

# Dispositivos Valetrônicos de MoS<sub>2</sub>- dispositivos eletrônicos e optoeletrônica da próxima geração

Jader Martins Camboim de Sá

Orientadores: Prof. Dr. Qu Fanyao e Prof. Dr. Leonardo Villegas-Lelovsky<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidade de Brasília, 70910-900, Brasília-DF, Brazil.*

(Dated: 15 de Julho de 2017)

Analisaremos a estrutura do Grafeno\* e suas características, também será apresentado um programa desenvolvido durante o projeto que será utilizado para o cálculo de estrutura de banda de materiais.

PACS numbers:

## I. INTRODUÇÃO

Pesquisa

O grafeno tem atraído considerável atenção devido às suas notáveis propriedades eletrônicas e promissoras aplicações tecnológicas na criação de dispositivos nanoeletrônicos<sup>1,2</sup>. Propriedades intrigantes surgem como uma consequência direta do gap de energia zero, entre as bandas de valência e de condução, e da linearidade da relação de dispersão da energia mais baixa, onde portadores de carga podem ser tratados como férmions quírais sem massa. Na verdade, essas características desempenham um papel-chave para explicar fenômenos tais como o tunelamento de Klein<sup>3,4</sup>, o que por sua vez explica o fato de que portadores de carga no grafeno não estejam totalmente localizados por um potencial de confinamento, já que para um estado eletrônico sempre existe um buraco fornecendo um canal de fuga. No entanto, foi mostrado também que, em sistemas de uma e zero dimensões deitados em amostras baseados em grafeno, as regras de quantização no momento linear e angular, respectivamente, podem introduzir energias proibidas, que prendem os portadores em uma determinada região<sup>5-9</sup>.

Na ausência de interação spin órbita a estrutura de bandas do grafeno mostra um espectro linear de energia cruzando o nível de Fermi dos pontos de Dirac  $K$  e  $K'$  zona hexagonal de Brillouin, no grafeno a interação spin órbita abre uma banda de gap nos pontos de Dirac. Trabalhos subsequentes, porém, mostram que a interação spin órbita intrínseca é bastante fraca<sup>10</sup>. Uma importante característica a se discutir é a resposta do campo elétrico que ajuda a criar estados localizados perto do cone de Dirac nos pontos degenerados da zona de Brillouin. Os pseudo estados relativísticos confinados nessas estruturas tem um inerente, mas finito, tempo de vida mas podem ser tratados como estados fermiônicos sem massa quase ligados<sup>6,8</sup>. Meios confiáveis de se criar gaps de energia no grafeno também têm sido propostos baseados na deposição química ou aplicação de tensões locais<sup>11-14</sup>. Assim, a funcionalidade de nanodispositivos tem melhorado nas montagens experimentais que provêm

condições para a abertura de gaps de energia acima de centenas de meV<sup>15,16</sup>. De fato, aplicações promissoras de estruturas de pequenas dimensões como pontos quânticos e anéis quânticos têm motivado estudos focados nos efeitos de tamanho quântico formado pelo corte de camadas de grafeno ou sujeitando os portadores de carga a potenciais eletrostáticos confiáveis<sup>17,18</sup>.

Nesse trabalho consideramos sistemas quânticos de grafeno com confinamento elétrico, induzido por terminais circulares, acima e abaixo do sistema grafeno-substrato, no qual é mantida uma voltagem controlada e um campo magnético transversal ao sistema. Nesse cenário estudaremos a interação spin-órbita do grafeno, procurando os estados ligados nas proximidades do cone de Dirac, na zona de Brillouin. Exploraremos o caso com e sem campo magnético, havendo ou não o efeito do substrato, no interior do poço de potencial, fora do mesmo não havendo qualquer campo magnético. Para isso resolvemos a equação de Dirac para o grafeno, usando hamiltoniano com o termo de spin órbita, o termo de massa e o potencial elétrico, obtendo um sistema de equações diferenciais acoplados, o qual possui solução analítica para o caso sem campo magnético e solução em séries de potência para o caso com campo.

## II. O MÉTODO

Durante o programa utilizamos o método da Teoria do Funcional da Densidade (DFT)(citação, na mecânica quântica, é um dos modelos mais usado para resolução do cálculo de estruturas eletrônicas para sistemas de múltiplos corpos. O nome deste método advém do uso de funções de densidade para o cálculo das propriedades, em que as características desses materiais são descritas por funcionais(citação\*\*\*

### III. MODELO TEÓRICO

#### A. Hamiltoniano

Inicialmente começamos utilizando o seguinte operador hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(r)I_{2 \times 2} + \tau\beta\sigma_z + \mathcal{H}_{SO} \quad (1)$$

onde:  $\mathcal{H}_0 = v\sigma\hat{\pi}$ , o qual é a energia cinética dos férmions sem massa,  $\mathcal{H}_{SO} = \alpha r \times \hat{\pi} \cdot \hat{S}$ , o qual é o termo de spin-órbita, com  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ , é o vetor das matrizes de Pauli-Dirac;  $r$  é a posição radial em um plano  $xy$ ,  $\beta$  é o termo de massa do substrato, o qual determina a força de interação entre a camada de grafeno e o substrato, o qual depende do material do substrato e é responsável pela abertura do gap de energia entre as bandas de condução e valência do cone de Dirac,  $\tau = \pm 1$ , indica os dois vales inequivalentes em  $K = \frac{2\pi}{a_0} \left( \frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$  e  $K' = \frac{2\pi}{a_0} \left( \frac{-1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$  da zona hexagonal de Brillouin, será igualado a 1,  $\alpha$  é o termo de interação spin-órbita,  $\hat{\pi}$  é o operador momento linear, o qual será definido como  $\hat{\pi} = -i\hbar\nabla + q_e A$ , sendo o calibre de Landau  $A = B \times \frac{r}{2}$ ,  $q_e$  é a carga do elétron, onde  $B$  é o campo magnético aplicado,  $V(r)$  é o potencial eletrostático,  $v$  é a velocidade de Fermi e  $I_{2 \times 2}$  é a matriz identidade  $2 \times 2$ . Dessa forma o Hamiltoniano (1) (vide A1 A2 no apêndice), na forma matricial é

Um perfil realista do potencial 2D, pode ser simulado através de uma gaussiana centrada em  $r = 0$ ,

$$V(r) = -V_0 e^{-\frac{r^2}{\Delta^2}},$$

onde  $-V_0$  e  $\Delta$  simulam, respectivamente, o poço e a largura da região atrativa. Porém escolhemos utilizar um potencial degrau, o qual pode ser resolvido de uma maneira mais simples entretanto com as mesmas propriedades do potencial real, da seguinte forma

$$V(r) = \begin{cases} 0 & ; r > a, \\ -V_0 & ; 0 < r < a. \end{cases} \quad (2)$$

#### B. Equação de Dirac e o problema de auto-valores

Nessa parte abordamos a solução do Hamiltoniano de Dirac ( $\mathcal{H}\psi = E\psi$ ), Eq.(2), para isso precisamos obter as equações acopladas referentes às funções de onda  $\psi$ .

A solução geral do hamiltoniano de Dirac, em coordenadas polares, pode ser escrita em duas componentes espinoriais para cada estado

$$\begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{im\theta} a(r) \\ e^{im'\theta} b(r) \end{pmatrix} \quad (3)$$

assumindo também que  $m' = m + 1$ , sendo  $m$  o número quântico orbital, ficaremos com as seguintes equações diferenciais acopladas

$$a(r) \left( \alpha\hbar \left( m + q_e \frac{Br^2}{2\hbar} \right) + V(r) + E + \beta \right) = i\hbar \left( b'(r) + b(r) \left( \frac{m+1}{r} + q_e \frac{Br}{2\hbar} \right) \right) \quad (4)$$

$$b(r) \left( -\alpha\hbar \left( m + 1 + q_e \frac{Br^2}{2\hbar} \right) + V(r) + E - \beta \right) = i\hbar \left( a'(r) - a(r) \left( \frac{m}{r} + q_e \frac{Br}{2\hbar} \right) \right) \quad (5)$$

Utilizando uma abordagem mais geral e simples, usaremos as seguintes unidades adimensionais  $\mathcal{V} = \frac{V}{V_0}$ ;  $\eta = \frac{r}{\ell_0}$ ;  $\gamma = \frac{\beta}{V_0}$ ;  $\varepsilon = \frac{E}{V_0}$ ;  $\bar{\alpha} = \frac{\alpha\hbar}{V_0}$ ;  $\ell_0 = \frac{\hbar v}{V_0}$ ;  $\ell_b = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$ ;  $\xi = \xi(B, V_0) = \left( \frac{\ell_0}{\ell_b} \right)^2$ , onde  $\ell_0$  e  $\ell_b$  são respectivamente a longitude elétrica e magnética características do sistema. Com isso conseguimos reescrever as equações (4) e (5) da seguinte forma

$$a'(\eta) - \left( \frac{\xi}{2}\eta + \frac{m}{\eta} \right) a(\eta) = i \left( \varepsilon - \mathcal{V} + \gamma + \bar{\alpha} \left( m + 1 + \frac{\xi}{2}\eta^2 \right) \right) b(\eta) \quad (6)$$

$$b'(\eta) - \left( \frac{\xi}{2}\eta + \frac{m+1}{\eta} \right) b(\eta) = i \left( \varepsilon - \mathcal{V} - \gamma + \bar{\alpha} \left( m + \frac{\xi}{2}\eta^2 \right) \right) a(\eta) \quad (7)$$

Desacoplando as equações (7) e (8) obtemos duas equações diferenciais de segunda ordem para as componentes spinoriais  $a(\eta)$  e  $b(\eta)$ , conforme demonstradas no apêndice B. Tendo em conta que as equações B1 e B2 são equivalentes sob a transformação  $(m, \gamma) \leftrightarrow (m+1, -\gamma)$ . Para análise de resultados basta utilizar apenas uma das equações (B1).

### IV. RESULTADOS

#### A. Solução sem campo magnético

Para o caso sem campo magnético ( $\xi = 0$ ), a equação B1 se reduz a

$$a''(\eta) + \frac{a'(\eta)}{\eta} + a(\eta) \left( \Lambda^2 - \frac{m^2}{\eta^2} \right) = 0 \quad (8)$$

onde o termo de energia  $\Lambda^2 = \Lambda_+ \Lambda_-$ , é a versão com spin-órbita do  $\lambda^2 = \lambda_+ \lambda_-$ <sup>19</sup> (ver Eqs. B3-B5). A equação (9), apresenta a seguinte solução geral

$$a(\eta) = C_1 J_m(\eta\Lambda) + C_2 Y_m(\eta\Lambda) \quad (9)$$

Figura 1: Diagrama de Fase  $\mathcal{E}$  vs  $\gamma$ : (a) Figura referência [19]  $\alpha = 0$  e  $m = 0$ , (b)  $\alpha = 1$  e  $m = 0$ , (c)  $\alpha = -1$  e  $m = 0$ , (d)  $\alpha = 1$  e  $m = 1$ .

Figura 2: Diagrama de Fase  $\mathcal{E}$  vs  $\alpha$ : (a)  $\gamma = 0$  e  $m = 0$ , (b)  $\gamma = 0.5$  e  $m = 0$ , (c)  $\gamma = 0$  e  $m = 1$ , (d)  $\gamma = 0.5$  e  $m = 1$ .

onde  $J_m$  e  $Y_m$  são as funções de Bessel de ordem  $m$ , de primeiro e segundo tipo respectivamente.

Do argumento da solução (10), dependendo do sinal do termo de energia ao quadrado ( $\Lambda^2 \leq 0$ ) nas diferentes regiões do sistema (duas para o ponto quântico e três para o anel quântico) emergem diferentes conjuntos de soluções ilustrados no diagrama de fases  $\mathcal{E}$  vs  $\gamma$  na Figura 1, especificados na referência [19] como: I-estados propagantes, II-estados ligados, III-estados banidos e IV-estados tune-lantes. A Fig.1(a), sem interação spin-órbita, serve como figura comparativa com as Figs.1(b-d), com interação spin-órbita ( $\alpha \neq 0$ ). Assim observamos, em (b) o deslocamento da simetria quiral em  $\gamma + 1$  e  $\mathcal{E} + 1$ , em (c) ao trocarmos o sinal de  $\alpha$  um deslocamento em  $\gamma - 1$  e  $\mathcal{E} + 1$ , em (d) para ( $m = 1$ ) um deslocamento  $\mathcal{E} + 1$  com relação a (b).

Para um melhor entendimento do efeito spin-órbita, fizemos um diagrama de fases  $\mathcal{E}$  vs  $\alpha$ , onde, conforme a Fig.2 observamos uma assimetria de  $\alpha$  para  $-\alpha$ . Assim a Fig.2(a), sem influência do substrato, apresenta uma transformação  $C_2$ . Entretanto em (b), com  $\gamma \neq 0$  observamos um deslocamento da origem em  $\bar{\alpha} + 1$  e  $\mathcal{E} + 1$ , em (c) para  $m = 1$ , com relação a (a), uma rotação da figura de  $\frac{\pi}{4}$  em torno da origem, em (d) a mesma rotação ocorrida em (c) porém com um deslocamento da origem em  $\bar{\alpha} + 1$  e  $\mathcal{E} + 1$ .

## B. Solução com campo magnético

Figura 3: Convergência da solução em série no ponto  $\eta = 6$  para um conjunto de parâmetros fixos  $m = 0$ ,  $\alpha = 0.1$ ,  $\lambda_+ = 2.0$ ,  $\lambda_- = \lambda_+$  e diferentes campos magnéticos:  $\xi = 0.01$  (a);  $\xi = 0.9$  (b).

Das equações (6) e (7) obtemos a equação mais geral para  $a(\eta)$  (vide apêndice B),

$$\begin{aligned} -a(\eta) \left( \frac{S}{\eta^2} + F\eta^2 + G\eta^4 + H\eta^6 + J \right) \\ - a'(\eta) \left( \frac{K}{\eta} + Z\eta \right) + a''(\eta) (L\eta^2 + P) = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

as definições dos coeficientes encontram-se bem definidos no apêndice C, a equação para  $b(\eta)$  é análoga a equação (11) Na solução da equação (11), utilizamos o método

de Froebenius, obtendo uma solução em torno da singularidade ( $\eta = 0$ ). Esse método em conjunto com o teorema de Fuchs, nos fornece duas soluções em séries de potências, porém apenas a solução com  $m > 0$  atende às condições de contorno do problema,

$$a(\eta) = \eta^m \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta^n \quad (11)$$

Detalhes sobre a solução da equação (11) encontram-se no apêndice D.

Figura 4: Diagrama de bandas de energia em função do campo magnético, sem confinamento elétrico ( $\mathcal{V} = 0$ ), para dois valores de spin-órbita, com  $m = 0$  e as funções de onda correspondentes aos estados de energia.

Uma análise da convergência da solução em séries é feita na Figura 3. Usando parâmetros físicos apropriados (com um número mínimo de estados confinados, no caso para  $\eta = 6$ ), como esperado atinge-se a convergência conforme aumentamos o número de termos do polinômio. Para viabilizar o cálculo computacional precisamos de um número finito de termos  $j = w$  com  $w$  número de corte onde a solução estabiliza com um erro de ordem de grandeza  $10^{-9}$ . Comparando (a) e (b) para campos magnéticos maiores será necessário levarmos em conta um maior número de termos para a equação (11) ( $\Omega(j)$ ) estabilizar, respectivamente,  $\xi = 0.01$  com  $w > 300$  e  $\xi = 0.9$  com  $w > 400$ .

### 1. Solução com campo magnético e sem confinamento elétrico

Ao resolver a equação de Dirac em duas regiões diferentes é suficiente manter a continuidade da solução na interface. Na primeira região ( $0 < \eta < 6$ ) temos campo magnético com o potencial eletrostático desligado, entretanto na segunda região não há campo magnético. Embora um potencial de confinamento elétrico sem campo magnético possibilite a natural aparição de estados ligados na região do poço, da Figura 4 é possível testemunhar de novo o surgimento de estados confinados na região de campo magnético sem potencial eletrostático. O campo magnético, transversal a folha do grafeno gera um potencial de confinamento parabólico originado do potencial escalar do momento linear ( $\hat{\pi}$ ).

Podemos perceber a assimetria da estrutura das bandas de condução e de valência, com respeito ao nível de Fermi ( $\mathcal{E} = 0$ ). Esta é uma manifestação da interação

Figura 5: Diagrama de bandas de energia em função do campo magnético, com confinamento elétrico ( $\mathcal{V} = 1$ ), para  $m = 0$  e  $\alpha = 0.1$  e as funções de onda correspondentes aos estados de energia.

spin-órbita no Hamiltoniano de Dirac gerando zonas em que não existe solução para o problema (similar as Figs (1,2)).

Cabe salientar a aparição, na banda de condução, de uma degenerescência entra o primeiro e segundo estados excitados, para um determinado valor de campo magnético ( $\alpha = 0.1$  e  $\xi = 0.85$ ). Com um aumento do efeito spin-órbita ( $\alpha = 0.15$ ) observamos, tanto para a banda de valência quanto para de condução, uma elevação dos estados de energia e o estreitamento da região solução ( $\mathcal{E}$  vs  $\xi$ ), apresentado pelas linhas oblíquas tracejadas, cujo resultado vai além de aumentar o band-gap ( $\Delta$ ) conforme o aumento do campo magnético, efeito bem conhecido na literatura, aqui nós temos que por exemplo,  $\xi = 0.45$ , para  $\alpha = 0.1$   $\Delta = 1.81$  entretanto,  $\alpha = 0.15$   $\Delta = 2.67$ . Por outro lado no ponto de degenerescência, para esse valor de spin-órbita  $\alpha = 0.15$  o mesmo diminui para  $\xi = 0.75$ . Na Figura 4 a direita ilustramos as funções de onda do estado fundamental e dos três primeiros excitados da banda de valência e o estado fundamental e os dois primeiros excitados da banda de condução (as cores das funções de onda correspondem as cores dos estados do diagrama de energia).

## 2. Solução com campo magnético e confinamento elétrico

*Sem interação grafeno-substrato.* O confinamento elétrico no sistema gera uma elevação do nível de Fermi ( $\mathcal{E} = 1$ ) segundo a Figura 5. Os estados de energia tiveram seus valores aumentados em  $\mathcal{E} + 1$  nas duas bandas. Efeitos relevantes aparecem na banda de condução. O estado fundamental e o primeiro estado excitado se correspondem, em posição, ao primeiro e segundo estados excitados da Figura 4, isto leva o ponto de degenerescência ao piso da banda de condução, enriquecendo as possibilidades para as possíveis transições ópticas.

*Com interação grafeno-substrato.* Como já foi explicado na referência[19], o termo de massa relativo ao efeito do substrato no grafeno induz um gap no diagrama de bandas proporcional a  $2\gamma$  como demonstrado nas Figuras 6(a) e 6(b), onde os novos limites para o piso da banda de condução e o teto da banda de valência serão, correspondentemente,  $\mathcal{E} = 1 + \gamma$  e  $\mathcal{E} = 1 - \gamma$ .

Cabe salientar, que a diferença das figuras precedentes, não há mais um ponto de degenerescência na banda de condução, assim teremos uma variação do band-gap imediata simplesmente mudando o valor do campo magnético, conforme a Figura 6(a), para um valor de campo magnético  $\xi = 0.2$  um bandgap aproximado  $\Delta = 1.33$ , entretanto para  $\xi = 0.62$ ,  $\Delta = 2.66$ .

Ao aumentar o valor do termo de massa, segundo a Figura 6(b), tanto a banda de condução como a de valência experimentam modificações na sua estrutura, assim os estados fundamentais das duas bandas se correspondem aos primeiros estados excitados da Figura 6(a). Outro efeito a destacar é a diminuição da região solução do problema conforme aumento do valor do termo de massa.

Figura 6: Diagrama de bandas de energia em função do campo magnético ( $m = 0$ ), com confinamento elétrico ( $\mathcal{V} = 1$ ) para diferentes valores do termo de quase-massa:  $\gamma = 0.2$  (a) e  $\gamma = 0.5$  (b).

## V. CONCLUSÃO

Neste trabalho temos analisado o efeito da interação spin-órbita no sistema grafeno-substrato em diferentes condições físicas de campos externos. Em particular analisamos o efeito de spin-órbita na estrutura de bandas do sistema induzido pelos confinamentos elétrico e magnético, em função do campo magnético.

Como um primeiro efeito temos a quebra da simetria quiral nos diagramas de fase  $\mathcal{E}$  vs  $\gamma$  com  $\alpha \neq 0$ . Outros efeitos relevantes, como a assimetria da estrutura das bandas de condução e de valência com respeito ao nível de Fermi, assim como a aparição de estados degenerados são uma manifestação do efeito combinado entre a interação spin-órbita e o campo magnético, como pode inferir-se do termo de spin-órbita do Hamiltoniano de Dirac.

Por outro lado observamos que a presença de um confinamento elétrico e o termo de massa, devido a interação substrato-grafeno, nessas condições possibilita uma manipulação a mais do bandgap do sistema. Assim a interação spin-órbita atuando junto ao termo de massa, em função do campo magnético, com um potencial eletrostático particular permitirá o controle das propriedades óptico-eletrônicas do sistema, com aplicações no design de dispositivos nanoeletrônicos.

É importante esclarecer que a metodologia desenvolvida no presente trabalho é extensiva para sistemas 2D que comportam o Hamiltoniano de Dirac, podendo dessa forma escolher materiais com diferentes valores de spin-órbita.

## Apêndice A: Hamiltoniano de Dirac

A forma matricial da parte cinética e da interação spin-órbita do hamiltoniano, em coordenadas cilíndricas é

$$\mathcal{H}_0 = v\sigma \cdot \pi = -i\hbar v \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta}(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + q_e \frac{Br}{2\hbar}) \\ e^{i\theta}(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} - q_e \frac{Br}{2\hbar}) & 0 \end{pmatrix} \quad (A1)$$

$$\mathcal{H}_{SO} = \alpha r \times \hat{\pi} \cdot \hat{S} = \begin{pmatrix} \alpha i\hbar(-\frac{\partial}{\partial \theta} + q_e \frac{Br^2}{2i\hbar}) & 0 \\ 0 & \alpha i\hbar(\frac{\partial}{\partial \theta} - q_e \frac{Br^2}{2i\hbar}) \end{pmatrix} \quad (A2)$$

Devido a simetria do potencial utilizamos as matrizes de Pauli em coordenadas cilíndricas ao invés das cartesianas, para isso precisamos transformar as matrizes de

Pauli  $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  em  $(\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z)$ . Para isso utilizamos a seguinte transformação

$$\begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{r} \\ \hat{\theta} \end{pmatrix}$$

Sob o efeito dela as matrizes de Pauli aparecem da seguinte forma

$$\sigma_r = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}, \sigma_\theta = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\theta} \\ ie^{i\theta} & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

### Apêndice B: Sistema de equações de Dirac

Desacoplando as equações (7) e (8) obtemos

$$F_2 a'' + [(-F_2') + (G_1 - F_1)F_2]a' + [(F_1 F_2' - F_2 F_1') - G_1 F_1 F_2 - F_2^2 G_2]a = 0 \quad (\text{B1})$$

$$G_2 b'' + [(-G_2') + (G_1 - F_1)G_2]b' + [(G_2 G_1' - G_1 G_2') - G_1 F_1 G_2 - G_2^2 F_2]b = 0 \quad (\text{B2})$$

onde

$$F_1 = \frac{\xi}{2}\eta + \frac{m}{\eta};$$

$$G_1 = \frac{\xi}{2}\eta + \frac{m+1}{\eta};$$

$$F_2 = i \left( \Lambda_+ + \bar{\alpha} \eta^2 \frac{\xi}{2} \right);$$

$$G_2 = i \left( \Lambda_- + \bar{\alpha} \eta^2 \frac{\xi}{2} \right);$$

$$\Lambda_+ = \lambda_+ - \bar{\alpha}(m+1); \quad (\text{B3})$$

$$\Lambda_- = \lambda_- - \bar{\alpha}m; \quad (\text{B4})$$

$$\lambda_{\pm} = \mathcal{E} - \mathcal{V} \pm \gamma; \quad (\text{B5})$$

### Apêndice C: Definições dos coeficientes

Os coeficientes da equação (11) para  $a(\eta)$

$$S = 2m^2 \Lambda_+;$$

$$F = \frac{1}{2} \xi^2 (2\bar{\alpha}m - \Lambda_+) - \bar{\alpha} \Lambda_+ (2\Lambda_- + \Lambda_+) \xi;$$

$$G = \frac{1}{2} \bar{\alpha}^2 (\Lambda_- + 2\Lambda_+) \xi^2 + \frac{\bar{\alpha} \xi^3}{4};$$

$$H = -\frac{1}{4} \bar{\alpha}^3 \xi^3;$$

$$J = 2\Lambda_- \Lambda_+^2 + \bar{\alpha}(m-2)m\xi - 2\Lambda_+(m+1)\xi;$$

$$K = 2\Lambda_+;$$

$$P = -2\Lambda_+;$$

$$Z = L = \bar{\alpha}\xi;$$

Os coeficientes da equação (11) para  $b(\eta)$

$$S = -2\Lambda_-(m+1)^2;$$

$$F = \frac{1}{2} \xi (2\alpha(m+1)\xi - \Lambda_- (2\alpha\Lambda_- + 4\alpha\Lambda_+ + \xi));$$

$$G = \frac{1}{4} \alpha \xi^2 (2\alpha (2\Lambda_- + \Lambda_+) + \xi);$$

$$H = -\frac{1}{4} \alpha^3 \xi^3;$$

$$J = \alpha(m+1)(m+3)\xi - 2\Lambda_- (m\xi - \Lambda_- \Lambda_+);$$

$$K = 2\Lambda_-;$$

$$P = -2\Lambda_-;$$

$$Z = L = \bar{\alpha}\xi;$$

## Apêndice D: Solução da equação diferencial de segunda ordem

Pelo método de Froebenius, as soluções em séries de potências temos

$$a(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta^{l+n};$$

$$a'(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (l+n) \eta^{l+n-1};$$

$$a''(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (l+n)(l+n-1) \eta^{l+n-2};$$

O método impõe que  $l = \pm m$ , além das seguintes relações de recorrência

$$a_1 = 0, a_{2n+1} = 0, a_0 \neq 0$$

onde  $n$  pertence aos naturais;

$$-Sa_2 - Ja_0 - Ka_2(l+2) - Za_0(l) + La_0(l)(l-1) + Pa_2(l+2)(l+1) = 0;$$

$$-Sa_4 - Fa_0 - Ja_2 - Ka_4(l+4) - Za_2(l+2) + La_2(l+2)(l+1) + Pa_4(l+4)(l+3) = 0;$$

$$-Sa_6 - Fa_2 - Ga_0 - Ja_4 - Ka_6(l+6) - Za_4(l+4) + La_4(l+4)(l+3) + Pa_6(l+6)(l+5) = 0;$$

$$a_{n+8}(-S - K(l+n+8) + P(l+n+8)(l+n+7)) + a_{n+6}(-J - Z(l+n+6) + L(l+n+6)(l+n+5)) + a_{n+4}(-F) + a_{n+2}(-G) + a_n(-H) = 0;$$

Pelo teorema de Fuchs, sabendo que  $m$  é o número quântico orbital e apenas assume valores inteiros, apenas o caso  $l = m$  é solução da equação (11), a outra solução é fornecida aplicando o método de redução de ordem. A solução geral da equação (11) fica da seguinte forma

$$a(\eta) = \eta^m \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta^n + \eta^m \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta^n \int \frac{\exp\left(-\int \frac{\left(\frac{K}{\eta_1} + Z\eta_1\right)}{(L\eta_1^2 + P)} d\eta_1\right)}{(\eta_2^m \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta_2^n)^2} d\eta_2. \quad (D1)$$

- <sup>1</sup> A. K. Geim, Science, **324**, 1530 (2009).
- <sup>2</sup> F. Schwierz, Nature Nanotech. **5**, 487 (2010).
- <sup>3</sup> A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- <sup>4</sup> M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Nature Phys. **2**, 620 (2006).
- <sup>5</sup> P. G. Silvestrov, and K. B. Efetov, Phys. Rev. Lett. **98**, 016802 (2007).
- <sup>6</sup> H-Yi Chen, V. Apalkov, and T. Chakraborty, Phys. Rev. Lett. **98**, 186803 (2007).
- <sup>7</sup> P. Hewageegana and V. Apalkov, Phys. Rev. B **77**, 245426 (2008).
- <sup>8</sup> H. C. Nguyen, M. T. Hoang, and V. L. Nguyen, Phys. Rev. B **79**, 035411 (2009).
- <sup>9</sup> V. V. Cheianov, and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. B **74**, 041403 (2006).
- <sup>10</sup> Cheng-Cheng Liu, Hua Jiang, and Yugui Yao, Phys. Rev. B **84**, 195430 (2011).
- <sup>11</sup> G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly,

- and J. van den Brink, Phys. Rev. B **76**, 073103 (2007).
- <sup>12</sup> J. P. Hague, Phys. Rev. B **84**, 155438 (2011).
- <sup>13</sup> R. M. Ribeiro, N. M. R. Peres, J. Coutinho, and P. R. Briddon, Phys. Rev. B **78**, 075442 (2008).
- <sup>14</sup> V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B **80**, 045401 (2009).
- <sup>15</sup> 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. Mater. **6**, 770 (2007).
- <sup>16</sup> C. Enderlein, Y. S. Kim, A. Bostwick, E. Rotenberg, and K. Horn, New J. Phys. **12**, 033014 (2010).
- <sup>17</sup> Dhar S *et al*, 2011, AIP Adv **1** 022109
- <sup>18</sup> Williams J R, Low T, Lundstrom M S and Marcus C M, 2011, Nature Nanotechnol. **6** 222
- <sup>19</sup> L. Villegas-Lelovsky, Carlos Trallero-Ginner, Victor Lopez-Richard, Gilmar E Marques, Cesar E P Villegas e Marcos R S Tavares, 2012, Nanotechnology **23** 385201