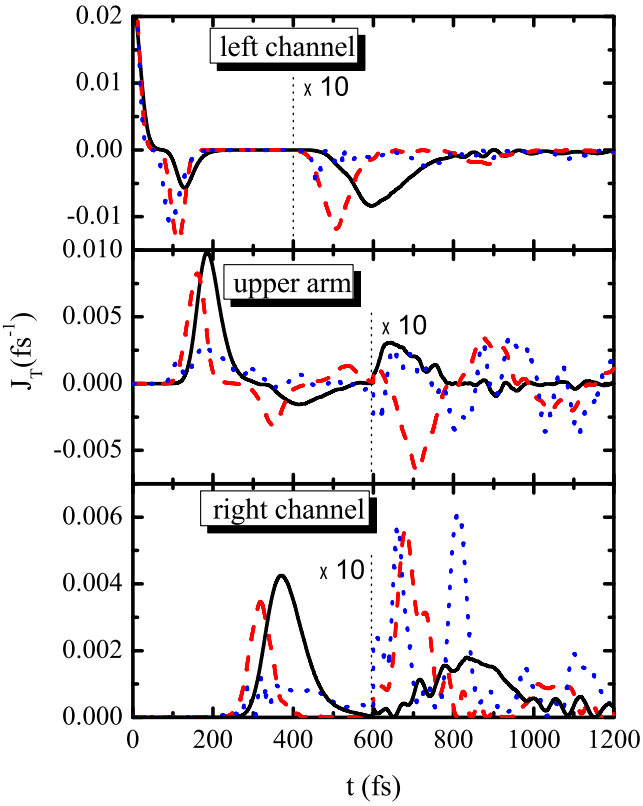

Figura 24: Corrente de probabilidade dependente do tempo, calculada em três pontos: canal esquerdo, braço superior do anel e canal direito, para pacotes de onda com energia ε_1 (preta, sólida), ε_2 (vermelha, tracejada) e ε_3 (azul, pontilhada). Em cada gráfico, para tempos acima das linhas verticais pontilhadas (400 fs para o canal esquerdo e 600 fs para o braço superior e para o canal direito), os valores estão multiplicados por 10, para facilitar a visualização.

transmissão T calculadas como função de um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do anel, para os três valores de energia do pacote de onda. As oscilações periódicas em T, devido ao já bem conhecido efeito Aharonov-Bohm, são claramente observadas, e a amplitude destas oscilações diminui à medida que o campo magnético se torna mais intenso, um efeito que tem sido atribuído ao desequilíbrio entre os braços superior e inferior do anel causado pela força de Lorentz. [1]

Se compararmos os resultados para conexões simples (a) e $R_s = 300$ Å (b) entre o canal e o anel, observamos que, dependendo da energia do pacote de onda, a probabilidade de transmissão e a amplitude das oscilações AB podem ser diminuídas ou aumentadas devido à suavidade das conexões. Isto também é observado no caso do fio T, se analisarmos, por exemplo, os resultados para conexões simples (preta, sólida) e $R_s = 300$ Å (amarela tracejada-pontilhada-pontilhada), para energias $\varepsilon = 70$ e 120 meV na Fig. 17. Isto é

surpreendente, porque poderíamos esperar intuitivamente que uma conexão suave deveria sempre aumentar a probabilidade de transmissão, já que a área efetiva na junção é maior para o caso suave. Porém, devemos lembrar que a junção canal-anel age como um potencial de confinamento, como discutido nas seções 3.1 e 3.2.1, de forma que efeitos de ressonância estão presentes para algumas energias do elétron, e a existência de uma junção suave modifica este espectro de ressonâncias, o que sugere que tanto a energia do pacote de onda como a suavidade da junção têm um papel importante na probabilidade de transmissão.

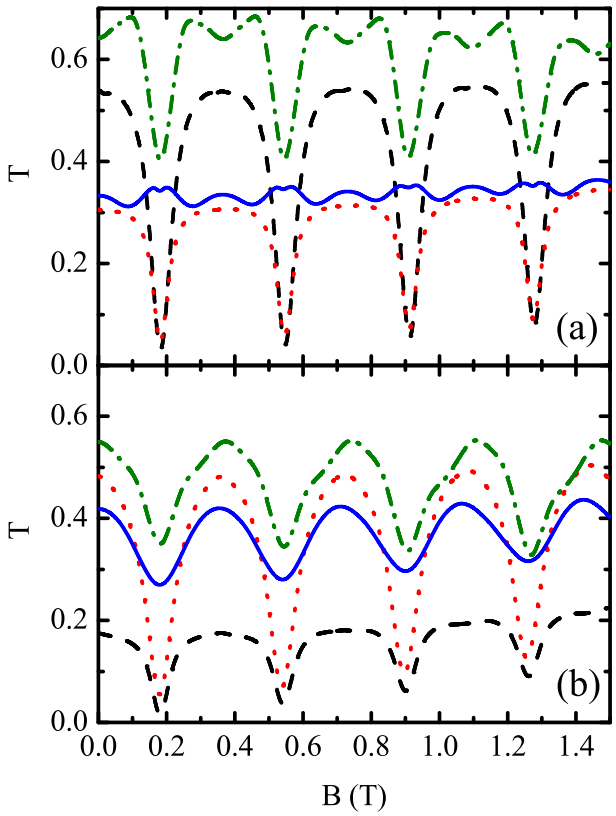

Figura 25: Probabilidades de transmissão T para pacotes de onda com energia ε_1 (preta, tracejada) e ε_2 (vermelha, pontilhada) na primeira subbanda, e com energia ε_3 na primeira (azul, sólida) e segunda (verde, tracejada-pontilhada-pontilhada) subbandas, como funções do campo magnético, considerando conexões (a) simples e (b) suaves.

Para ε_3 na primeira subbanda, as oscilações nas probabilidades de transmissão e reflexão apresentam uma amplitude muito baixa e as transmissões médias em ambos os casos de conexões simples e suaves são praticamente as mesmas. No caso de uma junção simples, a amplitude das oscilações AB é muito fraca e mais mínimos são observados quando comparamos estes resultados com os de ε_1 e ε_2. De fato, ε_3 é essencialmente diferente de ε_1 e ε_2, pois ela está acima da segunda subbanda do poço quântico. O

fato de que a probabilidade de transmissão neste caso está longe de 0 em $\phi = (n + 1/2)\phi_0$ (apesar de apresentar mínimos nestes pontos), ao contrário do que esperaríamos se estivéssemos tratando de um anel ideal, sugere que a interferência que ocorre em anéis ideais, responsável por $T = 0$ nestes pontos, não é completamente destrutiva em nosso sistema de anéis quânticos de espessura finita, especialmente para ε_3. Assim, para estes valores de ϕ, parte da função de onda sofre interferência destrutiva, o que causa uma queda na probabilidade de transmissão, mas outra parte segue para mais uma volta sobre o anel, de maneira que uma nova interferência ocorre na outra junção, resultando em um outro padrão de oscilações AB com o dobro da frequência, isto é, com $\phi = (n+1/2)\phi_0/2$. Este comportamento pode também ser observado na Fig. 26 (a), onde a probabilidade de transmissão T é mostrada como função do campo magnético para três valores de energia do pacote de onda, $\varepsilon = 140$ (preta), 160 (vermelha) e 170 (azul) meV. Os dois últimos são maiores que o mínimo de energia da segunda subbanda. Para $\varepsilon = 140$ meV, T apresenta apenas as oscilações AB comuns, mas para as outras energias, as oscilações podem ser descritas pela superposição de dois padrões de oscilação, um com mínimos em $\phi = (n+1/2)\phi_0$ e outro com mínimos em $\phi = (n+1/2)\phi_0/2$. Para interfaces suaves, este efeito não é observado, como mostra a Fig. 26 (b), devido a um efeito de interferência mais forte nas junções.

Se um campo magnético $B = 0.18$ T é aplicado perpendicularmente ao plano do anel, como mostrado na Fig. 27 (a) para $k_3^{(1)}$, surpreendentemente, a função de onda no canal de saída (direito) apresenta dois picos na direção y, levando a uma projeção grande sobre P_2, isto é, o elétron pode ocupar a segunda subbanda neste canal. Por outro lado, se injetamos um elétron na subbanda $k_3^{(2)}$, como na Fig. 27 (b), para este valor de campo, a função de onda no canal direito apresenta apenas um pico, ou seja, a projeção P_1 no canal direito também tem um valor alto. Este efeito não está presente na ausência de campos magnéticos. Note que o campo magnético $B = 0.18$ T é tal que seu fluxo na região do anel é $\phi_0/2$, ou seja, é um ponto de máxima interferência do efeito AB. De fato, considerando esta intensidade de campo magnético, as projeções P_2 no canal direito para pacotes de onda com energias ε_1 e ε_2 também são não-nulas, mas elas se tornam dominantes sobre P_1 apenas para ε_2 e ε_3. Note, porém, que para ε_2, assim como para ε_1, a probabilidade de transmissão para esta intensidade de campo magnético é praticamente zero (ver Fig 25 (a)), de forma que este efeito é melhor observado para ε_3. À medida que o campo magnético aumenta, P_2 (P_1) no canal da esquerda sofre apenas flutuações bastante pequenas, até mesmo para ε_3 na primeira (segunda) subbanda.

As contribuições $< J_x^{(j)} >$ dos estados da primeira (preta, tracejada), segunda (ver-

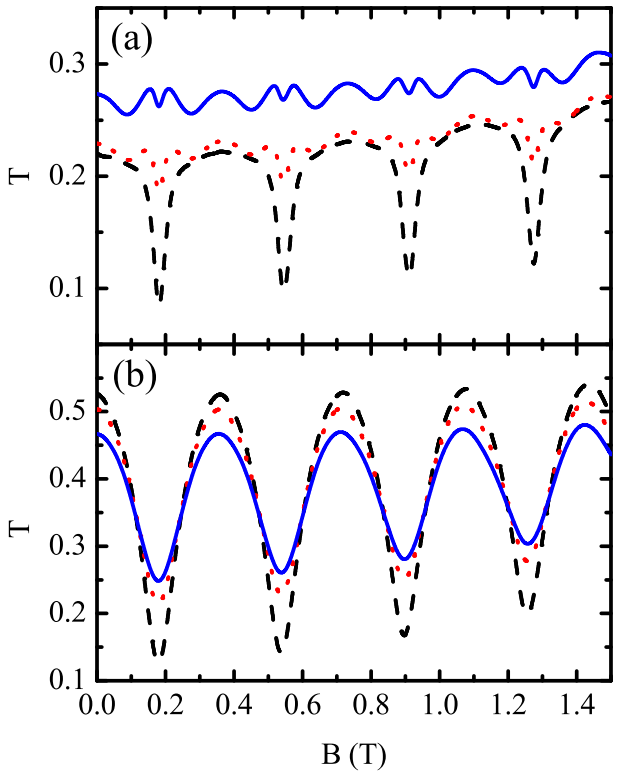

Figura 26: Probabilidades de transmissão T para pacotes de onda com energia $\varepsilon =$ 140 (preta), 160 (vermelha) e 170 meV (azul), como funções do campo magnético, considerando-se conexões (a) de ângulo reto (simples) e (b) suaves entre os canais e o anel.

melha, pontilhada) e terceira (verde, tracejada-pontilhada) subbandas para a corrente de probabilidade média no canal da direita são mostradas na Fig. 28 como função do fluxo magnético, para pacotes de onda com energia ε_3 inicialmente na primeira (a) e segunda (b) subbandas, e com energia 430 meV na segunda subbanda (c). Como em (a) e (b) a energia do pacote de onda é bem menor que o limite inferior da terceira subbanda, a contribuição $< J_x^{(3)} >$ desta subbanda para a corrente é quase zero nestes casos, então, não vale a pena mostrá-la na figura. A soma das $< J_x^{(j)} >$ para estas três subbandas é mostrada como uma linha sólida azul, que reproduz qualitativamente as probabilidades de transmissão mostradas na Fig. 25 (a) para ε_3. Na Fig. 28 (a) observamos que, considerando um pacote de onda de energia ε_3 na primeira subbanda, para um campo magnético correspondente a um fluxo igual a um inteiro (semi-inteiro) de ϕ_0, a função de onda de saída no canal da direita está predominantemente na primeira (segunda) subbanda. Podemos chegar a conclusões semelhantes analizando os resultados das Figs. 28 (b) e (c). Em outras palavras, esse efeito sugere que, além das já conhecidas oscilações AB

da probabilidade de transmissão, observadas na Fig. 25, quando consideramos um pacote de onda com energia maior que o mínimo da segunda subbanda, as projeções do pacote de onda de saída sobre os estados das subbandas no canal da direita também apresentam oscilações AB, com período $\phi_0 = h/e$. Estes resultados foram obtidos considerando uma conexão simples entre os canais e o anel, mas efeitos similares também são observados para conexões suaves, apesar disto não estar mostrado no presente trabalho.

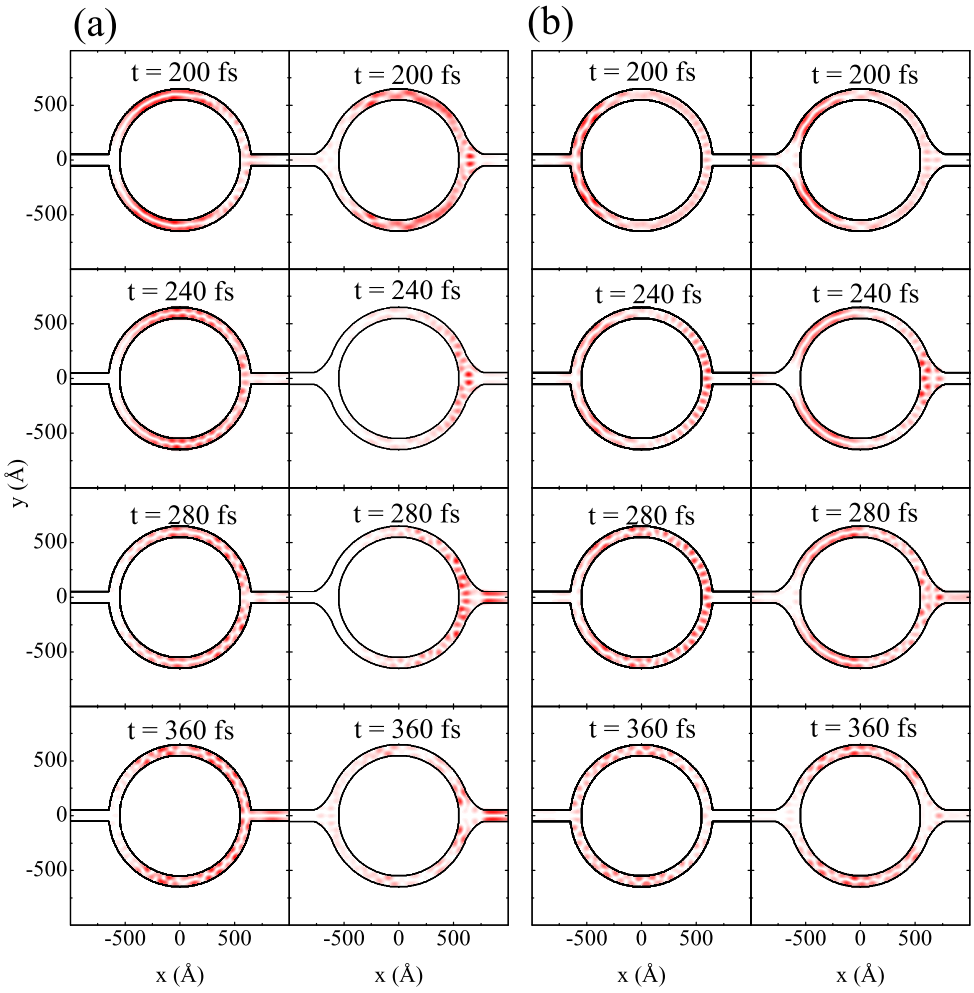

Figura 27: Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel, sob um campo magnético $B = 0.18$ T, aplicado perpendicularmente ao plano do anel. O pacote de onda inicial tem largura $\sigma = 200$ Å , energia ε_3 e está na (a) primeira e na (b) segunda subbanda.

Os resultados mencionados acima podem ser facilmente entendidos a partir de uma simples conjectura: quando temos um pacote de onda com projeção não-nula somente sobre uma subbanda, propagando-se em um sistema onde o espalhamento para outras

subbandas não é permitido, [1, 88] as partes da função de onda que viajam pelos braços superior e inferior do anel não possuem diferença de fase na ausência de campos magnéticos. Por outro lado, quando permitimos o espalhamento para outras subbandas, a parte da função de onda que é espalhada para as outras subbandas interfere destrutivamente na junção da direita já na ausência de campos, o que indica que a parte espalhada apresenta uma diferença de fase π intrínseca entre suas partes que viajam pelos braços superior e inferior do anel, explicando porque o pacote de saída no canal da direita apresenta projeção nula sobre os estados das outras subbandas na ausência do campo. Aplicando-se um campo magnético externo, somos capazes de proporcionar uma fase adicional π entre as funções nos braços superior e inferior. Quando tal fase é adicionada à subbanda inicial, os pacotes de onda interferem destrutivamente na junção canal-anel da direita e, se esta for a única subbanda do sistema, [1, 88] veremos uma transmissão quase nula para este valor de campo magnético, o que está relacionado com o efeito AB já conhecido. Porém, adicionando-se uma fase π às partes do pacote que foram espalhadas para outras subbandas, as quais já possuem uma diferença de fase intrínseca π entre os pacotes superior e inferior, obteremos agora uma diferença de fase 2π, ou seja, estas partes agora irão interferir construtivamente na junção canal-anel da direita. Como consequência, observamos oscilações AB tanto nos estados da subbanda inicial como para estados das outras subbandas, ambas com mesmo período, mas com um deslocamento de meio período entre os picos, devido à fase intrínseca π no segundo caso.

Vale a pena mencionar que se considerarmos um campo magnético muito forte ou um canal muito largo, uma mistura de subbandas também deve ser observada nos canais devido à força magnética, que pode desviar a função de onda e fazê-la mover-se em uma trajetória em zigzag ao longo dos canais. Este efeito não poderia ser observado nos trabalhos teóricos anteriores [1, 88], onde o movimento do pacote de onda era descrito como uma sequência de funções Gaussianas de base, centradas ao longo do mesmo eixo, de forma que a força magnética não estava ativa nos canais, e portanto, o campo magnético não poderia desviar a função de onda nestas regiões. Porém, para nossos canais de largura finita, a força magnética é ativa nos canais. Contudo, para os campos magnéticos fracos que consideramos neste trabalho, nossos canais são finos o suficiente para suprimir o desvio da função de onda devido ao campo, e o período de uma possível trajetória em zigzag seria muito maior que o comprimento dos canais.

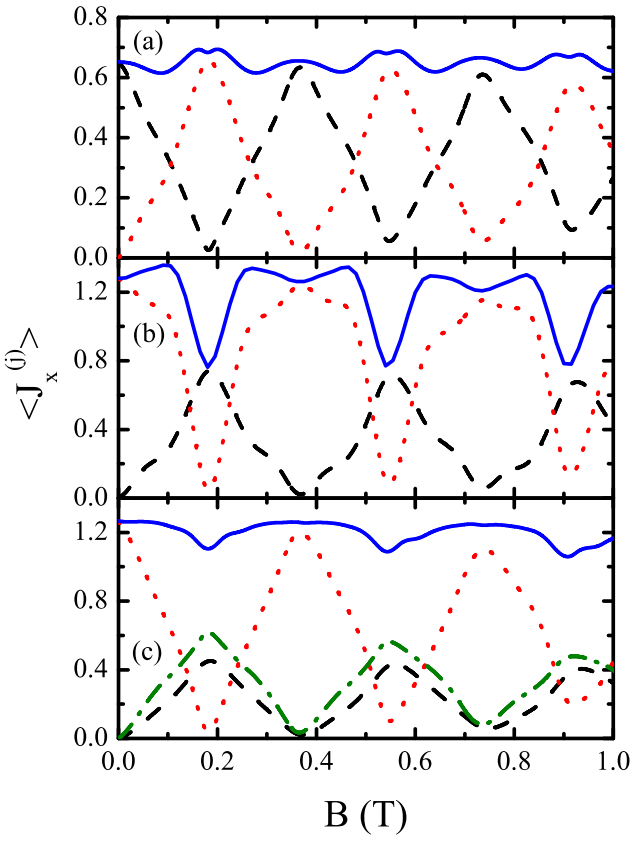

Figura 28: Contribuições $< J_x^{(j)} >$ das subbandas dos estados fundamental (preta, tracejada), primeiro excitado (vermelha, pontilhada) e segundo excitado (verde, tracejado-pontilhado) para a corrente de transmissão, como função do campo magnético B, calculadas no canal da direita, considerando-se pacotes de onda com energia ε_3 na (a) primeira e (b) segunda subbandas, e (c) com energia $\varepsilon = 430$ meV na segunda subbanda. A linha sólida azul é a soma das contribuições das três subbandas, $< J_x^{(1)} > + < J_x^{(2)} > + < J_x^{(3)} >$.

3.3 Anel assimétrico: efeitos de um potencial Gaussiano e de uma impureza

Como discutido anteriormente, na ausência de campos magnéticos e quando o pacote de onda é injetado em apenas uma subbanda, depois que ele passa através da primeira junção canal-anel, ele se espalha para outras subbandas acessíveis. Porém, quando ele atinge a segunda junção canal-anel, uma interferência completamente destrutiva ocorre para estas outras subbandas, de forma que a função de onda deixa o anel apenas na subbanda inicial. Este cenário não persiste quando um campo magnético externo está presente, e então a função de onda de saída pode estar distribuída entre várias subbandas no canal da direita. Na verdade, para $\Phi = (n + 1/2)\phi_0$ (n = inteiro), o efeito AB é

responsável por uma interferência completamente destrutiva dos estados na subbanda inicial da função de onda, consequentemente, a função de onda deixa o anel com projeção nula sobre este estado, estando assim distribuída apenas entre outras subbandas, como observado na Fig. 28. Qualquer mudança de fase extra na função de onda enquanto ela se propaga nos braços do anel pode atrapalhar a interferência destrutiva na segunda junção. Tal fase extra pode ser induzida por um campo magnético (como discutido na sub-seção anterior) ou por um campo elétrico, isto é, por variações de potencial. No segundo caso, isto é chamado de efeito AB eletrostático. Como um exemplo deste caso, consideramos um potencial atrativo Gaussiano localizado no braço do anel:

$$\overline{V}(x,y) = -V_G \exp\left[-\frac{1}{2\sigma}[(x-x_{arm})^2 + (y-y_{arm})^2]\right]. \tag{3.7}$$

Primeiro, consideraremos o potencial no meio do braço superior do anel, isto é, em $(x_{arm}, y_{arm}) = (0, R_{av})$. As probabilidades de transmissão para este caso estão mostradas como função da profundidade do potencial V_G nas Figs. 29 (a) e (d), para anéis com conexões simples e suaves (R_s = 300 Å), respectivamente, considerando-se pacotes de onda com energia ε_3 inicialmente na primeira ($k_3^{(1)}$) e segunda ($k_3^{(2)}$) subbandas. Dois valores de campo magnético são considerados: $B = 0$ (sólida, preta) e 0.18 T (pontilhada, vermelha), onde o último corresponde a $\Phi = \phi_0/2$. Se o pacote de onda começa na primeira subbanda, com $k_3^{(1)}$, para um sistema com conexões simples, a mudança de fase devido ao poço Gaussiano não é capaz de perturbar suficientemente as probabilidades de transmissão, e seus valores para ambas as intensidades de campo magnético são quase os mesmos. Porém, para junções suaves, ou para pacotes de onda com vetor de onda $k_3^{(2)}$, o potencial Gaussiano em um dos braços do anel é responsável por oscilações na probabilidade de transmissão à medida que a profundidade V_G aumenta. Uma análise das contribuições $< J_x^{(1)} >$ (azul) e $< J_x^{(2)} >$ (verde), para as partes do pacote que se propagam nas subbandas $j = 1$ e $j = 2$, respectivamente, como ilustrado nas Figs. 29 (b) e (e), para $k_3^{(1)}$, e (c) e (f), para $k_3^{(2)}$, ajuda-nos a entender o comportamento das probabilidades de transmissão. Como observado na Fig. 29 (b), para $B = 0$ T (0.18 T), todo o aumento (a diminuição) em $< J_x^{(2)} >$ à medida que V_G aumenta, é completamente compensado por uma redução (um aumento) em $< J_x^{(1)} >$, de forma que a probabilidade de transmissão permanece quase a mesma para qualquer V_G. Este efeito acontece apenas para ε_3 em uma estrutura com junções simples, isto é, no mesmo sistema onde as oscilações AB em T exibiram um período 50 % menor e pequenas amplitudes (ver Fig. 25, curva azul sólida). Para todos os outros casos, uma compensação deste tipo não está presente, de forma que as curvas para $B = 0$ e 0.18 T são fortemente dependentes em V_G.

Em todos os casos, a diferença de fase entre funções de onda propagando-se nos braços superior e inferior do anel é responsável pela perturbação da interferência, que deveria ser completamente destrutiva para os estados das outras subbandas na segunda junção canal-anel, permitindo que a função de onda de saída possua projeções sobre ambas as subbandas no canal da direita quando $V_G \neq 0$.

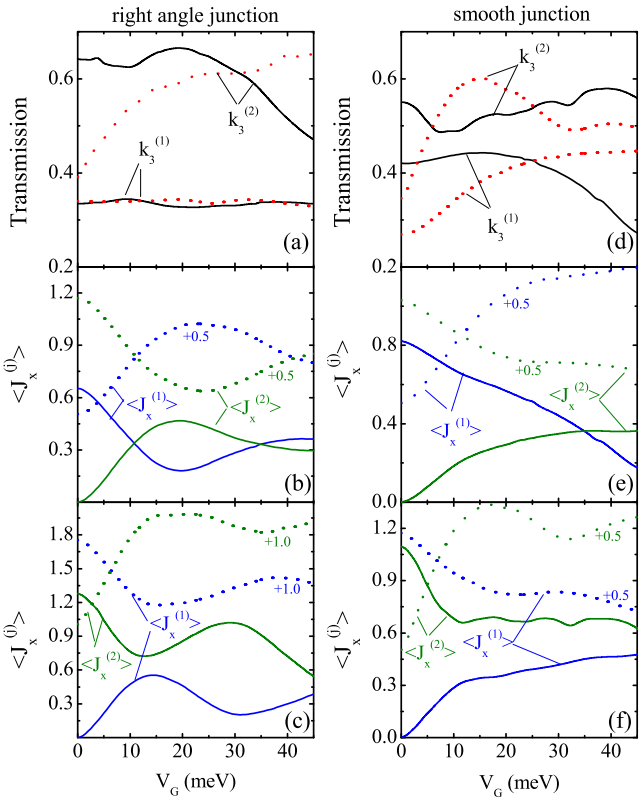

Figura 29: (a),(d) Probabilidade de transmissão como função da profundidade V_G do potencial Gaussiano, para pacotes de onda com energia ε_3 na primeira ($k_3^{(1)}$) e segunda ($k_3^{(2)}$) subbandas, considerando-se anéis quânticos com conexões simples (painéis da esquerda) e suaves, com $R_s = 300$ Å (painéis da direita). Dois valores de campo magnético B são considerados: 0 T (sólida) e 0.18 T (pontilhada). (b),(e) Contribuições $< J_x^{(1)} >$ e $< J_x^{(2)} >$, da primeira e segunda subbanda, respectivamente, para a corrente total, considerando-se um pacote de onda inicialmente na primeira subbanda, com $k_3^{(1)}$. (c),(f) Contribuições $< J_x^{(1)} >$ e $< J_x^{(2)} >$ para um pacote de onda inicialmente na segunda subbanda, com $k_3^{(2)}$. As linhas $< J_x^{(1)} >$ e $< J_x^{(2)} >$ para $B = 0.18$ T (pontilhada) foram deslocadas por +0.5, para ajudar a visualizar os resultados (exceto em (c), onde elas foram deslocadas por +1.0).

Este efeito pode ser verificado através de um experimento similar ao da Ref. [134]. Ajustando a tensão na fonte, podemos selecionar elétrons propagando-se com energia ε_1, ε_2 ou ε_3 através do anel. O eletrodo de porta, localizado sobre o centro de um dos

braços do anel, induz um potencial localizado que é ajustável pela tensão aplicada a esta porta. Os resultados experimentais da Ref. [134] sugerem que a presença de um potencial eletrostático em um dos braços do anel induz uma mudança de fase nas oscilações AB. As probabilidades de transmissão calculadas com nosso modelo para um anel suave ($R_s = 300$ Å) são mostradas como função do campo magnético na Fig. 30 para vários valores de V_G, considerando pacotes de onda injetados na primeira subbanda, com energias (a) ε_2 e (b) ε_3. De fato, uma mudança na posição dos mínimos de transmissão ocorre à medida que V_G aumenta de 0 (preta, sólida) para 40 V (amarela, tracejada-pontilhada-pontilhada), o que pode ser interpretado como uma fase π adicional nas oscilações AB. Na verdade, os resultados para valores intermediários de V_G, ou seja, 10 (vermelha, tracejada), 20 (azul, pontilhada) e 30 V (verde, tracejada-pontilhada), mostram que o potencial Gaussiano é responsável por uma redução (aumento) na probabilidade de transmissão em $\Phi = n\phi_0$ ($\Phi = (n + 1/2)\phi_0$), de forma que as oscilações são deslocadas de ϕ_0 quando $V_G = 40$ V. O motivo para esta virada nas oscilações AB deve-se ao fato de que quando a função de onda atinge um estado ressonante do poço de potencial Gaussiano, ela adquire uma fase π, que transforma o máximo da oscilação AB em mínimo e vice-versa. [1, 88]

Similarmente, a influência da presença de uma impureza negativa, localizada em $\mathbf{r}_{imp} = (0, R_{av}, z_{imp})$ (isto é, no meio do braço superior do anel, a uma distância z_{imp} do plano do anel) sobre as probabilidades de transmissão T e reflexão R é ilustrada na Fig 31 (a), para um pacote de onda de energia ε_2. Conexões suaves entre os canais e o anel foram consideradas nas Fig 31 (a) e (b). Se a impureza está próxima ao plano, em $z_{imp} = 1$ Å (preta, sólida), as oscilações AB são afetadas significativamente: o período destas oscilações das probabilidades de transmissão e reflexão como função do campo magnético é reduzido pela metade. Este efeito é similar ao encontrado por Szafran e Peeters [1] em um anel mesoscópico ideal (unidimensional) com canais, quando um potencial descrito por uma Gaussiana é considerado em um dos braços do anel. À medida que a impureza é afastada do plano do anel, o período original das oscilações AB é recuperado, apesar da presença da impureza ainda afetar a amplitude das oscilações, como pode ser observado para $z_{imp} = 100$ Å (vermelha, tracejada) e 400 Å (azul, pontilhada) por exemplo. De fato, a presença de uma impureza em apenas um dos braços do anel quebra fortemente a simetria azimutal do sistema, o que é essencial para as oscilações AB. Se considerarmos duas impurezas, localizadas em pontos diametralmente opostos do anel, como $\mathbf{r}_{imp1} = (0, R_{av}, z_{imp1})$ e $\mathbf{r}_{imp2} = (0, -R_{av}, z_{imp2})$, por exemplo, o desequilíbrio entre os braços do anel é reduzido, e o período original das oscilações AB é recuperado, como mostrado na Fig 31 (b), até mesmo para $z_{imp1} \neq z_{imp2}$ (vermelha, tracejada). A amplitude

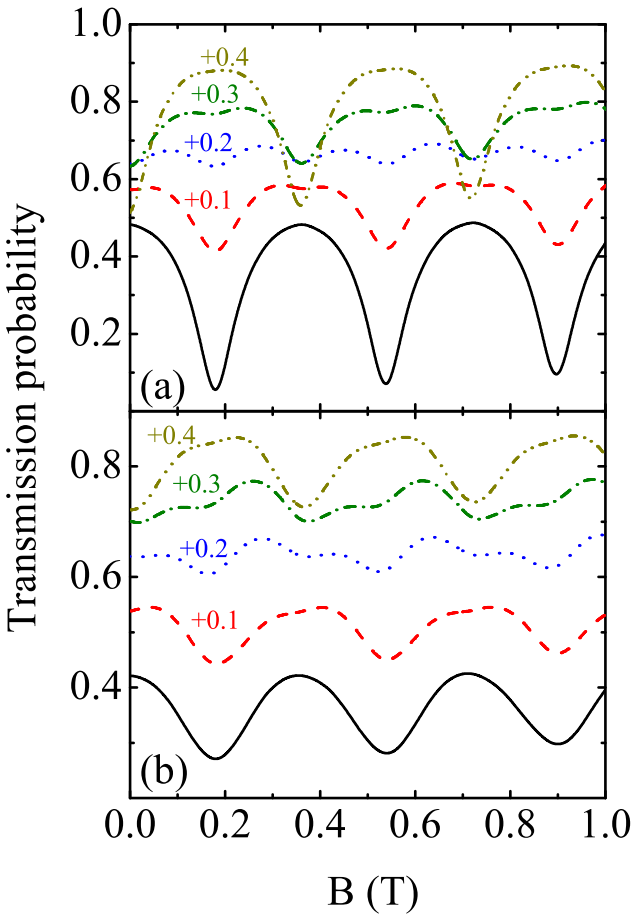

Figura 30: Probabilidade de transmissão como função do campo magnético para pacotes de onda com energia (a) ε_2 e (b) ε_3 na primeira subbanda ($k_3^{(1)}$), considerando anéis quânticos com conexões canal-anel suaves $R_s = 300$ Å, para vários valores de profundidade V_G do potencial Gaussiano: 0 (preta, sólida), 10 (vermelha, tracejada), 20 (azul, pontilhada), 30 (verde, tracejada-pontilhada) e 40 V (amarela, tracejada-pontilhada-pontilhada). As últimas quatro curvas foram deslocadas de maneira a ajudar a visualização dos resultados e o tamanho do deslocamento está indicado no topo de cada curva.

das oscilações também é praticamente recuperada se $z_{imp1} = z_{imp2}$, até mesmo quando as impurezas estão muito perto do plano do anel, como pode ser observado se compararmos os resultados para $z_{imp1} = z_{imp2} = 1$ Å (preta, sólida) com os obtidos para ε_2 em um sistema com conexões suaves na ausência de impurezas (ver Fig 25 (b), vermelha-tracejada). Algo similar a esta recuperação de oscilações AB quando duas impurezas são localizadas em pontos diametralmente opostos de um anel quântico já havia sido observado recentemente por Farias *et al.* [20] nas oscilações AB no espectro de energias de um elétron em um sistema de anel quântico sem canais de entrada e saída: para uma impureza, o efeito AB no espectro de energia é reduzido, enquanto para duas impurezas, simetricamente

localizadas no anel, as oscilações de energia são observadas novamente.

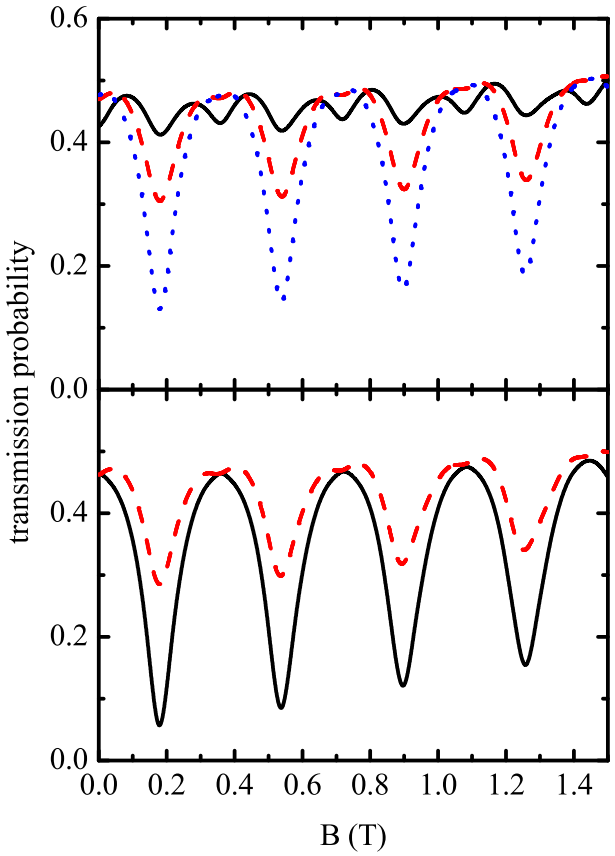

Figura 31: Probabilidades de transmissão para um pacote de onda com energia ε_2, como funções do campo magnético, considerando-se conexões suaves entre os canais e o anel, na presença de (a) uma impureza, localizada a três distâncias diferentes z_{imp1} do plano do anel: 1 Å (preta, sólida), 100 Å (vermelha, tracejada) e 400 Å (azul, pontilhada) , e (b) duas impurezas, considerando-se distâncias $z_{imp1} = 1$ Å e $z_{imp2} = 1$ Å (preta, sólida) ou $z_{imp2} = 100$ Å (vermelha, tracejada).

3.4 Influência da rugosidade sobre as oscilações Aharonov-Bohm da energia

A maioria dos trabalhos experimentais sobre anéis quânticos semicondutores na literatura tem demonstrado que estas estruturas têm superfícies rugosas, ao invés de uma forma circular perfeita [135, 136]. O objetivo desta seção está em mostrar até que ponto a rugosidade da superfície pode influenciar as energias de confinamento do elétron em anéis quânticos GaAs/AlGaAs sem canais de injeção, na presença de um campo magnético aplicado paralelamente ao eixo central do anel. Propomos um modelo bem simples para se

descrever a rugosidade, onde os raios interno e externo do anel são definidos como funções dependentes da coordenada angular. Os autoestados deste sistema são então encontrados pelo método split-operator, como descrevemos no Capítulo 2, evoluindo-se no tempo imaginário uma função de onda inicial arbitrária.

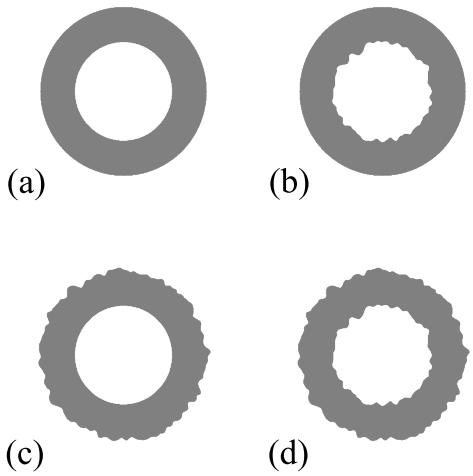

Figura 32: Perfis de potencial para (a) um anel ideal e para anéis com rugosidade nas superfícies (b) interna, (c) externa, e em (d) ambas as superfícies, considerando-se $R_i = 140$ Å , $R_e = 240$ Å , $\Gamma = 2$ Å e $L_c = 10$ Å .

Como na seção anterior, o anel é limitado pelos seus raios interno e externo, definidos como R_i e R_o, respectivamente. No modelo de rugosidade que propomos aqui, o raio interno (externo) do anel depende da variável angular θ como:

$$R_{i(o)}(\theta) = 2\Gamma\sqrt{\frac{L_C}{\overline{R_{i(o)}}}}\sum_{n>0} e^{\left(nL_C/2\overline{R_{i(o)}}\right)^2}\times$$

$$\cos(n\theta + \varphi_n) + \overline{R_{i(o)}} \tag{3.8}$$

onde Γ representa a amplitude de rugosidade, $\overline{R_{i(o)}}$ é o raio médio interno (externo), L_C é o comprimento de correlação e ϕ_n é uma fase aleatória. O potencial de confinamento é

então definido como

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad R_i \leq \sqrt{x^2+y^2} \leq R_e \\ V_e & otherwise \end{cases} \tag{3.9}$$

onde V_e é o band-offset da banda de condução. Aplicamos este modelo para um anel $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, onde $V_e = 262$ meV e a massa efetiva do elétron é $m^*/m_0 = 0.067$. [137]

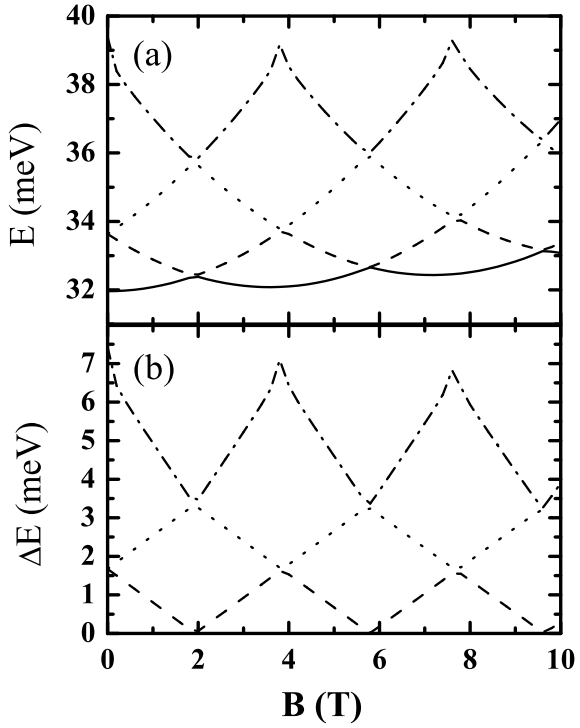

Figura 33: (a) Espectro de energia do elétron e (b) energias de transição do estado fundamental (sólida) para o primeiro (tracejada), segundo (pontilhada) e terceiro (tracejada-pontilhada) estado exitado, como função do campo magnético para um anel de superfícies ideais, considerando-se $\overline{R_i} = 140$ Å e $\overline{R_o} = 240$.

A Fig. 32 mostra os perfis de potencial para os quatro casos de anel quântico analisados nesta seção: (a) um anel com superfície ideal, isto é, sem rugosidades, e anéis com rugosidades nas superfícies (b) interna, (c) externa, e (d) em ambas as superfícies. Consideramos os valores $\overline{R_i} = 140$ Å e $\overline{R_o} = 240$ Å, para os raios médios interno e externo, respectivamente, e os parâmetros da superfície rugosa são $\Gamma = 2$ Å e $L_c = 5$ Å.

O (a) espectro de energia e (b) as energias de transição do elétron, como função do

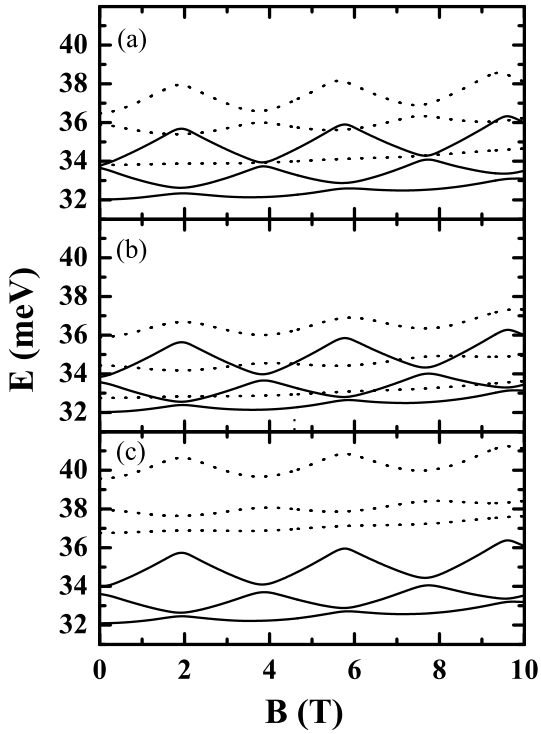

Figura 34: Espectro de energia do elétron como função do campo magnético em um anel quântico com rugosidade nas superfícies (a) interna, (b) externa e (c) em ambas as superfícies, considerando-se $L_c = 5$ Å , para $\Gamma = 2$ Å (sólida) e $\Gamma = 10$ Å (pontilhada).

campo magnético para um anel de superfícies ideais (ver Fig. 32(a)), são mostradas na Fig. 33. Este caso pode ser aproximado pelo modelo de anel ideal descrito no Capítulo 1 desta tese, onde demonstramos que existem oscilações e degenerescências no espectro de energia devido a trocas de momento angular, o que também é chamado de efeito Aharonov-Bohm. De fato, observam-se claramente as oscilações AB de energia à medida que o campo magnético aumenta, assim como a degenerescência nos pontos de transição de momento angular.

O espectro de energia como função do campo magnético em anéis quânticos com superfícies (a) interna, (b) externa e (c) ambas rugosas foram calculados para dois conjuntos diferentes de parâmetros de rugosidade: a Fig. 34 apresenta os resultados obtidos considerando-se $L_c = 5$ Å , para $\Gamma = 2$ Å (sólida) e $\Gamma = 10$ Å (pontilhada), enquanto a Fig. 35 mostra os resultados quando consideramos $L_c = 20$ Å , para $\Gamma = 2$ Å (sólida) e $\Gamma = 10$ Å (pontilhada). Na presença de superfícies rugosas, as oscilações AB tornam-se mais fracas e as energias de confinamento são deslocadas, especialmente quando ambas as superfícies são rugosas.

As transições de energia do elétron do estado fundamental para o primeiro (E_1-E_0) e

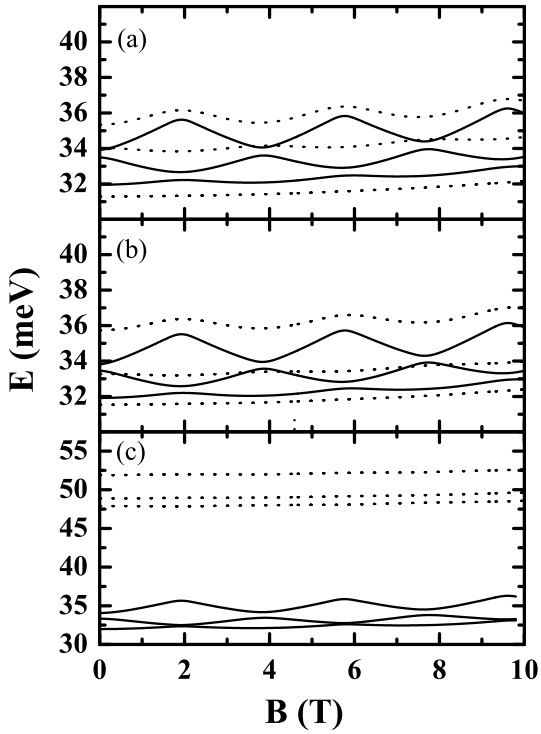

Figura 35: Espectro de energia do elétron como função do campo magnético em um anel com rugosidade nas superfícies (a) interna, (b) externa e (c) em ambas as superfícies, considerando-se $L_c = 20$ Å , para $\Gamma = 2$ Å (sólida) e $\Gamma = 10$ Å (pontilhada).

segundo (E_2-E_0) estado excitado, como função do campo magnético, em anéis quânticos com superfícies interna (tracejada), externa (pontilhada) e ambas as superfícies (sólida) rugosas estão mostradas na Fig. 36, considerando-se (a) $L_c = 5$ Å , com $\Gamma = 2$ Å , e (b) $L_c = 5$ Å , com $\Gamma = 10$ Å . Podemos observar que a existência de superfícies rugosas levanta as degenerescências nos pontos de transição de momento angular, e este efeito se torna mais forte quando a amplitude Γ é maior. Apesar do desvio da energia devido à presença da rugosidade em ambas as superfícies do anel ser máxima (ver Fig. 34(c) e 35(c)), as energias de transição neste caso são menores que as encontradas para anéis com rugosidade em apenas uma das superfícies, interna ou externa.

3.5 Efeitos Zeeman e spin-órbita em pontos quânticos

Aplicamos o formalismo *split-operator* no estudo de um ponto quântico plano com simetria circular, na presença de campos magnéticos. O potencial de confinamento considerado consiste de um degrau na direção radial, de forma que $V(x, y) = 0$ na região em que $R^2 > x^2 + y^2$ e $V(x, y) = V_e$ fora dessa região, onde R é o raio do ponto e V_e é o

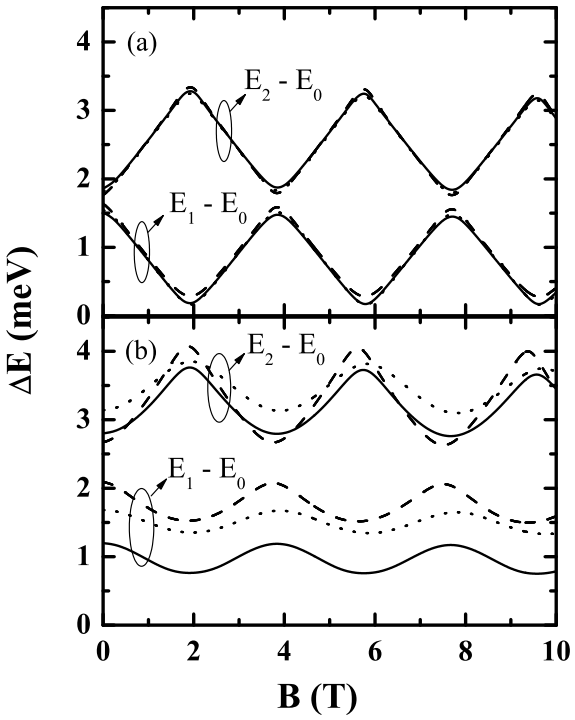

Figura 36: Energias de transição do estado fundamental para o primeiro e segundo estados excitados, como função do campo magnético no anel com rugosidade nas superfícies interna (pontilhada), externa (tracejada) e em ambas as superfícies (sólida), considerando-se $L_c = 5$ Å , para (a) $\Gamma = 2$ Å e (b) $\Gamma = 10$ Å .

band-offset da banda de condução.

Chamaremos H_0 o Hamiltoniano que descreve o confinamento do elétron nestes pontos quânticos, considerando-se um campo magnético $\overrightarrow{B} = B\hat{z}$, descrito por um potencial vetor no gauge simétrico, $\overrightarrow{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$, na ausência de efeitos Zeeman e spin-órbita. O Hamiltoniano do efeito Zeeman é dado por

$$H_Z = \frac{1}{2} g\mu B\sigma_z, \tag{3.10}$$

enquanto os Hamiltonianos de Dresselhaus e Rashba são

$$H_D = \frac{\alpha_D}{\hbar}\left[-\left(p_x + \frac{eBy}{2}\right)\sigma_x + \left(p_y - \frac{eBx}{2}\right)\sigma_y\right] \tag{3.11}$$

e

$$H_R = \frac{\alpha_R}{\hbar}\left[\left(p_y - \frac{eBx}{2}\right)\sigma_x - \left(p_x + \frac{eBy}{2}\right)\sigma_y\right] \tag{3.12}$$

respectivamente, de modo que o Hamiltoniano do sistema é dado por $H = H_0 + H_Z +$

$H_D + H_R$.

Usamos agora a técnica *split-operator* com spin que desenvolvemos no Capítulo 2 para separar os termos spin-órbita e Zeeman, de modo que o operador evolução temporal se torna

$$e^{\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}H\right]} = e^{\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}(H_D+H_R+H_Z)\right]}e^{\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_0\right]}e^{\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}(H_D+H_R+H_Z)\right]}. \tag{3.13}$$

Podemos reescrever $H_D + H_R + H_Z$ em termos de produtos escalares entre vetores e matrizes de Pauli:

$$\begin{aligned} H_D + H_R + H_Z = \frac{\alpha_D}{\hbar}\left[-\left(p_x + \frac{eBy}{2}\right)\sigma_x + \left(p_y - \frac{eBx}{2}\right)\sigma_y\right] \\ +\frac{\alpha_R}{\hbar}\left[\left(p_y - \frac{eBx}{2}\right)\sigma_x - \left(p_x + \frac{eBy}{2}\right)\sigma_y\right] + \frac{1}{2}g\mu B\sigma_z = \\ (\alpha_R k_y - \alpha_D k_x)\sigma_x + (\alpha_D k_y - \alpha_R k_x)\sigma_y \\ -\frac{eB}{2\hbar}(\alpha_R x + \alpha_D y)\sigma_x - \frac{eB}{2\hbar}(\alpha_R y + \alpha_D x)\sigma_y + \frac{1}{2}g\mu B\sigma_z. \end{aligned} \tag{3.14}$$

Podemos reescrever agora

$$e^{\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}(H_D+H_R+H_Z)\right]} = exp[-i\,(\overrightarrow{v_1}\cdot\overrightarrow{\sigma} + \overrightarrow{v_2}\cdot\overrightarrow{\sigma})], \tag{3.15}$$

onde os vetores $\overrightarrow{v_1}$ e $\overrightarrow{v_2}$ são escritos somente no espaço e dos momenta e das posições, respectivamente, como

$$\overrightarrow{v_1} = \frac{\Delta t}{2\hbar}\left[(\alpha_R k_y - \alpha_D k_x), (\alpha_D k_y - \alpha_R k_x), 0\right]$$

e

$$\overrightarrow{v_2} = \frac{\Delta t}{2\hbar}\left[-\frac{eB}{2\hbar}(\alpha_R x + \alpha_D y), -\frac{eB}{2\hbar}(\alpha_R y + \alpha_D x), \frac{1}{2}g\mu B\right]. \tag{3.16}$$

Devido à não-comutatividade $[\overrightarrow{v_1}\cdot\overrightarrow{\sigma}, \overrightarrow{v_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}] \neq 0$, usamos a técnica *spit-operator* mais uma vez para separar agora as exponenciais de cada um desses vetores, separando assim completamente as exponenciais que envolvem termos no espaço das posições e dos momenta:

$$e^{\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}(H_D+H_R+H_Z)\right]} = exp\left[-\frac{i}{2}\overrightarrow{v_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}\right] exp\left[-i\overrightarrow{v_1}\cdot\overrightarrow{\sigma}\right] exp\left[-\frac{i}{2}\overrightarrow{v_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}\right]. \tag{3.17}$$

Chegamos então, finalmente, numa forma para o operador de evolução temporal que é compatível com a da Eq. (2.35), se fizermos $\overrightarrow{S_1} = \overrightarrow{v_1}$ e $\overrightarrow{S_2} = \overrightarrow{v_2}/2$. A evolução temporal de um pacote de onda $|\Psi>_t$ é então, finalmente, encontrada como

$$|\Psi>_{t+\Delta t} = e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_1}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_0}e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_1}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}|\Psi>_t \tag{3.18}$$

onde podemos trocar as exponenciais por matrizes, seguindo a Eq. (2.35), chegando a

$$|\Psi>_{t+\Delta t}= M_2 \cdot M_1 \cdot M_2 \quad e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_0} \quad M_2 \cdot M_1 \cdot M_2|\Psi>_t . \tag{3.19}$$

Em resumo, a evolução temporal de um pacote de onda em um sistema que consiste de um ponto quântico com efeitos Zeeman e spin-órbita pode ser dada simplesmente pelas multiplicações matriciais da Eq. (3.19), tomando-se o cuidado de fazer sempre uma transformada direta (inversa) de Fourier antes (depois) de multiplicar as matrizes M_1, já que estas estão escritas no espaço dos momenta.

Como um caso teste, iniciamos analizando apenas a influência do efeito Zeeman (isto é, $\alpha_R = \alpha_D = 0$) sobre os autoestados e sobre o spin de um elétron em um ponto quântico de raio $R = 100$ Å na presença de um campo magnético perpendicular ao plano do ponto, na direção z. As energias dos quatro primeiros autoestados deste sistema estão mostradas na Fig. 37, onde vemos que a separação entre os pares de estados $E_1 - E_2$ e $E_3 - E_4$ depende do campo magnético B segundo a relação $\Delta E_{n-m} = g\mu B$, um resultado já conhecido para o efeito Zeeman.

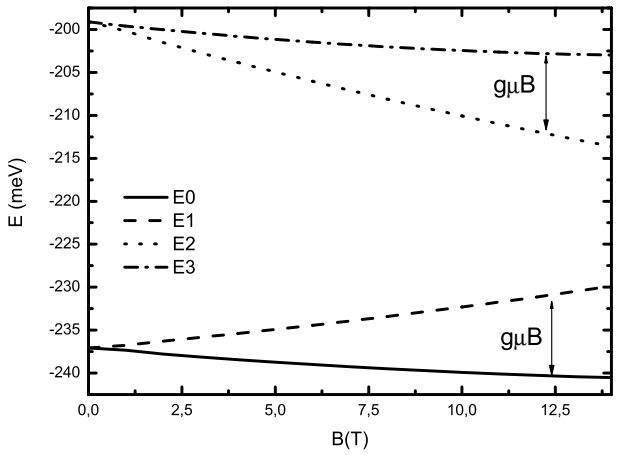

Figura 37: Energias dos quatro primeiro autoestados de um ponto quântico plano circular de raio R = 100 Å, como função do campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano.

Estudaremos agora a evolução em tempo real da componente z do spin de um elétron que começa com $\sigma_z = 1$ (preta) ou -1 (vermelha) neste sistema. Se o campo magnético for aplicado na direção z, como fizemos anteriormente, estes estados de spin são autoestados do sistema, o que significa que a componente z do spin do elétron permanecerá o mesmo durante toda a evolução. Porém, se considerarmos um campo magnético no plano, na

direção x, não estaremos considerando como função de onda inicial um autoestado do sistema, uma vez que o Hamiltoniano que descreve o efeito Zeeman nesse caso leva a $H_Z = g\mu B\sigma_x/2$, de maneira que, na base $|+>$ e $|->$, os autoestados de σ_x são

$$|1>= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+>+|->), \qquad |2>= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+>-|->). \tag{3.20}$$

Sendo assim, um estado puramente "up" ou "down", seria escrito na base dos autoestados de σ_x como

$$|+>= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iE_1t/\hbar}|1>+e^{-iE_2t/\hbar}|2>), \qquad |->= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iE_1t/\hbar}|1>-e^{-iE_2t/\hbar}|2>), \tag{3.21}$$

respectivamente, podendo ser facilmente reescrito como

$$|\pm>= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1>\pm e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}|2>). \tag{3.22}$$

A evolução em tempo real da componente z do spin neste sistema, com o campo magnético $B = 1$ T aplicado paralelamente ao plano do ponto, está mostrada na Fig. 38. Podemos observar claramente um comportamento oscilatório, de período $T = 3626$ fs, nesta componente do spin.

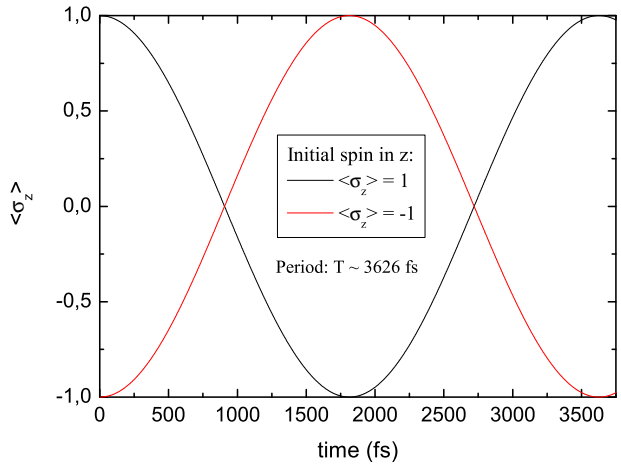

Figura 38: Componente z de spin como função do tempo em um ponto quântico sob um campo magnético aplicado paralelamente ao plano do ponto, considerando-se apenas efeito Zeeman, para funções inicialmente com spin "up" (preta) ou "down" (vermelha)

Note que a exponencial na Eq. (3.22) é um termo que oscila periodicamente no tempo entre -1 e +1. Isto é, periodicamente, temos uma soma ou uma subtração entre $|1>$ e $|2>$, a qual, se comparada com a Eq. (3.21), pode ser identificada facilmente como

os estados "up" ou "down", respectivamente. Em resumo, esta análise explica porque foram encontradas oscilações periódicas na evolução temporal da componente z do spin do elétron na Fig. Mais ainda: a análise que fizemos mostra que o período dessa oscilação deve ser dado por $T = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$; se substituirmos $E_2 - E_1 = g\mu B$, obteremos $T = 3626$ fs, que é exatamente o período que encontramos na Fig. a partir do método *split-operator* com spin, mostrando que nosso método traz resultados em bom acordo com as previsões analíticas.

Em resumo, os resultados que obtivemos numericamente com nosso método estão em bom acordo com as previsões analíticas. Resta-nos agora apenas calcular a influência dos termos de spin-órbita nestes pontos quânticos, analisando também como este efeito alteraria o espectro de energia dos elétrons nestes sistemas como função do campo magnético.

4 Estruturas baseadas em grafeno

4.1 Espectro de energia em anéis quânticos de grafeno

Iremos agora usar o modelo tight-binding (TB) descrito no Capítulo 1 desta tese para calcular o espectro de energia de anéis quânticos de grafeno com diferentes geometrias e tipos de borda. Iremos também discutir as principais características qualitativas do espectro obtido em termos da aproximação do contínuo (ou de Dirac), onde propomos um modelo simplificado [138] para a descrição de anéis de grafeno. Os resultados dos cálculos TB mostram que o espectro de energia destes sistemas depende fortemente dos detalhes estruturais das bordas, o que torna difícil encontrar soluções analíticas para os estados de energia nestes sistemas dentro do modelo contínuo. Mesmo assim, sob condições específicas, pode-se ainda usar o modelo simplificado proposto para se obter analiticamente as principais características qualitativas do espectro de energia de anéis armchair, ou usar a solução analítica proposta na Ref. [54] para observar algumas características exibidas pelo espectro de energia obtido através do modelo TB para um anel quântico formado por um termo de massa, como discutiremos a seguir.

Escrevendo o Hamiltoniano H_{TB} numa forma matricial (ver Cap. 2), diagonalizamos a matriz resultante numericamente, obtendo assim o espectro de energia para as diferentes geometrias do anel esquematicamente mostradas na Fig. 39: anéis hexagonais, com bordas (a) armchair e (b) zigzag, e (c) anéis circulares, onde cada borda exibe uma mistura de regiões armchair e zigzag.

Na Fig. 40, os espectros de energia para anéis hexagonais armchair são mostrados como função do fluxo magnético Φ. Estes espectros exibem cruzamentos e anti-cruzamentos. Os últimos são uma consequência da geometria hexagonal do anel. De fato, trabalhos anteriores têm mostrado que o espectro de energia de anéis quânticos de grafeno na forma de triângulos e losangos exibem subbandas de energia triplas e quádruplas, re-

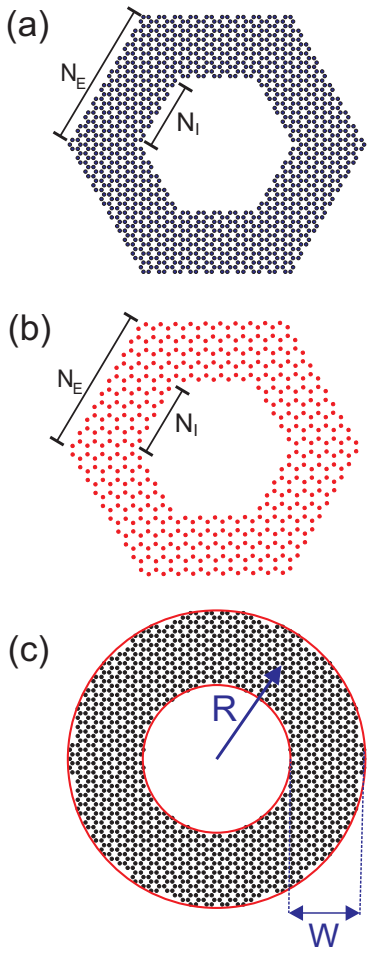

Figura 39: Esquema dos anéis hexagonais (a) armchair e (b) zigzag, assim como o (c) anel circular, considerados nesta seção. As primeiras duas geometrias são caracterizadas pelo número de anéis de carbono $N_E(N_I)$ na borda exterior (interior), enquanto a última é caracterizada pela largura W e raio médio R.

spectivamente, separadas por anti-cruzamentos. [11] Além disso, estes espectros exibem um gap em torno de $E = 0$ na ausência de campos magnéticos, mas estados $E = 0$ são encontrados para valores específicos de fluxo magnético, os quais são quase igualmente espaçados em fluxo para o anel mais fino na Fig. 40(a). Isto lembra o espectro de energia de elétrons de Schrödinger confinados em anéis quânticos sob campos magnéticos perpendiculares, [20, 21, 86] onde o espectro de energia oscila periodicamente com o fluxo magnético, devido ao efeito efeito Aharonov-Bohm (AB). Uma análise detalhada deste fato vai ser feita mais adiante, ainda neste capítulo. As características qualitativas observadas na Fig. 40(a), inclusive o gap em torno de $E = 0$ na ausência de campos magnéticos, estão presentes para *qualquer* espessura do anel. Isto é surpreendente, pois em nano-fitas armchair, o caráter do sistema oscila entre metálico e isolante à medida que a espessura muda. [139] Apesar do anel armchair na Fig. 40(a) ser feito simplesmente conectando-se seis nano-fitas armchair, as caraterísticas qualitativas das fitas não são diretamente

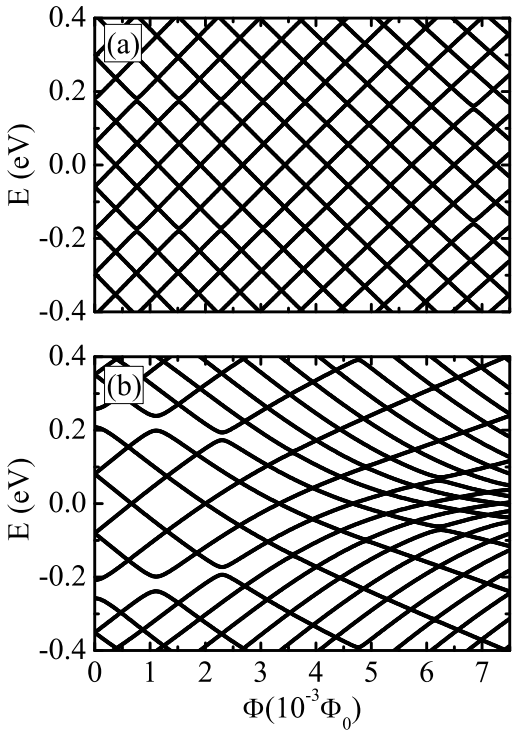

Figura 40: Espectro de energia como função do fluxo magnético através de um único hexágono de carbono para o anel quântico hexagonal armchair mostrado esquematicamente na Fig. 1(a), considerando-se duas espessuras do anel: (a) $N_E = 15$, $N_I = 10$ e (b) $N_E = 15$, $N_I = 3$. Este espectro é simétrico com relação a $E = 0$.

transferíveis ao caso de anéis quânticos, o que sugere que a geometria do anel e os pontos de conexão entre as fitas têm um papel crucial nestes sistemas. [140] A influência do aumento de espessura do anel sobre os estados de energia está mostrado na Fig. 40(b), onde observamos que o gap entre as subbandas sextuplas torna-se mais largo, comparado com o caso de espessuras mais finas na Fig. 40(a), mas decresce à medida que o campo magnético aumenta.

Os espectros de energia de anéis hexagonais zigzag, por outro lado, são fortemente dependentes da espessura do anel, como mostrado na Fig. 41. Dependendo da espessura do anel, o sistema pode exibir tanto duas subbandas sêxtuplas separadas por um gap em torno de $E = 0$, como mostrado na Fig. 41(a), como uma subbanda sêxtupla central em torno desta energia, como na Fig. 41(b). Uma diferença estrutural determina o comportamento qualitativo do espectro: o (primeiro) último é obtido quando as bordas zigzag externa e interna do anel estão (anti) alinhadas, como ilustrado nas inserções. Consquentemente, os estados de menor energia nos dois casos mostrados são qualitativamente diferentes; por exemplo, no primeiro caso, o estado fundamental não é degenerado na ausência de campo

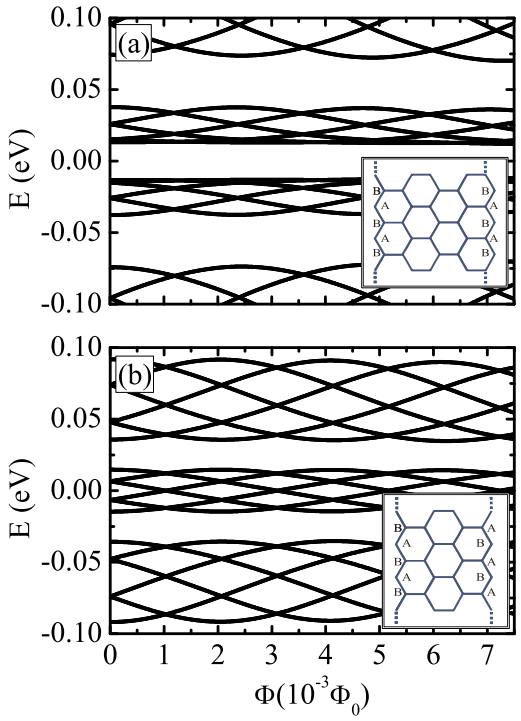

Figura 41: Espectro de nergia como função do fluxo magnético passando por a penas um hexágono de carbono, para o anel quântico hexagonal mostrado esquematicamente na Fig. 40(b), considerando-se duas espessuras do anel: (a) $N_E = 15$, $N_I = 10$ e (b) $N_E = 15$, $N_I = 9$. No (primeiro) último caso, as bordas zigzag internas e externas estão (anti-) alinhadas, como ilustrado nas inserções. O espectro de energia é simétrico com relação a $E = 0$.

magnético, enquanto no segundo, ele é duplamente degenerado. Assim, ao contrário do caso das nano-fitas, para anéis quânticos é a estrutura zigzag, e não a armchair, que exibe um comportamento oscilatório à medida que a espessura muda. Isto está de acordo com o fato de que as propriedades eletrônicas de junções de 120° entre nano-fitas zigzag também exibem comportamento oscilatório com o aumento da espessura, enquanto estas junções feitas com nano-fitas armchair não mostram nenhuma dependência qualitativa com a espessura, [141] o que confirma a idéia de que o espectro de energia de anéis hexagonais de grafeno é extremamente dependente das propriedades eletrônicas de suas junções entre nano-fitas, e não das propriedades eletrônicas das próprias nano-fitas.

O espectro de energia para o anel circular ilustrado esquematicamente na Fig. 39(c) é apresentado na Fig. 42(a) como função do fluxo magnético $\Phi_R = \pi R^2 B$ passando através do raio médio $R = 80$ Å. Como não há uma simetria hexagonal, as subbandas de energia não são mais sêxtuplas, como aquelas discutidas nos casos anteriores, mas elas são duplas e exibem oscilações AB à medida que o fluxo magnético aumenta, que não

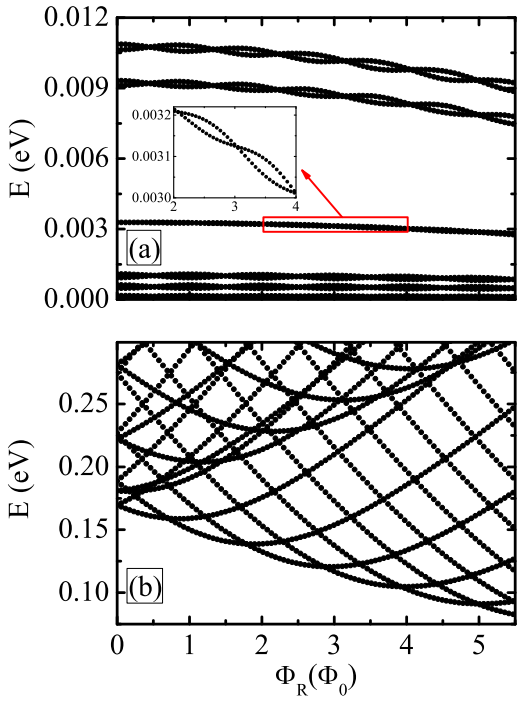

Figura 42: Espectro de energia como função do fluxo magnético através de um único hexágono de carbono para (a) o anel circular mostrado esquematicamente na Fig. 39(c), e (b) para um anél quântico formado por um potencial dependente do sítio dado pela Eq. (4.1), com suavidade $S = 10$ Å e altura $M_0 = 1$ eV. Em ambos os casos, o raio médio do anel é $R = 80$ Å e a espessura é 60 Å. O espectro é simétrico com relação a $E = 0$.

são perfeitamente periódicas em Φ_R devido à espessura finita $W = 60$ Å do sistema. Na Fig. 42(b), apresentamos os resultados para um tipo diferente de anel quântico circular, sugerido por artigos anteriores na literatura [54, 142, 143]: consideramos o caso de uma rede de grafeno não cortada, ao invés daquela cortada em forma de círculo ilustrada na Fig. 39(c), mas com um potencial dependente do sítio M_i que assume valor zero (M_0) dentro (fora) da região do anel. Para evitar efeitos de borda, consideramos uma transição suave entre as regiões de potencial zero e M_0, de forma que M_i é dado por

$$M_i(r_i) = \pm M_0[2 + \tanh\left(r_i^+\right) + \tanh\left(r_i^-\right)] \tag{4.1}$$

onde $r_i^+ = (r_i - R - W/2)/S$ e $r_i^- = (-r_i + R - W/2)/S$, S é a espessura da região suave e $r_i = \sqrt{x_i^2 + y_j^2}$ é a posição do i-ésimo sítio da rede. Os resultados para um potencial de altura $M_0 = 1$ eV e regiões suaves $S = 10$ Å são mostrados na Fig. 42(b), para um anel com o mesmo raio e espessura que na Fig. 42(a). O espectro, neste caso, exibe um gap de ≈ 170 meV e um estado fundamental degenerado na ausência de campo magnético. À medida que o campo magnético aumenta, a degenerescência do estado fundamental é

levantada e as oscilações AB são claramente observadas.

4.1.1 Comparação com o modelo contínuo

No Capítulo 1, demonstramos a equivalência entre os modelos TB e de Dirac para os estados de menor energia no grafeno. Discutiremos agora sobre como os resultados obtidos pelo método TB para anéis quânticos de grafeno se comparam aos resultados obtidos através da equação de Dirac para o modelo contínuo. Vamos primeiramente considerar um modelo simplificado para anéis quânticos. Na vizinhança do ponto K ($\tau = 1$), [1] o Hamiltoniano (1.31) em coordenadas polares é dado por

$$H_D = \hbar v_F \begin{bmatrix} \frac{M}{\hbar v_F} & -i\left(\Pi_r^* + \frac{\pi r B}{\Phi_0}\right) \\ -i\left(\Pi_r - \frac{\pi r B}{\Phi_0}\right) & -\frac{M}{\hbar v_F} \end{bmatrix}, \tag{4.2}$$

onde $\Pi_r = e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r}\frac{\partial}{\partial \phi}\right)$. Nenhum potencial de confinamento é considerado a priori na Eq. (4.2), e a constante M é capaz de modelar qualquer possível gap no espectro de energia. Nós então assumimos que o momento na direção radial aproxima-se de zero devido ao confinamento quântico no anel e, a partir da definição do operador momentum na direção radial [144]

$$\mathbf{p}_r = \frac{1}{2}(\mathbf{p}_r \cdot \hat{r} + \hat{r} \cdot \mathbf{p}_r) = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2R}, \tag{4.3}$$

onde $\hat{r}$ é o vetor unitário na direção radial e R é o raio do anel, obtemos $\partial/\partial r \to -1/2R$ quando $\hat{p}_r \to 0$ e $r \to R$. Então, o Hamiltoniano simplificado para o anel quântico de grafeno é

$$H_D = \begin{bmatrix} M & -e^{-i\phi}\left(\frac{d}{d\phi} + i\frac{\Phi_R}{\Phi_0} - \frac{i}{2}\right) \\ e^{i\phi}\left(\frac{d}{d\phi} + i\frac{\Phi_R}{\Phi_0} + \frac{i}{2}\right) & \text{-}M \end{bmatrix}, \tag{4.4}$$

onde $\Phi_R = \pi R^2 B$ é o fluxo magnético através do anel quântico e a energia é dada em unidades de $E_0 = \hbar v_F/R$.

Note que esta definição de momento radial na Eq. (4.3) resolve um problema antigo na descrição de elétrons em anéis quânticos unidimensionais. De fato, em 1993, Aronov e Lyanda-Geller [145] usaram a mesma aproximação, isto é, um elétron confinado em um anel quântico com momento aproximadamente zero na direção radial, no estudo de elétrons de Schrödinger em um anel quântico com interação spin-órbita de Rashba, o qual exibe similaridades com o Hamiltoniano de Dirac para o grafeno. [10] Porém, por um erro, eles definiram o momento na direção radial como $\mathbf{p}_r = \frac{\partial}{\partial r}$, que leva a

[1] No ponto K', substituindo-se $\vec{\sigma} \to \vec{\sigma}^*$ (ver, por exemplo, Ref. [10]), obtém-se o mesmo espectro de energia, mas para $l \to l + 1$.

$\frac{\partial}{\partial r} \to 0$ quando o momento radial se aproxima de zero. Devido a essa definição errada, eles acabaram encontrando um Hamiltoniano não-Hermitiano para este sistema. A não-Hermiticidade deste Hamiltoniano foi eliminada *artificialmente* em artigos subsequentes, [146, 147] assumindo-se um termo adicional $-1/2R$ nas sub-diagonais do Hamiltoniano. Uma explicação física para este termo foi dada apenas dez anos depois por Meijer et al. [148], onde os autores separaram o Hamiltoniano em duas partes, uma para confinamento radial e outra para a interação Rashba, e usaram as autofunções da parte radial para demonstrar que o valor médio da primeira derivada na direção radial no Hamiltoniano de Rashba é $\langle \partial/\partial r \rangle = -1/2R$. Porém, esta não é a maneira mais geral de explicar este termo: esta explicação não se aplica ao Hamiltoniano do anel (4.2), uma vez que neste caso não podemos separar o Hamiltoniano e obter um termo de confinamento radial separadamente. Usando-se a Eq. (4.3), por outro lado, obtém-se o resultado encontrado por Meijer et al. de uma forma mais natural, mostrando que a identidade $\langle \partial/\partial r \rangle = -1/2R$ é na verdade uma consequência do momento radial nulo. Nossa derivação do Hamiltoniano do anel de grafeno nas Eqs. (4.2-4.4) mostra que se simplesmente definirmos o momento radial de maneira apropriada, a expressão correta para as derivadas radiais e, consequentemente, a forma Hermitiana do Hamiltoniano, vão aparecer naturalmente da derivação. É fácil ver que o mesmo ocorre na derivação do Hamiltoniano da interação de Rashba para anéis quânticos semicondutores.

Os autoestados do Hamiltonian (4.4) são encontrados como $\Psi_l = [A_R e^{il\phi}, \quad iB_R e^{i(l+1)\phi}]^T$, com energias dadas por

$$E = \pm\sqrt{\left(l + \frac{\Phi_R}{\Phi_0} + 1\right)\left(l + \frac{\Phi_R}{\Phi_0}\right) + \frac{1}{4} + M^2}, \tag{4.5}$$

onde l é índice de momento angular.

Dentre as estruturas de anéis quânticos discutidas até este ponto, o anel armchair é o melhor candidato a exibir as características preditas pelo modelo simplificado, pois estas estruturas não apresentam estados de borda, isto é, a densidade eletrônica é máxima nos centros dos braços do anel, os quais podem ser modelados grosseiramente por um círculo. Nossos resultados mostram que este é realmente o caso: o espectro de energia dado pela Eq. (4.5) para o anel circular de raio $R \approx 47$ Å , ilustrado pela curva vermelha na Fig. 43(a), é mostrado pelas curvas sólidas na Fig. 43(b), onde as curvas tracejadas são os resultados obtidos pelo modelo TB model para o anel hexagonal armchair mostrado na Fig. 43(a). No espectro de energia obtido pelo modelo simplificado para $M = 0$, observa-se que: i) o gap de energia atinge um valor máximo $E = \hbar v_F/R$ em $\Phi_R = n\Phi_0$ (n

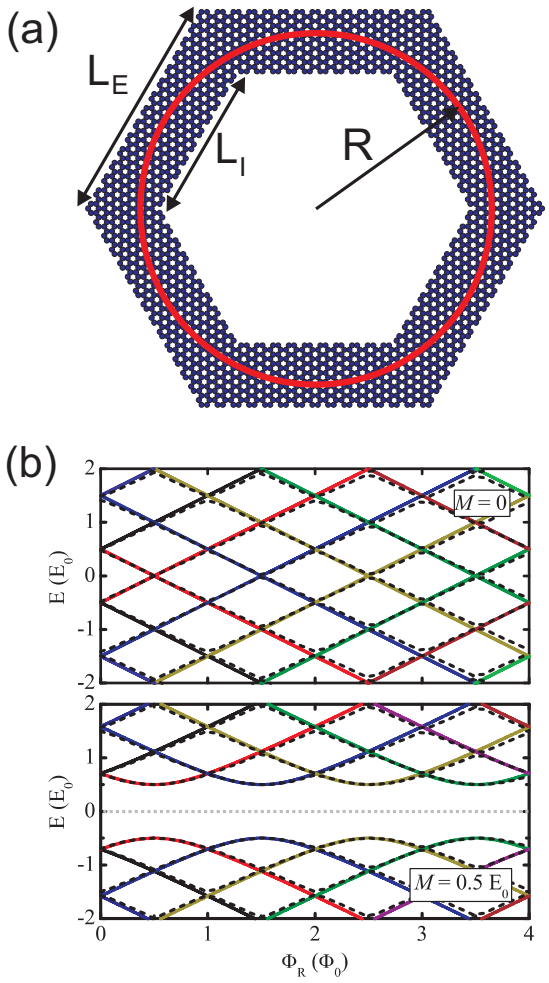

Figura 43: (a) Anel quântico armchair hexagonal (pontos pretos) considerado no cálculo TB, com $N_E = 15$ e $N_I = 10$, junto com o anel unidimensional $R \approx 47$Å (curva vermelha) considerado no modelo simplificado. (b) Espectro de energia obtido através do modelos simplificado (sólida) e TB (tracejada) como função do fluxo magnético que atravessa o anel circular vermelho ilustrado em (a). Curvas com cores diferentes representam índices de momento angular l diferentes. Os resultados do modelo TB com um termo de massa de fundo $M = 0.5E_0$ são também comparados com aqueles do modelo simplificado para este caso.

inteiro) e ii) o sistema não possui gap para $\Phi_R = (n + 1/2)\Phi_0$. Os resultados do modelo TB exibem praticamente as mesmas características, apesar de um acordo melhor com o modelo simplificado ser observado para energias e campos magnéticos menores, onde os efeitos devido à curvatura das bandas de energia e devido ao tamanho finito da amostra são menos importantes. Nós também consideramos o caso de um anel depositado sobre um substrato que proporciona um potencial de fundo relacionado à massa $M = 0.5E_0$. Note que isto não é o mesmo mostrado na Fig. 42(b), já que neste caso temos uma massa constante M, ao invés do potencial dependente do tempo $M_i(r_i)$ da Eq. (4.1). O modelo simplificado (sólida) então prevê que um termo de massa como este é responsável pela

abertura de um gap mínimo E_0 no espectro de energia em $\Phi_R = (n+1/2)\Phi_0$. Esta previsão é confirmada pelos resultados do modelo TB (tracejada) para um potencial dependente do sítio como este.

Como discutido anteriormente, o espectro de energia dos anéis quânticos hexagonais zigzag com bordas alinhadas e anti-alinhadas são qualitativamente diferentes. Fica claro que ambos espectros não podem ser obtidos por nosso modelo simplificado. Mesmo assim, podemos ainda estimar o período das oscilações AB da energia observados na Fig. 41 por $\Phi_R = n\Phi_0$, usando um valor razoável do raio do anel, que no caso da Fig. 41 é ≈ 29 Å . Como o espectro de energia para o caso anti-alinhado, mostrado na Fig. 41(a), exibe um gap em torno de $E = 0$, poderia-se esperar que introduzindo-se $M \neq 0$ na Eq. (4.5) levaria a um espectro de energia correto. Apesar dos estados de menor energia deste espectro lembrarem qualitativamente aqueles aqueles da Fig. 42(b) para $M = 0.5E_0$, as oscilações AB encontradas pelo modelo simplificado exibem uma diferença de fase π em comparação com os resultados da Fig. 41(a), de forma que o estado fundamental para $\Phi_R = 0$ na Fig. 42(b) (Fig. 41(a)) é duplamente (não-) degenerado.

A vantagem de se ter um modelo simplificado para o anel quântico de grafeno é óbvia: com este modelo, podemos prever o comportamento destes anéis em alguns casos onde uma descrição numérica seria computacionalmente inviável, por exemplo, se considerarmos anéis com raios muito grandes. A Fig. 44 mostra a influência do raio do anel sobre o espectro de energia dado pela Eq. (4.5) para um anel quântico de grafeno no modelo simplificado, considerando-se um termo de massa $M = 50$ meV. Na ausência de campos magnéticos, as energias são dadas por $E = \sqrt{(l+1/2)^2 + M^2}$, de forma que, deixando explícita a unidade de energia E_0, os ramos de energia têm uma dependência $1/R$ e se aproximam de $E \to \pm M$ para raios muito grandes. Para um campo magnético não-nulo $B = 3$ T, os painéis da direita mostram que os ramos têm aproximadamente uma dependência linear no raio do anel para R grande, particularmente temos $E \approx \sqrt{(v_F eBR/2)^2 + (2l+1)\hbar^2 v_F^2 \pi B/\Phi_0 + M^2}$.

Os autoestados do Hamiltoniano simplificado são também autoestados do operador de momento angular total J_z, dado pela soma entre o momento angular orbital L_z e um termo que descreve o pseudo-spin $S_z = (1/2)\sigma_z$, de forma que $J_z = L_z + \hbar S_z$. Os valores esperados destes operadores para o estado fundamental estão mostrados como função do campo magnético na Fig. 45(b) para ambos os vales K (tracejada) e K' (tracejada-pontilhada). Note que para o vale K, $\langle L_z \rangle \approx l\hbar$ e $\langle S_z \rangle \approx \hbar/2$, enquanto no vale K', $\langle L_z \rangle \approx (l+1)\hbar$ e $\langle Sz \rangle \approx -\hbar/2$. Assim, para ambos os vales K e K', o momento

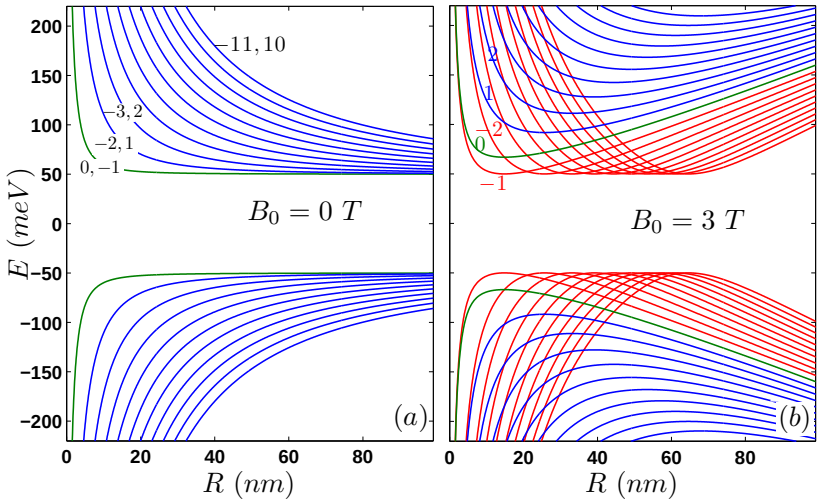

Figura 44: Níveis de energia com l=-10, . . . ,10 de um anel quântico ideal de grafeno como função do raio R do anel, para campos magnéticos (a) B_0=0 T e (b) B_0 = 3 T, considerando-se um termo de massa M =50 meV.

angular total é aproximadamente quantizado como $\langle J_z \rangle \approx (l+1/2)\hbar$ e em média seu valor decresce linearmente com o campo magnético. A densidade de corrente angular para um anel quântico ideal em grafeno pode ser calculada através do valor médio do operador de corrente $\vec{j} = v_F[\Psi^\dagger \vec{\sigma} \Psi]$ na direção angular, o que leva a

$$j = \frac{4v_F\,(m + 1/2 + \Phi/\Phi_0)}{E^2 - M^2}. \tag{4.6}$$

Note que as contribuições dos vales K (ver j_K, na Fig. 46(a)) e K' (ver $j_{K'}$, na Fig. 46(b)) são as mesmas e eles oscilam em fase em torno de zero. A corrente persistente possui uma forma indentada, com um comportamento similar àquele obtido pelas oscilações Aharonov-Bohm comuns em anéis quânticos metálicos ou semicondutores.

Finalmente, discutiremos agora o modelo de Dirac para um anel de grafeno de espessura finita. Neste caso, devemos considerar a condição de contorno apropriada para descrever as bordas zigzag e armchair corretamente. [149] Devido à geometria e às condições de contorno complicadas involvidas no caso de anéis hextagonais zigzag e armchair (ver Figs. 39(a) e (b)), a equação de Dirac para estes casos não permite solução analítica. No caso circular mostrado na Fig. 39(c), apesar da simetria circular fornecer uma maneira fácil de se estudar o problema por uma equação unidimensional (radial), as condições de contorno ainda são muito complicadas para um tratamento analítico deste sistema, já que elas misturam bordas de ambos os tipos, zigzag e armchair. Assim, para comparar os resultados da equação de Dirac com aqueles do modelo TB para sistemas de largura finita, deve-se resolver a equação Dirac para estas estruturas numericamente, o que deixaremos para

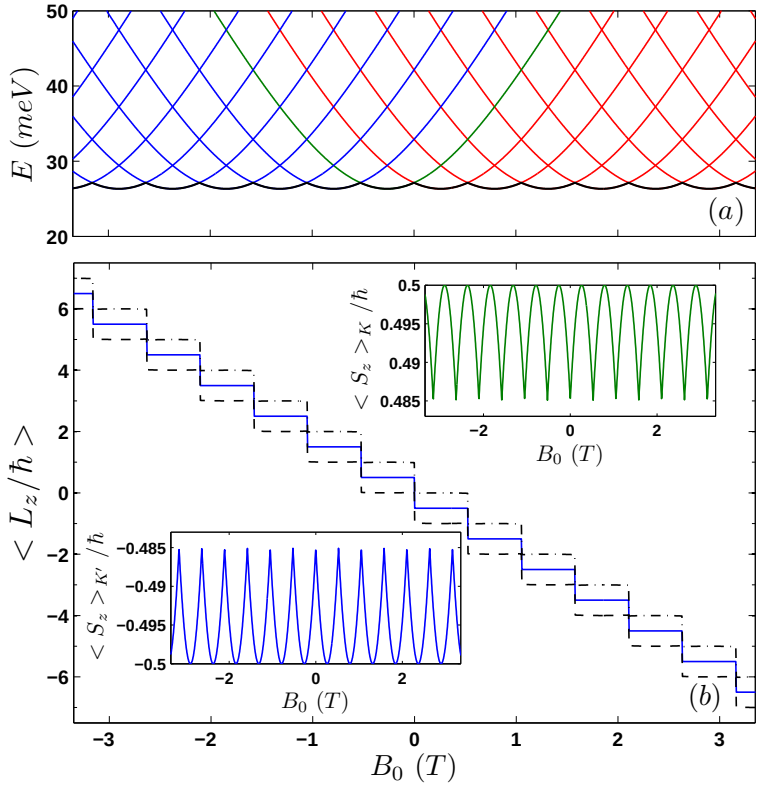

Figura 45: (a) Níveis de energia do anel quântico ideal de grafeno como função do campo magnético externo, considerando-se $M = 2E_0$ e $R = 50$ nm. A curva preta representa o estado fundamental. (b) Valor esperado de $\langle L_z\rangle/\hbar$ para o estado fundamental como função do campo magnético para ambos os vales K (preta, tracejada) e K' (preta, tracejada-pontilhada). Os valores esperados de $\langle S_z\rangle/\hbar$ para o vale K (K') são mostrados na inserção superior (inferior) da figura. A curva azul sólida representa o valor esperado de $\langle J_z\rangle$, que é o mesmo para ambos os vales.

trabalhos futuros. Por outro lado, Recher et al. [54] demonstraram que no caso de um anel circular, quando o confinamento é feito através de um gap aberto nas regiões externas devido a um termo de massa infinita, uma solução analítica é possível. Esta solução foi repetida por artigos subsequentes, [142, 143] onde foi mostrado que a energia do estado fundamental oscila periodicamente com o fluxo magnético e que este estado é degenerado na ausência de campos magnéticos. Como a solução e estes resultados analíticos já foram discutidos anteriormente nas Refs. [54, 142, 143], não iremos repeti-los aqui. Mesmo assim, podemos comentar que as características do espectro de energia mencionadas são de fato observadas na Fig. 42(b) para o modelo TB, apesar do espectro de energia ser ainda um pouco diferente daquele na Fig. 2 da Ref. [54], ou na Fig. 1 das Refs. [142] e [143], provavelmente devido à suavidade e ao valor finito do termo de massa que consideramos em nosso modelo TB, que são tecnicamente necessários, como mencionamos na seção anterior.

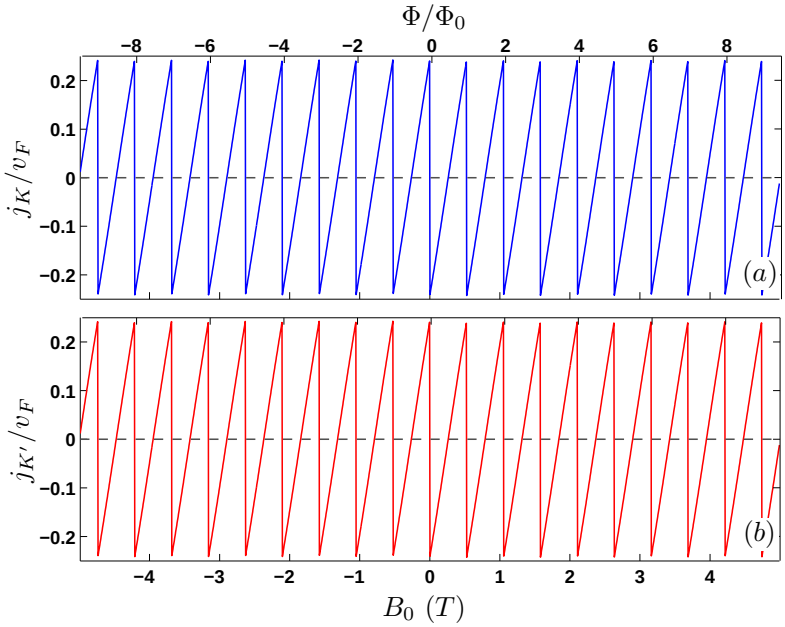

Figura 46: Densidade de corrente angular nos vales (a) K e (b) K' de um anel quântico de grafeno como função do campo magnético para o estado fundamental ilustrado pela curva preta na Fig. 45(a)

4.2 Evolução temporal de pacotes de onda em grafeno

Iremos agora discutir sobre a evolução temporal de pacotes de onda em grafeno. No modelo TB, iremos considerar uma rede de 2000×3601 átomos, com bordas armchair (zigzag) na direção x (y). O parâmetro de hopping e a distância inter-atômica do grafeno são considerados como $\tau = -2.7$ eV e $a = 1.42$ Å, respectivamente. Já no modelo contínuo, utilizaremos o Hamiltoniano H_D dado pela Eq. (1.31), onde $\hbar v_F = 3\tau a/2 = 5,751$ eVÅ.

Como pacote de onda inicial, consideramos uma Gaussiana com centro em $\vec{r_0} = (x_0, y_0)$ no espaço real e $\vec{q} = (q_x^0, q_y^0)$ no espaço recíproco:

$$\Psi_q(\vec{r}) = N \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2d^2} + i\vec{q}\cdot\vec{r}\right], \tag{4.7}$$

onde N é o fator de normalização e d é um parâmetro que controla a largura da Gaussiana. Note que incluímos um pseudo-spinor $[c_1, c_2]^T$ no pacote de onda inicial, onde $c_{1(2)}$ representa a probabilidade de se econtrar o elétron na sub-rede $A(B)$ do grafeno. Podemos também reescrever o pseudo-spinor como $[1, e^{i\theta}]^T$, onde o ângulo de polarização do pseudo-spin θ está mostrado explicitamente. No modelo TB, consideramos o pacote de onda inicial como uma forma discreta da distribuição Gaussiana da Eq. (4.7) para a rede

hexagonal do grafeno, onde multiplicamos a função Gaussiana por $c_{1(2)}$ nos sítios pertencentes à sub-rede triangular $A(B)$. O pseudo-spin é um conceito normalmente atribuido apenas à descreição de Dirac no grafeno. De fato, o pseudo-spin da função de onda no modelo de Dirac está relacionado com o valor esperado das matrizes de Pauli $\langle\sigma_i\rangle$, o que pode envolver integrais do produto entre funções de onda para as sub-redes A e B. Esta definição falha para funções de onda no modelo TB, uma vez que neste caso estas sub-redes definem pontos diferentes do espaço na rede hexagonal, de forma que qualquer integral que misture funções de ambas as sub-redes resulta em zero. Mesmo assim, o estudo do pseudo-spin do modelo de Dirac relativo ao pacote de onda inicial discreto do modelo TB ajuda a entender a dinâmica observada através do último, como veremos a seguir.

4.2.1 Polarização inicial do pseudo-spin e zitterbewegung

Faremos agora uma discussão sobre a evolução temporal de um pacote de onda em um sistema na ausência de campos magnéticos e/ou potenciais externos, isto é, para $V(x,y) \equiv 0$, $\vec{B} = 0$ e $M = 0$. No modelo de Dirac, um estudo parecido com este já foi feito por Maksimova *et al.* [150], onde a evolução temporal de um pacote de onda Gaussiano em uma monocamada de grafeno foi calculada analiticamente através de funções de Green. Os resultados obtidos pelos métodos descrito nesta Tese estão em bom acordo com os encontrados analiticamente. Isto não é grande novidade no caso do modelo de Dirac, pois para $V(x,y) \equiv 0$, $\vec{B} = 0$ e $M = 0$, já demonstramos que a Eq. (2.39) é solução exata para a evolução temporal, tal qual a solução dada na Ref. [150]. A novidade que trazemos nesta seção é a comparação destes resultados com aqueles obtidos pelo modelo TB, onde mostramos as principais diferenças e as condições necessárias para que os modelos possam ser comparados.

As principais características que encontramos na evolução temporal e que podem ser comparadas com as do artigo citado são: i) devido à dispersão, a função de onda inicial, que começa com simetria circular, adquire a forma de um arco com o passar do tempo; ii) um movimento trêmulo (conhecido como *zitterbewegung*, em alemão) da função de onda pode ser observado quando analisamos o valor médio da posição do elétron - este comportamento da função de onda depende fortemente da polarização do pseudospin; iii) a função de onda se separa em dois pacotes que se propagam em direções opostas quando consideramos uma função de onda inicial com pseudo-spin polarizado na direção perpendicular ao plano do grafeno, ou seja, $\langle\sigma_z\rangle = 1$ e $\langle\sigma_y\rangle = \langle\sigma_x\rangle = 0$. Investigaremos

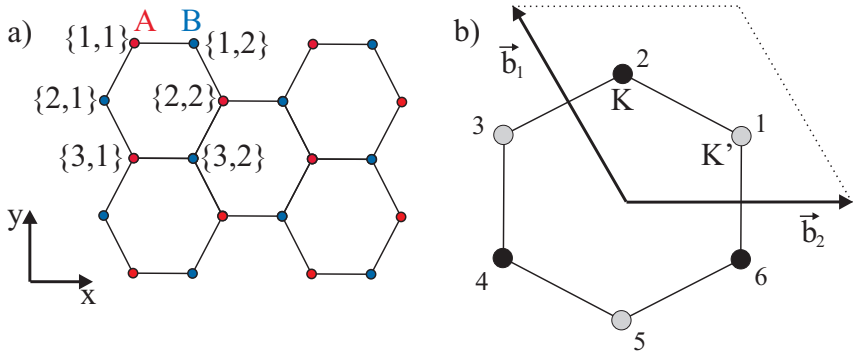

Figura 47: (a) Esboço da rede hexagonal do grafeno, feita de duas redes triangulares superpostas A e B. Os átomos são indexados como $\{n, m\}$ de acordo com seus índices de linha e coluna n e m, respectivamente. (b) Rede recíproca do grafeno, com pontos de Dirac K (preto) e K' (cinza), onde a área definida pelos vetores recíprocos $\vec{b}_1 = (-2\pi/3a_0, \sqrt{3})$ e $\vec{b}_2 = (4\pi/3a_0, 0)$ representa a primeira zona de Brillouin do grafeno. Os índices para cada ponto de Dirac são explicados no texto.

agora situações similares no modelo TB, e mostraremos que resultados análogos podem ser obtidos por este modelo. Antes de mais nada, faremos algumas definições que facilitarão tal comparação: A Fig. 47 mostra (a) como definimos os índices dos sítios atômicos para construir o Hamiltoniano TB na Eq. (2.22) e (b) os seis pontos de Dirac no espaço recíproco, os quais indexamos com números de 1 a 6. Note que para encontrar a equação de Dirac do grafeno no Capítulo 1, tivemos que deslocar a origem do espaço reciproco e descartar a exponencial de uma fase, de forma que esta equação não é feita para as coordenadas verdadeiras (x, y) e (k_x, k_y), mas sim para coordenadas (x, y) e $(\mathsf{k_x}, \mathsf{k_y})$, as quais estão rotacionadas e deslocadas, respectivamente, em relação às coordenadas originais, como demonstraremos em detalhes a seguir.

No modelo TB, temos a liberdade de escolher qualquer vetor de onda para o pacote de onda inicial. Apesar disso, a partir da Eq. (1.26) e da Fig. 6, fica claro que a região de interesse é a vizinhança dos pontos de Dirac K e K', uma vez que a energia correspondente aos vetores de onda fora desta região é muito alta. Geralmente, no modelo TB para cristais bidimensionais, considera-se a mesma distribuição Gaussiana para todos os sítios da rede. [151] Isto equivale a escolhermos $c_1 = c_2 = 1$ na Eq. (4.7). Figure 48(a) mostra as curvas de nível do módulo quadrado da função de onda propagada a $t = 40$ fs para estes valores de c_i, considerando um vetor de onda inicial $\vec{q} = (0, k_y^0) + K$, isto é, na vizinhança do ponto K assinalado como 2 na Fig. 47(b). Como mostrado na Ref. [150], a dinâmica dos pacotes de onda em torno dos cones de Dirac no grafeno não depende separadamente do momento k_y^0 ou da espessura d, mas da grandeza adimensional $k_y^0 d$. Este resultado foi obtido através do modelo de Dirac, isto é, considerando-se que

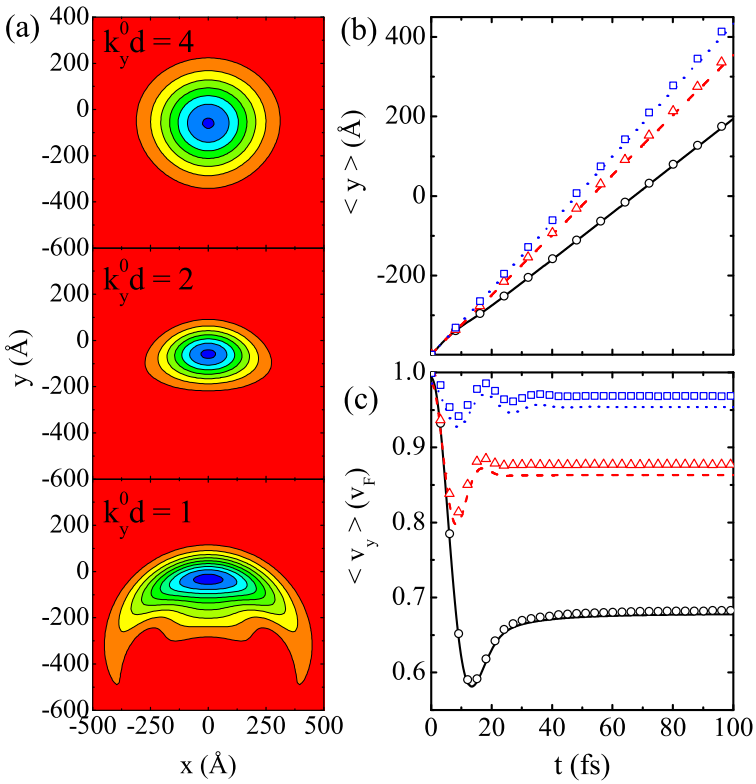

Figura 48: (a) Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda após uma evolução temporal de $t = 40$ fs, para três valores diferentes do parâmetro adimensional $k_y^0 d$. (b) Valor experado da posição e (c) velocidade na direção y como função do tempo. Os resultados obtidos através do modelo TB (de Dirac) são apresentados como curvas (símbolos), para $k_y^0 d = 1$ (sólida, círculos), 2 (tracejada, triângulos) e 4 (pontilhada, quadrados)

até mesmo estados de energia mais alta exibem dispersão linear. Dentro do modelo TB espera-se que pacotes de onda com o mesmo $k_y^0 d$ comportem-se de forma parecida apenas se k_y^0 não estiver muito longe do cone de Dirac e se d não for muito pequeno, de forma que o pacote esteja bastante localizado no espaço das energias. Dentro destas condições, Fig. 48 ilustra a evolução temporal para diferentes valores desta grandeza adimensional: $k_y^0 d = 1$ e 2, com $d = 100$ Å , e $k_y^0 d = 4$, com $d = 200$ Å . Observamos que a dispersão do pacote de onda é mais intensa para valores menores de $k_y^0 d$, onde ele se distorce em forma de arco com o passar do tempo. A distorção do pacote de onda na Fig. 48(a) é claramente o efeito citado como (i) no parágrafo anterior. Para maiores $k_y^0 d$, por outro lado, o pacote de onda mantém uma forma praticamente circular durante um tempo bem maior.

Como relembramos há pouco, para se obter o Hamiltoniano de Dirac Eq. (1.31), deslocamos a origem do vetor de onda $\vec{k}$ para um dos seis pontos de Dirac mostrados na

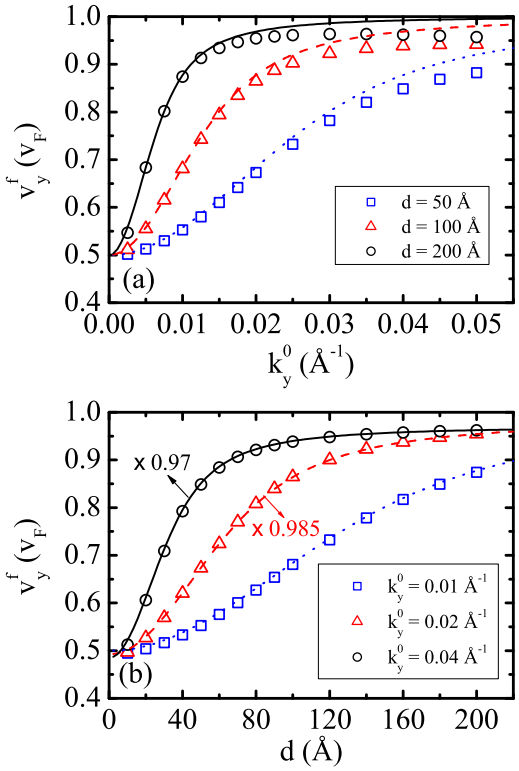

Figura 49: Velocidades finais para os pacotes de onda Gaussianos da Eq. (4.7), com pseudo-spin $c_1 = c_2 = 1$ e momento $\vec{q} = (0, k_y^0) + K$ como função (a) do momento relativo k_y^0, para espessuras $d = 50$ Å, 100 Å e 200 Å, e (b) da espessura d, para momenta $k_y^0 = 0.01$ Å^{-1}, 0.02 Å^{-1} e 0.04 Å^{-1}. Os símbolos (curvas) são obtidos pelo modelo TB (de Dirac). Em (b), os resultados do modelo de Dirac para $k_y^0 = 0.02$ Å^{-1} (tracejada) e 0.04 Å^{-1} (sólida) estão multiplicados por 0.985 e 0.97, respectivamente.

Fig. **??**(b). Além disso, a exponencial complexa na Eq. (1.28) de $\phi = -5\pi/6$ (-$\pi/6$) no ponto K (K') indexado como 1 (6) pode ser facilmente interpretada como um operador de rotação por um ângulo ϕ, seguindo as definições de operadores e "geradores"no Capítulo 2. Em outras palavras, devemos também rotacionar os eixos x e y por um ângulo ϕ que depende de qual ponto K ou K' foi considerado como origem no espaço dos momenta. Na vizinhança do l-ésimo ponto de Dirac, obtém-se $\phi = -\pi/6 + l\pi/3$, com $l = 1 - 6$. Por exemplo, para o ponto $K = (0, 4\pi/3\sqrt{3}a_0)$, indexado como 2 na Fig. 47(b), o Hamiltoniano de Dirac na Eq. (1.31) é obtido rotacionando-se os eixos por 90°, ou seja, transformando-se as coordenadas como $x \to -\mathsf{y}$ e $y \to \mathsf{x}$. O pseudo-spinor $c_1 = c_2 = 1$ representa uma função de onda polarizada na direção x, isto é $\langle\sigma_x\rangle > 0$ e $\langle\sigma_z\rangle = \langle\sigma_y\rangle = 0$. Da representação de Heisenberg, obtemos a velocidade na direção x para o pacote de onda proposto como sendo

$$\frac{d\mathsf{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathsf{x}, H_D] = v_F\sigma_x. \tag{4.8}$$

Realizando as transformações de coordenadas apropriadas, a velocidade obtida pelo modelo TB para a direção y deve ser consistente com a previsão da aproximação de Dirac, leia-se, $v_y = d\mathsf{x}/dt = v_F\sigma_x$. Isto sugere que um pacote de onda como este deve se propagar no sentido positivo da direção y, mas com velocidade não-constante, uma vez que as matrizes de Pauli não comutam entre si, o que leva a $[\sigma_x, H_D] \neq 0$. O valor esperado $\langle y\rangle$ da posição em y do pacote é mostrado como função do tempo pelas curvas na Fig. 48(b), para $k_y^0 d = 1$ (sólida), 2 (tracejada) e 4 (pontilhada), onde os resultados obtidos pela equação de Dirac são apresentados como símbolos, para comparação. Um comportamento linear diferente já pode ser observado para cada pacote de onda em tempos maiores, o que implica que eles têm velocidades diferentes, algo que é de certa forma contra-intuitivo, já que elétrons de baixa energia no grafeno deveriam se propagar sempre com a mesma velocidade de Fermi v_F. A Fig. 48(c) mostra a velocidade v_y, calculada através da derivada temporal dos resultados TB para $\langle y\rangle$, a qual exibe claras oscilações que se amortecem ao passar do tempo, convergindo para um valor final $v_y^f < v_F$ que depende da espessura d e do vetor de onda k_y^0 iniciais do pacote de onda. As velocidades obtidas pelo modelo de Dirac são mostradas como símbolos, onde o mesmo comportamento qualitativo é observado comparando-se com o modelo TB, apesar de que para maiores valores de momento e espessura, uma pequena diferença quantitativa é observada, como consequência da dispersão energia-momento diferente para energias mais altas no espectro.

O comportamento oscilatório da velocidade é uma manifestação do zitterbewegung, ou seja, do movimento trêmulo do pacote de onda devido à interferência entre estados de energia positiva e negativa que compõem o pacote de onda inicial. [60, 55] Este é o efeito citado como (ii) no início desta sub-seção. Ele já é bem conhecido para partículas relativísticas, que são descritas pela equação de Dirac, e é também esperado para elétrons em grafeno na vizinhança dos pontos K e K', uma vez que eles podem ser descritos como quasi-partículas que obedecem a equação de Dirac da mesma forma. A velocidade oscila com período mais curto e menor amplitude para valores maiores de $k_y^0 d$. A convergência das velocidades demonstra que o zitterbewegung não é um efeito permanente, mas transiente. [60]

A Fig. 49 mostra a velocidade final após a convergência v_y^f como função (a) do momento k_y^0 e (b) da espessura d do pacote de onda Gaussiano. Os resultados TB (símbolos) são comparáveis àqueles calculados pela Eq. (31) na Ref. [150] (curvas), a qual foi obtida analiticamente a partir da aproximação de Dirca no limite $t \to \infty$ e é repedida aqui

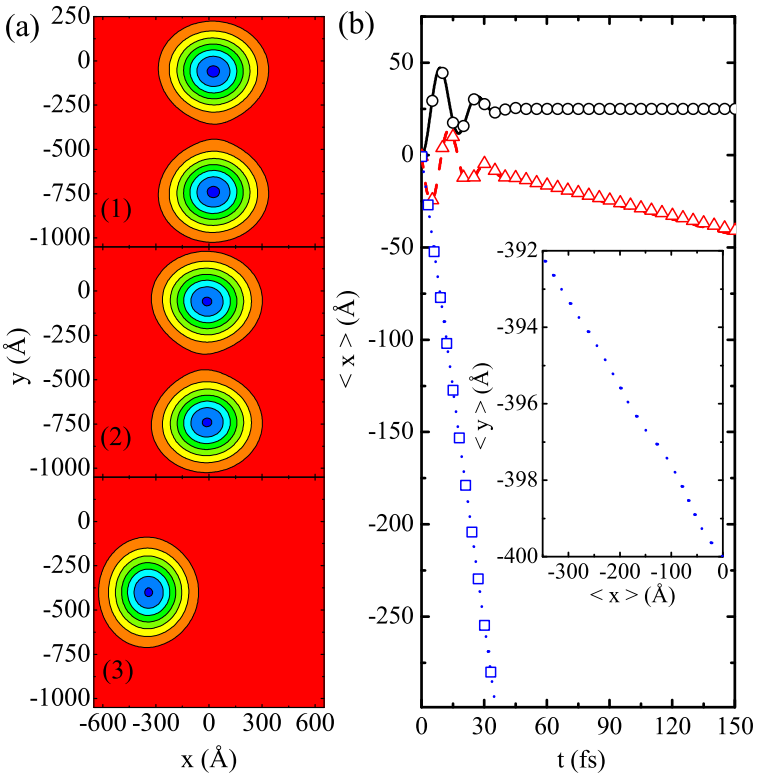

Figura 50: (a) Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda após uma evolução temporal de $t = 40$ fs, para três configurações iniciais de pseudo-spin $[c_1, c_2]^T$ e momento $\vec{q}_0$: 1) $[1, 0]^T$, $k_x^0 = 0$ e $k_y^0 d = 4$; 2) $[1, i]^T$, $k_x^0 = 0$ e $k_y^0 d = 4$; e 3) $[1, i]^T$, $k_x^0 d = 4$, $k_y^0 = 0$. (b) Valor esperado de x obtido pelo modelo TB para os pacotes de onda iniciais 1 (sólida), 2 (tracejada) e 3 (pontilhada) como função do tempo. Os resultados obtidos pelo modelo de Dirac, após a rotação de coordenadas apropriada (ver texto), são mostrados como círculos, triângulos e quadrados, respectivamente. A inserção mostra a trajetória do pacote de onda obtida pelo modelo TB para o pacote de onda inicial 3.

somente por completeza:

$$\frac{v_y^f}{v_F} = 1 - \frac{1 - e^{-(k_y^0 d)^2}}{2(k_y^0 d)^2}. \tag{4.9}$$

Dentro do modelo de Dirac, observa-se que aumentando d ou k_y^0 na Eq. (4.9), a velocidade final cresce monotonicamente e se aproxima de v_F, o que é razoável, já que um pacote mais largo no espaço real leva a uma distribuição mais estreita no espaço dos k, enquanto um valor mais alto do vetor de onda faz o centro do pacote de onda ficar mais longe de $E = 0$. Em ambos os casos, a interferência com estados de energia negativa é reduzida e, consequentemente, efeitos de zitterbewegung tornam-se menos significantes. Porém, como a fórmula analítica da Eq. (4.9) não leva em conta qualquer efeito como a curvatura das bandas de energia para estados de maior energia ou a deformação trigonal, esta fórmula

não deve gerar resultados precisos para maiores valores de k_y^0. De fato, Fig. 49(a) mostra que uma concordância muito boa entre resultados do TB e da equação de Dirac podem ser observados apenas para valores pequenos de k_y^0, enquanto para k_y^0 maior, as velocidades finais obtidas pelo modelo TB são menores que aquelas obtidas pelo modelo de Dirac e não crescem monotonicamente, mas decrescem vagarosamente para k_y^0 bastante alto, como consequência da curvatura das bandas de energia. Por outro lado, na Fig. 49(b) observamos que variando a espessura do pacote de onda para um momento fixo, um bom acordo *qualitativo* com o modelo de Dirac é obtido para quase qualquer valor de d. As curvas para maiores valores de k_y^0 (sólida e tracejada) são apenas *quantitativamente* diferentes daquelas obtidas pelo modelo TB, e elas são comparáveis aos resultados TB após a multiplicação por um fator 0.985 (0.970) para $k_y^0 = 0.02$ Å^{-1} (0.04 Å^{-1}). Um acordo qualitativo pior entre os resultados TB e de Dirac neste caso é observado apenas para d muito pequeno, onde a largura da Gaussian no espaço das energias, dada por $\Delta E = v_F \hbar d^{-1}$, incorpora altos valores de energia, levando aos desvios em v_y^f obtidos pelo modelo TB quando comparado àqueles do modelo de Dirac.

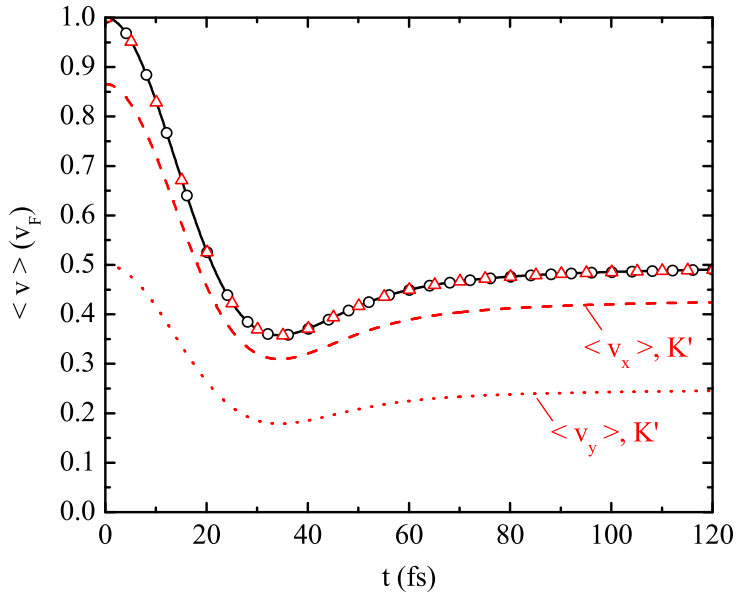

Figura 51: (a) Valor esperado da velocidade como função do tempo, para pacotes de onda com $k_y^0 = k_x^0 = 0$ e pseudo-spinor $[1, 1]^T$ (sólida) e $[1, i]^T$ (círculos) no ponto de Dirac $K = (0, 4\pi/3\sqrt{3}a_0)$ (ponto 2 na Fig. 47(b)), e $[1, 1]^T$ (triângulos) em $K' = (2\pi/3a_0, 2\pi/3\sqrt{3}a_0)$ (ponto 1 na Fig. 47(b)). As componentes x e y da velocidade no último caso são mostradas pelas curvas tracejada e pontilhada, respectivamente.

Na Fig. 50(a) nós mostramos as curvas de nível do módulo quadrado da função de

onda em $t = 40$ fs para três escolhas diferentes de vetor de onda $\vec{q} = (k_x^0, k_y^0) + K$ e pseudo-spinores iniciais: 1) $[1, 0]^T$, com $k_x^0 = 0$ e $k_y^0 d = 4$, 2) $[1, i]^T$, com $k_x^0 = 0$ e $k_y^0 d = 4$, e 3) $[1, i]^T$, com $k_x^0 d = 4$ e $k_y^0 = 0$. As curvas (símbolos) na Fig. 50(b) mostram o valor esperado $\langle x \rangle$ para cada caso, obtido pelo modelo TB (de Dirac). No caso 1 (sólida, círculos), o pseudo-spinor aponta para a direção z, de forma que $\langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle$ e, consequentemente, a velocidade para ambas as direções do plano deve ser zero. De fato, o pacote de onda se separa em duas partes iguais e se propaga em direções y opostas, levando a $v_y = 0$. Na direção x, apesar de haver ainda um pequeno zitterbewegung, $\langle x \rangle$ rapidamente converge para uma constante, levando a $v_x = 0$. Este é exatamente o comportamento observado pela equação de Dirac e citado como (iii) no início desta subseção. No caso 2 (tracejada, triângulos), o pseudo-spinor aponta para a direção y, mas o momento do pacote de onda nesta direção é zero, de forma que o pacote de onda se separa em dois na direção y, pois $v_y = v_F \sigma_x = 0$, mas arrasta-se vagarosamente na direção $-x$ (ou, equivalentemente, y). No caso 3 (pontilhada, quadrados), ambos o pseudo-spin e o momento estão na direção y, de forma que o pacote de onda se propaga nesta direção sem se separar. Esta situação é comparável à da Fig. 48(a), já que em ambos os casos o pseudo-spin e o momento estão na mesma direção e, como consequência, o pacote de onda se propaga nesta direção praticamente preservando sua simetria circular. Porém, no caso 3, o pacote de onda ainda apresenta uma oscilação bem pequena na direção y, e também se arrasta muito vagarosamente nesta direção, como podemos ver pela trajetória do pacote de onda no plano $x-y$ para este caso, mostrada na inserção da Fig. 50(b). Esta oscilação e arraste estão relacionados com as contribuições de estados de maior energia no pacote de onda: um pacote de onda centralizado em $k_x^{(0)} = 0$ e $k_y^{(0)} \neq 0$, como na Fig. 48(a), tem uma distribuição simétrica de momento na direção x mesmo para altas energias e, consequentemente, não há nenhuma oscilação adicional nesta direção. Por outro lado, um pacote com centro em $k_x^{(0)} \neq 0$ e $k_y^{(0)} = 0$, como na Fig. 50(b), não possui distribuição simétrica de momento na direção y devido à deformação trigonal para altas energias e, consequentemente, algumas oscilações são observadas nesta direção. Como o Hamiltoniano de Dirac padrão H_D para grafeno não leva em conta a deformação trigonal, este efeito não é observado no modelo de Dirac.

Tanto no trabalho numérico de Thaller, [55] como no analítico de Maksimova, [150] foi demonstrado que no modelo de Dirac, mesmo quando $k_y^0 = k_x^0 = 0$, um movimento do pacote de onda ainda é observado devido a efeitos de zitterbewegung. As velocidades do pacote de onda obtidas por nosso modelo TB de grafeno para um momento exatamente nos pontos K' e K, isto é, os pontos 1 e 2 na Fig. 47(a), respectivamente, são mostrados

na Fig. 51. As velocidades exibem uma oscilação amortecida com o mesmo módulo dependente do tempo para qualquer pseudo-spin e ponto de Dirac, apesar delas apontarem em direções diferentes: para $[1,1]^T$ (sólida) e $[1,i]^T$ (círculos) em K, a velocidade aponta para as direções y e $-x$ da rede, respectivamente, as quais são exatamente as direções de polarização destes pseudo-spinores após a rotação $\phi = \pi/2$ requerida pelo cone K 2. No cone K' 1, o ângulo de rotação é $\phi = \pi/6$ e, de acordo com isso, a velocidade aponta nesta direção, como podemos ver pela decomposição da velocidade em suas componentes $\langle v_x \rangle$ (tracejada) e $\langle v_y \rangle$ (pontilhada), que obedecem exatamente as relações $\langle v_x \rangle = (\sqrt{3}/2)\langle v \rangle$ e $\langle v_y \rangle = (1/2)\langle v \rangle$. Note que as velocidades convergem exatamente para $v_F/2$, um valor que pode também ser obtido analiticamente fazendo-se $k_y^0 d \to 0$ na Eq. (4.9).

Apesar de já termos expandido um pouco mais os estudos de Maksimova *et al.* [150] em um sistema na ausência de massa, campos ou potenciais externos, tudo que fizemos com a equação de Dirac nesta sub-seção poderia ser feito também através da solução analítica proposta por eles. A vantagem de se trabalhar com o método *split-operator* com spins em problemas de grafeno aparece quando pretendemos estudar sistemas na presença, por exemplo, de um termo de massa e de potenciais externos. Nestes dois casos, as soluções analíticas apresentadas por Maksimova *et al.* não são mais válidas, e torna-se necessária então uma abordagem numérica. Nas proximas duas sub-seções, utilizaremos então a técnica que desenvolvemos nesta tese para estudar monocamadas de grafeno na presença de termos de massa e de potenciais externos, respectivamente, dentro da aproximação de Dirac. Como trataremos apenas da aproximação de Dirac, quando falarmos da energia E do pacote de onda, subentende-se que na função de onda inicial da Eq. (4.7) teremos um momento $q = \mathsf{k} = E/(\hbar v_F)$, que vem da forma aproximada do espectro de energia do grafeno para $\vec{q}_0$ próximo de K ou K'.

4.2.2 Efeito da massa sobre o zitterbewegung

Como temos discutido no decorrer desta tese, a presença de um termo de massa, o qual pode ser obtido experimentalmente como consequência dos efeitos de um substrato sobre o grafeno, é responsável pela abertura de um gap na estrutura de bandas. A abertura do gap e a possibilidade de se confinar elétrons em grafeno manipulando-se o substrato fez com que este efeito fosse bastante estudado recentemente. Por outro lado, existe uma outra consequência deste termo de massa, à qual não tem-se dado a devida importância: um termo como este entra no Hamiltoniano de Dirac como $M\sigma_z$, ou seja, ele adiciona uma matriz de Pauli ao Hamiltoniano. Como demonstramos na

sub-seção anterior, o zitterbewegung é consequência direta da não-comutatividade entre o Hamiltoniano e as matrizes de Pauli, de forma que a velocidade na direção y, dada por $v_y = i/\hbar[y, H_D] = v_F\sigma_y$ oscila no tempo devido a $[\sigma_y, H_D] \neq 0$. Como há um termo σ_z a mais no Hamiltoniano, espera-se que v_y agora oscile de forma diferente, uma vez que $[\sigma_y, \sigma_z] \neq 0$. Isto é de fato observado na Fig. 52, que mostra o valor esperado da velocidade v_y para um pacote com energia $E = 100$ meV e largura $d = 200$ Å no modelo de Dirac, na presença de um termo de massa $M(x, y) \equiv M_0$. Como podemos verificar no exemplo para $M_0 = 0$ mostrado na inserção, a velocidade v_y/v_F (curva) é realmente idêntica ao valor esperado de σ_y (símbolos). Ao aumentarmos o valor de M_0, tornamos o termo em σ_z do Hamiltoniano de Dirac mais significativo, de forma que a amplitude das oscilações em σ_y e, consequentemente, na velocidade v_y, torna-se maior. Com isso, demonstramos que o substrato no grafeno pode ser utilizado não só para abrir um gap na estrutura de bandas, mas também como uma ferramenta para intensificar o zitterbewegung, facilitando sua visualização experimental.

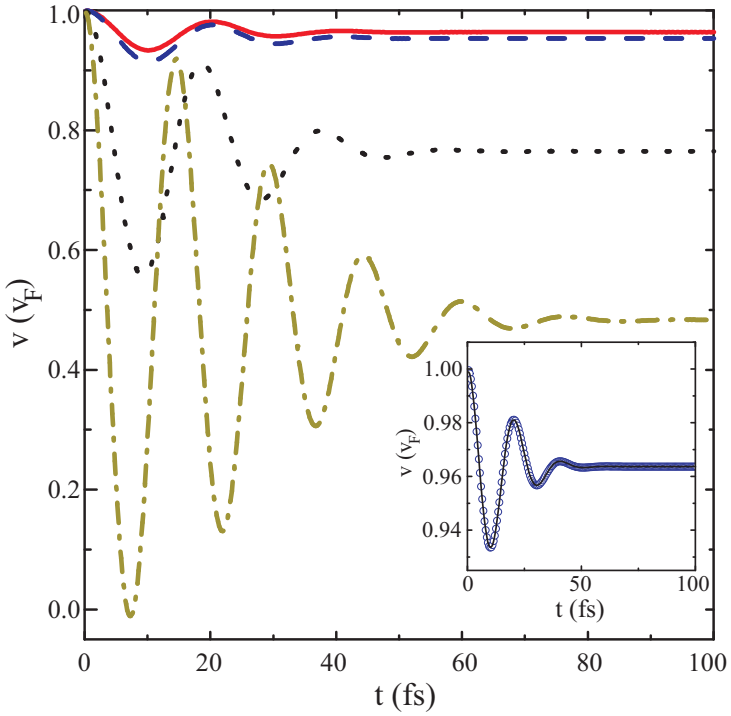

Figura 52: Valor esperado da velocidade na direção y como função do tempo, para diferentes valores do potencial relacionado à massa $M_0 = 0$ (sólida), 10 (tracejada), 50 (pontilhada) e 100 meV (tracejada-pontilhada). O pacote de onda inicial tem energia média $E = 100$ meV e largura $d = 200$ Å. A inserção mostra as velocidades obtidas por $\frac{d\langle y\rangle}{dt}$ (curva) e $\langle\sigma_y\rangle$ (símbolos) para o caso $M_0 = 0$.

Isso nos traz à discussão sobre a possibilidade de se usar uma barreira de massa para simular as bordas de uma folha de grafeno. Na Ref. [53], por exemplo, considerou-se

uma barreira de massa de forma circular para a simulação de um ponto quântico de grafeno, onde conseguiu-se descrever qualitativamente alguns resultados experimentais. Com efeito, o elétron não deve poder atravessar a borda da folha de grafeno e, por isso, podemos pensar a borda do sistema como uma região de gap infinito. Dessa forma, poderíamos ingenuamente pensar que simplesmente considerando-se uma região de massa infinita, a qual gera um gap infinito, podemos descrever fielmente o espalhamento de um pacote de onda que atinge a borda de uma folha de grafeno. Isto porém é errado, pois o termo de massa não só abre o gap como também influi no zitterbewegung, como acabamos de demonstrar. Consideremos como exemplo o espalhamento de um pacote

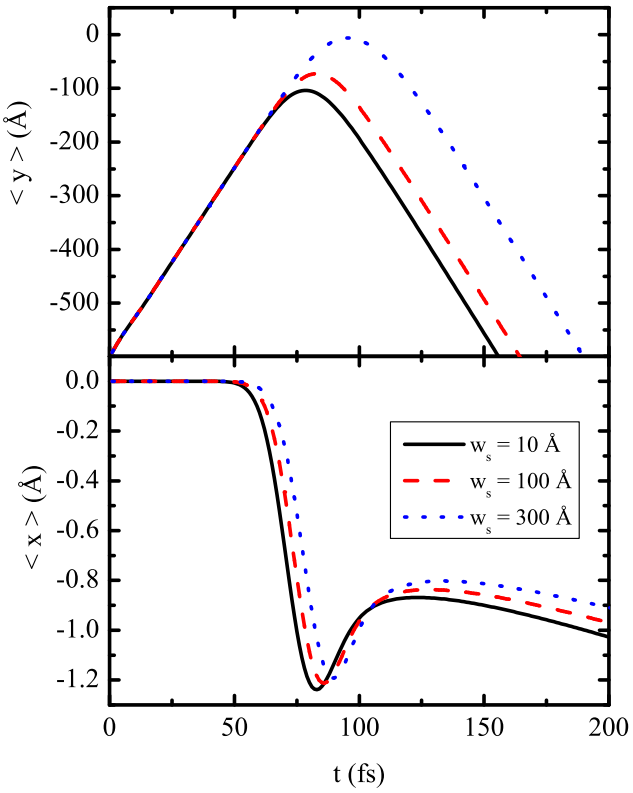

Figura 53: Valor esperado da posição em x e y como função do tempo para um pacote de onda com energia $E = 100$ meV e largura $d = 100$ Å sendo espalhado por uma barreira de massa cujo gap resultante é $M_0 = 300$ meV. A barreira é suave, possuindo uma interface linear de largura w_s.

de onda $E = 100$ meV e $d = 100$ Å por uma barreira de massa na direção y, a qual assumimos ser suave, de forma que o potencial cresce linearmente de $M = 0$ a $M = 300$ meV num intervalo $0 < y < w_s$. Escolhemos a altura da barreira de massa baseando-nos no gap encontrado para o grafeno experimentalmente devido a um substrato de SiC. [45] A Fig. 53 mostra os valores esperados $\langle y \rangle$ e $\langle x \rangle$ deste pacote como função do tempo para

vários valores da largura w_s da interface. A posição y do pacote passa a diminuir após o pacote de onda ser refletido pela barreira, devido ao gap aberto pela massa. Obviamente, para interfaces maiores, o pacote penetra mais na região da barreira ($y > 0$) e demora mais para ser refletido. O pacote de onda estudado não deve apresentar *nenhuma* oscilação na direção x devido ao zitterbewegung, pois escolhemos o momento e a polarização do pseudo-spin na direção y. De fato, de início, $\langle x \rangle$ permanece próximo de zero. Porém, quando o pacote de onda atinge a região $M \neq 0$, isto é, quando o pacote começa a ser refletido, a posição em x do pacote passa a variar devido ao zitterbewegung, induzido pelo termo adicional $M\sigma_z$ do Hamiltoniano nesta região. Quanto mais suave a barreira, menos significante é esta oscilação em x, mas ela permanece bastante visível até mesmo para $w_s = 300$ Å. O mais curioso é o fato de que após a reflexão e a saída do pacote de onda da região de massa não-nula, ele continua se propagando na direção x, o que não deveria ocorrer se não houvesse tal barreira. Isso nos dá mais uma sugestão para detecção experimental (indireta) do zitterbewegung: um pacote que inicialmente deveria se propagar sempre no eixo $x = 0$ pode ser visto se propagando fora deste eixo após uma reflexão devido a uma barreira de massa, somente devido ao zitterbewegung.

4.2.3 Tunelamento de Klein

Consideremos primeiramente um degrau de potencial de altura V_0, definido por $V = V_0\Theta(\mathsf{y})$, onde $\Theta(\mathsf{y})$ é a função degrau de Heaviside. Classicamente, sabe-se que quando uma partícula incide sobre uma barreira de potencial mais alta que sua energia, ela é refletida, enquanto para um potencial menor que sua energia, ela é transmitida sobre a barreira. Por outro lado, no caso quântico, para partículas descritas pela equação de Schrödinger, em ambos os casos a partícula pode ter uma probabilidade não nula de ser refletida ou transmitida. Já no caso do grafeno, onde as quasi-partículas obedecem à equação de Dirac, ocorre algo ainda mais curioso: para uma incidência perfeitamente normal a uma barreira de potencial (isto é, $\mathsf{k_x} = 0$ e $\mathsf{k_y} > 0$), um elétron é sempre transmitido com probabilidade 1, não importando se sua energia está acima ou abaixo da altura da barreira. Isso ocorre porque, mesmo que a energia do elétron incidente seja menor que a altura da barreira, ele pode ocupar um estado de buraco na região da barreira e, assim, tunelar por ela, como ilustrado na Fig. 54. A este fenômeno, dá-se o nome de tunelamento de Klein. No nosso caso, uma vez que estamos tratando de um pacote de onda, existe uma espessura $\Delta\mathsf{k_x}$, inversamente proporcional a $\Delta\mathsf{x}$. Assim, não devemos esperar que uma transmissão perfeita ocorra no nosso caso, já que não estamos tratando de uma incidência perfeitamente normal. Porém, os resultados da Fig. 55 mostram que

uma alta probabilidade de transmissão pode ser observada, se a energia do pacote de onda inicial está longe da altura V_0 da barreira. A Fig. 55 mostra as probabilidades de encontrarmos um elétron fora (P_1) e dentro (P_2) da região da barreira de potencial, para $V_0 = 0$ (a), 110 meV (b) e 250 meV (c). Os parâmetros que definem o pacote de onda são $E = 100$ meV e $d = 150$ Å (sólida) e 250 Å (pontilhada). Para V_0 próximo de E, a probabilidade de transmissão diminui. Este efeito é reduzido quando consideramos um d maior, isto é, um Δx mais largo, o que leva a um Δk_x mais estreito e, consequentemente, uma incidência mais próxima da normal. Já para $V_0 = 250$ meV, a probabilidade de transmissão é aproximadamente 1, e podemos observar o tunelamento de Klein em sua plenitude.

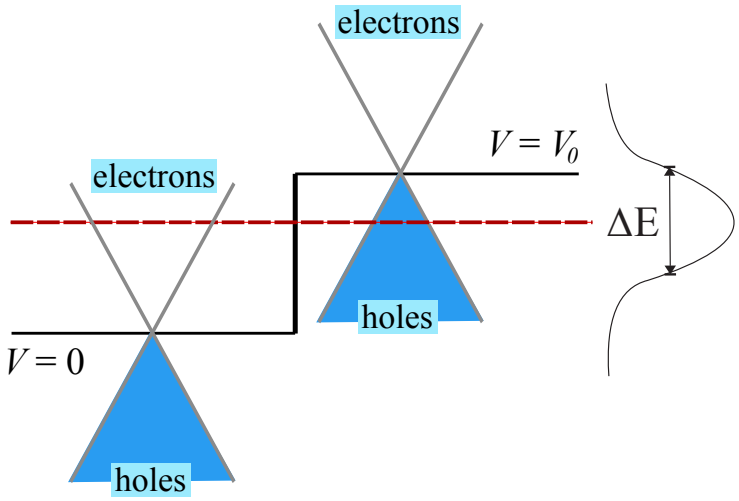

Figura 54: Esquema que ilustra o tunelamento de Klein: um elétron em um cone de Dirac, delimitado pelas linhas cinzentas, com energia E (linha vermelha tracejada) menor que a altura do degrau de potencial V_0 (linha preta), pode se propagar na região do degrau como um buraco, se sua incidência for normal ao degrau. A curva à direita do gráfico representa a distribuição de energia do pacote de onda Gaussiano considerado neste trabalho, com largura $\Delta E = \hbar v_F \Delta k$.

Na Fig 56, que mostra P_2 como função do tempo para vários valores de V_0, podemos verificar que apenas para $V_0 \simeq E$ esta probabilidade é reduzida. A explicação para isto vem do estudo do tunelamento de Klein para incidência não-normal: a probabilidade de transmissão decai à medida que o ângulo de incidência aumenta. Porém, este decaimento é bem mais rápido para E próximo de V_0, [5, 10, 152] de forma que na vizinhança de $E = V_0$, somente uma incidência muito próxima da normal pode levar à probabilidade de transmissão ≈1. Assim, quando nosso pacote de onda incide na barreira com E longe de V_0, a distribuição de momento em x não tem um papel tão importante, enquanto para $E = V_0$, esta distribuição causa uma grande redução na transmissão, pois neste caso a transmissão se deve praticamente só devido à parte da função de onda que incide

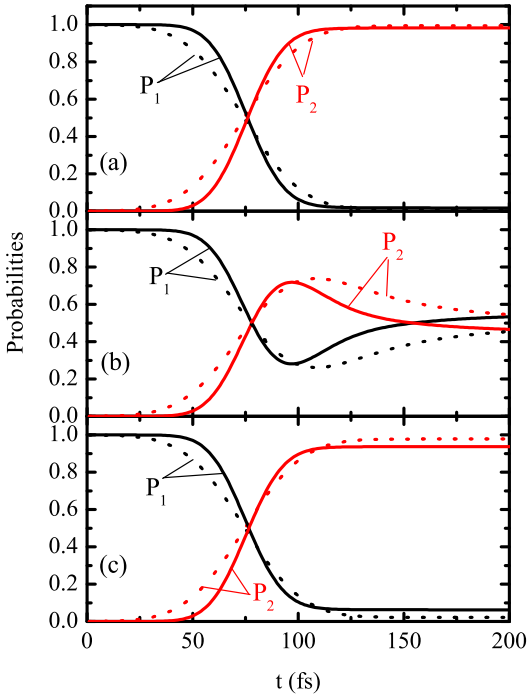

Figura 55: Probabilidades de encontrar o elétron nas regiões 1 (P_1, preto) e 2 (P_2, vermelho), como função do tempo, para $V = 0$ (a), 110 meV (b) e 250 meV (c). Dois valores são considerados para a largura do pacote de onda: $d = 150$ Å (sólida) e 250 Å (pontilhada)

normalmente na barreira. Fazendo uma comparação entre os resultados para $d = 150$ Å (a) e $d = 250$ Å (b), observamos que a probabilidade de tunelamento P_2 é reduzida para uma janela maior de potenciais no primeiro caso, o que está de acordo com a idéia de que esta redução deve-se à distribuição de momenta em x, já que tal distribuição é maior para d menor.

As curvas de nível da função de onda refletida pelo degrau de altura $V_0 = 110$ meV na Fig. 57 ajudam a ilustrar o que acabamos de explicar: note que o pacote de onda refletido em $t = 180$ fs possui uma linha de zeros em $\mathsf{x} = 0$, o que condiz com a idéia de que toda a parte do pacote de onda que incide normalmente à barreira é transmitida, refletindo-se apenas a parte com $\mathsf{k_x} \neq 0$, que se propaga em direção às diagonais do plano.

Note que a forma na qual estamos estudando o tunelamento de Klein é diferente da visão comumente utilizada na literatura, [10] pois não estamos tratando de uma só partícula com um único momento definido, e sim de um pacote de onda com uma distribuição de momento. De fato, já demonstramos que as visões diferem um pouco nos resultados quando frisamos que o tunelamento de Klein nem sempre é observado em sua

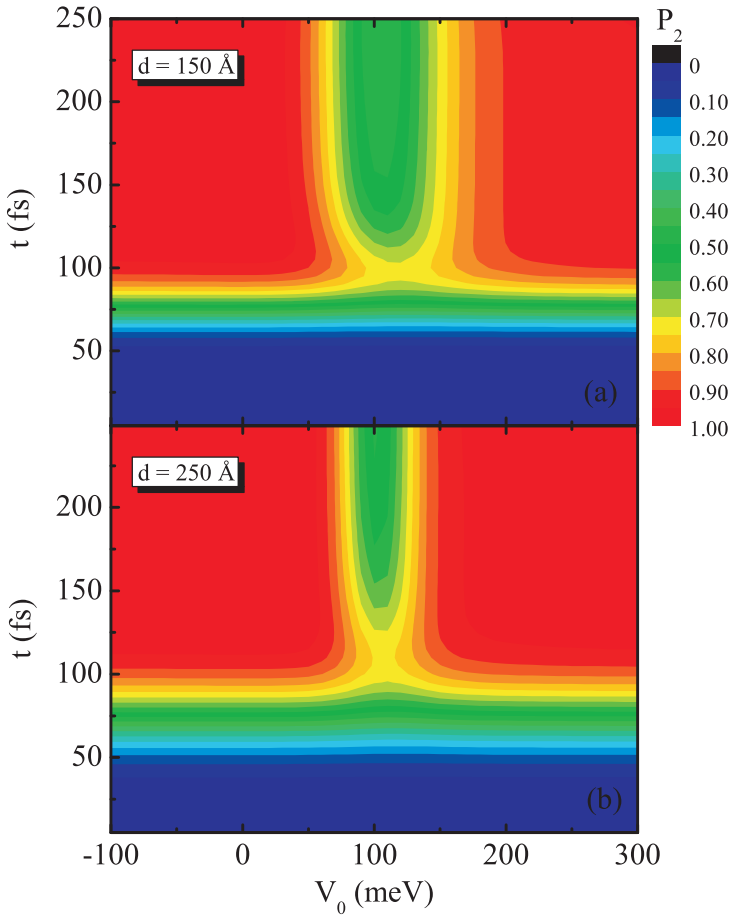

Figura 56: Probabilidade de encontrar o elétron após a região da barreira (P_2) como função do tempo e do potencial V_0, para $E = 100$ meV e $d = 150$ Å (a) e 250 Å (b).

plenitude se considerarmos um pacote de onda. Porém há ainda algo mais interessante a ser observado: se temos um pacote de onda que se propaga na barreira, parte dele tem projeção sobre o espectro dos buracos e, a outra parte, sobre o espectro dos elétrons (ver Fig. 54). Sendo assim, este pacote de onda transmitido é construído por uma combinação de autoestados com momenta positivo e negativo, e é fácil notar que uma soma de duas ondas planas, uma com momento positivo e outra com negativo, gera uma função oscilatória na posição, como um seno ou um cosseno. Assim, a própria função de onda deve exibir oscilações com a posição, como consequência desta combinação. Isto tem fortes semelhanças com o zitterbewegung, pois também se trata de uma oscilação da função de onda proveniente da combinação de estados de elétrons e buracos. Em outras palavras, isto é o zitterbewegung induzido por um potencial externo. Este efeito é de fato observado nas funções de onda tuneladas: a Fig. 58 mostra, como curvas de nível, a seção transversal do módulo quadrado (em cima) e da parte real (em baixo) da função de onda em $\mathsf{x} = 0$ como função do tempo, para um pacote de onda com $E = 100$ meV e $d = 200$ Å que incide normalmente sobre um degrau de potencial como definido anteriormente, para

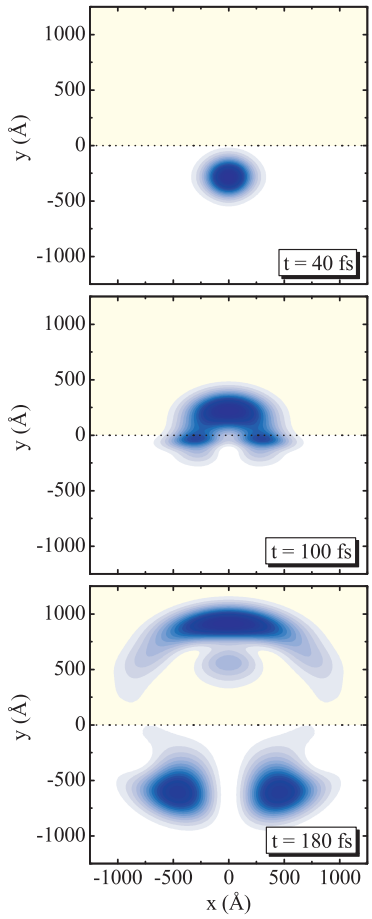

Figura 57: Curvas de nível da função de onda refletida por um degrau de potencial $V_0 = 110$ meV em três instantes diferentes. A área hachurada do plano, delimitada pela linha pontilhada horizontal, corresponde à região de potencial não nulo. O pacote de onda inicial tem energia $E = 100$ meV, largura $d = 150$ Å e se propaga na direção y.

V_0 = (a) 0, (b) 110 e (c) 250 meV. A inserção no caso $V_0 = 110$ meV mostra o perfil da função de onda tunelada, onde observa-se uma oscilação da função de onda em y devido à interferência entre estados de elétrons e buracos. De fato, este é o único caso em que a função de onda tunelada não preserva sua forma inicial, com um só pico; para os dois outros valores de V_0 considerados, a função de onda tunelada continua aproximadamente com a mesma forma. Para $V_0 = 250$ meV, onde a energia do pacote de onda é bem menor que a altura da barreira, o pacote tunelado distribui-se praticamente apenas entre estados de buracos, com momento negativo. Isto se reflete na velocidade de fase, ou seja, na variação da posição dos picos de $\Re[\Psi(0, \mathsf{y})]$ como função do tempo: embora o próprio pacote de onda permaneça se propagando no sentido positivo de y, estes picos passam a se propagar no sentido oposto quando penetram a barreira, pois passam a ser constituídos de estados de momento negativo dentro da barreira. Apesar deste também ser um resultado interessante, ele apenas confirma que o pacote de onda estudado exibe o tunelamento de

Klein em sua totalidade para $V_0 = 250$ meV: sua probabilidade de transmissão é proxima de 1 (ver Fig. 56(b)) e isso se deve de fato à "transformação"do estado inicial de elétron para buraco na barreira (ver Fig. 58).

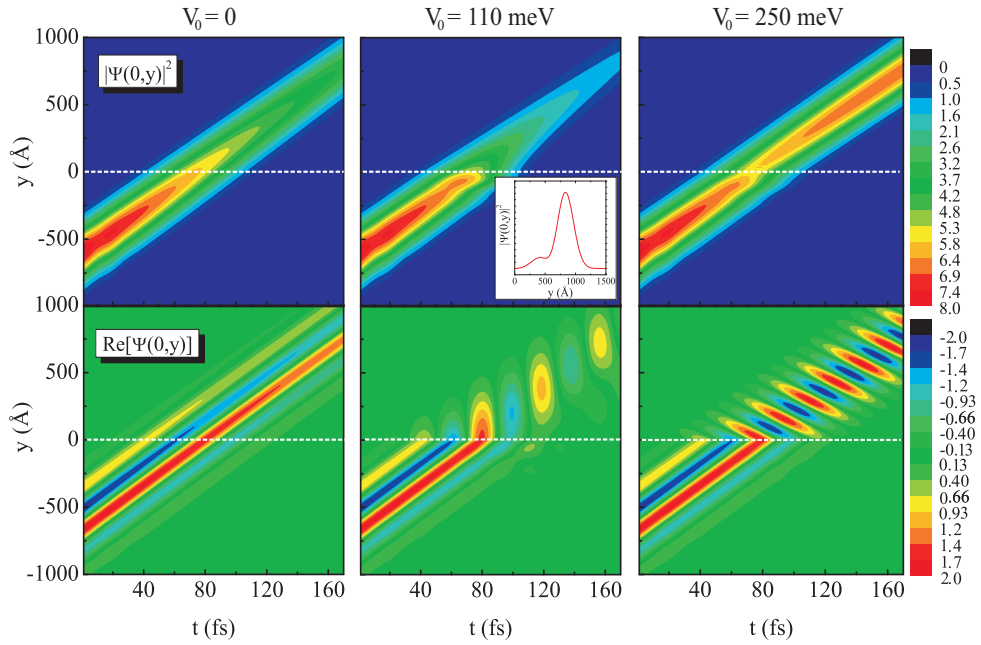

Figura 58: Curvas de nível do módulo quadrado (em cima) e da parte real (em baixo) da secção transversal em $x = 0$ da função de onda como função do tempo. Consideramos uma barreira de potencial $V = V_0\Theta(\mathsf{y})$, para três valores de V_0. A linha tracejada horizontal determina o limite da barreira de potencial. A inserção mostra o módulo quadrado da secção transversal da função de onda $|\Psi(0,\mathsf{y})|^2$ em $t = 170$ fs para $V_0 = 110$ meV.

Um outro efeito que associamos ao zitterbewegung na seção anterior foi o fato de que a velocidade final do pacote de onda depende de d e E. Se ela depende de E, devemos ser capazes de explorar isto modulando a velocidade através de poços de potencial. Ao entrar no poço de potencial, o pacote exibe uma menor mistura entre estados de elétron e buraco e, por isso, a velocidade do pacote deve mudar. Isto é de fato observado, como ilustrado na Fig. 59 que mostra a velocidade como função do tempo para um pacote de onda com $E = 100$ meV e $d = 200$ Å , que se propaga na direção y através de um potencial degrau de altura $-V_0$. Devido ao zitterbewegung, a velocidade oscila até atingir um valor final $v_y^f \approx 0.964$ para $V_0 = 0$ (preta), o qual pode ser obtido pela Eq. (4.9). Porém, quando temos $V_0 \neq 0$, ao atingir a região de potencial negativo em $t \approx 70$ fs, a velocidade do pacote passa a convergir para um outro valor, maior que $v_y^f \approx 0.964$. Note que esta variação de velocidade é um efeito atribuído somente a pacotes de onda; elétrons de baixa energia em grafeno devem se propagar sempre com velocidade v_F, não importando se estão em uma barreira de potencial ou não, pois eles obedecem à relação de dispersão $E = \hbar v_F k$. Sendo assim, este efeito não deve ser confundido com o efeito clássico onde

a velocidade varia ao mudarmos o potencial devido à conservação de energia total, pois a velocidade do elétron na aproximação de Dirac não depende da energia. Resta-nos, então, entender tal variação de velocidade na região do poço como sendo apenas devido à redistribuição de estados de elétron e buraco que ocorre quando o pacote de onda adentra esta região.

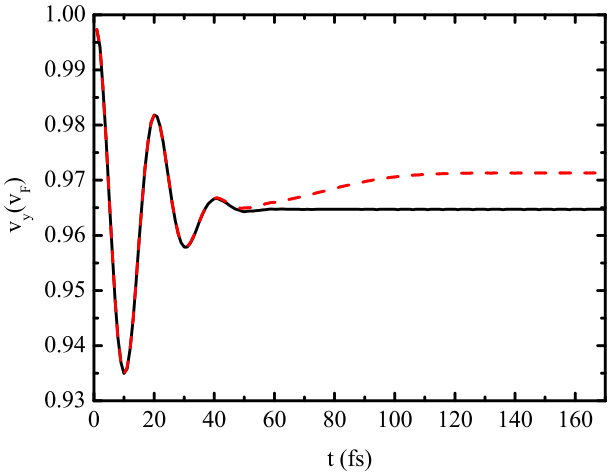

Figura 59: Velocidade de um pacote de onda que se propaga na direção y com $E = 100$ meV e $d = 200$ Å , tunelando através de uma barreira de potencial $V = V_0\Theta(\mathsf{y})$, para dois valores da altura do potencial: $V_0 = 0$ (preta, sólida) e -250 meV (vermelha, tracejada).

Alguns artigos recentes na literatura [153] também têm sugerido que, para uma incidência de elétrons com um certo ângulo em relação à normal, uma folha de grafeno com um potencial degrau atuaria como um metamaterial, ou seja, um material com índice de refração negativo, e que uma lei de Snell estaria presente, de forma que os ângulos de incidência e refração do elétron, θ_i e θ_r, respectivamente, obedecem $E \sin\theta_i = (V - E)\sin\theta_r$. Este fenômeno está ilustrado na Fig. 60, onde mostramos a evolução temporal de um pacote de onda de largura $d = 200$ Å e energia $E = 100$ meV em uma monocamada de grafeno com um potencial degrau definido como $V = V_0\Theta(\mathsf{y})$, com $V_0 = 200$ meV. [46] O pacote se propaga em uma direção tal que o ângulo de incidência é $\theta_i = \pi/4$, o que pode ser obtido considerando-se $c_1 = 1$ e $c_2 = \exp[i\pi/4]$. Como $V_0 - E = E$ neste caso, a lei de Snell leva a um ângulo de refração também será dado por $\theta_r = \pi/4$. Observa-se que, de fato, a propagação dos pacotes de onda refratado e refletido segue as linhas obtidas através da lei de Snell. Além disso, a refração ocorre no mesmo lado da incidência, o que é uma característica comum aos metamateriais.

Começando com esse mesmo pacote de onda e considerando agora, ao invés de um

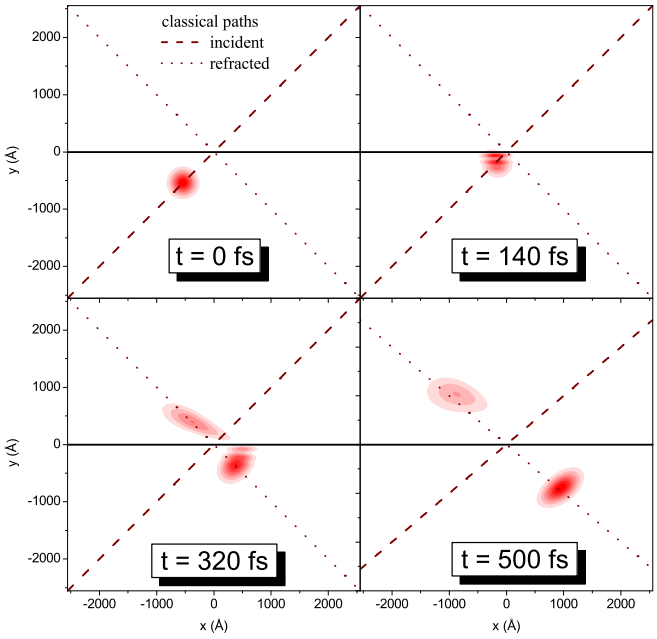

Figura 60: Evolução temporal do módulo quadrado da função de onda em um degrau de potencial $V_0 = 200$ meV, considerando-se um pacote de onda inicial com energia $E = 100$ meV propagando-se em uma direção que forma um ângulo de incidência $\theta_i = \pi/4$. O degrau de potencial começa em $\mathsf{y} = 0$ e segue para $\mathsf{y} > 0$. As linhas vermelhas representam os caminhos percorridos por um feixe de luz refratado em um metamaterial com este mesmo índice de refração (negativo).

potencial degrau, uma barreira de potencial de espessura $e = 500$ Å, mostramos na Fig. 61 que este potencial atua para elétrons de forma análoga à uma lâmina de faces paralelas para a óptica, causando um deslocamento d para cima na trajetória do elétron refratado. Esse deslocamento pode ser calculado utilizando-se óptica geométrica comum, considerando-se uma lâmina de faces paralelas composta de um metamaterial, o que nos leva a $d = e\sin(\theta_i + \theta_r)/\cos(\theta_r)$. A Fig. 61 mostra o módulo quadrado das funções de onda inicial (curvas sólidas) e final (vermelho) após uma propagação de $t = 500$ fs. As linhas tracejadas vermelhas mostram os caminhos do pacote incidente e do pacote refratado, calculado através da óptica geométrica. As linhas pontilhadas delimitam a barreira de potencial. Vemos claramente que o pacote de onda refratado, de fato, segue a linha calculada analiticamente para um feixe de luz numa lâmina de faces paralelas feita de um metamaterial. Note também que existem dois pacotes refletidos neste caso, um para a reflexão na interface inferior da barreira e outro na interface superior.

Sabendo que a lei de Snell está presente nestes sistemas, sugerimos que um contato quântico (*quantum point contact*) poderia ser usado para confinar elétrons da seguinte

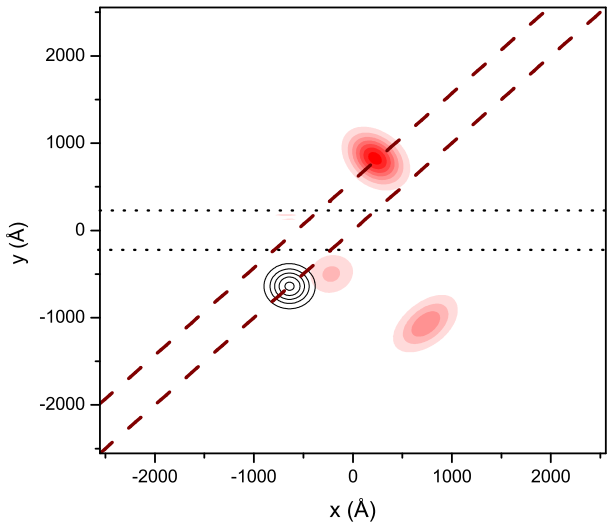

Figura 61: Curvas de nível do módulo quadrado das funções de onda para $t = 0$ (círculos pretos) e 500 fs (vermelha) em uma monocamada de grafeno com uma barreira de potencial $V = 200$ meV de espessura $e = 500$ Å , considerando-se um pacote de onda inicial com energia $E = 100$ meV propagando-se em uma direção que forma um ângulo de incidência $\theta_i = \pi/4$. As linhas pontilhadas delimitam a barreira e as linhas tracejadas mostram os caminhos para os feixes de luz incidente e refratado em uma lâmina de faces paralelas de mesma espessura e índice de refração.

maneira: considere o potencial mostrado na figura Fig 73 (a), onde um elétron atinge o quadrado superior direito no meio de seu lado mais baixo, com ângulo de incidência $\phi_i = \pi/4$. O potencial das barreiras (vermelho) é duas vezes o valor da energia do pacote incial, de maneira que $V - E = E$, em outras palavras, os dois meios apresentam o mesmo índice de refração. Uma vez que a refração e a incidência devem estar no mesmo lado nestes sistemas, devido ao fato de estarmos tratando de um metamaterial, o elétron é refratado com um ângulo $\phi_r = \pi/4$ e caminha para o lado esquerdo deste quadrado, atingindo-o com $\phi_i = \pi/4$ novamente. Podemos facilmente concluir que a trajetória deste elétron irá formar um losango em torno do contato neste caso. Como existem reflexões nas barreiras de potencial, e considerando ainda que nosso problema sempre trata de condições peródicas de contorno, devido à transformada de Fourier, devemos esperar que vários losangos apareçam na trajetória do elétron neste sistema. Este resultado é, de fato, verificado nos nossos cálculos para $E = 300$ meV e $V = 2E = 600$ meV: o logaritmo da média no tempo da função de onda para este caso, depois de propagada por $t = 3000$ fs, é mostrado na Fig 73 (b), onde os losangos são facilmente observados.

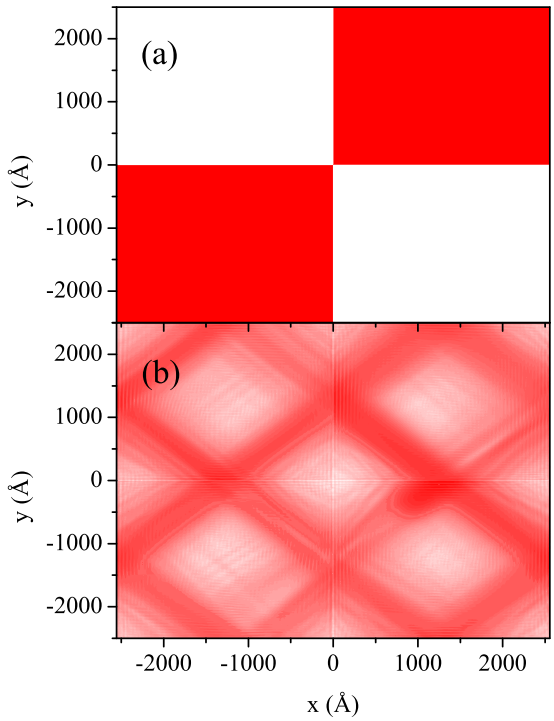

Figura 62: (a) Potencial (b) e média temporal para um pacote de onda com energia E = 300 meV movendo-se em um potencial do tipo tabuleiro de xadrez, com condições de contorno periódicas. Em (a), quadrados vermelhos (brancos) têm V = 600 (0) meV. Em (b), a média temporal da função de onda é plotada em escala logarítmica, onde o vermelho (branco) representa um valor mais alto (baixo).

4.2.4 Campos magnéticos externos e induzidos por tensão

Como os efeitos de tensão envolvem a mudança na posição dos átomos na rede de carbono, voltemos agora ao modelo TB, onde podemos trabalhar diretamente com os sítios atômicos. Deste ponto em diante, iremos considerar vetores de onda iniciais $\vec{q}_0$ em torno dos pontos de Dirac 2 e 5 da Fig. 47(b), ou seja

$$K = \left(0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right) \quad and \quad K' = \left(0, -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right), \tag{4.10}$$

respectivamente. Esta escolha é bastante conveniente, já que os ângulos de rotação para estes pontos são $\phi = \pi/2$ e $3\pi/2$, respectivamente, de forma que o pseudo-spinor $[1, 1]^T$ aponta para a direção y (-y) no primeiro (último) caso. [154] Assim, com este pseudo-spinor, pacotes de onda em K (K') propagam-se com velocidade positiva (negativa) na direção zigzag vertical.

Recentemente,[76] foi demonstrado teoricamente que flexionando-se uma folha de

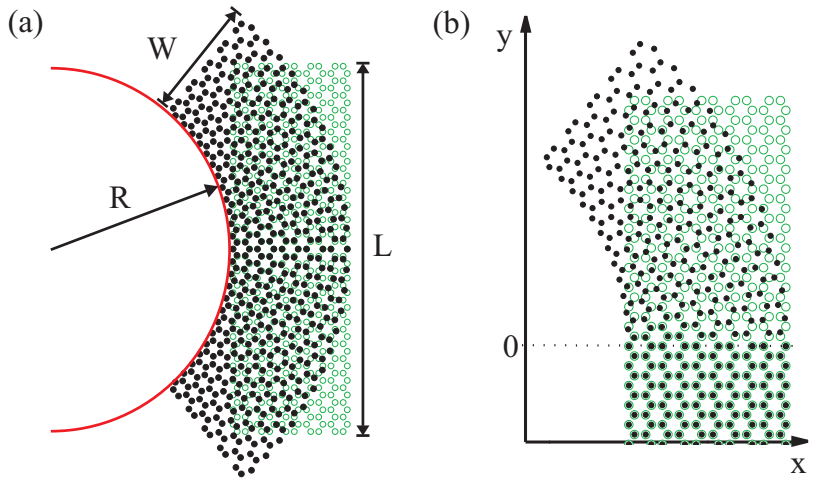

Figura 63: (a) Esboço de uma folha de grafeno tensionada: consideramos uma amostra retangular de largura W e altura L, flexionada como um arco de círculo de raio R. A folha de grafeno não tensionada é mostrada como círculos abertos, para comparação. (b) Barreira magnética induzida por tensão, obtida flexiondando-se a rede do grafeno apenas na região $y \geq 0$. O número de átomos da rede foi reduzido em ambas as figuras, em comparação com as redes estudadas neste trabalho, apenas para facilitar a visualização.

grafeno em um arco de círculo produz-se um perfil de campo pseudo-magnético forte e quase uniforme. A Fig. 63(a) ilustra um sistema tensionado deste tipo, onde uma amostra retangular de grafeno de espessura W e altura L é flexionada em um arco de círculo com raio interno R. Como o campo (pseudo) magnético aponta na mesma direção (direções opostas) em cada ponto K e K', [42] a combinação de ambos os efeitos de campos magnéticos externo e induzido por tensão leva a um campo magnético dependente do vale. Se aplicarmos um valor apropriado de campo magnético externo para uma certa configuração de tensão no grafeno, poderemos obter uma supressão quase perfeita do campo magnético efetivo em um dos cones de Dirac, enquanto o campo efetivo no outro cone aumenta. Isto leva a um sistema complicado de ser estudado dentro da aproximação de Dirac, já que temos dois sistemas completamente diferentes para os vales K e K'. Por exemplo, níveis de Landau estariam presentes somente em torno de um dos cones (embora não possamos esperar um espectro de níveis de Landau perfeito, já que o campo magnético induzido por tensão não é perfeitamente uniforme no espaço), enquanto no outro cone, observaríamos o espectro contínuo usual. Isto nos motivou a analisar as trajetórias dos pacotes de onda em um sistema como este dentro do modelo TB, onde não precisamos incluir o campo pseudo-magnético artificialmente nos cones de Dirac, já que eles aparecem naturalmente quando nós consideramos o efeito das mudanças nas

distâncias interatômicas, induzidas pela tensão, sobre os parâmetros de hopping, como explicamos no Capítulo 1.

Nesta sub-seção, investigaremos a dinâmica de um pacote de onda com largura $d = 200$ Å e vetor de onda inicial $k_x^0 = 0$ e $k_y^0 = 0.02$ Å^{-1} em torno dos pontos de Dirac K e K' da Eq. (4.10) na presença de barreiras de campos magnéticos externo e induzido por strain. Como no vale K' o pseudo-spinor $[1, 1]^T$ está polarizado no sentido negativo da direção y da rede do grafeno, escolhemos agora $[1, -1]^T$ para este caso, de forma que um pacote de onda neste vale irá também se propagar no sentido positivo de y. Para obter uma barreira de campo pseudo-magnético, consideramos que a folha de grafeno está tensionada apenas na região $y \geq 0$, como ilustrado na Fig. 63(b). Consideramos também um campo magnético externo $\vec{B} = B\Theta(y)\hat{z}$, que leva a uma barreira magnética para $y \geq 0$, descrito pelo potencial vetor $\vec{A} = (-By\Theta(y), 0, 0)$. Para evitar efeitos devido ao zitterbewegung na região do campo (pseudo) magnético, o pacote de onda começa na posição $x_0 = 0$, $y_0 = -420$ Å, de forma que ele pode propagar-se por algum tempo na região livre de campos $y < 0$ até sua velocidade convergir para um valor independente do tempo.

A influência das barreiras de campo magnético externo e induzido por tensão sobre as trajetórias dos pacotes de onda são analizadas separadamente na Fig. 64, que mostra as trajetória dos centróides dos pacotes de onda nos pontos K (símbolos) e K' (curvas), calculadas como $\langle r \rangle = (\langle x \rangle, \langle y \rangle)$, (a) na folha de grafeno não tensionada com uma barreira de campo magnético externo $B = 5$ T (sólida, círculos), 7 T (tracejada, triângulos) e 10 T (pontilhada, quadrados), e (b) em uma folha de grafeno tensionada com raio $R = 1$ μm (sólida, círculos), 0.8 μm (tracejada, triângulos) e 0.6 μm (pontilhada, quadrados). Todas as trajetórias formam semi-círculos na região $y \geq 0$, o que se deve à força de Lorentz produzida pelo campo (pseudo) magnético. À medida que o campo magnético externo (raio da região tensionada) aumenta (diminui), os raios destas trajetórias semi-circulares são reduzidos, pois um campo (pseudo) magnético mais intenso produz um módulo mais forte da força de Lorentz. Note que os raios das trajetórias nos casos de campos externos e pseudo-magnéticos são comparáveis, o que significa que para raios $R = 1$ μm - 0.6 μm de tensão no grafeno, o campo pseudo-magnético gerado é também dentro de ≈ 5 T e 10 T. De fato, a distribuição do campo pseudo-magnético induzido por tensão para uma fita

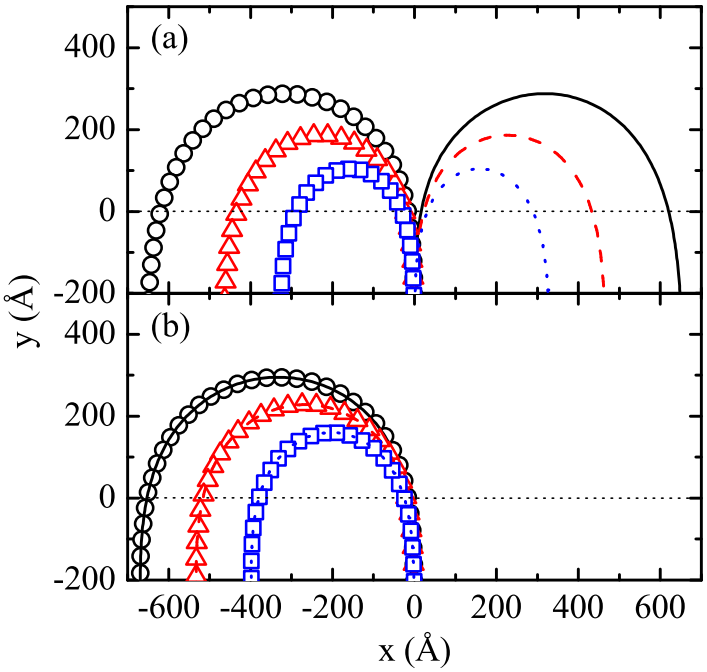

Figura 64: Trajetórias do pacote de onda no plano $x-y$, obtidas pelo método TB, para um momento inicial $k_y^0 = 0.02$ Å^{-1} em torno dos pontos K (símbolos) e K' (curves), para (a) um grafeno não tensionado com uma barreira magnética de altura $B = 5$ T (sólida, círculos), 7 T (tracejada, triângulos) e 10 T (pontilhada, quadrados), e para (b) uma folha de grafeno flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1$ μm (sólida, círculos), 0.8 μm (tracejada, triângulos) e 0.6 μm (pontilhada, quadrados), considerando $B = 0$ T. Em (b), símbolos e curvas coincidem para cada valor de R.

de grafeno flexionada em forma de arco é dada por [76]

$$B_S(x,y) = -4c\frac{\beta\Phi_0}{aL}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\cos\left[\frac{2x}{L}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right] \times\left[1-\frac{R+y}{L}\arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right], \tag{4.11}$$

onde $\beta \approx 2$ e c é uma constante adimensional que depende dos detalhes dos deslocamentos atômicos. [6] Considerando-se $L/R \to 0$ na Eq. (4.11) o campo pseudo-magnético pode ser aproximado por $B_S \approx -c\beta\Phi_0/aR = \omega/R$. Usando o valor $\omega \approx 4.5\times10^4$ TÅ estimado numericamente na Ref. [74], obtemos campos pseudo-magnéticos dentro de $B_S \approx 4.5$ T - 7.5 T para $R = 1$ μm - 0.6 μm, o que está na mesma ordem de magnitude dos campos magnéticos externos que consideramos. Para a barreira de campo magnético externo, as trajetórias dos pacotes de onda nos pontos K e K' formam círculos em direções opostas, como mostrado na Fig. 64(a), o que é razoável, já que estes pacotes têm momenta

opostos, o que causa uma troca de sinal na força de Lorentz. De maneira contrária, considerando-se a barreira magnética induzida por tensão ilustrada na Fig. 63(b), as trajetórias dos pacotes de onda em K e K' se curvam na mesma direção, pois, apesar dos seus momenta terem sinais opostos, os campos pseudo-magnéticos também apontam para direções opostas em cada cone de Dirac K e K'.

4.2.5 Filtro de vales

Consideremos agora a amostra tensionada da Fig. 63(b) com $R = 1\ \mu$m. Comparando-se o raio da trajetória semi-circular do pacote de onda em um sistema como este com aquele obtido para diferentes alturas de uma barreira magnética, obtém-se uma estimativa do campo magnético induzido por tensão para este valor de R como ≈ 4.9 T. A Fig. 65(a) mostra as trajetórias no plano $x - y$ do centróide dos pacotes de onda em um sistema onde combinamos uma tensão $R = 1\ \mu$m para $y \geq 0$ com uma barreira magnética externa $B = 0$ T (sólida, aberto) e 4.9 T (tracejada, fechado), para pactes de onda nos pontos K (símbolos) e K' (curvas) de Dirac. Na ausência do campo magnético externo, ambos os pacotes em K e K' exibem a mesma trajetória semi-circular, como discutido anteriormente. Porém, quando combinamos o efeito das barreiras magnéticas externa e induzida por tensão, o pacte de onda em K' sofre uma força de Lorentz maior e é imediatamente refletida, enquanto o do ponto K exibe uma trajetória praticamente reta, como se o pacote não tivesse sido influenciado por qualquer força de Lorentz. Isto é consequência do fato de que a combinação entre os efeitos de um campo pseudo-magnético produzido por uma flexão $R = 1\mu$m e de um campo magnético externo $B = 4.9$ T resulta em um campo magnético efetivo mais forte no ponto K', enquanto no ponto K estes campos se equilibram, produzindo uma região praticamente livre de campos magnéticos para partículas neste cone. Nesta situação, o sistema funciona como um filtro de vales, onde apenas pacotes no cone K de Dirac podem passar através da região tensionada, enquanto os pacotes de onda em K' são refletidos. Os resultados para o pacote de onda em K considerando-se dois outros valores de campo magnético externo são mostrados como linhas sólidas finas, que demonstram que dentro de um intervalo $\Delta B = \pm 0.2$ T em torno de $B = 4.9$ T, o que é um intervalo razoável para intensidades de campos magnéticos em experimentos, observa-se somente uma força de Lorentz bem fraca, e o filtro de vales ainda funciona satisfatoriamente. Os resultados da Fig. 65 foram obtidos para ambas as barreiras de campo magnético externo e induzido por tensão começando na mesma posição $y = 0$. É fácil verificar que se existir um descasamento entre as posições iniciais nas barreiras, alguns desvios devem ocorrer na trajetória mas, contanto que o comprimento

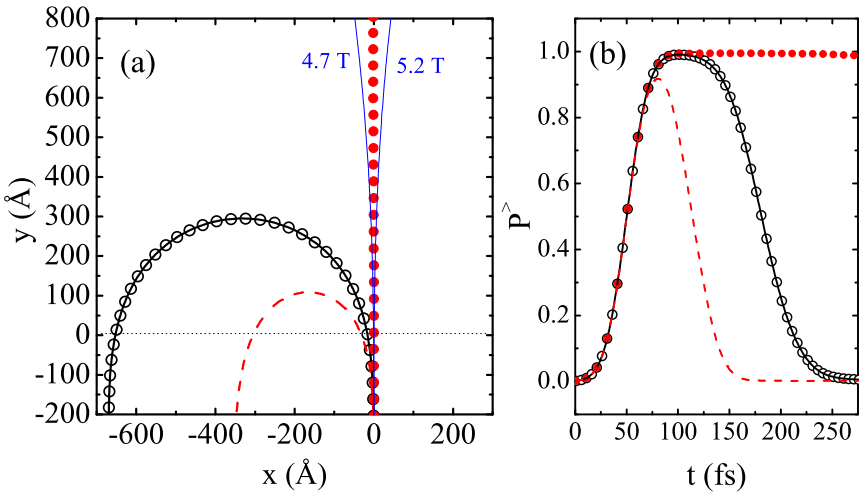

Figura 65: (a) Trajetórias no plano $x - y$ para pacotes de onda com momento inicial $k_y^0 = 0.02$ Å^{-1} em torno de K (símbolos) e K' (curvas), considerando-se uma folha de grafeno flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1$ μm e um campo magnético externo $B = 0$ T (aberto, sólida) e 4.9 T (fechado, tracejada). As curvas azuis finas mostram os resultados para duas outras intensidades de campo magnético externo para o pacote em K. (b) Probabilidade de se encontrar a partícula em $y \geq 0$ como função do tempo, para pacotes de onda com as mesmas configurações que em (a).

do descasamento seja menor que o comprimento magnético, o efeito de filtragem ainda permanece estável. Por exemplo, um descasamento de 30 Å entre as barreiras de campo externo e pseudo-magnético no sistema analisado na Fig. 65 produziria um desvio de $\approx 5°$ na trajetória do pacote de onda em K, que deveria ser vertical, enquanto o pacote de onda em K' ainda é prontamente refletido pela combinação de campos magnéticos na região do filtro.

A probabilidade $P^{>}$ de se encontrar a partícula na região tensionada $y \geq 0$, calculada como

$$P^{>}(t) = \sum_{n^{>}} \sum_{m} |\Psi^t_{n,m}|^2, \tag{4.12}$$

onde $n^{>}$ representa as linhas de sítios atômicos com $y \geq 0$, é mostrada como função do tempo na Fig. 65(b). No caso $B = 0$ T, ambos os pacotes de onda em K (círculos abertos) e K' (sólida) permanecem na região tensionada $y \geq 0$ só até $t \approx 300$ fs, quando eles voltam para a região $y < 0$, refletidos pela força de Lorentz induzida pela tensão. Porém, para $B = 4.9$ T, $P^{>}$ já se aproxima de zero em $t \approx 175$ fs para o pacote em K' (tracejada), enquanto para K (círculos fechados), ele permanece próximo de 1 até mesmo para maiores valores de t.

A eficiência do filtro de vales proposto é confirmada pela Fig. 66, onde mostramos $P^{>}$ como função do tempo para pacotes de onda iniciais dados pela combinação de Gaussianas em torno dos pontos K e K' na Eq. (4.10):

$$\Psi = \sqrt{\alpha}\Psi_{K'} + \sqrt{\beta}\Psi_{K}, \tag{4.13}$$

onde $\Psi_{K(K')}$ é o pacote de onda Gaussiano da Eq. (4.7) com momento $\vec{q}$ em torno do ponto de $K(K')$ de Dirac. Os resultados são apresentados para três valores diferentes de β, onde pode-se facilmente ver que a probabilidade de se encontrar o pacote na região tensionada exibe um pico em $t \approx 80$ fs mas, como a parte K' do pacote é refletida pela barreira magnética, esta probabilidade decai, convergindo exatamente a $P^{>} = \beta$ para tempos t maiores. Um sistema como este prova-se ser um filtro de vales perfeito, capaz de refletir todas as componentes do pacote incidente que estão no ponto K' e transmitir um pacote de onda composto apenas por estados com momento na vizinhança de K.

Salientamos que quando um pacote de onda chega à borda de uma nanofita de grafeno, ele pode ser espalhado para um cone de Dirac diferente. [155] Consequentemente, a eficiência do filtro de vale pode ser comprometida se considerarmos uma fita muito fina,

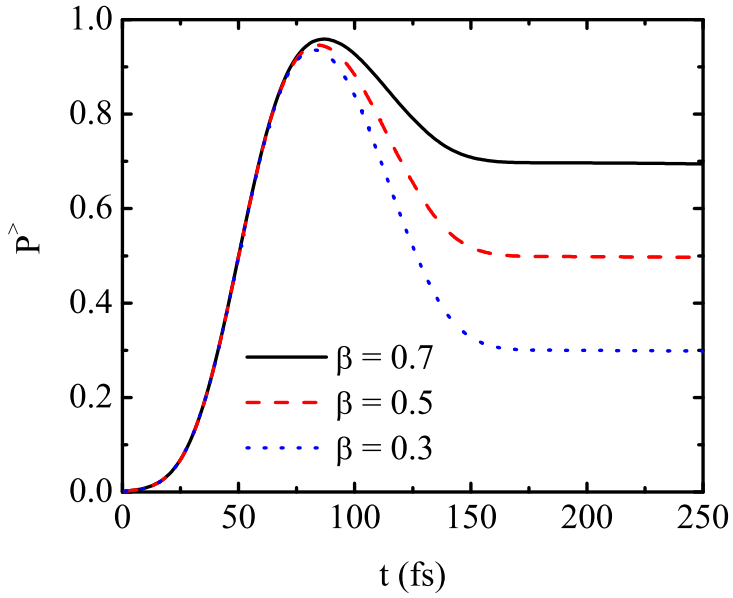

Figura 66: Probabilidade de se encontrar o elétron na região do filtro $y \geq 0$, para um pacote de onda inicial dado por uma combinação de distribuições Gaussianas em torno de ambos os pontos K e K' de Dirac, para três valores diferentes de β, que representa a componente em K do pacote de onda.

de forma que o pacote filtrado ainda possa atingir as bordas e se espalhar de volta ao outro vale. Para evitar este tipo de efeito, consideramos uma nanofita bem larga, de maneira que, para os intervalos de tempo estudados neste trabalho, os efeitos de borda não são significativos.

Recentemente, uma forma ainda mais simples para a filtragem de vales foi sugerida por Wu *et al.* [70]: se fôssemos capazes de controlar o ângulo de incidência do elétron sobre uma barreira pseudo-magnética induzida por tensão, como a da Fig. 63(b) poderíamos fazê-lo incidir com um certo ângulo, de forma que a força de Lorentz refletiria elétrons no vale K, enquanto elétrons no vale K' poderiam penetrar bem mais e atravessar a barreira, pois o campo pseudo-magnético neste caso é negativo. Isto está ilustrado na Fig. 67, onde temos as trajetórias obtidas através do modelo de Dirac para pacotes de onda incidindo sobre uma barreira pseudo-magnética $B = +2.5$ T (-2.5 T) no ponto K (K'). Desta forma, podemos separar os estados de cada vale de uma forma bem mais simples, a qual não depende da existência de uma barreira magnética externa, eliminando qualquer problema devido ao possível descasamento entre barreiras de campo magnético e pseudo-magnético, como explicado nos parágrafos anteriores.

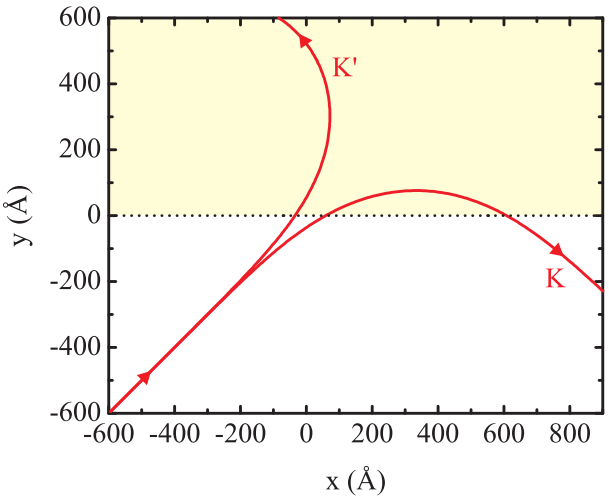

Figura 67: Trajetórias obtidas pelo modelo de Dirac para pacotes de onda nos vales K e K', considerando-se $E = 100$ meV e $d = 200$ Å , em um sistema que apresenta uma barreira pseudo-magnética $B = 2.5$ T, delimitada pela linha horizontal pontilhada em $y = 0$. Os pacotes se propagam inicialmente formando um ângulo $\pi/4$ com relação à normal, ou seja, o pseudo-spinor é considerado como $c_1 = 1$ e $c_2 = e^{i\pi/4}$. A área hachurada representa a região onde o campo magnético é não-nulo ($\mathsf{y} > 0$).

4.2.6 Efeitos de campos externos e pseudo-magnéticos sobre o Zitterbewegung: oscilações permanentes

Em um trabalho anterior, Rusin e Zawadzki [60] usaram o Hamiltoniano de Dirac para o grafeno para mostrar que o zitterbewegung, que é transiente para $B = 0$, como discutimos anteriormente, torna-se permanente para $B \neq 0$. Além disso, os autores mostraram que para um pacote de onda Gaussiano, a evolução temporal do valor médio da corrente é diferente nas direções x e y, o que eles dizem que deve-se ao fato do Hamiltoniano de Dirac não ser simétrico no momento $\hat{p}_x$ e $\hat{p}_y$. Apesar destes mesmos autores dizerem em um artigo subsequente [156] que este efeito é não-físico, por violar a simetria rotacional do plano $x - y$ do grafeno, acreditamos que este resultado ainda é fisico: deve-se lembrar que o modelo de Dirac para o grafeno vem de uma aproximação tight-binding para este sistema, a qual descreve uma rede hexagonal de átomos que não é simétrica no plano $x-y$ por definição, exibindo porém uma simetria C_{6v}. Para cada ponto K e K', as coordenadas x e y no Hamiltoniano de Dirac representam direções diferentes na rede hexagonal real do grafeno, onde para uma amostra infinita, a coordenada x (y) na equação de Dirac está sempre relacionada com uma das direções zigzag (armchair) da amostra real. Nesta sub-seção, usamos nosso modelo TB de grafeno para expandir os estudos anteriores de Rusin e Zawadzki [60] para situações diferentes.

Estudamos agora a dinâmica de um pacote de onda com largura $d = 200$ Å, pseudo-spinor $c_1 = 1$ e $c_2 = 1$ e vetor de onda inicial $k_x^0 = k_y^0 = 0$, isto é, exatamente em um dos pontos de Dirac K e K' da Eq. (4.10), na presença de um campo magnético uniforme aplicado $\vec{B} = B\hat{z}$, ao invés da barreira magnética considerada na sub-seção anterior. Vamos também considerar um campo pseudo-magnético obtido flexionando-se toda a amostra retangular de grafeno como um arco de círculo de raio R, como ilustrado na Fig. 63(a). O raio do círculo é considerado como $R = 1$ μm, o que produz um campo pseudo-magnético de ≈ 4.9 T, como demonstrado na sub-seção anterior. Efetivamente, consideramos o campo magnético externo uniforme como $B = 4.9$ T.

Algumas técnicas experimentais têm sido sugeridas na literatura para a observação do zitterbewegung. [59, 62] Uma interessante [156] baseia-se no fato de que o pacote de onda $\Psi(\vec{r}, t)$ exibe um momento de dipolo elétrico $\vec{D}(t) = \langle \Psi(\vec{r}, t)|\vec{r}|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$ e, consequentemente, o zitterbewegung leva a uma oscilação deste momento de dipolo, o qual pode ser visto como uma fonte de radiação eletromagnética, descrita classicamente [157] pela equação

$$\vec{\varepsilon}(t) = \frac{d^2\vec{D}(t)}{dt^2}\frac{\sin\Phi}{4\pi\epsilon_0 s}, \tag{4.14}$$

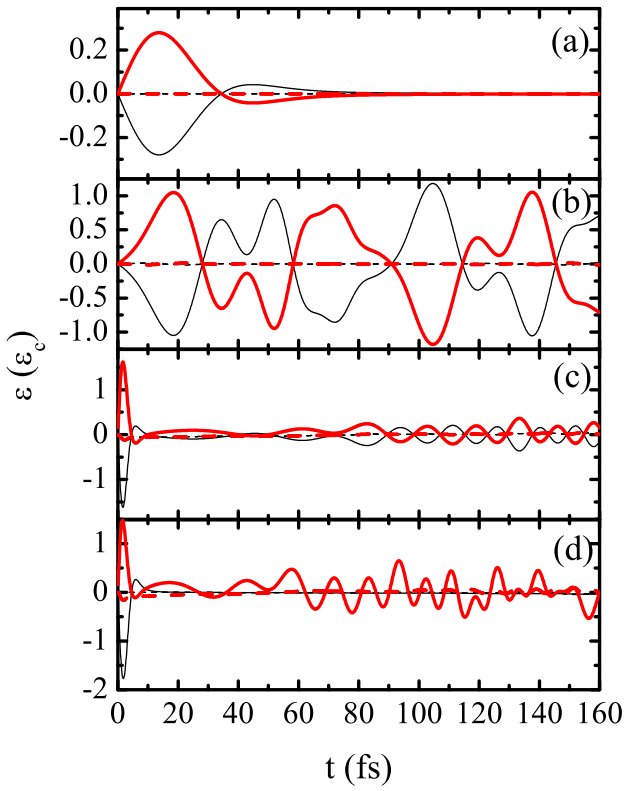

Figura 68: Radiação do dipolo magnético como função do tempo para pacotes de onda com pseudo-spinor inicial $[1,1]^T$ em K (preta) e K' (vermelha), considerando-se uma folha de grafeno (a) na ausência de tensão e campos magnéticos, (b) sob um campo magnético $B = 4.9$ T aplicado uniformemente, (c) flexionada como um arco de círculo de raio $R = 1\mu$m (ver Fig. 63) e (d) com ambos o campo magnético uniforme $B = 4.9$ T e a flexão $R = 1\mu$m. Curvas sólidas (tracejadas) são os resultados para a componente ε_y (ε_x).

onde s e Φ são a distância e o ângulo de observação, respectivamente, e ϵ_0 é a permissividade do vácuo.

A Fig. 68 mostra os efeitos dos campos magnéticos externo e induzido por tensão sobre a radiação do campo elétrico produzida pelo zitterbewegung, escrita em unidades de $\varepsilon_c = \sin\Phi/4\pi\epsilon_0 s$. Somente oscilações fracas são esperadas na direção armchair (x), já que o pseudo-spin $[1,1]^T$ aponta para a direção x no modelo de Dirac que, como mencionamos anteriormente, representa a direção zigzag (y) da rede hexagonal do grafeno. De fato, na Fig. 68(a-d), a componente x do campo elétrico (tracejada) está sempre proxima de zero. Na Fig. 68(a), apresentamos os resultados na ausência de tensão e campos magnéticos, para comparação. Neste caso, as oscilações no campo elétrico são amortecidas para tempos maiores, o que se deve ao caráter transiente do zitterbewegung. Além disso, os resultados

para ε_y (sólida) nos pontos K (preta) e K' (vermelha) têm sinais opostos, já que para estes pontos os eixos dos cones Dirac estão rotacionados por ângulos que diferem de $\pi/2$. Na Fig. 68(b), O campo magnético uniformemente aplicado $B = 4.9$ T em uma amostra não-tensionada leva a oscilações persistentes em ε_y, o que está relacionado ao espectro discreto de níveis de Landau criado por este campo. Cada nível de Landau populado pela distribuição Gaussiana contribui com uma frequência diferente. [60, 158, **?**] A Fig. 68(c) mostra que um comportamento persistente parecido é obtido também flexionando-se a folha de grafeno como um arco de círculo de raio $R = 1\mu$m, o que produz um campo pseudo-magnético com a mesma ordem de magnitude. Note, porém que a amplitude das oscilações neste caso é quatro vezes menor que aquelas encontradas na Fig. 68(b) para a amostra não tensionada sob um campo magnético externo. De fato, não podemos esperar que estes dois casos produzam o mesmo zitterbewegung, porque, apesar de ambas as amostras exibirem aproximadamente a mesma intensidade de campo magnético, a amostra tensionada tem não só o campo pseudo-magnético, mas também uma distribuição diferente de sítios atômicos. Assim, no caso tensionado, existe uma mudança adicional na direção da polarização do pseudo-spin à medida que o pacote de onda se propaga, devido à própria distorção da rede. Como demonstramos anteriormente, o zitterbewegung depende fortemente da polarização do pseudo-spin e, por isso, uma interação diferente entre os sítios tensionados e a polarização inicial do pseudo-spin produz um zitterbewegung diferente para o caso tensionado, quando o comparamos com o de uma amostra não-tensionada sob um campo magnético externo. Na Fig. 68(d), combinamos os efeitos da tensão $R = 1$ μm e campo externo $B = 4.9$ T para produzir um sistema onde o campo magnético efetivo é praticamente zero no ponto K, mas é não-nulo no ponto K', de forma que somente o pacote no ponto K' exibe oscilações persistentes, enquanto as oscilações para o pacote em K são suprimidas com o passar do tempo. Para o ponto K, o campo externo compensa somente o efeito do campo pseudo-magnético, ou seja, o zitterbewegung persistente, mas ele não remove o efeito da distorção da rede. Como consequência, comparando-se os resultados para K (preta) nas Figs. 68(a) e (d), observa-se que as oscilações são transientes em ambos os casos, já que não há campo magnético efetivo, mas eles ainda exibem um perfil diferente de oscilações em tempos t pequenos, devido à distorção da rede no segundo caso, que não existe no primeiro.

5 Interação entre vórtices em supercondutores

Neste capítulo, iremos revisar o comportamento assintótico do campo magnético e do parâmetro de ordem de um vórtice estático na teoria de Ginzburg-Landau e expandir a expressão analítica sugerida por Kramer [92] para o estudo da interação entre um vórtice e um outro vórtice, um antivórtice ou um vórtice gigante, no limite de grandes separações entre eles. Desenvolveremos então um conjunto de equações diferenciais não-lineares que descrevem essas interações e que são válidas para separações arbitrárias entre vórtices e, consequentemente, válidas também para pequenas separações, onde as deformações dos núcleos dos vórtices interagentes são importantes. Resolvemos numericamente este conjunto de equações sem nenhuma aproximação, para valores arbitrários de κ, e obtemos resultados para as interações vórtice-vórtice (V-V), vórtice-vórtice gigante (V-GV) e vórtice-antivórtice (V-AV), os quais são comparados às expressões analíticas obtidas neste capítulo. Para cada um destes casos, propomos uma função de fitting para a interação, o que facilitará a utilização destes potenciais de interação em futuros trabalhos de dinâmica molecular. Depois disso, mostraremos então como expandir o método numérico proposto para o estudo de interações V-V em supercondutores de duas bandas, e discutiremos sobre a possibilidade de se observar um comportamento híbrido tipo-I/tipo-II nestes sistemas, também conhecido como supercondutividade tipo-1.5, onde os vórtices se atraem (repelem) a longas (curtas) distâncias.

5.1 O caráter assintótico do potencial entre vórtices

Começaremos a partir da expressão para a energia livre na teoria de Ginzburg-Landau (ou, equivalentemente, o potencial no modelo Abeliano de Higgs)[93, 105]:

$$E = \int \mathcal{F} d\vec{\mathsf{r}}, \tag{5.1}$$

onde o funcional $\mathcal{F}$ é dado por

$$\mathcal{F} = \frac{\hbar^2}{4m}\left|\left(\vec{\nabla} - i\frac{2e}{\hbar c}\vec{\mathsf{A}}\right)\psi\right|^2 + \frac{1}{8\pi}|\vec{\nabla}\times\vec{\mathsf{A}}|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 - \alpha|\psi|^2. \tag{5.2}$$

Nesta expressão, ψ é o parâmetro de ordem (um campo escalar complexo), $\vec{\mathsf{A}}$ é o potencial vetor eletromagnético e α e β são parâmetros fenomenológicos, que estão relacionados aos dois comprimentos característicos em um supercondutor: o comprimento de coerência $\xi = \hbar/\sqrt{4m\alpha}$ e a profundidade de penetração $\lambda = vc/e(\sqrt{m\beta/8\pi\alpha})$. Definimos, por conveniência, $\mu = \sqrt{2}\kappa$, de forma que $\mu < 1$ ($\mu > 1$) representa o regime tipo-I (tipo-II) ($\kappa = 1/\sqrt{2}$ leva a $\mu = 1$). [93] Definindo também $\vec{A} = (2e/\hbar c)\vec{\mathsf{A}}$ e $\Psi = \sqrt{\beta/\alpha}\psi/\lambda$, a expressão para o funcional de energia pode ser reescrita de forma adimensional como

$$F = \frac{1}{2}|(\vec{\nabla} - i\vec{A})\Psi|^2 + \frac{1}{2}|\vec{\nabla}\times\vec{A}|^2 + \frac{\mu^2}{8}(1-|\Psi|^2)^2, \tag{5.3}$$

onde a unidade de distância é a profundidade de penetração magnética λ, a de energia é $E_0 = \beta/2\alpha^2\xi^2$ e a de força é $\Omega_0 = \beta/2\alpha^2\xi^2\lambda$.

A configuração de menor energia do sistema é encontrada minimizando-se E em relação a Ψ e ao potencial vetor $\vec{A}$. A maneira padrão de se minimizar um funcional consiste em resolver as equações de Euler-Lagrange, que no caso da Eq. (5.1) são

$$\frac{\partial F}{\partial \Psi} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial F}{\partial(\frac{\partial \Psi}{\partial x_i})} = 0 \tag{5.4a}$$

e

$$\frac{\partial F}{\partial A_j} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial F}{\partial(\frac{\partial A_j}{\partial x_i})} = 0. \tag{5.4b}$$

As Eqs. (5.4a) e (5.4b) resultam nas já conhecidas equações de Ginzburg-Landau. [160]

Para calcular o potencial de interação entre vórtices, temos que procurar um meio de controlar a localização e a vorticidade de cada vórtice. Como dito anteriormente no Cap. 1, alguns trabalhos teóricos anteriores propõem uma maneira de fixar os vortices e obter o potencial de interação, baseada em quatro passos: i) fixar uma mudança de fase de 2π em torno de cada vórtice como um vínculo nas equações de Euler-Lagrange, ii)

encontrar o comportamento assintótico do potencial vetor e da amplitude do parâmetro de ordem longe de cada vórtice [92] ou, de forma equivalente, resolver numericamente as equações diferenciais para essas variáveis, [93] iii) Construir um ansatz através de uma superposição entre as soluções de cada vórtice para Ψ e $\vec{A}$ que descreve a estrutura de dois vórtices, e iv) usar o ansatz nas Eqs. (5.1) e (5.3) para obter a energia para uma dada separação entre os vórtices.

Se já tivermos conhecimento do comportamento assintótico dos vórtices, obtido no passo ii), a integral na Eq. (5.1) pode ser resolvida analiticamente, o que resulta em uma expressão analítica para a energia como função da separação entre vórtices. Com o intuito de encontrar uma expressão analítica para o comportamento assintótico do potencial de interação entre um vórtice e outro vórtice, um antivórtice ou um vórtice-gigante, começamos pela sequência descrita acima: uma fase circular é fixada ao redor de cada vórtice ao definirmos $\Psi(r,\theta) = f(r)e^{in\theta}$, onde (r,θ) são coordenadas polares com origem no centro de cada vórtice, n é a vorticidade e $f(r)$ é a amplitude do parâmetro de ordem, que assume-se ter simetria circular ao redor do vórtice. Considerando-se o gauge $\vec{A} = na(r)\widehat{\theta}/r$, as equações de Euler-Lagrange Eqs. (5.4a) e (5.4b) para um único vórtice são

$$\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{df}{dr} - \frac{n^2(a-1)^2}{r^2}f - \frac{\mu^2}{2}f(f^2-1) = 0, \tag{5.5a}$$

e

$$\frac{d^2a}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{da}{dr} - (a-1)f^2 = 0, \tag{5.5b}$$

com $f(\infty) = a(\infty) = 1$. Sabemos que a vorticidade n também determina o número de zeros do campo $f(r)$ e, por causa da simetria circular do vórtice, estes zeros devem ser todos degenerados em $r = 0$. [93] Substituindo-se as funções auxiliares $\sigma(r) = f(r) - 1$ e $Q(r) = a(r) - 1$ nas Eqs. (5.5a) e (5.5b), podemos descartar termos de ordem superior na equação diferencial resultante quando $r \to \infty$, já que $\sigma(\infty) = Q(\infty) = 0$, o que leva às seguintes equações, válidas no limite assintótico:

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d(\mu r)^2} + \frac{1}{\mu r}\frac{d\sigma}{d(\mu r)} - \sigma\right] = 0, \tag{5.6a}$$

e

$$\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{Q}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{Q}{r}\right) - \left(1 + \frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{Q}{r}\right) = 0. \tag{5.6b}$$

As Eqs. (5.6a) e (5.6b) são facilmente identificadas como equações de Bessel modificadas, e suas soluções são $\sigma(r) = \gamma_1 K_0(\mu r)$ e $Q(r) = \gamma_2 r K_1(r)$, onde γ_1 e γ_2 são coeficientes a determinar. Por exemplo, depois de resolver as Eqs. (5.5a) e (5.5b) numericamente, podemos obter estes coeficientes fitando $f(r) = 1 + \gamma_1 K_0(\mu r)$ e $\overrightarrow{A} = n(1 + \gamma_2 r K_1(r))\widehat{\theta}/r$

aos resultados obtidos pelo procedimento numérico.

Vários procedimentos diferentes podem ser seguidos para extrair a expressão analítica para o potencial de interação através destas funções assintóticas. Por exemplo, Bettencourt e Rivers [100] sugeriram usar um ansatz baseado na superposição $\overline{\Psi}(\vec{r},\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Psi(|\vec{r}-\vec{r}_1|)\Psi(|\vec{r}-\vec{r}_2|)$ e $\overline{A_\theta}(\vec{r},\vec{r}_1,\vec{r}_2) = A_\theta(|\vec{r}-\vec{r}_1|) + A_\theta(|\vec{r}-\vec{r}_2|)$, para vórtices centrados em $\vec{r_1}$ e $\vec{r_2}$, no funcional de energia na Eq. (5.1), e em manter os termos que sao lineares nos campos para cada vórtice. Após alguns cálculos, descritos mais detalhadamente na Ref. [100], obtemos

$$E_{int}(d) = 2\left[n_1 n_2 \gamma_2^{(1)}\gamma_2^{(2)} K_0(d) - \gamma_1^{(1)}\gamma_1^{(2)} K_0(\mu d)\right], \tag{5.7}$$

onde d é a separação entre vórtices, n_i é a vorticidade e $\gamma_1^{(i)}$ e $\gamma_2^{(i)}$ são coeficientes ajustáveis para o vórtice i na posição $\vec{r_i}$. Note que no artigo de Bettencourt e Rivers, a expressão para E_{int} é um pouco diferente da Eq. (5.7) porque eles assumiram que $\gamma_1^{(i)} = |n_i|\gamma_2^{(i)}$, o que é válido apenas no regime crítico $\mu = 1$, como mostrado por Speight [98] e verificado através das equações de Bogomol'nyi para este regime. A mesma expressão para $E_{int}(d)$ foi encontrada por Kramer através de uma approximação perturbativa [92] e pode também ser obtida considerando-se fontes puntuais em uma teoria de campos linearizada. [98, 99].

Vê-se facilmente que o potencial na Eq. (5.7) é consistente com o fato de que para $\mu < 1$ (> 1), a interação V-V é atrativa (repulsiva) a longo alcance, levando a um comportamento do tipo-I (tipo-II). Esta conclusão também é valida para interações V-GV, já que a Eq. (5.7) também vale para este caso, onde o potencial de interação é obtido apenas substituindo-se $n_1 = 1$ e $n_2 > 1$ e encontrando-se os coeficientes de ajuste $\gamma_1^{(i)}$ e $\gamma_2^{(i)}$ para este caso. Porém, para interações V-AV, o produto $n_1 n_2$ é sempre negativo, levando a um potencial *atrativo* $E_{int}(d)$ para *qualquer valor* de κ. Além disso, a Eq. (5.7) mostra que a interação entre um antivórtice e um vórtice gigante também é sempre atrativa. Isso pode ser facilmente entendido através de um argumento heurístico: quando um vórtice e um antivórtice estão longe um do outro, a energia do sistema é não-nula, sendo dada pela soma das energias de um vórtice e de um antivórtice; por outro lado, quando eles se aproximam, eles se aniquilam, levando a um estado de *energia zero*. Assim, ao menos a partir de certa distância, a energia do par V-AV deve diminuir à medida que d se aproxima de zero e, como resultado, o potencial de interação torna-se atrativo. Este resultado contradiz a conjectura proposta pela Ref. [161], que afirma que em supercondutores do tipo-I a interação do par V-AV é repulsiva, e que foi usada para explicar a estabilidade da molécula V-AV encontrada em supercondutores mesoscópicos do tipo-I com geometria

triangular. [162, 163] De acordo com nossa teoria, a interação V-AV é sempre atrativa, o que deveria tornar energeticamente desfavorável o surgimento de moléculas V-AV em polígonos de supercondutores do tipo-I, pois nesse caso a interação V-V também é atrativa. [164, 165]

A conjectura proposta na Ref. [161] traz ainda uma outra questão: se vórtices se atraem (repelem) em supercondutores do tipo-I (tipo-II), equanto exatamente o oposto ocorre para interações V-AV, que comportamento devemos esperar para interações V-AV no ponto crítico? Neste regime, ou seja, quando $\mu = 1$, os vórtices não interagem entre si; devemos esperar o mesmo para interações V-AV? A resposta para esta questão é obtida resolvendo-se as equações de Bogomol'nyi [166]

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_1} - iA_1\right) + sgn(n)i\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - iA_2\right)\right]\Psi = 0, \tag{5.8a}$$

$$|\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A}| + sgn(n)\frac{1}{2}\left(|\Psi|^2 - 1\right) = 0. \tag{5.8b}$$

Usando o ansatz de um vórtice escolhido anteriormente, $\Psi(r,\theta) = f(r)e^{in\theta}$ e $\overrightarrow{A} = na(r)\widehat{\theta}/r$, estas equações se tornam [167]

$$r\frac{df}{dr} - sgn(n)n(1-a)f = 0 \tag{5.9a}$$

$$\frac{2n}{r}\frac{da}{dr} + sgn(n)(f^2 - 1) = 0. \tag{5.9b}$$

Substituindo-se estas fórmulas na Eq. (5.9) e descartando os termos de ordem superior em $\sigma(r)$ e $Q(r)$ encontramos $nQ = -sgn(n)r\frac{d\sigma}{dr}$ ou, usando-se a forma assintótica destas funções, $n\gamma_2 rK_1(r) = -sgn(n)\gamma_1 rdK_0(r)/dr = sgn(n)\gamma_1 rK_1(r) \Rightarrow \gamma_1 = sgn(n)n\gamma_2$. Substituindo estas expressões para $\gamma_1^{(i)}$ na Eq. (5.7), mostramos que o potencial de interação V-AV no regime crítico é dado por $E_{int}(d) = 4n_1\gamma_2^{(1)}n_2\gamma_2^{(2)}K_0(d)$, o que ainda é atrativo, já que $n_1 n_2 < 0$. Sendo assim, diferentemente dos pares vórtice-vórtice, um par V-AV exibe um potencial atrativo até mesmo no caso crítico $\mu = 1$.

Note que o potencial de interação V-AV neste trabalho é derivado para um supercondutor volumétrico, na ausência de um campo magnético externo. Por outro lado, as moléculas V-AV mostradas nas Refs. [161, 162, 163] foram encontradas em uma situação diferente, a saber, em sistemas mesoscópicos sob campos externos aplicados, de forma que o campo magnético líquido na região do antivórtice torna-se positivo nesta situação. Sendo assim, nossos resultados põem em questão a afirmação geral (e motivação) das Refs. [161, 162, 163] de que um vórtice e um antivórtice se repelem em supercondutores tipo-I, uma vez que mostramos que, ao menos em amostras volumétricas, isso não é verdade.

Outros motivos, relacionados ao confinamento e aos campos eletromagnéticos resultantes, devem ser explorados para explicar o aumento de estabilidade das moléculas V-AV encontradas nas Refs. [161, 162, 163], o que torna os resultados dos referidos trabalhos ainda mais intrigantes.

Devemos mencionar que, como $\gamma_1 \neq \gamma_2$ para $\mu \neq 1$, o potencial de interação dado pela Eq. (5.7) pode divergir em pequenas distâncias para alguns valores de μ. Isto mostra uma falha desta expressão analítica para d pequeno. Na verdade, para pequenas separações d, o ansatz de superposição proposto por Bettencourt e Rivers e usado nesta seção também falha, uma vez que ele não leva em conta nem as deformações espaciais dos campos, nem a possível formação de vórtices gigantes. [93] Assim, a expressão analítica para o potencial de interação entre vórtices tem validade restrita a grandes distâncias d. Mesmo assim, quando o potencial de interação é calculado de forma numérica, levando em conta todas as características mencionadas acima, os resultados encontrados mostram bom acordo com a Eq. (5.7) para d maior que uma separação crítica d_c que depende de μ, como mostraremos na próxima seção.

A força de interação Ω pode ser obtida derivando-se a energia com relação à distância entre dois vórtices. Os resultados para $\mu = 1$ nos casos V-V e V-GV claramente levam a $\Omega(d) = 0$. A expressão analítica para a força para grandes separações entre vórtices pode ser facilmente derivada da Eq. (5.7) com

$$\Omega(d) = 2\left[n_1 n_2 \gamma_2^{(1)} \gamma_2^{(2)} K_1(d) - \gamma_1^{(1)} \gamma_1^{(2)} \mu K_1(\mu d)\right]. \tag{5.10}$$

5.2 Equações de Ginzburg-Landau para vórtices fixos

Voltemos ao passo i) do procedimento descrito na seção anterior para obter a interação V-V, que consiste em fixar uma mudança de fase circular em torno de cada vórtice. Nesta seção, derivamos as equações de Euler-Lagrange a partir das Eqs. (5.4a) e (5.4b) com os vínculos impostos pelo passo i).

No artigo de Jacobs e Rebbi [93], os autores fixaram a fase para um único vórtice e obtiveram equações de Ginzburg-Landau 'modificadas', dadas pela Eq. (2.18) do referido artigo ou, equivalentemente, Eqs. (5.5a) e (5.5b) do nosso trabalho, assim como a Eq. (7) do artigo de Babaev e Speight [105]. Apesar de apresentarem estas equações em seu artigo, Jacobs e Rebbi não as resolveram diretamente, ao invés disso, eles usaram funções variacionais para $f(r)$ e $a(r)$ e minimizaram a energia E sem resolver as equações

diferenciais.

Para o sistema de dois vórtices, Jacobs e Rebbi fizeram um ansatz diferente, $\Psi = \exp[i\theta_1]\exp[i\theta_2]f(r,\theta)$, onde θ_1 e θ_2 são ângulos azimutais ao redor da posição de cada vórtice, f é uma função real que não necessariamente tem simetria circular e que é zero na posição de cada vórtice, e as vorticidades foram escolhidas como 1 para cada vórtice. Fixando as posições e vorticidades, eles precisaram apenas encontrar f e $\vec{A}$ que minimizam E. Como anteriormente, ao invés de derivarem as equações (diferenciais) de Euler-Lagrange, eles usaram um procedimento variacional, considerando funções variacionais que levam em conta as deformações dos vórtices à medida em que eles se aproximam e se fundem em um vórtice-gigante.

Os resultados de Jacobs and Rebbi são precisos e a vantagem do método proposto por eles é que muitos termos da função variacional podem ser integrados analiticamente. Porém, o procedimento variacional envolve muitos parâmetros, leva a um longo e exaustivo cálculo analítico e a função variacional proposta não está na forma mais geral: se quisermos resolver o problema para um par V-AV ou V-GV, a função variacional deve ser modificada e, consequentemente, as integrais analíticas no procedimento variacional teriam que ser re-calculadas.

Para obter o potencial entre vórtices, nosso método começa a partir do ansatz para dois vórtices $\Psi = e^{in_1\theta_1}e^{in_2\theta_2}f(x,y)$, onde controlamos a vorticidade n_1 e n_2 de cada vórtice. Nós então reescrevemos $e^{in_j\theta_j}$ em coordenadas cartesianas:

$$e^{in_j\theta_j} = \left(\frac{x_j + iy_j}{x_j - iy_j}\right)^{n_j/2}, \tag{5.11}$$

onde $\vec{r}_j = (x_j, y_j, 0)$ é o vetor posição no plano com origem no centro do vórtice j. Como estudaremos o caso de dois vórtices separados por uma distância d, tomamos $\vec{r}_1 = (x - d/2, y, 0)$ e $\vec{r}_2 = (x + d/2, y, 0)$.

Depois disso, substituímos o ansatz na Eq. (5.3) para obter o funcional de energia F para vórtices com posições fixas

$$\begin{aligned} F = &\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2\right] \\ &+\frac{1}{2}f^2\left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x\overline{Y} - A_y\overline{X}) + A^2\right] \\ &+\frac{\mu^2}{8}(1-f^2)^2 + \frac{1}{2}|\vec{\nabla}\times\vec{A}|^2, \end{aligned} \tag{5.12}$$

onde

$$\overline{X} = \frac{n_1 x_1}{r_1^2} + \frac{n_2 x_2}{r_2^2}, \qquad \overline{Y} = \frac{n_1 y_1}{r_1^2} + \frac{n_2 y_2}{r_2^2}.$$

Note que, apesar de $\overline{X}$ e $\overline{Y}$ parecerem não ter nenhum significado físico, eles estão relacionados ao gauge proposto por Jacobs e Rebbi para o potencial vetor, $\vec{A} = na(r)\widehat{\theta}/r$, ou $\vec{A} = (-n\sin\theta/r, n\cos\theta/r, 0) = (-ny/r^2, nx/r^2, 0)$ em coordenadas cartesianas, que mostrou-se ser compatível com a simetria das equações de Ginzburg-Landau, levando às Eqs. (5.5a) e (5.5b) para um único vórtice. Porém, como estamos buscando equações diferenciais mais gerais para dois vórtices, não iremos fazer nenhuma escolha a priori para o gauge do potencial vetor.

Em trabalhos anteriores, [93, 105] as equações de Euler-Lagrange não foram derivadas explicitamente. Nós derivamos as equações de Euler-Lagrange para o presente problema, que são dadas por

$$\nabla^2 f - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x\overline{Y} - A_y\overline{X}) + A^2\right] f + \frac{\mu^2}{2}(1-f^2)f = 0, \tag{5.13a}$$

e

$$\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A} + \left[\overrightarrow{A} - \frac{n_1\widehat{\theta}_1}{r_1} - \frac{n_2\widehat{\theta}_2}{r_2}\right] f^2 = 0, \tag{5.13b}$$

onde os vetores unidade para a coordenada angular em torno de cada vórtice podem ser reescritos como $\widehat{\theta_j} = (-y_j/r_j, x_j/r_j, 0)$. Pode-se até mesmo verificar, após uma manipulação das equações, que colocando-se $n_2 = 0$ nestas equações obtém-se a Eq. (2.18) do artigo de Jacobs e Rebbi, que é a equação para um único vórtice, mas em coordenadas cartesianas. Resolver as Eqs. (5.13a) e (5.38c) é tão difícil quanto resolver as equações de Ginzburg-Landau comuns, o que já foi feito em muitos trabalhos anteriores na literatura. [94, 164, 165]

5.3 Resultados numéricos e funções de fitting

Resolvemos as Eqs. (5.13a) e (5.38c) numericamente usando a técnica de diferenças finitas e um método de relaxação, adequado para equações diferenciais não-lineares. [119] O sistema bi-dimensional é dividido em uma malha quadrada uniforme 601×601 com dimensão total $60\lambda \times 60\lambda$. As singularidades na amplitude do parâmetro de ordem aparecem naturalmente na posição central de cada vórtice, como consequência da fase circular fixa $e^{in_i\theta_i}$ definida ao redor de cada vórtice i, que garante a existência de zeros no parâmetro de ordem no centro de cada vórtice. [93] Funções analíticas de fitting serão propostas para

as curvas obtidas numericamente, onde o erro no ajuste é definido pela variação [119]

$$\nu = \sum_{n=1}^{N} \frac{[G(n) - G_{fit}(n)]^2}{(N - N_p)}, \tag{5.14}$$

onde $G(n)$ é o conjunto numérico, $G_{fit}(n)$ é a função analítica de fitting, N é o tamanho do conjunto de dados e N_p é o número de parâmetro variacionais da função de fitting. [1]

5.3.1 Interação vórtice-vórtice

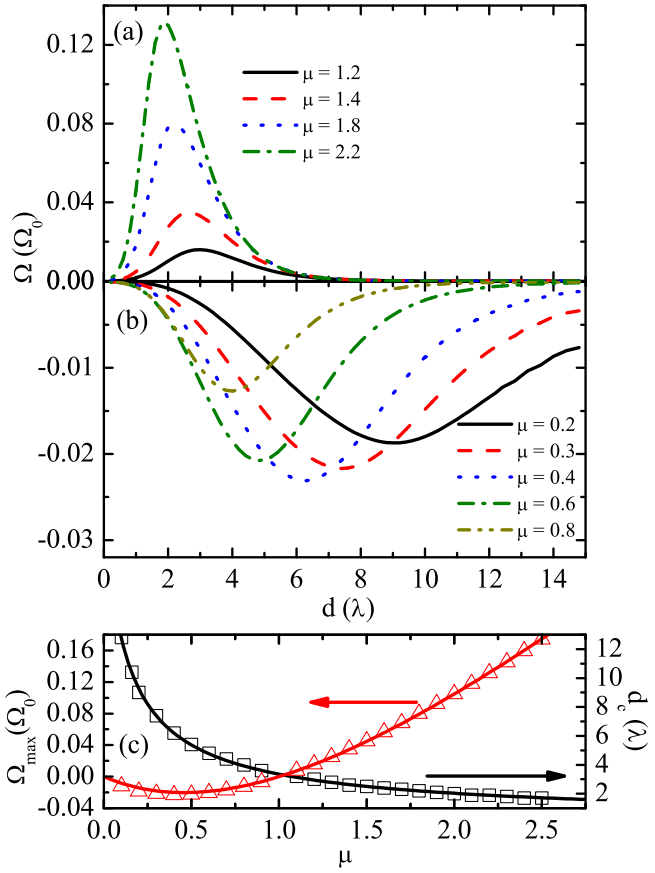

Figura 69: Força de interação vórtice-vórtice Ω obtida numericamente como função da separação d entre vórtices, para vários valores de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ nos regimes (a) tipo-II e (b) tipo-I. (c) Separação crítica d_c (quadrados, escala da direita) e extremo Ω_{max} (triângulos, escala da esquerda), que correspondem respectivamente à posição e à amplitude do pico de força, como funções do parametro de Ginzburg-Landau. As funções de fitting para d_c e Ω_{max} são mostradas pelas curvas sólidas.

Os resultados numéricos para a interação V-V são mostrados na Fig. 69, para vários

[1] Um ajuste perfeito levaria a $\nu \to 0$.

valores de μ no regime tipo-II (a) e tipo-I (b). Note que para $\mu \approx 0$, os vórtices não devem interagir e a força deve ser nula, mas para $0 < \mu < 1$ eles se atraem (regime tipo-I) e a força é negativa neste caso. Porém, no ponto crítico $\mu = 1$ a força deve se anular novamente. Assim, no tipo-I, dois regimes diferentes podem ser identificados: um onde o módulo da força aumenta a partir do zero, à medida que μ aumenta a partir de zero, e outro onde o módulo da força diminui de volta a zero, à medida que μ se aproxima de 1. Isto pode ser visto na Fig. 69(c), onde o extremo do pico de força Ω_{max} (triângulos abertos, escala da esquerda) aumenta com μ para pequenos valores de μ, enquanto para $0.6 < \mu < 1$ este pico diminui com μ, aproximando-se de zero quando $\mu = 1$. Os resultados numéricos podem ser aproximados pela função $\Omega_{max}(\mu) = 0.0961\mu(\mu - 1)/(1 + 0.2863\mu)^{1.341}$, que é mostrada pela curva vermelha na Fig. 69(c). Nas Figs. 69(a,b) observamos que a força exibe um máximo em uma certa separação crítica d_c, que depende do parâmetro de Ginzburg-Landau $\mu = \sqrt{2}\kappa$. A separação crítica d_c também é mostrada na Fig. 69(c) (quadrados abertos, escala da direita) como função de μ. A função que se aproxima desta curva, dada por $d_c = 22.203(1 + 10.504\mu)^{-0.774}$ (com variação estimada em $\nu \approx 0.3\%$), é mostrada pela curva preta na Fig. 69(c), que sugere que a separação crítica para interações V-V se aproxima de zero em situações extremas do tipo-II ($\mu \to \infty$). Uma situação extrema do tipo-II pode ser simulada através de um filme fino supercondutor de espessura $w \ll \lambda$, onde a profundidade de penetração magnética efetiva é dada por $\Lambda = \lambda^2/w$, e para o qual expressões analíticas para a interação V-V foram propostas por Pearl [168], e posteriormente por Brandt [169]. Porém, no caso de filmes supercondutores, a força de interação V-V decai monotonicamente como $1/d^2$, enquanto no presente caso de um supercondutor volumétrico, o decaimento é exponencial. Assim, apesar de ambas as situações serem consideradas como limites extremos do tipo-II, nossos resultados para supercondutores volumétricos com $\mu \to \infty$ são quantitativamente diferentes daqueles obtidos para filmes finos supercondutores.

A importância de se resolver as Eqs. (5.13a) e (5.38c) numericamente para dois vórtices separados está na possibilidade de se obter a força de interação entre vórtices até mesmo no limite de pequenas separações, que não pode ser descrito pelas funções assintóticas encontradas na literatura [100] e pela Eq. (5.10). Porém, uma vez que resovler estas equações é geralmente uma tarefa difícil, nós tentamos propor aqui uma expressão analítica que possui todas as características da força obtida numericamente como função da separação entre vórtices. Esta expressão pode ser útil, por exemplo, para a modelagem numérica de estruturas de vórtices através de simulações de dinâmica molecular (MD), onde os vórtices são considerados como partículas puntuais. Até o momento, nestas

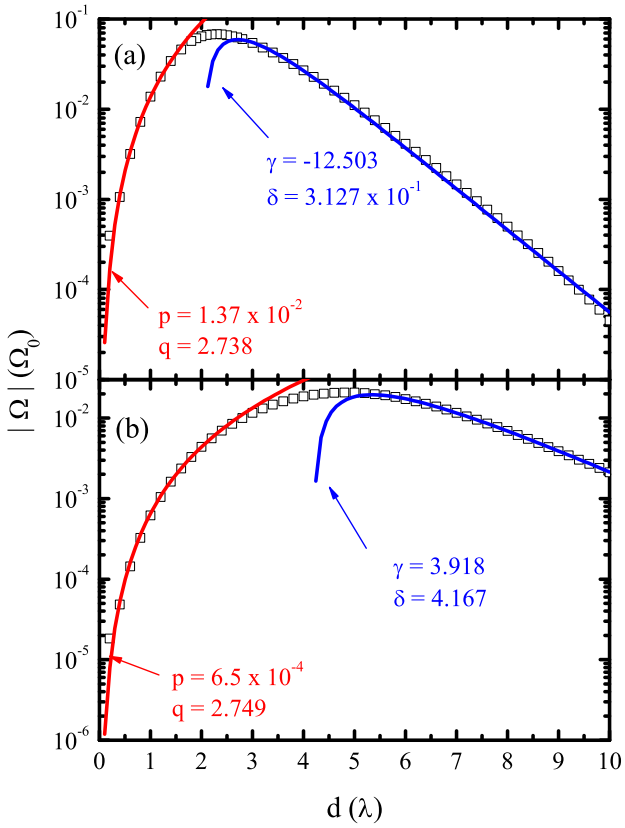

Figura 70: Comparação entre as forças de interação V-V como função da separação d obtidas pelo método numérico (símbolos) e pelas expressões assintóticas (curvas) das Eqs. (5.15, 5.16), para $\mu = 1.7$ (a) e $\mu = 0.6$ (b). As forças são mostradas em escala log_{10} e os valores dos parâmetros de ajuste p, q, γ e δ são dados em cada painel.

simulações de MD usa-se tipicamente as expressões assintóticas para a interação V-V, que são válidas apenas no regime de grandes separações. [170, 171] Para obter uma função de fitting apropriada, iremos primeiro analisar separadamente os comportamentos para grandes e pequenas separações entre vórtices: para grandes separações, usando-se a forma assintótica das funções de Bessel modificadas, a Eq. (5.10) pode ser reescrita como

$$\Omega(d \to \infty) = \gamma d^{-\frac{1}{2}} \left(\delta e^{-d} - \sqrt{\mu} e^{-\mu d} \right), \tag{5.15}$$

onde γ e δ são parâmetros de ajuste. Para pequenas separações, nossos resultados mostram que uma potência de d descreve a força satisfatoriamente, ou seja

$$\Omega(d \to 0) = p d^q, \tag{5.16}$$

com p e q como parâmetros de ajuste. Dois exemplos destes fittings são mostrados mostrados na Fig. 70, para $\mu = 0.6$ (em baixo) e $\mu = 1.7$ (em cima). Note que o parâmetro q

depende fracamente de μ, exibindo valores entre ≈ 2.7 e ≈ 2.8 para todos os valores de μ considerados no caso V-V.

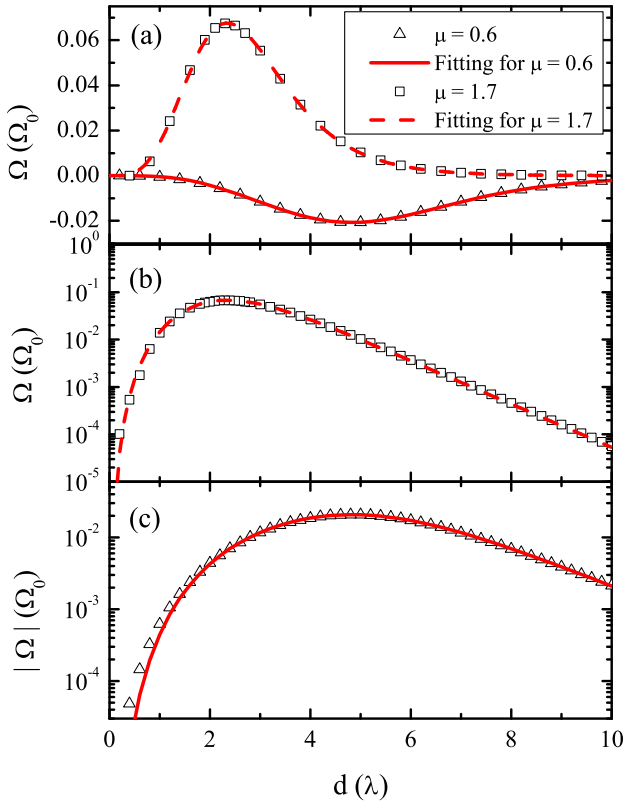

Figura 71: (a) Comparação entre as forças de interação V-V como função da separação d obtidas pelo método numérico (símbolos) e pela função de fitting (curvas) dada pela Eq. (5.17). As curvas sólidas (tracejadas) e os triângulos (quadrados) são os resultados para $\mu = 0.6$ (1.7). (b-c) Os resultados para cada valor de μ são mostrados separadamente em escala logarítmica, para enfatizar os pequenos desvios entre a função de fitting e os dados numéricos.

Seguindo o comportamento estabelecido para a interação nos casos limites, nós propomos uma única função que tem os comportamentos acima como limites:

$$\Omega_{fit}(d) = \eta_1 \frac{d^{\eta_3}}{1 + \eta_2 d^{\eta_3 + \frac{1}{2}}} \left(\eta_4 e^{-d} - \sqrt{\mu} e^{-\mu d} \right), \tag{5.17}$$

onde η_i ($i = 1$ - 4) são quatro parâmetros de ajuste.

Fig. 71 mostra o fitting obtido com a Eq. (5.17) para os mesmos valores de μ apresentados na Fig. 70. O fitting não é ideal para $d < \lambda$, onde a força se torna muito pequena. Mesmo assim, encontramos um erro no ajuste menor que 1%. Note que o potencial de interação V-V, que é a integral da força, será ainda mais preciso.

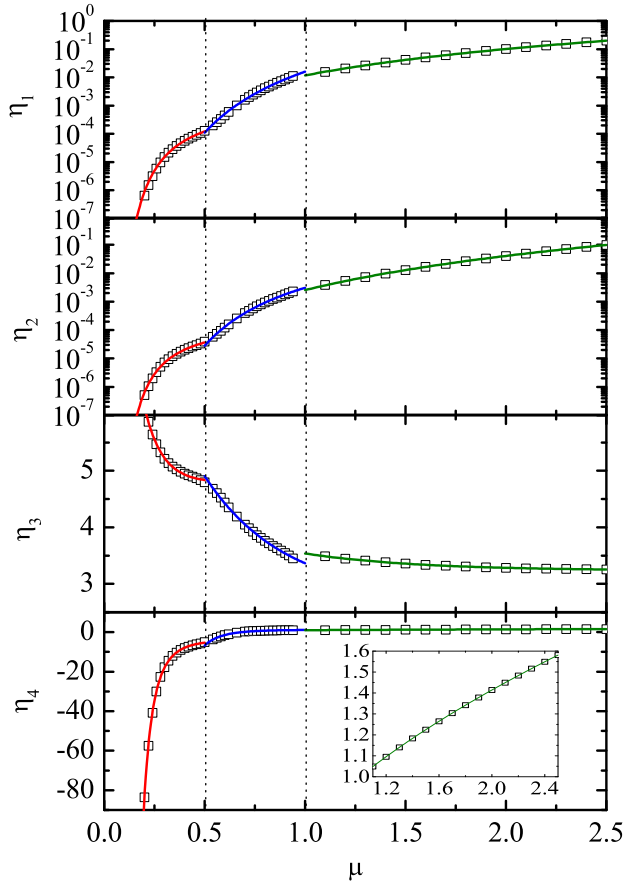

Figura 72: Parâmetros de ajuste (símbolos) da Eq. (5.17) como função de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ para o caso V-V. As curvas são funções de fitting dadas pelas Eqs. (5.18) para $\eta_i(\mu)$ $(i = 1-4)$, em três intervalos diferentes: $0 < \mu < 0.5$, $0.5 < \mu < 1$ e $1 < \mu$. A inserção mostra uma ampliação dos resultados para η_4 para os maiores valores de μ.

Os valores dos quatro parâmetros de ajuste são dados na Tabela I, para μ variando entre 0.2 e 2.5. Note que a variação estimada ν cresce com μ, então Eq. (5.17) não produz resultados precisos em casos tipo-II extremos. De qualquer forma, no caso tipo-II extremo a separação crítica d_c se aproxima de zero, como mencionado anteriormente, e consequentemente, a parte de curto alcance da interação V-V não deve ser importante nesta situação. Assim, a expressão assintótica $\Omega(d) = f_0 K_1(d)$ frequentemente usada na literatura, [172, 173] que pode ser obtida a partir da Eq. (5.10) fazendo-se $\mu \to \infty$, deve levar a uma descrição satisfatória da força de interação V-V em situações tipo-II extremas.

Tentamos então obter uma expressão analítica para os parâmetros de ajuste como função de μ. A dependência deles em μ é mostrada na Fig. 72. Três intervalos diferentes de μ, delimitados pelas linhas pontilhadas verticais na Fig. 72, podem ser distinguidos. A explicação física para a existência de três comportamentos diferentes dos parâmetros

Tabela 1: Parâmetros de ajuste η_i e o erro estimado ν para a Eq. (5.17) no caso V-V, para diversos valores de μ.

μ	η_1	η_2	η_3	η_4	$\nu(\times 10^{-8})$
0.2	6.564×10^{-7}	5.13×10^{-7}	6.135	-83.611	1.42
0.3	1.522×10^{-5}	7.268×10^{-6}	5.213	-17.667	3.96
0.4	5.698×10^{-5}	2.041×10^{-5}	4.950	-8.014	5.06
0.5	1.284×10^{-4}	3.911×10^{-5}	4.796	-5.090	1.95
0.6	4.474×10^{-4}	1.222×10^{-4}	4.440	-1.538	0.448
0.7	1.62×10^{-3}	3.968×10^{-4}	4.046	0.237	0.239
0.8	4.12×10^{-3}	9.326×10^{-4}	3.760	0.766	0.215
0.9	8.46×10^{-3}	1.79×10^{-3}	3.544	0.943	0.116
1.1	1.546×10^{-2}	3.88×10^{-3}	3.489	1.049	0.139
1.2	2.068×10^{-2}	5.37×10^{-3}	3.443	1.095	0.98
1.3	2.67×10^{-2}	7.31×10^{-3}	3.410	1.140	3.16
1.4	3.369×10^{-2}	9.78×10^{-3}	3.382	1.183	7.24
1.5	4.175×10^{-2}	1.286×10^{-2}	3.358	1.225	13.8
1.6	5.094×10^{-2}	1.664×10^{-2}	3.338	1.265	23.6
1.7	6.136×10^{-2}	2.121×10^{-2}	3.320	1.304	36.8
1.8	7.308×10^{-2}	2.667×10^{-2}	3.306	1.342	53.9
1.9	8.618×10^{-2}	3.311×10^{-2}	3.294	1.378	75.3
2.0	0.1008	4.066×10^{-2}	3.283	1.414	101.1
2.1	0.1169	4.94×10^{-2}	3.275	1.449	131.6
2.2	0.1347	5.945×10^{-2}	3.268	1.483	166.7
2.3	0.1542	7.093×10^{-2}	3.262	1.517	206.6
2.4	0.1756	8.396×10^{-2}	3.258	1.549	251.1
2.5	0.199	9.866×10^{-2}	3.254	1.581	286.2

Tabela 2: Parâmetros de ajuste nas Eqs. (5.18 a-d) para o caso V-V, para três intervalos diferentes de μ.

Parameter	$\mu < 0.5$	$0.5 < \mu < 1$	$\mu > 1$
A_1	5.977	-0.5420	-0.9404
B_1	-1.092	-9.041	-74.584
C_1	-1.191	-0.6323	-4.221×10^{-2}
A_2	13.845	7.935×10^{-2}	-0.9843
B_2	-0.6218	-5.359	-379.321
C_2	-1.373	-0.9084	-1.057×10^{-2}
A_3	4.79	2.756	3.234
B_3	12.542	7.587	1.849
C_3	-11.183	-2.523	-1.804
A_4	-3.677	1.215	0
B_4	-8.663×10^{-2}	-0.1229	1
C_4	-4.244	-6.022	0.5

η_i como função de μ é a seguinte: para o tipo-I ($\mu < 1$), como explicado anteriormente, deve haver um regime onde o tamanho do pico de força atrativa aumenta com μ e outro regime onde ele diminui com μ. Isto define os intervalos 1 ($\mu < 0.5$) e 2 ($0.5 < \mu < 1$), respectivamente. O intervalo 3 é então o regime tipo-II, para $\mu > 1$, onde a força de interação é repulsiva. As funções $\eta_i(\mu)$ na Fig. 72 foram aproximam-se de

$$\eta_1(\mu) = e^{B_1(\mu^{C_1}+A_1)}, \tag{5.18a}$$

$$\eta_2(\mu) = e^{B_2(\mu^{C_2}+A_2)}, \tag{5.18b}$$

$$\eta_3(\mu) = A_3 + B_3 e^{C_3\mu} \tag{5.18c}$$

e

$$\eta_4(\mu) = A_4 + B_4\mu^{C_4}, \tag{5.18d}$$

com parâmetros A_i, B_i e C_i diferentes para cada região, listados na Tabela II. Estas funções de fitting para $\eta_i(\mu)$ são mostradas como curvas na Fig. 72. Note que o parâmetro η_4 deve satisfazer a condição $\eta_4 \leq \sqrt{\mu}$ ($\geq \sqrt{\mu}$) no caso tipo-I (tipo-II), se não a diferença entre os termos exponenciais na Eq. (5.17) apresentaria uma mudança de sinal para pequenas separações, levando a uma falsa região repulsiva (atrativa) neste caso. No caso tipo-II, esta condição leva a $\eta_4(\mu) \approx \sqrt{\mu}$ como o melhor falor para este parâmetro de ajuste.

É importante salientar que os resultados obtidos para η_2 não apresentam os mesmos valores que q na Eq. (5.16) para a lei de potência em pequenas separações, que, como mencionado anteriormente, estão entre ≈ 2.7 e ≈ 2.8. Isto é razoável, porque os termos exponenciais na Eq. (5.17) ainda influenciam no limite de pequenas distâncias d nesta

expressão, assim, o parâmetro η_2 deve assumir um valor diferente de q para compensar estes termos. Os valores obtidos para η_4, que é o parâmetro que controla o comportamento da Eq. (5.10) para longas distâncias d, também não são os mesmos obtidos quando usamos o comportamento assintótico de cada vórtice para encontrar os parâmetros $\gamma_1^{(i)}$ e $\gamma_2^{(i)}$ na Eq. (5.10). Na verdade, para $\mu > 1$, encontramos $\eta_4 \approx \sqrt{\mu}$, que equivale a $\gamma_1^{(i)} = \gamma_2^{(i)}$. À medida que μ aumenta, a diferença entre $\gamma_1^{(i)}$ e $\gamma_2^{(i)}$ é intensificada [98], o que leva a um erro ν maior para maiores valores de μ, como mostrado na Tabela I. Mesmo assim, esta escolha de η_4 convenientemente leva a uma função que decai exponencialmente para grandes separações d, como esperado para interações V-V em supercondutores volumétricos, e que não apresenta nenhuma troca de sinal em pequenas separações. Obviamente, a função de fitting Eq. (5.17) pode ser aprimorada para podermos obter um ajuste melhor para a parte que corresponde a grandes separações e para reproduzir perfeitamente a lei de potência para pequenas separações, mas isso requer mais parâmetros de ajuste e expressões bem mais complicadas. A Eq. (5.17) é simples e ainda produz resultados razoáveis para $0 \leq \mu \leq 2.5$, como verificado pelos pequenos erros $\nu < 10^{-6}$ encontrados na Tabela I e pela comparação com os resultados numéricos na Fig. 71.

5.3.2 Interação vórtice-vórtice gigante

Como observado na Fig. 69, a força de interação entre dois vórtices mostra um máximo em uma certa separação crítica d_c e decai para zero tanto para separações muito grandes, como para separações muito pequenas. A primeira situação é razoável, já que a interação entre vórtices deve ser mais fraca quando eles estão longe um do outro. A segunda ocorre devido à formação de um estado de vórtice gigante: quando dois vórtices de vorticidade $n_1 = 1$ e $n_2 = 1$, por exemplo, são colocados próximos um do outro, eles se juntam, formando um vórtice gigante com vorticidade $n = n_1 + n_2 = 2$. [93, 94, 95, 96] Na ausência de confinamento lateral, o vórtice gigante é um estado estável (instável) em sistemas tipo-I (tipo-II) e pode assim interagir com outros vórtices, o que nos motiva a investigar a força de interação entre um vórtice e um vórtice gigante.

A força de interação V-GV é mostrada na Fig. 73 como função da distância entre eles, para vários valores de μnos regimes tipo-II (a) e tipo-I (b). O comportamento das curvas é bastante similar ao da Fig. 69 para o caso V-V, mas com amplitudes e separações críticas diferentes. A separação crítica d_c, onde os vórtices começam a se misturar, obtida numericamente para a interação V-GV é mostrada como função de μ na Fig. 73 (c), junto com sua função de fitting $d_c = 25.043(1 + 6.632\mu)^{-0.8862}$ (com erro estimado em

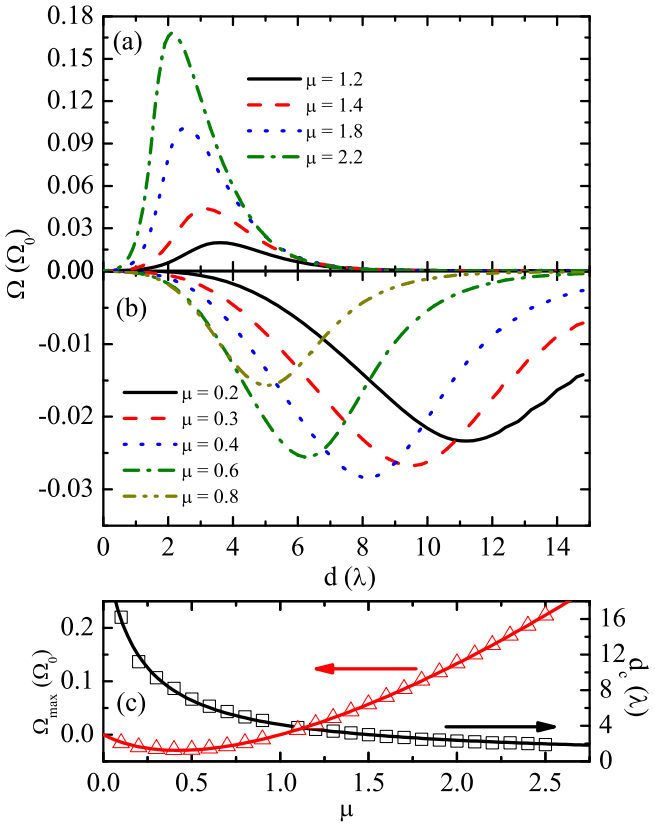

Figura 73: Força de interação vórtice-vórtice gigante Ω obtida numericamente como função da separação d, para vários valores de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ nos regimes (a) tipo-II e (b) tipo-I. (c) Separação crítica d_c (quadrados, escala da direita) e extremo Ω_{max} (triângulos, escala da esquerda), que correspondem respectivamente à posição e à amplitude do pico de força, como funções do parametro de Ginzburg-Landau. As funções de fitting para d_c e Ω_{max} são mostradas pelas curvas sólidas.

$\nu \approx 2\%$). Note que a separação crítica pra a interação V-GV é sempre maior que a do caso V-V, pois o vórtice gigante tem um centro maior em comparação com um vórtice $n = 1$. Mesmo assim, a função de fitting mostra que o menor valor de separação crítica para o caso V-GV, que seria obtido no regime tipo-II extremo, também é $d_c(\mu \to \infty) = 0$, como no caso V-V. O comportamento do extremo do pico de força Ω_{max} como função de μ, mostrado como triângulos abertos na Fig. 73(c), é similar àquele encontrado no caso V-V, com a amplitude aproximando-se de zero para $\mu \to 0$ e $\mu \to 1$, e aumentando monotonicamente para μ aumentando a partir de 1. O extremo do pico de força pode ser aproximado pela função $\Omega_{max} = 0.1709\mu(\mu - 1)/(1 + 1.854\mu)^{0.6087}$, que é mostrado pela curva sólida na Fig. 73(c).

Na Sec. II, encontramos analiticamente que a Eq. (5.10) permanece válida para

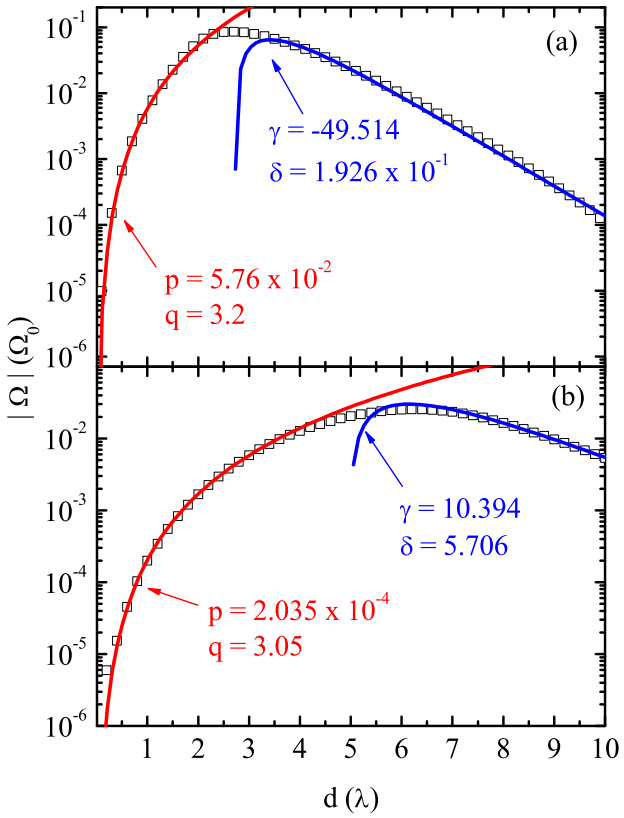

Figura 74: Comparação entre a força de interação V-GV como função da separação d, obtida pelo método numérico (símbolos) e pelas expressões analíticas (curvas) das Eqs. (5.15, 5.16), para $\mu = 1.7$ (a) and $\mu = 0.6$ (b). As forças são mostradas em escala log_{10} e os valores dos parâmetros de ajuste p, q, γ e δ são dados em cada figura.

interações assintóticas V-GV, simplesmente escolhendo-se $n_1 = 1$, $n_2 = 2$ e mudando-se os parâmetros $\gamma_1^{(i)}$ e $\gamma_2^{(i)}$ apropriadamente. Além disso, nossos resultados mostram que a força no limite de pequenas separações neste caso pode também ser descrita por uma potência da separação d. As funções de fitting para os limites de pequenas e grandes separações, dadas por Eqs. (5.15, 5.16), são mostradas na Fig. 74 para a interação V-GV, apresentando bom acordo com os resultados numéricos. Isto sugere que as funções de fitting dadas pela Eq. (5.17) podem não só ser usadas para interações V-V, mas também para interações V-GV.

Os quatro parâmetros de ajuste η_i (i = 1 - 4) encontrados para cada valor de μ no caso V-GV são mostrados na Tabela III, para μ e 0.2 a 2.5. Como no caso V-V, o erro ν aumenta para $\mu > 1$, de forma que a função sugerida deve falhar em situações extremas do tipo-II. Como um exemplo, a força de interação V-GV para $\mu = 1.7$ e 0.6 é mostrada na Fig. 75 como função da separação d entre o vórtice e o vórtice gigante, junto com

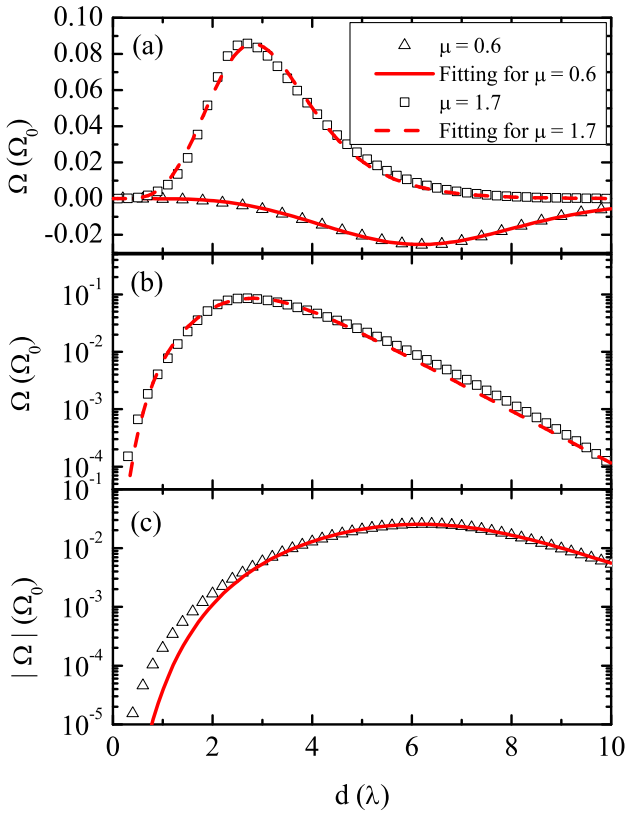

Figura 75: (a) Comparação entre as forças de interação V-V como função da separação d obtidas pelo método numérico (símbolos) e pela função de fitting (curvas) dada pela Eq. (5.17). As curvas sólidas (tracejadas) e os triângulos (quadrados) são os resultados para $\mu = 0.6$ (1.7). Os resultados para cada valor de μ são também mostrados separadamente em escala logarítmica, para enfatizar os pequenos desvios entre a função de fitting e os dados numéricos: (b) $\mu = 1.7$; (c) $\mu = 0.6$.

as curvas de fitting dadas pela Eq. (5.17) com os respectivos parâmetros encontrados na Tabela III. Apesar do erro ainda ser menor que 10^{-5} nestes casos, podemos ver no gráfico em escala logarítmica na Fig. 75(b) e (c) que para pequenas separações a função de fitting é menos precisa, comparado com o caso V-V mostrado na Fig. 71, onde os erros são menores que 10^{-7}. De qualquer forma, na região de pequenas separações d a força de interação é bastante fraca e, consequentemente, o desvio na força também é bastante pequeno.

A dependência dos parâmetros de ajuste em μ é mostrada na Fig. 76 (quadrados) para o caso de uma interação V-GV $n_1 = 1$ e $n_2 = 2$, onde o fitting dos dados também é mostrado (curvas). Mais uma vez, três comportamentos diferentes de η_i como função de μ são observados, de forma que os dados são ajustados usando parâmetros A_i, B_i e C_i diferentes nas Eqs. (5.18a-d). O motivo para a existência de três comportamentos

Tabela 3: Parâmetros de ajuste η_i e erros estimados ν para a Eq. (5.17) no caso V-GV ($n_1 = 1$ e $n_2 = 2$), para μ entre 0.2 e 2.5.

μ	η_1	η_2	η_3	η_4	$\nu(\times 10^{-8})$
0.2	1.495×10^{-9}	6.073×10^{-10}	8.440	-443.65	1.72
0.3	2.347×10^{-7}	4.944×10^{-8}	6.929	-58.765	16.2
0.4	1.165×10^{-6}	1.69×10^{-7}	6.679	-24.312	33.7
0.5	2.302×10^{-6}	2.823×10^{-7}	6.628	-19.433	22.6
0.6	1.083×10^{-5}	1.230×10^{-6}	6.199	-8.372	8.6
0.7	6.775×10^{-5}	6.892×10^{-6}	5.681	-1.661	2.6
0.8	3.681×10^{-4}	3.283×10^{-5}	5.173	0.446	0.91
0.9	1.54×10^{-3}	1.196×10^{-4}	4.706	0.942	0.41
1.1	3.81×10^{-3}	3.847×10^{-4}	4.539	1.049	0.69
1.2	5.98×10^{-3}	6.366×10^{-4}	4.423	1.095	6.0
1.3	8.78×10^{-3}	1.01×10^{-3}	4.330	1.140	21.7
1.4	1.237×10^{-2}	1.55×10^{-3}	4.248	1.183	54.0
1.5	1.684×10^{-2}	2.3×10^{-3}	4.175	1.225	108.8
1.6	2.177×10^{-2}	3.27×10^{-3}	4.148	1.265	196.0
1.7	2.813×10^{-2}	4.57×10^{-3}	4.095	1.304	315.8
1.8	3.561×10^{-2}	6.22×10^{-3}	4.048	1.342	474.8
1.9	4.428×10^{-2}	8.28×10^{-3}	4.008	1.378	676.0
2.0	5.421×10^{-2}	1.08×10^{-2}	3.973	1.414	676.0
2.1	6.549×10^{-2}	1.384×10^{-2}	3.942	1.449	1218
2.2	7.818×10^{-2}	1.747×10^{-2}	3.916	1.483	1564
2.3	9.236×10^{-2}	2.174×10^{-2}	3.894	1.517	1962
2.4	0.1081	2.671×10^{-2}	3.876	1.549	2410
2.5	0.1255	3.245×10^{-2}	3.861	1.581	2911

distintos dos parâmetros η_i como função de μ é o mesmo do caso V-V. Além disso, para $\mu > 1$ (regime tipo-II), encontramos $\eta_4(\mu) \approx \sqrt{\mu}$, como no caso V-V. Os parâmetros A_i, B_i e C_i para o caso V-GV, para cada intervalo de μ, são dados na Tabela IV.

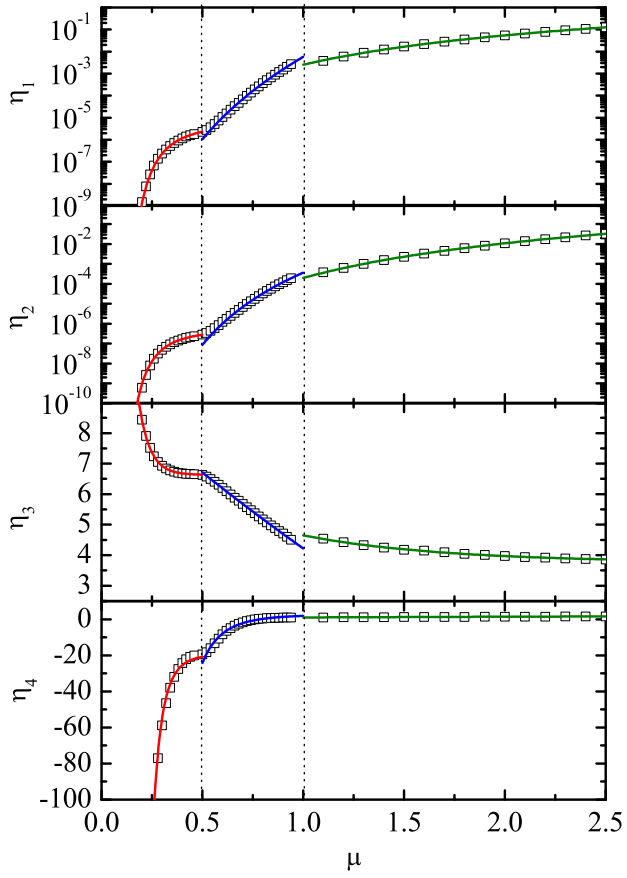

Figura 76: Parâmetros de ajuste $\eta_{i=1-4}$ (símbolos) da Eq. (5.17) como função de $\mu = \sqrt{2}\kappa$ para o caso V-GV. As curvas mostram o ajuste de $\eta_i(\mu)$ dado pelas Eqs. (5.18a-d) para três intervalos diferentes, definidos no texto como intervalo 1 ($0 < \mu < 0.5$), intervalo 2 ($0.5 < \mu < 1$) e intervalo 3 ($1 < \mu$).

5.3.3 O problema de três vórtices

Até agora, consideramos apenas a interação de dois corpos entre vórtices. No estudo da dinâmica de muitos vórtices, geralmente considera-se a soma de interações entre pares. Neste sentido, a força agindo sobre o vórtice i em um sistema com muitos vortices formando uma certa configuração é dada por [172, 173]

$$\vec{\Omega}_i = \sum_{j \neq i} \Omega\left(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|\right) \hat{r}_{i,j} \tag{5.19}$$

Tabela 4: Parâmetros de ajuste das Eqs. (5.18a-d) para o caso V-GV ($n_1 = 1$ e $n_2 = 2$), para três intervalos diferentes de μ.

Parameter	$\mu < 0.5$	$0.5 < \mu < 1$	$\mu > 1$
A_1	61.948	-0.9926	-0.5785
B_1	-0.1937	-693.484	-14.199
C_1	-2.350	-1.779×10^{-2}	-0.3514
A_2	101.28	-0.6458	-0.5461
B_2	-0.1417	-22.365	-18.823
C_2	-2.374	-0.4566	-0.3461
A_3	6.631	-15.424	3.761
B_3	67.184	24.938	3.748
C_3	-18.061	-0.2385	-1.442
A_4	-19.425	2.654	0
B_4	-2.396×10^{-2}	-0.7764	1
C_4	-6.075	-5.113	0.5

onde $\vec{r_i}$ é a posição do vórtice i e $\hat{r}_{i,j} = (\vec{r_i} - \vec{r_j})/|\vec{r_i} - \vec{r_j}|$. Neste modelo, a força de interação V-V é obtida derivando-se o potencial entre um par de vórtices, e é geralmente assumida como $\Omega(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|) = f_0 K_1(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|/\lambda)$, onde f_0 é uma constante. Como mencionado na Sec. IV A, isso corresponde à situação do tipo-II extremo ($\mu \gg 1$). Para valores intermediários de μ, devemos considerar ambas as funções de Bessel na Eq. (5.10), o que não é conveniente, uma vez que, como mencionado na Sec. II, esta expressão diverge para pequenas separações V-V e não leva em conta nem a deformação dos núcleos dos vórtices, nem a formação de vórtices gigantes. Assim, usar a Eq. (5.17) para a força de interação entre um par de vórtices, com os parâmetros dados pela Tabela I ou pelas Eqs. (5.18a-d), seria uma maneira fácil de levar-se em conta todas estas características e de evitar-se a divergência para pequenas separações. Apesar disto resolver o problema nas simulações padrão de dinâmica de vórtices, que envolvem apenas interações entre pares, mostraremos aqui quando esta aproximação passa a falhar, considerando como exemplo a interação entre três vórtices localizados nos vértices de um triângulo equilátero.

Consideremos três vórtices nas posições $r_1 = (-d/2, -\sqrt{3}d/4)$, $r_2 = (d/2, -\sqrt{3}d/4)$ e $r_3 = (0, \sqrt{3}d/4)$, formando um triângulo de lado d. O ansatz de três vórtices é $\Psi = e^{in_1\theta_1}e^{in_2\theta_2}e^{in_3\theta_3}f(x,y)$, onde controlamos as vorticidades n_1, n_2 e n_3 de cada vórtice. Para este exemplo, consideramos três vórtices de mesma vorticidade $n_1 = n_2 = n_3 = 1$. Seguindo o procedimento descrito na Sec. 5.2, obtemos as equações de Euler-Lagrange para o problema de três vórtices, onde a primeira equação é similar à Eq. (5.13a), mas com $\overline{X}$ e $\overline{Y}$ contendo três termos

$$\overline{X} = \frac{x_1}{r_1^2} + \frac{x_2}{r_2^2} + \frac{x_3}{r_3^2}, \qquad \overline{Y} = \frac{y_1}{r_1^2} + \frac{y_2}{r_2^2} + \frac{y_3}{r_3^2},$$

e a segunda equação é

$$\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A} + \left[\overrightarrow{A} - \frac{1}{r_1}\widehat{\theta}_1 - \frac{1}{r_2}\widehat{\theta}_2 - \frac{1}{r_3}\widehat{\theta}_3\right] f^2 = 0. \tag{5.20}$$

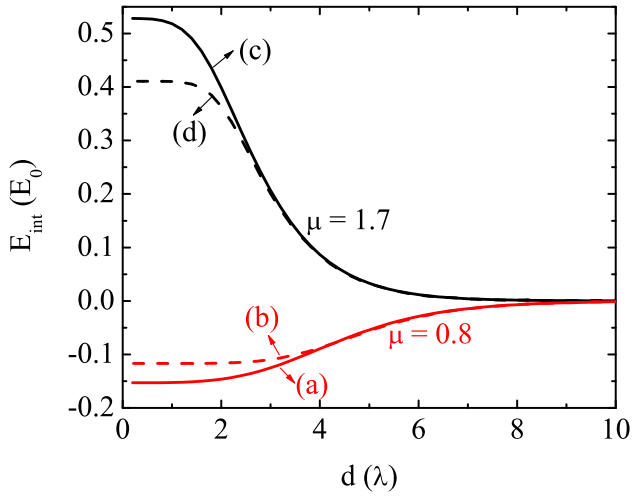

Figura 77: Energia da interação entre três vórtices localizados nos vértices de um triângulo equilátero como função do comprimento do lado d do triângulo, obtidos pelo ansatz de três vórtices (tracejada) e pela interação entre pares (sólida), isto é, por $E_{int}(d) = 3E_{int}^{pair}(d)$, para $\mu = 0.8$ e 1.7.

Similarmente ao caso das interações V-V e V-GV, resolvemos as equações de Euler-Lagrange para três vórtices numericamente, usando o esquema de diferenças finitas e o método de relaxação. Os resultados obtidos para a energia de interação como função da distância V-V, ou equivalentemente, do lado d do triânglo, são mostrados como curvas tracejadas na Fig. 77 para dois valores do parâmetro de Ginzburg-Landau, $\mu = 0.8$ (tipo-I) e 1.7 (tipo-II). Como consideramos a mesma distância d entre cada par de vórtices formando o triângulo, o procedimento padrão para o problema de muitos corpos, que considera apenas interação entre pares, prevê uma energia de interação $E_{int}(d) = 3E_{int}^{pair}(d)$, onde $E_{int}^{pair}(d)$ é a energia de interação para cada par V-V. Esta energia é mostrada pelas curvas sólidas na Fig. 77, onde uma boa concordância com os resultados obtidos pelo ansatz de três vórtices é observada apenas para separações d maiores, enquanto para separações menores, as energias previstas pelo modelo de interação de pares são claramente superestimadas. Este resultado é uma manifestação da importância das deformações dos vórtices para pequenas separações V-V: o modelo de interação entre pares simplesmente não leva em conta as deformações ocorridas na formação de um vórtice gigante triplo. Consequentemente, este modelo superestima as energias. Isto está ilustrado na Fig. 78,

onde a amplitude do parâmetro de ordem de dois (a, c) e três (b, d) vórtices interagentes é mostrada para $\mu = 0.8$ (painéis da esquerda) e 1.7 (painéis da direita), para separações V-V $d = 3.2\lambda$ e 1.8λ, respectivamente. No caso de três vórtices, observamos que cada vórtice é deformado em direção ao centro do conjunto de vórtices. Esta deformação, que é encontrada como o estado de menor energia do sistema de três vórtices, não pode ser obtida por um modelo que consiste apenas de interações entre pares de vórtices. De qualquer forma, nos casos tipo-II extremos estudados na literatura [172, 173], a separação crítica d_c onde os vórtices começam a se misturar se aproxima de zero (como demonstrado na sub-seção anterior) e a concordância entre os resultados obtidos pelo modelo de pares e pelo ansatz de três vórtices deve ser melhor até mesmo para separações menores.

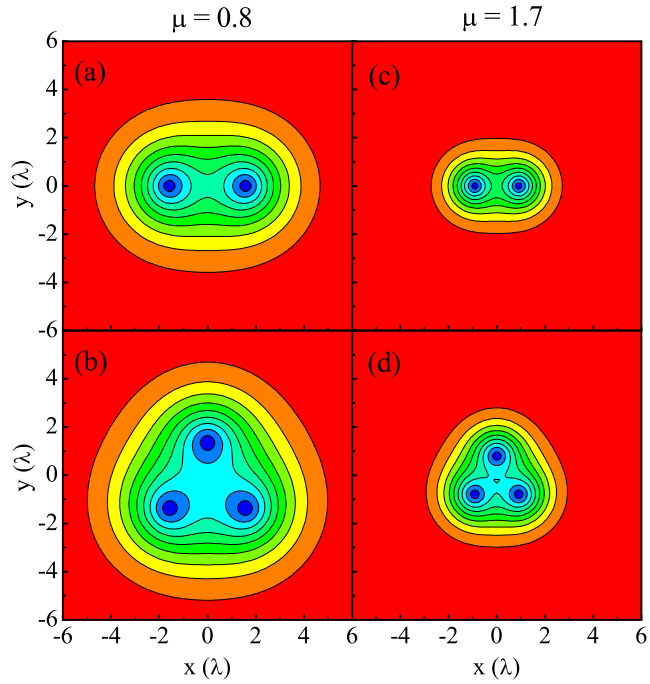

Figura 78: Curvas de nível da amplitude do parâmetro de ordem para os casos indicados na Fig. 77, ou seja, considerando-se $\mu = 0.8$ (1.7) e $d = 3.2\lambda$ (1.8λ), obtidas para dois (a, c) e três (b, d) vórtices interagentes.

No problema de muitos vórtices, os vórtices podem se aproximar de diversas maneiras diferentes, e o estudo de três vórtices em uma geometria triangular apresentado nesta sub-seção é um caso bastante específico. Ainda assim, este exemplo demonstra de forma simples que, exceto no caso tipo-II extremo, uma descrição exata da dinâmica de muitos vórtices é uma tarefa bastante difícil. O potencial de pares, mesmo quando leva em consideração as deformações V-V, ainda produz apenas uma descrição aproximada do problema, já que as deformações devido à presença de todos os outros vórtices não estão

incluída no modelo. Neste sentido, as expressões propostas no nosso trabalho para as forças de interação V-V e V-GV trazem um avanço importante sobre as expressões conhecidas $\Omega(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|) = f_0 K_1(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|/\lambda)$ e Eq. (5.10), pois incluem as deformações e a mistura entre vórtices, mas um estudo de dinâmica molecular para muitos vórtices usando estas expressões ainda não é uma descrição ideal para um sistema onde as escalas de comprimento ξ e λ são comparáveis.

5.3.4 Interação vórtice-antivórtice

Nas sub-seções anteriores, mostramos que quando dois vórtices, ou um vórtice e um vórtice gigante, se aproximam, eles se misturam formando um único vórtice gigante com vorticidade $n = n_1 + n_2$. Mostramos também que no limite de pequenas separações, as forças de interação V-V ou V-GV são bastante fracas. Diferentemente, como discutido na Sec. II, um vórtice e um antivórtice se atraem e se aniquilam em ambos os supercondutores do tipo-I e do tipo-II. Nesta sub-seção, o comportamento da força de interação vórtice-antivórtice (V-AV) como função da separação V-AV será estudado em maiores detalhes.

De fato, a interação V-AV é completamente diferente daquelas obtidas nos casos V-V and V-GV estudados nas sub-seções anteriores. A energia (a) e a força (b) da interação V-AV são mostradas na Fig. 79, para dois valores do parâmetro de Ginzburg-Landau, $\mu = 0.6$ (triângulos) e 1.7 (quadrados). Como discutido anteriormente na Sec. II, a interação V-AV é sempre atrativa, para qualquer valor de μ. Porém, em uma certa separação crítica d_E, a solução com super-correntes bem definidas em torno de cada vórtice e antivórtice deixa de ser o estado de menor energia do sistema. Uma solução com menor energia, que apresenta forte supressão da amplitude do parâmetro de ordem e da super-corrente na região entre o vórtice e o antivórtice passa a ser o estado fundamental para pequenas separações. Uma histerese é observada na vizinhança da separação crítica d_E, como mostrado na Fig. 79(a). Estes resultados lembram aqueles obtidos por Priour e Fertig [174] no caso de um vórtice próximo a um defeito artificial. Uma supressão da amplitude do parâmetro de ordem também foi observada por Sardella *et al.* [175] na dinâmica da aniquilação V-AV em um supercondutor mesoscópico, para pequenas separações V-AV. O valor absoluto da força é mostrado na Fig. 79(b) em escala log_{10}, onde dois comportamentos diferentes, para separações d menores e maiores que d_E, são claramente observados.

A dependência da separação crítica d_E, obtida numericamente para a interação V-AV, sobre o parâmetro de Ginzburg-Landau μ é ilustrada como quadrados na Fig. 79(c), e pode ser ajustada a uma função similar àquelas usadas para a separação crítica nos

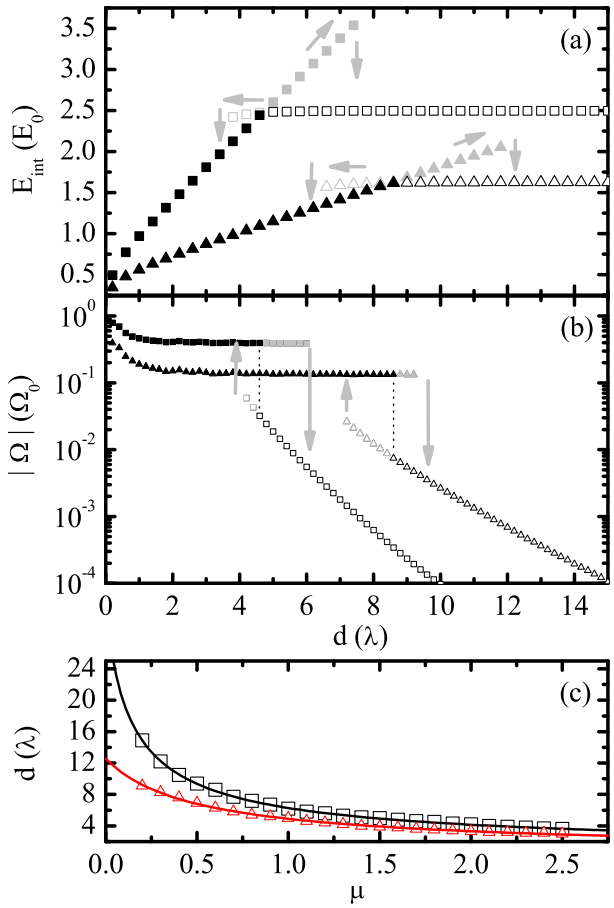

Figura 79: (a) Energia e (b) força (valor absoluto) da interação V-AV como função da separação d, para $\mu = 0.6$ (triângulos) e 1.7 (quadrados). Os símbolos fechados (abertos) são os resultados obtidos através do processo numérico de relaxação aumentando-se (diminuindo-se) gradualmente d de 0 a 15 λ (de 15 λ a 0). Uma histerese é observada em torno de uma separação crítica d_E, como indicado pelas setas, e a solução representada pelos símbolos abertos é estável apenas para $d > d_A$. (c) Separações críticas d_E (quadrados) e d_A (triângulos) obtidas numericamente como função do parâmetro de Ginzburg-Landau μ, junto com suas funções de fitting (curvas).

casos V-V e V-GV, dada por $d_E = 0.337 + 31.249(1 + 10.264\mu)^{-0.6855}$ (com erro estimado em $\nu \approx 0.4\%$), a qual é mostrada como uma curva sólida na Fig. 79(c). A diferença é que no limite $\mu \to \infty$ esta separação é finita, enquanto nos casos anteriores ela era zero. Apesar da solução com super-correntes bem definidas em redor do vórtice e do antivórtice não ser o estado de menor energia para $d < d_E$, ele ainda é um estado estável na vizinhança deste ponto, e se torna instável apenas para $d < d_A$. A dependência de d_A sobre μ é mostrada pelos triângulos na Fig. 79(c) e aproxima-se da função $d_A = 0.337 + 12.222(1 + 2.461\mu)^{-0.7931}$ (com erro estimado $\nu \approx 0.6\%$).

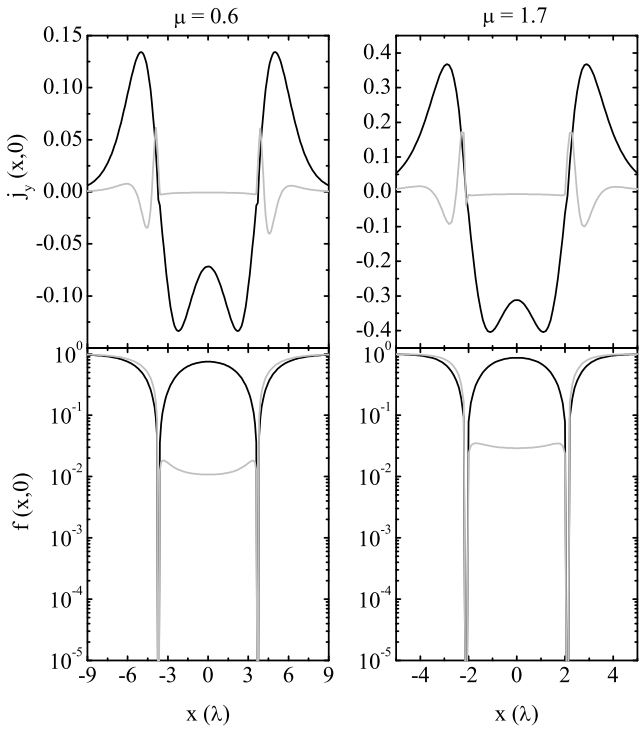

Figura 80: Super-corrente (em cima) e amplitude do parâmetro de ordem (em baixo) ao longo da direção da aproximação entre o vórtice e o antivórtice x, para separações V-AV indicadas pelas setas na Fig. 10 (b), ou seja, $d = 9.2\lambda$ (5.2 λ), para $\mu = 0.6$ (1.7). Curvas pretas (cinzas) se referem aos estados representados pelos símbolos abertos (fechados) na Fig. 79 (b).

A Fig. 80 mostra a distribuição da super-corrente $\vec{J} = \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A}$ e a amplitude do parâmetro de ordem na direção da aproximação entre o vórtice e o antivórtice (eixo $y = 0$) para valores diferentes da separação V-AV. As separações críticas para $\mu = 0.6$ e 1.7 são $d_E = 8.6\lambda$ e 4.5λ, respectivamente, e os valores da separação V-AV na Fig. 80 são tomados como $d = 9.2\lambda > d_E$ para $\mu = 0.6$ e $5.2\lambda > d_E$ para $\mu = 1.7$. Note que para cada uma destas separações, podemos encontrar duas soluções com energias diferentes. As curvas pretas (cinzas) na Fig. 80 são relacionadas aos símbolos abertos (fechados) na Fig. 79(b). Quando a separação V-AV é grande, as correntes ao redor de cada vórtice e antivórtice apresentam picos bem definidos a uma certa distância que depende de μ. Quando o vórtice e o antivórtice são colocados próximos um do outro, as super-correntes se superpõem na região entre eles, como observado pelas curvas pretas na Fig. 80 (em cima). As curvas pretas na Fig. 80 (em baixo) mostram que a amplitude do parâmetro de ordem nestas soluções apresenta zeros na posição do vórtice e do antivórtice e atinge ≈ 1 na região entre eles. Na vizinhança de d_E, para separações V-AV $d > d_E$, existe um estado de maior energia (ver símbolos cinzas fechados na Fig 79(a)) com super-correntes

e amplitudes do parâmetro de ordem bastante suprimidos na região entre o vórtice e o antivórtice, o que é mostrado pelas curvas cinzas na Fig. 80. Para $d < d_E$, a solução representada pelas curvas pretas na Fig. 80 deixa de ser o estado de menor energia, como mostrado na Fig. 79(a), e se torna instável quando a separação V-AV é reduzida a $d < d_A$, enquanto a solução com correntes e parâmetros de ordem suprimidos entre o vórtice e o antivórtice, mostrada pelas curvas cinzas, se torna o estado de menor energia para $d < d_E$ e a única solução estável para $d < d_A$.

Os parâmetros de ordem suprimidos na região entre vórtices observados na única solução estável para $d < d_A$ sugerem que um vórtice e um antivórtice não podem coexistir nestas distâncias, ao menos que estejam fixos de alguma forma, neste caso esta solução de corda é formada. Isto é razoável, uma vez que a curtas distâncias os campos do vórtice e do antivórtice se compensam, e a quantização do fluxo, uma propriedade essencial dos vórtices (ou antivórtices), é perdida. Note que isto é diferente do caso de dois vórtices, que podem coexistir a curtas distâncias, deformar-se e interagir como descrito nas sub-seções anteriores, já que a quantização do fluxo do par V-V é preservada até em pequenas separações V-V. A formação da corda vai além das simulações de dinâmica V-AV, uma vez que neste caso, o par V-AV não é mais bem definido pelas correntes e parâmetros de ordem ao seu redor. Para estudos de dinâmica molecular do movimento de vórtices e antivórtices, devemos considerar a separação crítica d_A como a separação onde o par V-AV se aniquila (veja, por exemplo, Ref. [176]).

Devido ao comportamento peculiar encontrado para a força V-AV como função da separação d, que é discontínua em d_E, não é possível encontra uma única função de fitting que descreva a força em ambos os regimes $d > d_E$ e $d < d_E$, como fizemos para as forças V-V e V-GV. Por outro lado, como discutido na seção anterior, a força de interação V-AV em grandes distâncias d pode ser descrita por uma combinação de funções de Bessel, dada pela Eq. (5.10), que pode ser reescrita como

$$\Omega(d) = -\Delta_1 K_1(d) - \Delta_2 K_1(\mu d), \tag{5.21}$$

onde Δ_1 e Δ_2 são parâmetros de ajuste. Nós fitamos numericamente as forças de interação V-AV obtidas numericamente para $d > d_E$ usando Eq. (5.21), e uma lista de parâmetros de ajuste para μ indo de 0.3 a 2.5 é dada na Tabela V. Uma lista destes parâmetros de ajuste também pode ser encontrada na Ref. [98], onde a relação entre nossos parâmetros de ajuste e os parâmetros q e m do referido trabalho é $\Delta_1 = m^2/2\pi^2$ e $\Delta_2 = \mu q^2/2\pi^2$. Seguindo o mesmo procedimento das sub-seções anteriores, propomos funções de fitting

Tabela 5: Parâmetros de ajuste Δ_i e erro estimado ν para a Eq. (5.21) no caso V-AV ($n_1 = 1$ e $n_2 = -1$), para $d > d_E$.

μ	Δ_1	Δ_2	$\nu(\times 10^{-9})$
0.3	156.948	0.4203	0.918
0.4	67.315	0.7419	0.10
0.5	31.064	1.173	0.098
0.6	19.070	1.719	0.18
0.7	14.401	2.340	0.342
0.8	11.990	2.925	0.56
0.9	6.499	5.060	3.06
1.0	6.357	6.357	5.01
1.1	5.320	9.170	5.0
1.2	4.159	14.269	1.21
1.3	4.254	16.759	1.21
1.4	4.125	20.640	1.10
1.5	4.039	23.58	0.75
1.6	3.775	33.662	1.20
1.7	3.632	43.173	1.40
1.8	3.542	51.251	1.03
1.9	3.422	66.755	1.23
2.0	3.315	87.448	1.38
2.1	3.226	113.229	1.54
2.2	3.162	138.472	1.25
2.3	3.101	170.634	1.08
2.4	3.037	220.086	1.13
2.5	2.983	277.742	1.08

para estes parâmetros como função do parâmetro de Ginzburg-Landau μ,

$$\Delta_1(\mu) = 2.879 + 3.415\mu^{-3.166} \tag{5.22a}$$

e

$$\Delta_2(\mu) = \mu(-0.2258 + 1.044e^{1.866\mu}), \tag{5.22b}$$

que estão ilustradas como curvas sólidas na Fig. 81 junto com os dados da Tabela 5 (símbolos).

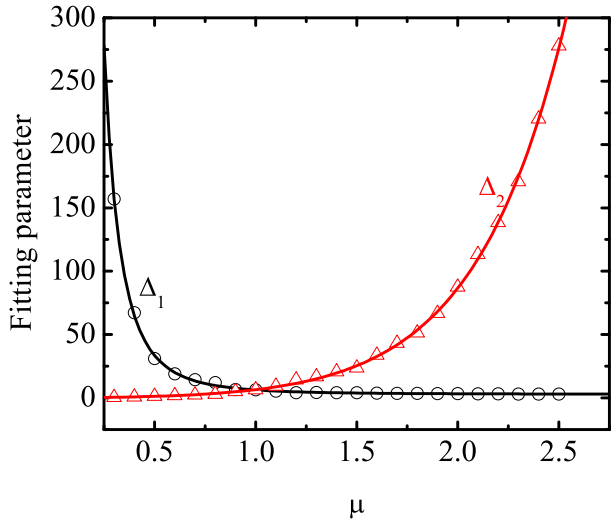

Figura 81: Funções de fitting (curvas) para os parâmetros Δ_1 e Δ_2 na Eq. (5.21), para a força de interação V-AV em $d > d_E$, como função do parâmetro de Ginzburg-Landau $\mu = \sqrt{2}\kappa$. Os dados da Tabela 5 são mostrados como símbolos, para comparação.

Note que para a interação V-AV, nós não encontramos comportamentos diferentes em intervalos diferentes de μ, como observado nos casos V-V e V-GV, já que a interação V-AV é sempre atrativa e apenas se torna mais forte à medida que μ aumenta a partir de zero, ao invés de apresentar força zero quando $\mu = 1$ e se tornar repulsiva para $\mu > 1$, como observado no caso das interações V-V e V-GV. Assim, substituindo-se as Eqs. (5.22) an Eq. (5.21) leva a uma única expressão

$$\begin{aligned}\Omega(d) = &-(2.879 + 3.415\mu^{-3.166})K_1(d) \\ &+(0.2258 - 1.044e^{1.866\mu})\mu K_1(\mu d),\end{aligned} \tag{5.23}$$

que deve produzir uma descrição precisa da força de interação V-AV, para separações $d > d_E$ e para qualquer valor de μ.

5.4 Interação entre vórtices em supercondutores de duas bandas

Iremos agora expandir o método de cálculo das interações entre vórtices para o caso de supercondutores de duas bandas. Mais ainda, iremos mostrar como é possível prever o comportamento qualitativo da curva do potencial entre vórtices a partir dos parâmetros microscópicos do sistema, e discutiremos sobre a possibilidade de se encontrar a chamada interação do tipo-1.5, que tem sido alvo de intensa discussão na literatura.

No formalismo de Ginzburg-Landau, o funcional de energia agora contém contribuições de cada condensado, um termo de acoplamento e a energia do campo magnético dentro e ao redor da amostra:

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= \sum_{i=1,2} \alpha_i|\Psi_i|^2 + \frac{1}{2}\beta_i|\Psi_i|^4 + \frac{1}{2m_i}\left|\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\right)\Psi_i\right|^2 \\ &\quad -\Gamma(\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_1\Psi_2^*) + \frac{(\mathbf{h}-\mathbf{H})^2}{8\pi}. \end{aligned} \tag{5.24}$$

Os dois condensados de pares de Copper são descritos por parâmetros de ordem Ψ_1 e Ψ_2, $\mathbf{H}$ é o campo magnético aplicado e $\mathbf{h}$ é o campo magnético líquido. O termo de acoplamento de Josephson prevê o 'acoplamento mínimo', descrito na literatura. A temperatura entra na expressão da energia através de $\alpha_{i=1,2}$, que é linearmente dependente do termo de temperatura τ, que se aproxima de zero à medida em que a temperatura T se aproxima da temperatura crítica T_c (na teoria de Ginzburg-Landau, $\tau = \ln T_c/T$ [112]). Estritamente, a expansão que leva à teoria de Ginzburg-Landau a partir da teoria microscópica é válida apenas na vizinhança de T_c. Mesmo assim, usaremos esta teoria também para temperaturas um pouco menores, argumentando, ao contrário de Kogan e Schmalian [114], que os parâmetros de ordem das duas bandas geralmente não são proporcionais e que eles devem ser calculados com precisão maior que $\tau^{1/2}$. De fato, para considerar os termos de ordem superior de forma completamente correta, a teoria de Ginzburg-Landau deve ser derivada novamente para o caso de duas bandas, incluindo termos de ordem superior em Ψ, mas nossa aproximação, pelo menos, captura a física do problema como primeira aproximação. Note que o formalismo de Ginzburg-Landau para condensados acoplados pode também dar uma certa visão sobre o comportamento de dois supercondutores de uma banda, com comprimentos característicos e temperaturas críticas diferentes, acoplados por tunelamento de Josephson. Por fim, a derivação a rigor das equações de Ginzburg-Landau para supercondutores em nanoescala levará a expressões microscópicas para todos os parâmetros usados no nosso modelo [178], de forma que nossos resultados

poderão ser também transferidos ao campo dos nano-supercondutores.

5.4.1 A definição do caráter tipo-I/tipo-II

Demonstraremos agora o comportamento magnético interessante encontrado para condensados acoplados, de forma similar à Ref. [177], mas num cenário microscópico correto. O funcional de Ginzburg-Landau na Eq. (5.24) para um supercondutor de duas bandas derivado a partir da teoria microscópica apresenta [2] $\alpha_i = -N(0)n_i\chi_i = -N(0)n_i(\tau - S_i/n_i\eta)$, $\beta_i = N(0)n_i/W^2$ e $\Gamma = N(0)\lambda_{12}/\eta$, onde λ_{ij} forma a matriz de acoplamento, n_i ($N(0)$) representa a densidade de estados parcial (total) de cada banda, v_i são as velocidades de Fermi em cada banda, e $W^2 = 8\pi^2T_c^2/7\zeta(3)$. As constantes S_i e η são definidas como na Ref. [114]. Isto nos permite definir formalmente os comprimentos de coerência $\xi_i = \frac{\hbar v_i}{\sqrt{6}W}$ e as profundidades de penetração $\lambda_i = \sqrt{\frac{3c^2}{16\pi N(0)e^2n_iv_i^2}}$, assim como os parâmetros de Ginzburg-Landau $\kappa_i = \lambda_i/\xi_i$ de cada condensado como se eles existissem separadamente. Note que α_1 e α_2 mudam de sinal em temperaturas diferentes, que podem ser definidas formalmente como as temperaturas críticas de cada condensado $T_{c(i)} = T_ce^{-S_i/n_i\eta} < T_c$. Consequentemente, próximo a T_c, ambos $\alpha_i > 0$ mas ainda assim o sistema é supercondutor. Esta situação já é diferente daquela estudada na Ref. [177], onde pelo menos um dos α_i era negativo.

A seguir, repetiremos o procedimento descrito na Sec. 5.1 anterior para determinar o comportamento assintótico do potencial de interação entre vórtices em longo alcance, antes de entrarmos em detalhes sobre este potencial a curtas distâncias entre vórtices, considerando-se que conhecemos os parâmetros mencionados acima para os dois condensados. Em coordenadas cilíndricas, consideramos o ansatz para um vórtice com simetria circular $\Psi_i = e^{in\theta}f_i(r)$, e substituímos gauge $\vec{A} = na(r)\hat{\theta}/r$, de forma que as equações de Ginzburg-Landau podem ser escritas de forma adimensional como

$$\frac{d^2f_1}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{df_1}{dr} - \frac{n^2(a-1)^2}{r^2}f_1 + (\chi_1 - f_1^2)f_1 + \gamma f_2 = 0, \tag{5.25a}$$

$$\frac{d^2f_2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{df_2}{dr} - \frac{n^2(a-1)^2}{r^2}f_2 + \alpha(\chi_2 - f_2^2)f_2 + \frac{\gamma}{\alpha}\frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2}f_1 = 0, \tag{5.25b}$$

e

$$\frac{d^2a}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{da}{dr} - (a-1)\left(\frac{f_1^2}{\kappa_1^2} + \alpha\frac{f_2^2}{\kappa_2^2}\right) = 0, \tag{5.25c}$$

onde $\alpha = (v_1/v_2)^2$ é equivalente ao quadrado da razão entres os comprimentos de

[2] Parâmetros diferentes no funcional para duas bandas podem ter diferentes dependências na temperatura, especialmente no limite impuro [179]. Nossa aproximação pode ser facilmente adaptada ara estes casos, mas iremos nos restringir ao modelo padrão onde apenas α_i depende da temperatura.

coerência dos dois condensados a temperatura zero e $\gamma = \Gamma/n_1$. Na Eq. (5.25), os parâmetros de ordem são escritos em unidades de W, distâncias em ξ_1, e o potencial vetor em $\Phi_0/2\pi\xi_1$, onde $\Phi_0 = hc/2e$. Para $r \to \infty$, a converge para 1 e f_i para uma constante a_i, obtida resolvendo-se o conjunto de equações não-lineares

$$(\chi_1 - a_1^2)a_1 + \gamma a_2 = 0 \tag{5.26a}$$

$$(\chi_2 - a_2^2)a_2 + \frac{\gamma\kappa_2^2}{\alpha^2\kappa_1^2}a_1 = 0, \tag{5.26b}$$

que podem ser desacopladas definindo-se a razão $\rho = a_1/a_2$, que então obedece a equação de quarta ordem

$$\frac{\gamma\kappa_2^2}{\alpha^2\kappa_1^2}\rho^4 + \chi_2\rho^3 - \chi_1\rho - \gamma = 0. \tag{5.27}$$

Este tipo de equação pode ser resolvido analiticamente através de um procedimento bastante extenso, conhecido como método de Ferrari [180], através do qual obtém-se

$$a_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho} + \chi_1}, \quad a_2 = \sqrt{\frac{\gamma\kappa_2^2}{\alpha^2\kappa_1^2}\rho + \chi_2}. \tag{5.28}$$

Para eliminar os termos de ordem superior em grandes distâncias, usamos novamente as funções auxiliares que se aproximam de zero para $r \to \infty$, ou seja, $Q(r) = a(r) - 1$ e $\sigma_i(r) = f_i(r) - a_i$. Mantendo-se apenas os termos de primeira ordem nestas funções, as Eqs. (5.25) se tornam

$$\frac{d^2\sigma_1}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\sigma_1}{dr} + \left(\chi_1 - 3a_1^2\right)\sigma_1 + \gamma\sigma_2 = 0, \tag{5.29a}$$

$$\frac{d^2\sigma_2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\sigma_2}{dr} + \alpha\left(\chi_2 - 3a_2^2\right)\sigma_2 + \frac{\gamma}{\alpha}\frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2}\sigma_1 = 0 \tag{5.29b}$$

e

$$\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{Q}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{Q}{r}\right) - \left(\frac{\xi_{10}^2}{\lambda^2} - \frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{Q}{r}\right) = 0, \tag{5.29c}$$

onde definimos $\lambda^{-2} = (a_1/\lambda_1)^2 + (a_2/\lambda_2)^2$. Para qualquer valor de γ e T, a solução da Eq. (5.29c) é a função de Bessel modificada $Q(r) = \delta_3 r K_1(r\xi_1/\lambda)$. Para $\gamma \neq 0$, as equações para σ_i são desacopladas e então, devemos definir o operador $\hat{L}_2 = \nabla^2 + \alpha\left(\chi_2 - 3a_2^2\right)$, de forma que $\hat{L}_2\sigma_2 = -(\gamma\kappa_2^2/\alpha\kappa_1^2)\sigma_1$, e aplicá-lo na Eq. (5.29a), obtendo assim

$$\nabla^2\nabla^2\sigma_1 + C_1\nabla^2\sigma_1 + C_2\sigma_1 = 0. \tag{5.30}$$

Nesta expressão, $C_1 = (\chi_1 - 3a_1^2) + \alpha\left(\chi_2 - 3a_2^2\right)$ e $C_2 = \alpha\left(\chi_2 - 3a_2^2\right)\left(\chi_1 - 3a_1^2\right) - \gamma^2\kappa_2^2/\alpha\kappa_1^2$. O operador ∇^2 para soluções axialmente simétricas tem como autofunções as funções de Bessel $J_0(\beta r)$ e $Y_0(\beta r)$, com autovalor $-\beta^2$, ou as funções de Bessel modificadas $I_0(\beta r)$

e $K_0(\beta r)$, com autovalor β^2. Destas quartro autofunções, apenas a última satisfaz a condição de que σ_i deve decair monotonicamente com r. Substituindo $\nabla^2 K_0(\beta r) = \beta^2 K_0(\beta r)$ na Eq. (5.30), obtemos

$$\beta_\pm = \sqrt{\frac{-C_1 \pm \sqrt{C_1^2 - 4C_2}}{2}}, \tag{5.31}$$

e

$$\sigma_1(r) = \delta_1 \cos(\omega) K_0(\beta_- r) - \delta_2 \sin(\omega) K_0(\beta_+ r), \tag{5.32a}$$

$$\sigma_2(r) = \delta_1 \sin(\omega) K_0(\beta_- r) + \delta_2 \cos(\omega) K_0(\beta_+ r). \tag{5.32b}$$

Note que nas Eqs. (5.32), cada σ_i deve conter ambas as funções de Bessel para $\beta_\pm$, numa combinação convenientemente escrita na forma de um ângulo de mistura ω, para garantir a ortogonalidade destas funções. Substituindo as Eqs. (5.32) na equação diferencial Eq. (5.29a), obtemos

$$\tan(\omega) = \frac{\gamma}{\beta_+^2 + (\chi_1 - 3a_1^2)}, \tag{5.33a}$$

de forma que $\gamma \to 0$ leva a $\omega \to 0$, $\beta_- \to \sqrt{2\chi_1}$, $\beta_+ \to \sqrt{2\alpha\chi_2}$ e, consequentemente, a $\sigma_1(r) \to \delta_1 K_0(\sqrt{2\chi_1} r)$ e $\sigma_2(r) \to \delta_2 K_0(\sqrt{2\alpha\chi_2} r)$, como era de se esperar.

Os parâmetros δ_i nas expressões para $Q(r)$, $\sigma_1(r)$ e $\sigma_2(r)$ são constantes reais que podem ser determinadas somente ajustando-se estas funções às soluções numéricas das Eqs. (5.25). De posse da forma assintótica dos parâmetros de ordem e do potencial vetor, seguimos agora o procedimento padrão [98] para encontrar a interação vórtice-vórtice no limite $r \to \infty$, obtendo assim

$$E_{2B}(\mathsf{r}) = \delta_3^2 K_0\left(\frac{\mathsf{r}}{\lambda}\right) - \delta_1^2 K_0\left(\beta_- \frac{\mathsf{r}}{\xi_1}\right) - \delta_2^2 K_0\left(\beta_+ \frac{\mathsf{r}}{\xi_1}\right), \tag{5.34}$$

onde as unidades agora são mostradas explicitamente.

Listamos agora as consequências da solução assintótica obtida acima: i) Comparando a Eq. (5.34) àquela encontrada para o caso de uma banda, [101] mostrada como Eq. (5.7) neste capítulo, obtemos analogamente

$$E_{1B}(\mathsf{r}) = \delta_4^2 K_0\left(\frac{\mathsf{r}}{\lambda_{1B}}\right) - \delta_5^2 K_0\left(\sqrt{2}\frac{\mathsf{r}}{\xi_{1B}}\right), \tag{5.35}$$

o que mostra que o comprimento $\lambda^{-2} = (a_1/\lambda_1)^2 + (a_2/\lambda_2)^2$ definido para o supercondutor de duas bandas faz o papel de um comprimento de penetração magnética efetivo, ao contrário daquele sugerido como $\lambda^{-2} = (1/\lambda_1)^2 + (1/\lambda_2)^2$ nas Refs. [177, 182], que vale apenas na ausência de acoplamento, que é uma situação irreal. ii) Os parâmetros δ_i

são geralmente diferentes uns dos outros, mas eles podem ser calculados exatamente no ponto de Bogomol'nyi para o sistema de duas bandas, onde encontramos $\delta_1^2 = \delta_2^2 = 2\delta_3^2$. Para $\gamma = 0$, a situação $\xi_1 = \xi_2 = 1$ e $\kappa_1 = \kappa_2 = 1$ é análoga ao ponto de Bogomol'nyi $\kappa_{1B} = 1/\sqrt{2}$ para supercondutores de uma banda e, de acordo com isso, o potencial de interação a longo alcance deve ser identicamente nulo (e mudar de sinal para $\kappa_1 = \kappa_2 < 1$). Isto mostra diretamente que até mesmo escolhendo-se dois condensados do tipo-II, podemos observar um comportamento do tipo-I para o sistema acoplado! iii) Na Eq. (5.35) para supercondutores de uma banda, verifica-se claramente que se $\kappa_{1B} = \lambda_{1B}/\xi_{1B} > 1/\sqrt{2}$ ($< 1/\sqrt{2}$), o potencial de interação $E_{1B}(\mathsf{r})$ será repulsivo (atrativo), como discutimos nas seções anteriores. Para supercondutores de duas bandas, a Eq. (5.34) mostra que os parâmetros relevantes são $\kappa_{\pm}^* = \frac{\beta_{\pm}\lambda}{\sqrt{2}\ \xi_1}$, ao invés dos parâmetros de Ginzburg-Landau κ_i para cada condensado em separado. Se κ_+^* e/ou κ_-^* for menor que $1/\sqrt{2}$, o potencial de interação de longo alcance será atrativo (como no tipo-I). iv) Na presença de acoplamento, Eq. (5.32) mostra que o comportamento a longo alcance de σ_i depende exponencialmente do *menor* entre β_- e β_+. Assim, no caso acoplado, podemos não só definir uma única profundidade de penetração magnética λ para ambas as bandas, como também os comprimentos de coerência de ambos os condensados exibem *o mesmo decaimento* em longas distâncias, que toma o sentido de um comprimento de coerência conjunto $\xi^* = \xi_1/\min(\beta_+, \beta_-)$.

Isso nos traz à discussão sobre o verdadeiro critério da natureza tipo-I ou tipo-II da interação entre vórtices. No caso de uma banda, a mudança de sinal da energia da interface vórtice-supercondutor no ponto de Bogomol'nyi é um critério correto. Porém, no caso de duas bandas e à grandes separações vórtice-vórtice, o ponto de Bogomol'nyi é determinado por um único valor $\kappa^* = \min(\kappa_+^*, \kappa_-^*) <> 1/\sqrt{2}$ que não necessariamente é o mesmo onde a energia de superfície muda de sinal! Para mostrar isso, calculamos a energia de superfície E_S de uma interface normal-supercondutor unidimensional, similar à Ref. [182], a qual agora expandimos para levar em conta o acoplamento de Josephson e a dependência dos parâmetros na temperatura. Primeiramente, definimos formalmente o campo crítico termodinâmico de cada condensado como $H_{c(i)} = \Phi_0/(2\sqrt{2}\pi\lambda_i\xi_i) = 2W\sqrt{\pi N(0)n_i}$. O campo crítico termodinâmico do sistema como um todo é então obtido considerando-se que o funcional de energia da Eq. (5.24) converge a zero para $r \to \infty$ para $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{cc}$, o que leva a

$$H_{cc}^2 = H_{c(1)}^2 a_1^2(2\chi_1 - a_1^2) + H_{c(2)}^2 a_2^2(2\chi_2 - a_2^2) + 4\gamma H_{c(1)}^2 a_1 a_2. \tag{5.36}$$

Minimizamos então a energia para um campo $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{cc}$ resolvendo numericamente as

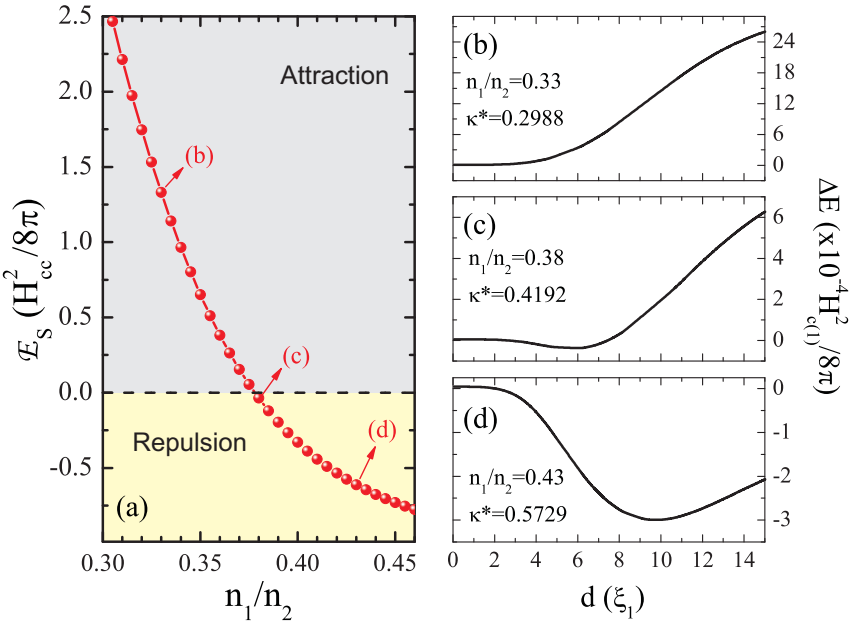

Figura 82: Energia da interface normal-supercondutor como função da razão entre densidades de estado parciais nos dois condensados (a), e as energias de interação vórtice-vórtice como função da distância entre vórtices (b-d) para cada escolha de parâmetros indicada. A força de interação de curto alcance muda de comportamento quando a energia de superfície muda de sinal.

equações de Euler-Lagrange unidimensionais para o funcional da Eq. (5.24), que são

$$\psi_1'' = \left(A^2/2\right)\psi_1 - \left(\chi_1 - \psi_1^2\right)\psi_1 - \gamma\psi_2, \tag{5.37a}$$

$$\psi_2'' = \left(A^2/2\right)\psi_2 - \alpha\left(\chi_2 - \psi_2^2\right)\psi_2 - \gamma\kappa_2^2/\left(\alpha\kappa_1^2\right)\psi_1, \tag{5.37b}$$

$$A'' = \left(\kappa_1^{-2}\psi_1^2 - \alpha\kappa_2^{-2}\psi_2^2\right)A, \tag{5.37c}$$

onde $\psi_i = \Psi_i/W$ e as condições de contorno para a interface normal-supercondutor são $\psi_i(x \to 0) = 0$, $\psi_i'(x \to \infty) = 0$, $A'(x \to 0) = 1$ e $A'(x \to \infty) = 0$.

5.4.2 Equações de Ginzburg-Landau para vórtices fixos em duas bandas

Agora que sabemos como prever o comportamento do potencial a longo alcance e como calcular a energia de superfície, o último ingrediente para nosso estudo da interação entre vórtices em supercondutores de duas bandas está na expansão do método proposto na Sec. 5.2 para o cálculo do potencial de interação. Esta expansão é feita de maneira trivial: utilizamos um ansatz para vórtices fixos análogo ao do caso anterior de uma banda, $\Psi_i = e^{in_1\theta_1}e^{in_2\theta_2}f_i(x,y)$, que descreve dois vórtices de vorticidade n_1 e n_2 localizados em

$\vec{r}_1 = (-d/2, 0)$ e $\vec{r}_2 = (d/2, 0)$. As equações de Euler-Lagrange neste caso são:

$$\nabla^2 f_1 - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x\overline{Y} - A_y\overline{X}) + \vec{A}^2\right] f_1 + (\chi_1 - f_1^2) f_1 + \gamma f_2 = 0, \tag{5.38a}$$

$$\nabla^2 f_2 - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x\overline{Y} - A_y\overline{X}) + \vec{A}^2\right] f_2 + \alpha\left(\chi_2 - f_2^2\right) f_2 + \frac{\gamma\kappa_2^2}{\alpha\kappa_1^2} f_1 = 0 \tag{5.38b}$$

e

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = -\left[\vec{A} - \frac{n_1\hat{\theta}_1}{r_1} - \frac{n_2\hat{\theta}_2}{r_2}\right]\left(\frac{f_1^2}{\kappa_1^2} + \alpha\frac{f_2^2}{\kappa_2^2}\right) = 0, \tag{5.38c}$$

Estas equações são resolvidas numericamente, como na Sec. 5.2, e os resultados obtidos são substituídos no funcional de energia, para o cálculo da energia do par vórtice-vórtice para cada separação d.

Finalmente, faremos a seguir uma comparação entre os resultados obtidos numericamente, através do procedimento descrito acima, para o potencial de interação vórtice-vórtice em supercondutores de duas bandas, e as previsões descritas na sub-seção anterior utilizando a solução analítica para o comportamento assintótico.

5.4.3 Resultados numéricos e a interação do tipo-1.5

A Fig. 82 mostra (a) a energia da interface normal-supercondutor e (b-d) os potenciais de interação vórtice-vórtice obtidos numericamente pelo procedimento descrito na sub-seção anterior, para parâmetros similares aos do MgB_2, onde κ_1 é fixo como 3.71, $\xi_1/\xi_2 = v_1/v_2 = 0.255$, [7], a matriz de acoplamento é obtida a partir da Ref. [179] e a temperatura é fixa em $T = 0.67T_C$. Observamos que $\kappa^* < 1/\sqrt{2}$, de forma que a interação de longo alcance é sempre atrativa, enquanto a interação de curto alcance muda de atrativa para repulsiva exatamente quando a energia de superfície muda de sinal com o aumento de n_1/n_2. De fato, se $E_S < 0$, a fusão entre os vórtices é energeticamente desfavorável, e um potencial de interação repulsivo a curto alcance é esperado, embora a grandes distâncias os vórtices ainda se atraiam. Isso também prova que a conjectura que diz que basta escolhermos $\lambda/\xi_1 > 1/\sqrt{2}$ e $\lambda/\xi_2 < 1/\sqrt{2}$ para que o sistema exiba uma interação entre vórtices atrativa a longo alcance e repulsiva a curto alcance (chamada de supercondutividade "tipo-1.5" na Ref. [7]) não é correta. O comportamento real é bem mais complexo e pode ser determinado de forma exata da maneira explicada acima.

Cálculos recentes sobre interfaces normal-supercondutor [115] têm mostrado que quando $T \to T_C$, os parâmetros de ordem dos dois condensados se tornam proporcionais e o comportamento do tipo-1.5 não pode ser observado. De fato, analisando κ^* e o sinal de E_S

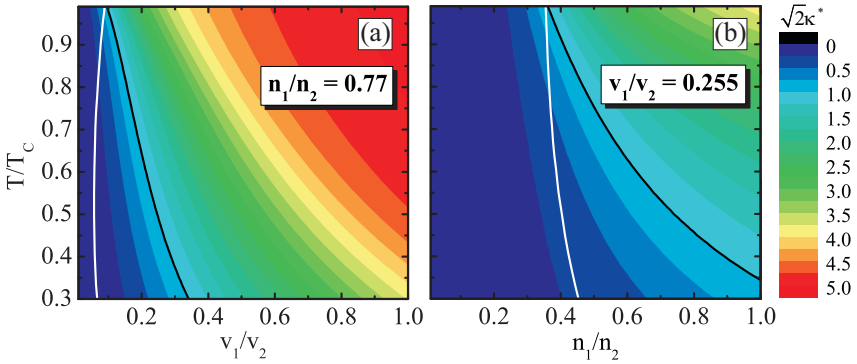

Figura 83: Diagrama de fases da interação de longo alcance para um cristal MgB_2, variando-se a temperatura e a razão entre (a) as velocidades de Fermi e (b) entre as densidades de estados parciais de cada banda. A linha preta separa as regiões de atração e repulsão em longo alcance. A linha branca mostra os pontos onde E_S muda de sinal positivo para negativo à medida que as razões aumentam.

para $T \to T_C$, como explicado acima, encontramos que para esta temperatura, $E_S = 0$ e $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$ ocorrem para a mesma combinação de parâmetros do sistema, ou seja, devemos esperar o mesmo tipo de interação tanto para curto alcance como para longo alcance. Por outro lado, para T apenas um pouco abaixo de T_C, a troca de sinal de E_S e a transição de $\kappa^* > 1/\sqrt{2}$ para $\kappa^* < 1/\sqrt{2}$ ocorrem para conjuntos diferentes de parâmetros, o que nos permite prever um intervalo de parâmetros onde um comportamento tipo-1.5 pode ser observado. Isto está ilustrado na Fig. 83, que mostra curvas de nível de κ^* como função da temperatura e das razões entre as (a) velocidades de Fermi e (b) as densidades de estado parciais de cada condensado. A linha preta representa $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$ e a linha branca, $E_S = 0$. Em $T = T_C$ estas linhas coincidem, em conformidade com as conclusões da Ref. [115], mas à medida que T diminui, estas linhas se separam e, dentro da região delimitada pelas curvas branca e preta, o sistema apresenta $E_S < 0$ (repulsão a curto-alcance) e $\kappa^* < 1/\sqrt{2}$ (atração a longo alcance), ou seja, um comportamento do tipo-1.5. Note que os resultados da Fig. 82 para $T = 0.67\ T_C$ se enquadram nesta categoria. Isto também abre uma nova possibilidade de ajustar-se as interações magnéticas em supercondutores de duas bandas através da mudança de temperatura. Por exemplo, para os parâmetros do MgB_2 dados na Ref. [7] (Fig. 83(a) para $v_1/v_2 = 0.255$), encontramos que a supercondutividade do tipo-1.5 ocorre para $T \lesssim 0.49\ T_C$, enquanto um comportamento puramente tipo-II é esperado para temperaturas mais altas. O experimento da Ref. [7] foi feito para $T \approx 0.1\ T_C$, e deveria então ser repetido em maiores temperaturas para verificar nossas previsões.

Na Fig. 84(a), construímos um diagrama de fases similar para LiFeAs, um material supercondutor recentemente descoberto e interessante por diversos motivos, como função

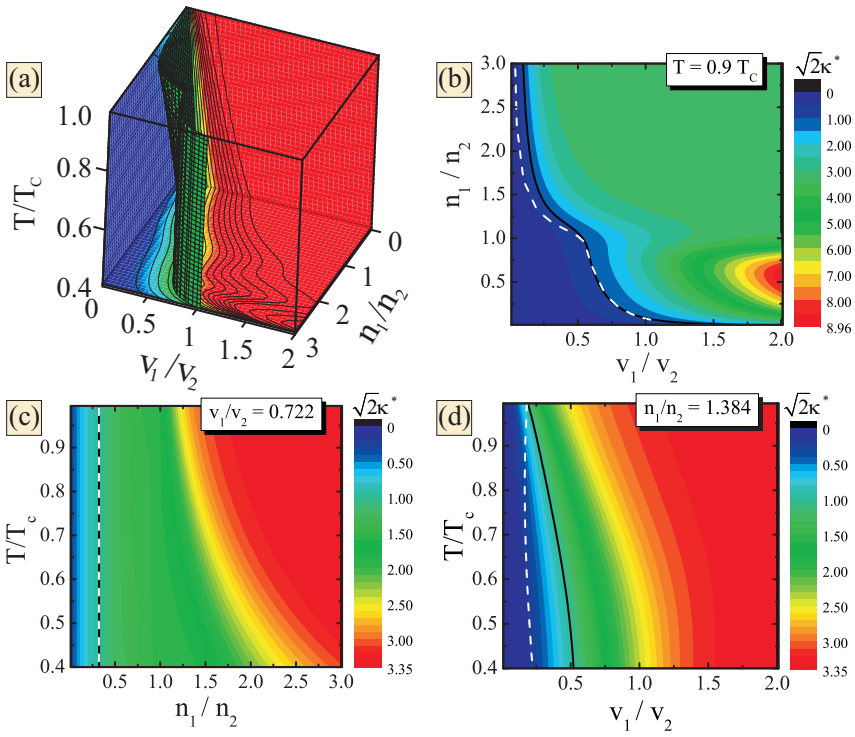

Figura 84: (a) Diagrama de fase $(v_1/v_2, n_1/n_2, T)$ da interação de longo alcance entre vórtices para LiFeAs, onde $\kappa_1 = 2.4$. [183] A isosuperfície ilustrada representa $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$, em outras palavras, o ponto de mudança do comportamento de longo alcance. (b-d) Cortes de (a) nos planos $T = 0.9\ T_C$, $v_1/v_2 = 0.722$, e $n_1/n_2 = 1.384$. Curvas pretas (brancas) correspondem a $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$ ($E_S = 0$).

da temperatura e das razões entre as velocidades de Fermi (ou, equivalentemente, os comprimentos de coerência) v_1/v_2 e as densidades de estado parciais n_1/n_2. A partir dos parâmetros dados na literatura [183] para este material, podemos estimar $\kappa_1 = 2.4$, $v_1/v_2 = 1.384$ e $n_1/n_2 = 0.722$. Curiosamente, como $\kappa_2 = \kappa_1\sqrt{n_1/n_2}v_1/v_2$, observa-se que ambos os parâmetros de Ginzburg-Landau estão acima de $1/\sqrt{2}$ se $\sqrt{n_1/n_2}v_1/v_2 \gtrsim 0.295$. Assim, podemos verificar mais uma vez que em uma grande porção do espaço dos parâmetros onde ambas as bandas são claramente tipo-II separadamente, o sistema acoplado exibe um comportamento do tipo-I. Para $T = 0.9\,T_C$, as curvas $E_S = 0$ (branca) e $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$ (preta) coincidem para n_1/n_2 pequeno e v_1/n_2 grande. Este comportamento se mantém até em baixas temperaturas, como mostra a Fig. 84(c). Porém, no caso oposto (n_1/n_2 grande e v_1/v_2 pequeno), estas curvas começam a se separar, formando uma região de supercondutividade tipo-1.5 no diagrama de fases, que se torna maior à medida que a temperatura diminui, como mostrado na Fig. 84(d).

Por mais interessante que sejam, as Figs. 83 e 84 mostram apenas dois exemplos das possibilidades atingíveis pela hibridização de duas bandas. Note que uma gama de transições, até mesmo comportamentos reentrantes, podem ser encontrados como função dos parâmetros de acoplamento na matriz λ_{ij}. No entanto, restringimos nossa análise aos parâmetros acessíveis experimentalmente, e focamos principalmente nos métodos demonstrados aqui para obter os diagramas de fase de supercondutores de duas bandas de maneira bastante simples.

6 Conclusões e perspectivas

Ao longo desta tese, expandimos o já conhecido método *split-operator* para estudar não só o Hamiltoniano de Schrödinger e seu análogo no modelo da massa efetiva, mas também para os Hamiltonianos de Dirac, de Rashba e Dresselhaus (para interações spin-órbita), e do modelo tight-binding.

Apresentamos assim um estudo teórico da evolução temporal de um pacote de onda Gaussiano em anéis quânticos e fios T, onde estudamos os efeitos sobre a probabilidade de transmissão devido a conexões suaves entre os canais de injeção, a campos magnéticos e à presença de um potencial Gaussiano ou de uma impureza em um dos braços do anel. Assim, expandimos os trabalhos das Refs. [1] e [88] da seguinte maneira: 1) Incluímos uma espessura finita para os canais e para os anéis, 2) não limitamos o número de subbandas no sistema, permitindo assim transições entre estas subbandas, e 3) as conexões entre os canais e o anel são modeladas de uma forma mais realística, onde a curvatura na junção é levada em conta, o que num experimento real é inevitável. Apesar de esperarmos intuitivamente que uma conexão suave levaria sempre a uma probabilidade de transmissão maior, nossos resultados mostram que isto depende fortemente da energia do pacote de onda: como uma conexão como esta age como um potencial de confinamento, onde ressonâncias quânticas estão presentes, a probabilidade de transmissão é afetada não só pela suavidade da junção, mas também pela energia do pacote de entrada.

Na ausência de um campo magnético, para energias maiores do pacote de onda, o elétron é espalhado na primeira conexão canal-anel para outras subbandas de energia, mas curiosamente ele é espalhado de volta à subbanda inicial na segunda junção canal-anel, de forma que os pacotes de entrada e saída estão sempre na mesma subbanda. Porém, um campo magnético pode influenciar fortemente a interferência na segunda junção, de forma que nas ressonâncias AB encontramos uma interferência completamente destrutiva somente para o estado da subbanda inicial, o que resulta em elétrons de entrada e saída

distribuídos em subbandas diferentes. Este efeito afeta fortemente as probabilidades de transmissão, mudando a amplitude e o período das oscilações AB. Na verdade, podemos observar que, aumentando-se a intensidade de um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do sistema canal-anel, uma oscilação periódica ocorre não só nos coeficientes de transmissão e reflexão, como já é esperado pelo efeito AB, mas também nas projeções da função de onda sobre as outras subbandas no canal direito.

O efeito de assimetrias no anel é analisado considerando-se uma impureza ou um potencial Gaussiano localizado em um dos seus braços. Na presença de uma assimetria como esta, é possível reduzir à metade o período da oscilação AB, reduzindo também significativamente sua amplitude. Porém, se duas impurezas negativas estão posicionadas em lados diametralmente opostos do anel, a simetria do sistema é recuperada, assim como a amplitude e o período das oscilações AB. Um comportamento similar a este foi observado também anteriormente nas autoenergias de um elétron em um anel quântico com impurezas. [20]

Uma análise da corrente de densidade de probabilidade como função do tempo em certos pontos do sistema nos permite entender como se dá a trajetória do elétron nestas estruturas, além de possibilitar-nos fazer uma comparação com os resultados para uma partícula clássica. Em alguns casos para o fio T e para o anel, especialmente para baixas energias, a abordagem clássica leva a um resultado bastante coerente. Já para energias maiores, a abordagem clássica superestima o valor da velocidade do elétron. Isso pode ser entendido se lembrarmos que, para maiores energias, boa parte da função de onda transmitida está na segunda subbanda, que apresenta menor k e, consequentemente, menor velocidade. Além disso, podemos ver que a função de onda do elétron move-se para frente e para trás nos braços do anel, contribuindo assim para a transmissão e para a reflexão com mais de um pulso.

Propomos também um modelo simples para descrever superfícies rugosas em anéis quânticos semicondutores. A influência da rugosidade da superfície sobre o espectro de energia do elétron em anéis quânticos $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, sob um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano do ring, é analisada, onde demonstramos que a existência de rugosidade é responsável por um desvio considerável nos níveis de energia. Além disso, a degenerescência dos pontos de transição de momento angular nas oscilações AB é levantada quando consideramos superfícies rugosas, devido à quebra de simetria azimutal, e em casos especiais, as oscilações de energia do estado fundamental podem ser até mesmo suprimidas, o que dificultaria uma observação experimental do efeito AB em

amostras rugosas.

Mostramos como utilizar o método split-operator para os Hamiltonianos de Rashba, Dresselhaus e Zeeman, onde demonstramos que o operador de evolução temporal para estes Hamiltonianos pode ser expandido numa forma matricial de maneira exata. Utilizamos então este método para investigar as oscilações de pacotes de onda e a quebra de degenerescência de spins devido à presença de um campo magnético externo.

Em um segundo momento, estudamos o comportamento de elétrons em grafeno, onde primeiramente calculamos os níveis de energia de anéis quânticos de grafeno sob um campo magnético aplicado. Observamos que o espectro de energia e as oscilações AB para estes sistemas são fortemente dependentes da geometria e da estrutura das bordas.

O espectro de energia obtido pelo modelo TB para anéis quânticos hexagonais com bordas armchair exibe subbandas sêxtuplas separadas por gaps estreitos, que se tornam mais largos à medida que a espessura do anel aumenta. Este espectro não tem estados $E = 0$ quando o campo magnético é nulo, mas exibe estes estados para certos valores de fluxo magnético. As principais características deste espectro de energia podem ser obtidas através de um modelo simplificado, que considera elétrons obedecendo a equação de Dirac para um anel circular de espessura zero. Com um modelo simples como esse, podemos estimar os níveis de energia e o período das oscilações AB ou, alternativamente, estimar o raio do anel analizando seu espectro de energia como função do campo magnético. Esta aproximação é mais apropriada para anéis hexagonais com espessura menor e para valores menores de energia e campo magnético.

Para anéis zigzag, o espectro é qualitativamente diferente. As subbandas de energia sêxtuplas, separadas por gaps grandes, são bem mais visíveis que no caso armchair. Quando as bordas zigzag interna e externa estão alinhadas, o espectro de energia exibe uma subbanda em torno de $E = 0$ e o estado de menor energia é duplamente degenerado. Além disso, o sistema exibe estados de energia zero para valores específicos de fluxo magnético $\Phi_R \approx (n+1/2)\Phi_0$. Por outro lado, quando estas bordas estão anti-alinhadas, o espectro muda drasticamente: a degenerescência do nível de energia mais baixo é quebrada e duas subbandas, separadas por um gap pequeno, são observadas em torno de $E = 0$. Isso nos leva à seguinte questão: seria realmente possível modelar através da aproximação do contínuo esta forte dependência do espectro de energia sobre as estruturas das bordas, com o comportamento oscilatório do espectro ao mudarmos a espessura do anel? Este é um assunto interessante a ser analizado por trabalhos futuros.

Estudamos também dois casos de anéis circulares dentro do modelo TB: no primeiro,

onde o anel é efetivamente cortado de uma camada de grafeno, observamos um espectro de energia composto por pares de estados de energia que exibem oscilações AB à medida que o campo magnético aumenta. No segundo, onde os elétrons estão confinados em uma estrutura em forma de anel devido a um potencial externo dependente do sítio, o espectro de energia exibe um gap em torno de $E = 0$ e o estado fundamental é duplamente degenerado na ausência de campos magnéticos. À medida que o campo aumenta, esta degenerescência é levantada e as oscilações AB são observadas. Resultados similares foram obtidos analiticamente pelo modelo de Dirac em trabalhos anteriores [54, 143, 142] considerando-se barreiras abruptas de massa infinita.

Após a análise dos autoestados, passamos a estudar a dinâmica de pacotes de onda nestes sistemas. No caso de um elétron livre no grafeno, observamos o efeito conhecido como *zitterbewegung*, ou movimento trêmulo da função de onda. Os resultados obtidos com ambos os modelos TB e contínuo neste caso estão em bom acordo com os encontrados analiticamente, dentro dos limites de validade da aproximação do contínuo. [150] Demonstramos que a presença de um termo de massa, o qual pode ser obtido experimentalmente através da influência de um substrato sobre a rede hexagonal do grafeno, não só abre um gap no espectro de energia, como tem-se discutido em artigos recentes, mas também é responsável por uma maior intensidade do zitterbewegung, o que pode ser utilizado para facilitar a detecção experimental deste efeito. Isto também elimina a possibilidade de se utilizar uma barreira de massa para simular a reflexão de um pacote de onda nas bordas de uma folha de grafeno: devido ao zitterbewegung, o pacote de onda refletido acaba oscilando na direção perpendicular ao movimento e desviando-se do seu eixo de movimento inicial.

Usando o método split-operator adaptado para o Hamiltoniano de Dirac, estudamos o caso de um grafeno com barreiras de potencial, onde observamos todos os efeitos previstos para estes sistemas, como o tunelamento de Klein e a lei de Snell para a "refração" (tunelamento) de um elétron nestas barreiras. Mostramos que há ainda uma pequena reflexão em pacotes de onda Gaussianos, mesmo que estes incidam perpendicularmente à barreira, devido ao fato de haver uma distribuição de k's no pacote de onda na direção perpendicular à direção y do movimento. Ao aumentar a largura Δx do pacote, diminuímos a largura Δk desta distribuição, reduzindo assim a probabilidade de reflexão na barreira e facilitando a observação do tunelamento de Klein. Sugerimos ainda um sistema de barreiras de potencial, no formato de um contato, onde a lei de Snell pode induzir um estado quasi-ligado.

Estudamos também a propagação de pacotes Gaussianos sob campos magnéticos externos e induzidos por tensão, onde o último é obtido flexionando-se a folha de grafeno como um arco de círculo. Demonstramos que a combinação entre o campo pseudo-magnético e um campo magnético externo com a intensidade apropriada pode ser usado como um filtro de vales bastante eficiente. Um pacote de onda incidente composto de momenta em torno dos pontos K e K' de Dirac é espalhado de forma que todas as suas componentes em um dos cones de Dirac sofrem uma forte força de Lorentz e são prontamente refletidas, enquanto as componentes no outro cone podem passar através do dispositivo apenas com pequenas distorções em suas trajetórias, devido a uma força de Lorentz residual bastante fraca. Demonstramos também, através do modelo de Dirac, uma forma ainda mais simples de se separar os vales em uma folha de grafeno tensionada: considerando-se uma barreira de campo pseudo-magnético, como a estudada pelo modelo TB neste trabalho, se a incidência do pacote de onda não for normal à barreira, não é necessário usar um campo magnético externo para filtrar os vales, pois a própria força de Lorentz age de maneira a separá-los.

Nossos resultados mostram que na ausência de campos externos ou induzidos por tensão, o zitterbewegung é um efeito transiente, enquanto na presença de qualquer destes campos, as oscilações persistem no tempo. Em uma amostra tensionada sob um campo magnético externo com a intensidade apropriada, o campo magnético efetivo em um dos cones de Dirac é aumentado, enquanto no outro cone ele é praticamente cancelado. Nesta situação, um zitterbewegung permanente é observado para pacotes de onda em somente um dos cones de Dirac. As oscilações do pacote de onda produzem uma radiação eletromagnética, que pode ser detectada experimentalmente.

Por fim, apresentamos também um estudo teórico da interação entre vórtices em supercondutores na teoria de Ginzburg-Landau. Um estudo analítico do limite assintótico da interação vórtice-vórtice mostra que uma combinação de funções de Bessel modificadas do segundo tipo descrevem o comportamento das forças obtidas numericamente para vórtices separados a uma longa distância. Para pequenas distâncias, um fitting das curvas para interações V-V e V-GV mostra que a força nestas distâncias se comporta como uma potência da separação entre vórtices. Propomos então uma função de fitting que combina ambos os comportamentos nos limites, ou seja, a lei de potência para curtas distâncias e a função de Bessel modificada para longas distâncias. Esta função, dada pela Eq. (5.17), resulta em um fitting razoavelmente preciso da força de interação para qualquer valor de μ, até mesmo no regime tipo-I. Ela depende quatro parâmetros, os quais podem ser obtidos para qualquer μ interpolando-se os dados apresentados na Tabela I (Tabela III),

para interações vórtice-vórtice (vórtice-vórtice gigante), ou usando Eqs. (5.18 a-d) com os parâmetros apresentados na Tabela II (Tabela IV).

Nossos estudos analíticos da interação V-AV mostram que a força de interação V-AV é atrativa para qualquer valor do parâmetro de Ginzburg-Landau μ, o que se confirma pelos nossos resultados numéricos e contradiz a conjectura proposta em artigos anteriores [161, 162, 163] que sugere que a interação V-AV é repulsiva para $\mu < 1$ (tipo-I). Para grandes separações d, a força de interação decai com d como uma combinação de funções de Bessel modificadas. Porém, para d menor que uma separação crítica d_E, o par V-AV na sua forma convencional deixa de ser o estado de menor energia. Ao invés disso, o estado de menor energia exibe uma forte diminuição da corrente e da amplitude do parâmetro de ordem na região entre o vórtice e o antivórtice, o que resulta em um comportamento diferente da força como função de d neste caso e, consequentemente, a força de interação V-AV é discontínua em d_E. Além disso, o par V-AV convencional torna-se instável para d menor que uma determinada separação d_A, a qual interpretamos como o ponto de aniquilação do par V-AV. Fitamos a força de interação V-AV para separações $d > d_E$ através da Eq. (5.21) e propomos uma expressão analítica aproximada para esta força, dada pela Eq. (5.23), que é válida para qualquer valor de μ.

As funções de fitting para a força de interação V-V, V-GV e V-AV dadas neste trabalho serão úteis, por exemplo, para o estudo de sistemas volumétricos e mesoscópicos consistindo de muitos vórtices através de técnicas de dinâmica molecular. Ainda assim salientamos que, apesar das deformações serem levadas em conta na força de interação entre pares de vórtices neste trabalho, as deformações em um sistema de muitos vórtices devem ser bem mais complexas. Assim, o estudo de dinâmica molecular de muitos vórtices, mesmo com as expressões para a força de interação sugeridas neste trabalho, ainda é apenas uma descrição aproximada do sistema. Como um método, a derivação e o manuseio das equações diferenciais que descrevem a interação entre vórtices apresentadas neste trabalho podem ser facilmente adaptados para descrever estas mesmas interações em supercondutores de duas bandas, ou em sistemas híbridos, compostos por dois materiais supercondutores diferentes.

De fato, adaptamos nosso método para o estudo de interações V-V em supercondutores de duas bandas. Com isso, demonstramos uma forma de calcular o potencial de interação V-V nestes sistemas e usamos as formas assintóticas dos vórtices para determinar a profundidade de penetração magnética efetiva, o comprimento de coerência e, consequentemente, um parâmetro de Ginzburg-Landau κ^* efetivo para os condensados de

pares de Cooper em supercondutores de duas bandas. Estes parâmetros efetivos nos permitem prever diretamente o comportamento da interação vórtice-vórtice a longo alcance, enquanto o comportamento a curto alcance é descrito pelo sinal da energia de superfície de uma interface entre os estados normal e supercondutor em duas bandas. Nossa análise permite uma fácil estimativa do comportamento magnético dos materiais de duas bandas já conhecidos, como MgB_2 e pnictides, uma vez que conhecemos os parâmetros destes materiais, mas também será útil para futuros estudos sobre supercondutores em nano-escala e supercondutores híbridos de duas componentes produzidos artificialmente.

Podemos citar diversas perspectivas para trabalhos futuros:

- Para o caso de Hamiltonianos que independem de spin, pretendemos expandir ainda mais o estudo da injeção de elétrons em anéis quânticos, tratando também de sistemas assimétricos e na presença de campos elétricos no plano. Pretendemos calcular também as propriedades de transporte de um elétron em um meio semicondutor poroso, onde aproximaremos os poros por cilindros de potencial infinito distribuídos aleatoriamente sobre o plano. Podemos ainda pensar em um outro tipo de sistema de duas dimensões: um sistema de dois elétrons em um fio quântico heteroestruturado. [35] Podemos fazer um estudo da evolução temporal de um elétron neste sistema na presença de outro elétron já confinado. Cada elétron só teria uma dimensão de liberdade (na direção z), fazendo assim, duas dimensões. Eles então interagiriam através de um potencial Coulombiano. Podemos estudar também um sistema composto de um anel quântico com dois canais, para a injeção de dois elétrons, consistindo de um problema de quatro dimensões (direções x e y para cada elétron). Por fim, em um artigo recente, foi demonstrado experimentalmente que as oscilações de condutividade devido ao efeito AB passam a apresentar um período diferente para campos magnéticos muito intensos. [184] Pretendemos utilizar nossos métodos para analisar a propagação de um pacote de onda para estes valores de campos magnéticos em um anel quântico, de maneira a verificar e tentar entender melhor tal efeito.

- Para o caso de Hamiltonianos dependentes de spin, pretendemos utilizar o método *split-operator* para aprofundar o estudo de pontos e anéis quânticos com efeitos spin-órbita, analisando a evolução de pacotes de onda e as propriedades de transporte em casos de interesse para spintrônica. Podemos estudar, por exemplo, o efeito dos termos de interação spin-órbita sobre o tempo de tunelamento de um estado confinado em um ponto quântico com uma barreira finita.

- Pretendemos aprofundar o estudo da evolução temporal de pacotes de onda em

sistemas de grafeno com termos de massa e de potencial. De imediato, propomos calcular o zitterbewegung em uma folha de grafeno através do método tight-binding na presença de um campo magnético externo e de um potencial dependente do sítio (ou seja, um termo de massa), induzido pelo substrato . Neste caso, consideraríamos inicialmente um autoestado do sistema, o qual seria excitado por um pulso de energia dependente do tempo. Este aparato sugerido seria a situação ideal para a detecção experimental do zitterbewegung, onde tempos uma alta amplitude, devido ao termo de massa, e um movimento permantente, devido ao campo externo. Tentaremos também encontrar a densidade de estados e estudar os estados quasi-ligados no potencial em forma de contato sugerido neste trabalho.

- No caso da interação entre vórtices em supercondutores, pretendemos, de imediato, expandir nosso método de cálculo da interação para supercondutores de tamanho finito. Nos problemas que estudamos aqui, consideramos sistemas volumétricos, onde conhecemos o caráter tipo-I, tipo-II ou tipo-1.5 das interações através do(s) valor(es) do(s) parâmetro(s) de GL. Sabe-se também que no limite de filmes muito finos, com espessura $L \to 0$, temos um parâmetro de GL efetivo dado por κ/L, o qual torna o sistema efetivamente do tipo-II. Porém, seria interessante saber detalhadamente como uma amostra do tipo-I se torna do tipo-II pela redução da espessura do sistema: seria uma passagem abrupta, de um potencial totalmente atrativo para um totalmente repulsivo? seria uma passagem gradual, onde primeiramente só o início ou só o fim da curva de potencial se torna repulsivo, para que depois, para menores espessuras, toda a curva seja repulsiva? Em qualquer um dos casos, o problema é interessante: no primeiro, deveríamos então ter uma espessura para o qual $\kappa = 1/\sqrt{2}$ e os vórtices não interagem; já no segundo, para tamanhos intermediários, deveríamos observar clusters ou bolhas de vórtices, pois o potencial de interação seria não-monotônico.

APÊNDICE A – Artigos publicados relacionados à tese

- M. Zarenia, J. M. Pereira Jr., A. Chaves, F. M. Peeters, G. A. Farias, *Simplified model for the energy levels of quantum rings in single layer and bilayer graphene*, Phys. Rev. B **81**, 045431 (2010).

- J. M. Pereira Jr., F. M. Peeters, A. Chaves, G. A. Farias, *Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene*, Semic. Sci. Tech. **25**, 033002 (2010).

- A. Chaves, L. Covaci, Kh. Yu. Rakhimov, G. A. Farias, F. M. Peeters, *Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene*, Phys. Rev. B **82**, 205430 (2010).

- A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters, B. Szafran, *Wave packet dynamics in semiconductor quantum rings of finite width*, Phys. Rev. B **80**, 125331 (2009).

- A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, G. A. Farias, *The role of surface roughness on the electron confinement in semiconductor quantum rings*, Microelect. J. **39**, 455 (2007).

APÊNDICE B – Artigos em andamento

- A. Chaves, L. Komendova, J. S. Andrade Jr., M. Milošević, F. M. Peeters, G. A. Farias *On the conditions for a non-monotonic interaction between vortices in multiband superconductors*;
- A. Chaves, F. M. Peeters, G. A. Farias, M. Milošević, *(Giant) Vortex - (anti) vortex interaction in bulk superconductors: The Ginzburg-Landau theory*, arXiv:1005.4630v1 (2010);
- J. Costa e Silva, A. Chaves, G. A. Farias, M. H. Degani, R. Ferreira, *Eccentricity effects on the quantum confinement in double quantum rings*;
- A. Chaves, M. Zarenia, J. M. Pereira Jr., G. A. Farias, F. M. Peeters, *Aharonov-Bohm oscillations in the energy spectra of graphene quantum rings.*

APÊNDICE C – Artigos publicados não relacionados à tese

- L. J. P. Xavier, J. M. Pereira Jr., A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters, *Topological confinement in graphene bilayer quantum rings*, App. Phys. Lett. **96**, 212108 (2010).

- A. C. A. Ramos, A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters, *Electronic states above a helium film suspended on a ring-shaped substrate*, Phys. Rev. B **77**, 045415 (2008).

- A. Chaves, J. A. K. Freire, G. A. Farias, *Grading effects in semiconductor nanowires with longitudinal heterostructures*, Phys. Rev. B **78**, 155306 (2008).

- A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, M. H. Degani, V. N. Freire, G. A. Farias, *Influence of Graded Interfaces on the Exciton Energy of Type-I and Type-II* $Si/Si_{1-x}Ge_x$ *Quantum Wires*, J. Mat. Sci. **42**, 2314 (2007).

- A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, G. A. Farias, *Excitonic Properties of Type-I and Type-II* $Si/Si_{1-x}Ge_x$ *Quantum Wells*, J. App. Phys. **101**, 113703 (2007).

- J. Costa e Silva, A. Chaves, J. A. K. Freire, V. N. Freire, G. A. Farias, *Theoretical Investigation of Excitons in Type-I and Type-II* $Si/Si_{1-x}Ge_x$ *Quantum Wires*, Phys. Rev. B **74**, 85317 (2006).

- C. L. N. Oliveira, A. Chaves, E. W. S. Caetano, M. H. Degani, J. A. K. Freire, *Quantum Confinement of Carriers in Heterostructured GaAs/GaP Quantum Wires*, Microelect. J. **36**, 1049 (2005).

Referências

[1] B. Szafran and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **72**, 165301 (2005).

[2] P. Stano and J. Fabian, Phys. Rev. B 72, 155410 (2005).

[3] I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).

[4] W. Zawadzki, Phys. Rev. B **72**, 085217 (2005).

[5] A. Matulis and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **77**, 115423 (2008).

[6] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, Nat. Phys. **6**, 30 (2010).

[7] V. V. Moshchalkov, M. Menghini, T. Nishio, Q. H. Chen, A. V. Silhanek, V. H. Dao, L. F. Chibotaru, N. D. Zhigadlo, and J. Karpinski, Phys. Rev. Lett. **102**, 117001 (2009).

[8] E. H. Brandt and Mukunda P. Das, arXiv:1007.1107v1 (2010).

[9] *Solid State Physics*, Neil W. Ashcroft e N. David Mermin, Holt Rineheart and Winston (1976).

[10] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

[11] D. A. Bahamon, A. L. C. Pereira, and P. A. Schulz, Phys. Rev. B **79**, 125414 (2009).

[12] M. V. Milošević, and R. Geurts, Physica C **470**, 791 (2010).

[13] R. Tsu, and L. Esaki, Appl. Phys. Lett.22, 562 (1973).

[14] J. Costa e Silva, A. Chaves, J. A. K. Freire, V. N. Freire, and G. A. Farias, Phys. Rev. B **74**, 085317 (2006).

[15] J-M Baribeau, XWu, N L Rowell, and D J Lockwood, J. Phys.: Condens. Matter 18, R139 (2006).

[16] C.-H. Chiu, Z. Huang and C. T. Poh, Phys. Rev. Lett. **93**, 136105 (2004).

[17] I. Kegel, T. H. Metzger, A. Lorke, J. Peisl, J. Stangl, G. Bauer, J. M. García e P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. 85, 1694 (2000).

[18] A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters, and B. Szafran, Phys. Rev. B **81**, 125331 (2009).

[19] F. Martins, B. Hackens, M. G. Pala, T. Ouisse, H. Sellier, X. Wallart, S. Bollaert, A. Cappy, J. Chevrier, V. Bayot, and S. Huant, Phys. Rev. Lett. **99**, 136807 (2007).

[20] G. A. Farias, M. H. Degani, J. A. K. Freire, J. Costa e Silva and R. Ferreira, Phys. Rev. B **77**, 085316 (2008).

[21] A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, G. A. Farias, Microelectr. J. 39, 455 (2008).

[22] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 115, 485 (1959).

[23] Sergio M. Rezende, *Materiais e Dispositivos Eletrônicos*, 2a edição (2004).

[24] *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures*, Eudenilson L. Albuquerque e Michael G. Cottam, Elsevier B.V. (2004).

[25] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition (1994).

[26] Jasprit Singh, *Physics of Semiconductors and their Heterostructures*, McGraw Hill (1993).

[27] W. I. Wang e F. Stern, J. Vac. Sci. Technol. B **3**, 1280 (1985).

[28] E. H. Li, Physica E **5**, 215 (2000).

[29] L. Yang, J. R. Watling, R. C. W. Wilkins, M. Boriçi, J. R. Barker, A. Asenov e S. Roy, Semicond. Sci. Tech. **19**, 1174 (2004).

[30] B. Hackens, F. Martins, T. Ouisse, H. Sellier, S. Bollaert, X. Wallart, A. Cappy, J. Chevrier, V. Bayot and S. Huant, Nature Phys. **2**, 826 (2006).

[31] J. van Bree, P. M. Koenraad, and J. Fernández-Rossier, Phys. Rev. B **78**, 165414 (2008).

[32] T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, T. Noda, K. Kuroda, K. Sakoda, G. Kido and N. Koguchi, Physica E **32**, 46 (2006).

[33] L. C. L. Y. Voon, B. Lassen, R. Melnik and M. Willatzen, J. Appl. Phys. **96**, 4660 (2004).

[34] G. A. Farias, J. S. de Sousa and A. Chaves, Quantum Confinement in Heterostructured Semiconductor Nanowires with Graded Interface, in *Nanowires*, Paola Prete (Ed.), ISBN: 978-953-7619-79-4, (InTech, 2010).

[35] A. Chaves, J. A. K. Freire, and G. A. Farias, Phys. Rev. B **78**, 155306 (2008).

[36] P. Pietiläinen and T. Chakraborty, Phys. Rev. B **73**, 155315 (2006).

[37] R. Hanson, L. H. Willems van Beveren, I. T. Vink, J. M. Elzerman, W. J. M. Naber, F. H. L. Koppens, L. P. Kouwenhoven, and L. M. K. Vandersypen, Phys. Rev. Lett. **94**, 196802 (2005).

[38] S. Bandyopadhyay, Phys. Rev. B **61**, 13813 (2000).

[39] G. Bastard, Phys. Rev. B **46**, 4253 (1992).

[40] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).

[41] P. R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).

[42] M. A. H. Vozmediano, M. I. Katsnelson, and F. Guinea, Physics Reports **496**, 109 (2010).

[43] V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B **80**, 045401 (2009).

[44] G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P.J. Kelly, and J. van den Brink, Phys. Rev. B **76**, 073103 (2007).

[45] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, Nat. Mat. **6**, 770 (2007).

[46] J. M. Pereira, A. Chaves, G. A. Farias, and F. M. Peeters, Semic. Sci. Tech. **25**, 033002 (2010).

[47] P. Hewageegana and V. Apalkov, Phys. Rev. B 77, 245426 (2008).

[48] J. M. Pereira Jr., P. Vasilopoulos and F. M. Peeters, Nano. Lett. **7**, 946 (2007).

[49] J. M. Pereira Jr, F. M. Peeters and P. Vasilopouolos, Phys. Rev. B 75, 125433 (2007).

[50] J. M. Pereira Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Appl. Phys. Lett. 90, 132122 (2007).

[51] J. Wurm, A. Rycerz, I. Adagideli, M. Wimmer, K. Richter, and H. U. Baranger, Phys. Rev. Lett. **102**, 056806 (2009).

[52] J. Wurm, M. Wimmer, H. U. Baranger, and K. Richter, Semic. Sci. Tech. **25**, 034003 (2010).

[53] S. Schnez, K. Ensslin, M. Sigrist, and T. Ihn, Phys. Rev. B **78**, 195427 (2008).

[54] P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya. M. Blanter, C. W. J. Beenakker, and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B **76**, 235404 (2007).

[55] B. Thaller, arXiv:quant-ph/0409079v1 (2004).

[56] W. Zawadzki, T. M. Rusin, Phys. Lett. A **374**, 3533 (2010).

[57] G. Dàvid and J. Cserti, Phys. Rev. B **81**, 121417(R) (2010).

[58] E. Schrödinger, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. Kl. **24**, 418 (1930).

[59] J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt, Phys. Rev. Lett. **94**, 206801 (2005).

[60] T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **80**, 045416 (2009).

[61] Y.-X. Wang, Z. Yang, and S.-J. Xiong, Europhys. Lett. **89**, 17007 (2010).

[62] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos, Nature (London) **463**, 68 (2010).

[63] J. A. Lock, Am. J. Phys. 47, 797 (1979).

[64] J. W. Braun, Q. Su and R. Grobe, Phys. Rev. A 59, 604 (1999).

[65] V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **103**, 046801 (2009).

[66] Seon-Myeong Choi, Seung-Hoon Jhi, and Young-Woo Son, Phys. Rev. B **81**, 081407(R) (2010).

[67] F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, Phys. Rev. B **81**, 035411 (2010).

[68] O. Bahat-Treidel, O. Peleg, M. Grobman, N. Shapira, M. Segev, and T. Pereg-Barnea, Phys. Rev. Lett. **104**, 063901 (2010).

[69] T. Fujita, M. B. A. Jalil, and S. G. Tan, Appl. Phys. Lett. **97**, 043508 (2010).

[70] Z. Wu, F. Zhai, F. M. Peeters, H. Q. Xu and K. Chang, arXiv:1008.4858v3 (2010).

[71] E. Cadelano, S. Giordano, and L. Colombo, Phys. Rev. B **81**, 144105 (2010).

[72] G. Cocco, E. Cadelano, and L. Colombo, Phys. Rev. B **81**, 241412 (2010).

[73] Y. Lu and J. Guo, Nano Res. **3**, 189 (2010).

[74] T. Low and F. Guinea, Nano Lett. **10**, 3551 (2010).

[75] N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto, M. F. Crommie, Science **329**, 544 (2010).

[76] F. Guinea, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov, Phys. Rev. B **81**, 035408 (2010).

[77] A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, Nat. Phys. **3**, 172 (2007).

[78] M. R. Masir, P. Vasilopoulos, A. Matulis, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **77**, 235443 (2008).

[79] S. Gustavsson, R. Leturcq, M. Studer, T. Ihn, K. Ensslin, D. C. Driscoll and A. C. Gossard, Nano Lett. **8**, 2547 (2008).

[80] S. Russo, J. B. Oostinga, D. Wehenkel, H. B. Heersche, S. S. Sobhani, L. M. K. Vandersypen, and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B **77**, 085413 (2008).

[81] L. G. G. V. Dias da Silva, S. E. Ulloa, and A. O. Govorov, Phys. Rev. B. 70, 155318 (2004).

[82] J. Liu, A. Zaslavsky, and L. B. Freund, Phys. Rev. Lett. 89, 096804 (2002).

[83] X. Yu, J. - L. Zhu and X. Hu, Appl. Phys. Lett. **82**, 4567 (2003).

[84] B. Szafran, F. M. Peeters and S. Bednarek, Phys. Rev. B **70**, 125310 (2004).

[85] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, Phys. Rev. B **71**, 125312 (2005).

[86] A. C. A. Ramos, A. Chaves, G. A. Farias, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **77**, 045415 (2008).

[87] S. Miyamoto, O. Moutanabbir, T. Ishikawa, M. Eto, E. E. Haller, K. Sawano, Y. Shiraki, K. M. Itoh, Phys. Rev. B **82**, 073306 (2010).

[88] B. Szafran and F. M. Peeters, Europhys. Lett. **70**, 810 (2005).

[89] F. London and H. London, Proc. R. Soc. London A **149** (866), 71 (1935).

[90] A. A. Abrikosov, Soviet Physics JETP **5**, 1174 (1957).

[91] J. W. Rohlf, *Modern Physics from a to Z0*, Wiley 1994.

[92] L. Kramer, Phys. Rev. B **3**, 3821 (1971).

[93] L. Jacobs and C. Rebbi, Phys. Rev. B **19**, 4486 (1979).

[94] V. A. Schweigert and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **57**, 13817 (1998).

[95] A. Kanda, B. J. Baelus, F. M. Peeters, K. Kadowaki, and Y. Ootuka, Phys. Rev. Lett. **93**, 257002 (2004).

[96] D. S. Golubović, M. V. Milošević, F. M. Peeters, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. B **71**, 180502(R) (2005).

[97] E. H. Brandt, Phys. Rev. B **34**, 6514 (1986).

[98] J. M. Speight, Phys. Rev. D **55**, 3830 (1997).

[99] R. MacKenzie, M.-A. Vachon, and U. F. Wichoski, Phys. Rev. D **67**, 105024 (2003).

[100] L. M. A. Bettencourt and R. J. Rivers, Phys. Rev. D **51**, 1842 (1995).

[101] F. Mohamed, M. Troyer, G. Blatter, and I. Luk'yanchuk, Phys. Rev. B **65**, 224504 (2002).

[102] A. D. Hernández and A. López, Phys. Rev. B **77**, 144506 (2008).

[103] J. R. Clem, J. Low Temp. Phys. **18**, 427 (1975).

[104] R. Auzzi, M. Eto, and W. Vinci, J. High Energ. Phys. **2**, 100 (2008).

[105] E. Babaev and M. Speight, Phys. Rev. B **72**, 180502(R) (2005).

[106] R. Geurts, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, arXiv:1005.2921v1.

[107] V.V. Moshchalkov *et al.*, in *Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology*, Academic Press, pp. 451-525 (1999).

[108] F. Bouquet, R. A. Fisher, N. E. Phillips, D. G. Hinks, and J. D. Jorgensen , Phys. Rev. Lett. **87**, 047001 (2001); P. Szabó, P. Samuely, J. Kačmarčík, T. Klein, J. Marcus, D. Fruchart, S. Miraglia, C. Marcenat, and A. G. M. Jansen, Phys. Rev. Lett. **87**, 137005 (2001).

[109] M.L. Teague, G. Drayna, G. Lockhart , P. Cheng, B. Shen, H.-H. Wen, and N.-C. Yeh, arXiv:1007.5086v1.

[110] B.L. Blackford and R.H. March, Phys. Rev. **186**, 397 (1969).

[111] D. Eom, S. Qin, M.-Y. Chou, and C. K. Shih, Phys. Rev. Lett. **96**, 027005 (2006).

[112] M.E. Zhitomirsky and V.H. Dao, Phys. Rev. B **69**, 054508 (2004).

[113] S.-Z. Lin, X. Hu, arXiv:1007.1940v1 (2010).

[114] V. G. Kogan and J. Schmalian, arXiv:1008.0581.

[115] J. Geyer, R. M. Fernandes, V. G. Kogan, and J. Schmalian , Phys. Rev. B **82**, 104521 (2010).

[116] N. Watanabe and M. Tsukada, Phys. Rev. E **62**, 2914 (2000).

[117] M. Suzuki, Phys. Lett. A **146**, 319 (1990).

[118] A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire and G. A. Farias, Microelectr. J. **39**, 455 (2008).

[119] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, *Numerical Recipes in Fortran 77*, Second Edition, (1992).

[120] K. L. Janssens, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **67**, 235325 (2003).

[121] M. Governale and C. Ungarelli, Phys. Rev. B **58**, 7816 (1998).

[122] G. Stefanucci and C.-O. Almbladh, Phys. Rev. B **69**, 195318 (2004); V. Moldoveanu, V. Gudmundsson and A. Manolescu, Phys. Rev. B **76**, 085330 (2007); A. Stan, N. E. Dahlen and R. van Leeuwen, J. Chem. Phys. **130**, 224101 (2009).

[123] T. Kramer, C. Kreisbeck, and V. Krueckl, Physica Scripta **82**, 038101 (2010).

[124] R. Kosloff and D. Kosloff, J. Comput. Phys. **63**, 363 (1986).

[125] D. Neuhauser and M. Baer, J. Chem. Phys. **90**, 4351 (1988).

[126] S. Mahapatra and N. Sathyamurthy, J. Chem. Soc., Faraday Trans. **93**, 773

[127] A. Arnold, M. Ehrhardt and I. Sofronov, Comm. Math. Sci. **1**, 501 (2003).

[128] D. E. Manolopoulos, J. Chem. Phys. **117**, 9552 (2002).

[129] M. H. Degani, Phys. Rev. B **66**, 233306 (1997). (2002).

[130] R. Robinett *Quantum Mechanics: Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples* . Oxford University Press, Oxford (2006).

[131] J. Planelles and J. I. Climente, Eur. Phys. J. B 48, 65 (2005).

[132] F. M. Peeters, in the Proc. of NATO workshops on 'Science and Engineering of One and Zero Dimensional Semiconductors', Eds. S. P. Beaumont and C. M. Sotomayor Torres (Plenum Press, N. Y., 1990), p. 107.

[133] F. Sols, M. Macucci, U. Ravaioli and K. Hess, Appl. Phys. Lett. **54**, 350 (1989).

[134] W. G. van der Wiel, Yu. V. Nazarov, S. De Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, E. W. G. M. Huizeling, S. Tarucha, and L. P. Kouwenhoven, Phys. Rev. B. **67**, 033307 (2003).

[135] V. I. Mashanov, H. -H. Cheng, C. -T. Chia and Y. -H. Chang, Physica E **28**, 531 (2005).

[136] D. Granados and J. M. García, Appl. Phys. Lett. **82** 2401 (2003).

[137] T. Mano, T. Kuroda, S. Sanguinetti, T. Ochiai, T. Tateno, J. Kim, T. Noda, M. Kawabe, K. Sakoda, G. Kido, and N. Koguchi, Nano Lett. **5**, 425 (2005).

[138] M. Zarenia, J. M. Pereira, A. Chaves, F. M. Peeters, and G. A. Farias, Phys. Rev. B **81**, 045431 (2010).

[139] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).

[140] T. Luo, A. P. Iyengar, H. A. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. B **80**, 165310 (2009).

[141] A. Iyengar, T. Luo, H. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. B **78**, 235411 (2008).

[142] C.-H. Yan and L.-F. Wei, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 295503 (2010).

[143] D. S. L. Abergel, V. M. Apalkov, and T Chakraborty, Phys. Rev. B **78**, 193405 (2008).

[144] G. Paz, Eur. J. Phys. **22**, 337 (2001).

[145] A. G. Aronov and Y. B. Lyanda-Geller, Phys. Rev. Lett. **70**, 343 (1993).

[146] Y. S. Yi, T. Z. Qian, and Z. B. Su, Phys. Rev. B **55**, 10631 (1997).

[147] T. Choi, S. Y. Cho, C. M. Ryu, and C. K. Kim, Phys. Rev. B **56**, 4825 (1997).

[148] F. E. Meijer, A. F. Morpurgo, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 033107 (2002).

[149] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **77**, 085423 (2008).

[150] G. M. Maksimova, V. Ya. Demikhovskii and E. V. Frolova, Phys. Rev. B **78**, 235321 (2008).

[151] H. N. Nazareno, P. E. de Brito, and E. S. Rodrigues, Phys. Rev. B **76**, 125405 (2007).

[152] J. M. Pereira Jr., V. Mlinar, F. M. Peeters and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B 74, 045424 (2006).

[153] V. V. Cheianov, V. Fal'ko, and B. Altshuler, Science **315**, 1252 (2007).

[154] A. Chaves, L. Covaci, Kh. Yu. Rakhimov, G. A. Farias, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **82**, 205430 (2010).

[155] J.-H. Chen, W. G. Cullen, C. Jang, M. S. Fuhrer,and E. D. Williams, Phys. Rev. Lett. **102**, 236805 (2009).

[156] T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **78**, 125419 (2008).

[157] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1975).

[158] E. Romera and F. de los Santos, Phys. Rev. B **80**, 165416 (2009).

[159] V. Krueckl and T. Kramer, New J. Phys. **11**, 093010 (2009).

[160] D. R. Tilley and J. Tilley, *Superfluidity and superconductivity*, (IOP Publishing Ltd. - London, 1990).

[161] V. R. Misko, V. M. Fomin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. Lett. **90**, 147003 (2003).

[162] V. R. Misko, V. M. Fomin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov, Phys. C **404**, 251 (2004).

[163] G. Teniers, V. V. Moshchalkov, L. F. Chibotaru, and A. Ceulemans, Phys. B **329-333**, 1340 (2003).

[164] G. R. Berdiyorov, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. **96**, 207001 (2006).

[165] R. Geurts, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. **97**, 137002 (2006); *ibid.* Phys. Rev. B **75**, 184511 (2007).

[166] E. B. Bogomol'nyi, Sov. J. Nucl. Phys. **24**, 449 (1976).

[167] T. M. Samols, Commun. Math. Phys. **145**, 149 (1992).

[168] J. Pearl, Appl. Phys. Lett. **5**, 65 (1964).

[169] E. H. Brandt, Phys. Rev. B **79**, 134526 (2009).

[170] S. Zapperi, A. A. Moreira, and J. S. Andrade Jr., Phys. Rev. Lett. **86**, 3622(2001)

[171] E. H. Brandt, Rep. Prog. Phys. **58**, 1465 (1995).

[172] C. Reichhardt, C. J. Olson, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. **78**, 2648 (1997).

[173] W. V. Pogosov, H. J. Zhao, V. R. Misko, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **81**, 024513 (2010)

[174] D. J. Priour Jr. and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **67**, 054504 (2003).

[175] E. Sardella, P. N. Lisboa Filho, C. C. de Souza Silva, L. R. Eulalio Cabral, and W. Aires Ortiz, Phys. Rev. B **80**, 012506 (2009).

[176] C. L. S. Lima and C. C. de Souza Silva, Phys. Rev. B **80**, 054514 (2009).

[177] E. Babaev and M. Speight, Phys. Rev. B **72**, 180502 (2005); ver também arXiv:0910.1607 e Physica C (2010).

[178] A.A. Shanenko *et al.*, (submetido).

[179] A. Gurevich, Phys. Rev. B **67**, 184515 (2003); Physica C **456**, 160-169 (2007).

[180] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, pp. 17-18, New York - Dover, 1972.

[181] A. Chaves, F. M. Peeters, G. A. Farias, M. Milošević, arXiv:1005.4630v1 (2010).

[182] J.-P. Wang, Phys. Lett. A **374**, 58 (2009).

[183] H. Kim, M. A. Tanatar, Yoo Jang Song, Yong Seung Kwon, R. Prozorov, arXiv:1008.3251v3 (2010).

[184] A. J. M. Giesbers, U. Zeitler, M. I. Katsnelson, D. Reuter, A. D. Wieck, G. Biasiol, L. Sorba, and J. C. Maan, Nat. Phys. **6**, 173 (2010).