

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ

Centro de Ciências Departamento de Física



UNIVERSITEIT ANTWERPEN

Faculteit Wetenschappen

Departement Fysica

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

# Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

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

C438d Chaves, Andrey Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores./ Andrey Chaves . – Fortaleza: [s.n], 2010. 328 f. : il. ; enc.
Orientador: Gil de Aquino Farias. Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2010.
1. Semicondutores. 2. Carbono. 3. Supercondutores. I. Título.

"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

#### Agradecimentos

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-VI 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 uma 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 causada por uma tensão externa na rede do grafeno 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<sub>2</sub>, 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 coefficients 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

| $\mathbf{Li}$ | Lista de Figuras |   |       |
|---------------|------------------|---|-------|
| 1             | Introdução       |   |       |
|               | 1.1              | Semicondutores  |       |
|               |                  | 1.1.1 Modelo da massa efetiva   | p. 34 |
|               |                  | 1.1.2 Interação spin-órbita   | p. 37 |
|               | 1.2              | Grafeno   | p. 40 |
|               |                  | 1.2.1 Modelo <i>tight-binding</i> e a equação de Dirac                  | p. 41 |
|               | 1.3              | Efeito Aharonov-Bohm  | p. 47 |
|               | 1.4              | Vórtices em supercondutores e o modelo de Ginzburg-Landau               | p. 51 |
|               |                  | 1.4.1 Supercondutores de duas bandas                                    | p. 56 |
|               | 1.5              | Objetivos e estrutura da Tese   | p. 57 |
| <b>2</b>      | Evo              | lução temporal - O método <i>split-operator</i>                         | p.60  |
|               | 2.1              | Hamiltonianos que não envolvem spin                                     | p.62  |
|               | 2.2              | Hamiltonianos do tipo <i>tight-binding</i>                              | p.64  |
|               | 2.3              | Hamiltonianos que envolvem spin   | p.68  |
|               |                  | 2.3.1 Hamiltoniano de Dirac para o grafeno                              | p. 70 |
|               | 2.4              | Evolução em tempo real  | p. 71 |
|               |                  | 2.4.1 Condições de contorno   | p. 72 |
|               | 2.5              | Evolução em tempo imaginário: obtendo auto<br>estados $\ .\ .\ .\ .\ .$ | p. 74 |
| 3             | Est              | ruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade                        | p. 76 |

## Sumário

|   | 3.1            | Fios T          |   |        |
|---|----------------|-----------------|---|--------|
|   | 3.2            | Anéis quânticos |   |        |
|   |                | 3.2.1           | Estados localizados induzidos pela geometria do sistema $\ .\ .\ .$                                       | p. 85  |
|   |                | 3.2.2           | Evolução temporal para $\mathbf{B}=0$   | p.86   |
|   |                | 3.2.3           | Evolução temporal para B diferente de zero  | p.90   |
|   | 3.3            | Anel a          | ssimétrico: efeitos de um potencial Gaussiano e de uma impureza   | p. 99  |
|   | 3.4            | Influêr         | ncia da rugosidade sobre as oscilações Aharonov-Bohm da energia   | p. 104 |
|   | 3.5            | Efeitos         | s Zeeman e spin-órbita em pontos quânticos  | p. 108 |
| 4 | $\mathbf{Est}$ | ruturas         | s baseadas em grafeno   | p.114  |
|   | 4.1            | Espect          | ro de energia em anéis quânticos de grafeno   | p. 114 |
|   |                | 4.1.1           | Comparação com o modelo contínuo  | p. 119 |
|   | 4.2            | Evoluç          | ção temporal de pacotes de onda em grafeno  | p. 125 |
|   |                | 4.2.1           | Polarização inicial do pseudo-spin e <i>zitterbewegung</i>  | p. 126 |
|   |                | 4.2.2           | Efeito da massa sobre o <i>zitterbewegung</i>   | p. 134 |
|   |                | 4.2.3           | Tunelamento de Klein  | p. 137 |
|   |                | 4.2.4           | Campos magnéticos externos e induzidos por tensão   | p. 146 |
|   |                | 4.2.5           | Filtro de vales   | p. 150 |
|   |                | 4.2.6           | Efeitos de campos externos e pseudo-magnéticos sobre o <i>Zitter-</i><br>bewegung: oscilações permanentes | p. 153 |
| 5 | Inte           | eração          | entre vórtices em supercondutores   | p. 157 |
|   | 5.1            | O cará          | iter assintótico do potencial entre vórtices  | p. 158 |
|   | 5.2            | Equaç           | ões de Ginzburg-Landau para vórtices fixos  | p. 162 |
|   | 5.3            | Result          | ados numéricos e funções de fitting   | p. 164 |
|   |                | 5.3.1           | Interação vórtice-vórtice   | p. 165 |
|   |                | 5.3.2           | Interação vórtice-vórtice gigante   | p. 172 |
|   |                | 5.3.3           | O problema de três vórtices   | р. 177 |

## Sumário

|   |       | 5.3.4   | Interação vórtice-antivórtice                                  | p. 181 |
|---|-------|---------|--|--------|
|   | 5.4   | Intera  | ção entre vórtices em supercondutores de duas bandas $\ldots$  | p. 187 |
|   |       | 5.4.1   | A definição do caráter tipo-I/tipo-II                          | p. 188 |
|   |       | 5.4.2   | Equações de Ginzburg-Landau para vórtices fixos em duas bandas | p. 192 |
|   |       | 5.4.3   | Resultados numéricos e a interação do tipo-1.5                 | p. 193 |
| 6   | Con   | clusõe  | s e perspectivas   | p. 197 |
| 7   | Sun   | nmary   |  | p. 205 |
| Apêndice A – Artigos publicados relacionados à tese |       |         | p. 211   |        |
| Aj  | pêndi | ice B - | - Artigos em andamento   | p. 212 |
| Aj  | pêndi | ice C - | - Artigos publicados não relacionados à tese                   | p. 213 |
| Re  | eferê | ncias   |  | p. 214 |

# Lista de Figuras

| 1 | Ilustração que representa (a) um cristal de parâmetro de rede $a \in (b)$ seu respectivo potencial $V$ periódico.   | p. 30 |
|---|---|-------|
| 2 | Gráfico qualitativo que mostra o comportamento de $E$ como função (a) do parâmetro $\Delta$ e (b) do vetor de onda $k$ , na primeira zona de Brillouin.   | p. 32 |
| 3 | (a) Esquema ilustrativo das bandas de energia e do $gap$ em um semicon-<br>dutor, mostrando em azul as bandas preenchidas a $T = 0$ K, incluindo<br>a de valência, e em cinza as que não estão ocupadas a esta temperatura,<br>como a banda de condução. (b) Ilustração mostrando a excitação de um<br>elétron (-), que passa da banda de valência (BV) para a de condução<br>(BC), deixando assim um estado desocupado (+) na primeira   | p. 33 |
| 4 | Representação esquemática de uma heterojunção entre dois semicondu-<br>tores com gaps $E_{gap}^B$ e $E_{gap}^W$ diferentes, onde as bandas de condução e<br>valência apresentam degraus de potencial com alturas $V_e$ e $V_h$ , respecti-<br>vamente   | p. 33 |
| 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. 40 |
| 6 | Estrutura de bandas de uma monocamada de grafeno  | p. 43 |
| 7 | Esquema de um experimento de fenda dupla na presença de um solenóide<br>longo (círculo cinza), que gera um campo magnético $\mathbf{B}$ em seu interior.<br>As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons<br>passam, e as setas sólidas mostram a direção do potencial vetor $\mathbf{A}$ .   | p. 47 |
| 8 | Autoestados de um elétron em um anel quântico ideal como função do<br>fluxo magnético.  | p. 50 |
| 9 | Efeito Meissner: um material que apresenta comportamento normal a<br>temperaturas $T > T_C$ passa a repelir campos magnéticos quando se torna<br>supercondutor para $T < T_C$   | p. 52 |
|   | The second | r. 🗸  |

- 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. 66

- 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.80

- 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,  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ , enquanto em (b), consideramos  $\varepsilon_3$  nas subbandas  $k_3^{(1)}$  e  $k_3^{(2)}$ . . . . . . . p.81
- 16 (a) Tempos de transmissão calculados para uma partícula clássica movendose 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  $\varepsilon$ , 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  $\varepsilon$  ..... p.82
- 17 (a) Probabilidade de transmissão como função da energia do pacote de onda inicial  $\varepsilon$  (na primeira subbanda) para um fio T com canais W = 100Å, 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.83
- 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. 85

## Lista de Figuras

| 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.90  |
|----|---|-------|
| 22 | Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões<br>simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel. O pacote<br>de onda inicial está na primeira subbanda, tem largura $\sigma = 200$ Å e<br>energia (a) $\varepsilon_1$ e (b) $\varepsilon_2$   | p. 91 |
| 23 | Curvas de nível do módulo quadrado da função de onda, para conexões<br>simples (esquerda) e suaves (direita) entre os canais e o anel. O pacote<br>de onda inicial tem largura $\sigma = 200$ Å, energia $\varepsilon_3$ e está (a) na primeira<br>subbanda, com vetor de onda $k_3^{(1)}$ , ou (b) na segunda subbanda, com<br>vetor de onda $k_3^{(2)}$ .   | p. 92 |
| 24 | Corrente de probabilidade dependente do tempo, calculada em três pon-<br>tos: canal esquerdo, braço superior do anel e canal direito, para pacotes<br>de onda com energia $\varepsilon_1$ (preta, sólida), $\varepsilon_2$ (vermelha, tracejada) e $\varepsilon_3$<br>(azul, pontilhada). Em cada gráfico, para tempos acima das linhas ver-<br>ticais pontilhadas (400 fs para o canal esquerdo e 600 fs para o braço<br>superior e para o canal direito), os valores estão multiplicados por 10,<br>para facilitar a visualização | p. 93 |
| 25 | Probabilidades de transmissão $T$ para pacotes de onda com energia $\varepsilon_1$<br>(preta, tracejada) e $\varepsilon_2$ (vermelha, pontilhada) na primeira subbanda, e<br>com energia $\varepsilon_3$ na primeira (azul, sólida) e segunda (verde, tracejada-<br>pontilhada-pontilhada) subbandas, como funções do campo magnético,<br>considerando conexões (a) simples e (b) suaves  | p. 94 |
| 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. 96 |

- 28 Contribuições  $\langle J_x^{(j)} \rangle$  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, considerandose pacotes de onda com energia  $\varepsilon_3$  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,  $\langle J_x^{(1)} \rangle + \langle J_x^{(2)} \rangle + \langle J_x^{(3)} \rangle$ . ... p.99

- 30 Probabilidade de transmissão como função do campo magnético para pacotes de onda com energia (a)  $\varepsilon_2$  e (b)  $\varepsilon_3$  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-pontilhadapontilhada). As últimas quatro curvas foram deslocadas de maneira a ajudar a visualização dos resultados e o tamanho do deslocamento está p. 103 31 Probabilidades de transmissão para um pacote de onda com energia  $\varepsilon_{2}$ , 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 p. 104 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.105 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. 106

| 36 | Energias de transição do estado fundamental para o primeiro e segundo<br>estados excitados, como função do campo magnético no anel com ru-<br>gosidade nas superfícies interna (pontilhada), externa (tracejada) e em<br>ambas as superfícies (sólida), considerando-se $L_c = 5$ Å, para (a) $\Gamma = 2$<br>Å e (b) $\Gamma = 10$ Å.   | p. 109 |
|----|--|--------|
| 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. 111 |
| 38 | Componente z de spin como função do tempo em um ponto quântico<br>sob um campo magnético aplicado paralelamente ao plano do ponto,<br>considerando-se apenas efeito Zeeman, para funções inicialmente com<br>spin "up" (preta) ou "down" (vermelha)  | p. 112 |
| 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. 115 |
| 40 | Espectro de energia como função do fluxo magnético através de um único<br>hexágono de carbono para o anel quântico hexagonal armchair mostrado<br>esquematicamente na Fig. 1(a), considerando-se duas espessuras do anel:<br>(a) $N_E = 15$ , $N_I = 10$ e (b) $N_E = 15$ , $N_I = 3$ . Este espectro é simétrico<br>com relação a $E = 0$   | p. 116 |
| 41 | Espectro de nergia como função do fluxo magnético passando por a penas<br>um hexágono de carbono, para o anel quântico hexagonal mostrado es-<br>quematicamente na Fig. 40(b), considerando-se duas espessuras do anel:<br>(a) $N_E = 15$ , $N_I = 10$ e (b) $N_E = 15$ , $N_I = 9$ . No (primeiro) último<br>caso, as bordas zigzag internas e externas estão (anti-) alinhadas, como<br>ilustrado nas inserções. O espectro de energia é simétrico com relação a |        |
|    | $E = 0. \ldots $  | p. 117 |

- 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. 118
- 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. 121
- 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<sub>0</sub>=0 T e (b) B<sub>0</sub> = 3 T, considerando-se um termo de massa M =50 meV.p. 123
- 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. 124
- 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. 125

- 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. 128
- 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<sup>-1</sup>, 0.02 Å<sup>-1</sup> e 0.04 Å<sup>-1</sup>. 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<sup>-1</sup> (tracejada) e 0.04 Å<sup>-1</sup> (sólida) estão multiplicados por 0.985 e 0.97, respectivamente. . . p. 129

- 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. 136
- 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. 138
- 55 Probabilidades de encontrar o elétron nas regiões 1 (P<sub>1</sub>, preto) e 2 (P<sub>2</sub>, 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. 139
  56 Probabilidade de encontrar o elétron após a região da barreira (P<sub>2</sub>) como

- 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  $V = V_0 \Theta(y)$ , 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  $|\Psi(0, y)|^2$  em t = 170 fs para  $V_0 = 110$  meV.p. 142

#### 

- 60 Evolução temporal do módulo quadrado da função de onda em um degrau de potencial V<sub>0</sub> = 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 θ<sub>i</sub> = π/4. O degrau de potencial começa em y = 0 e segue para 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).
- 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. 145

- 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).
- 64 Trajetórias do pacote de onda no plano x y, obtidas pelo método TB, para um momento inicial  $k_y^0 = 0.02$  Å<sup>-1</sup> 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  $R = 1 \ \mu m$  (sólida, círculos), 0.8  $\mu m$  (tracejada, triângulos) e 0.6  $\mu m$  (pontilhada, quadrados), considerando B = 0 T. Em (b), símbolos e curvas coincidem para cada valor de R..... p. 149
- (a) Trajetórias no plano x − y para pacotes de onda com momento inicial k<sub>y</sub><sup>0</sup> = 0.02 Å<sup>-1</sup> 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 ≥ 0 como função do tempo, para pacotes de onda com as mesmas configurações que em (a).p. 151

- 67 Trajetórias obtidas pelo modelo de Dirac para pacotes de onda nos vales  $K \in K'$ , 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  $c_1 = 1 \text{ e } c_2 = e^{i\pi/4}$ . A área hachurada representa a região onde o campo magnético é não-nulo (y > 0). . . . . p. 153

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  $\mu$  são mostrados separadamente em escala logarítmica, para enfatizar os pequenos desvios entre a função de fitting p.168 Parâmetros de ajuste (símbolos) da Eq. (5.17) como função de  $\mu=\sqrt{2}\kappa$ 72para 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 p.169 Força de interação vórtice-vórtice gigante  $\Omega$  obtida numericamente como 73função 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  $\Omega_{max}$  (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  $d_c \in \Omega_{max}$ são mostradas pelas curvas sólidas. p. 173 Comparação entre a força de interação V-GV como função da separação 74d, 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. 174 (a) Comparação entre as forças de interação V-V como função da sep-75aração 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  $\mu$  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. 175

#### Lista de Figuras

- 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. 179
- Curvas de nível da amplitude do parâmetro de ordem para os casos indicados na Fig. 77, ou seja, considerando-se μ = 0.8 (1.7) e d = 3.2λ (1.8λ), obtidas para dois (a, c) e três (b, d) vórtices interagentes. . . . p. 180
- 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 = 9.2λ (5.2 λ), para μ = 0.6 (1.7). Curvas pretas (cinzas) se referem aos estados representados pelos símbolos abertos (fechados) na Fig. 79 (b). . . . . . p. 183

# 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

#### 1.1 Semicondutores



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 expandindose em série de Taylor uma função de onda transladada  $\psi(x+a)$  em torno do ponto inicial x:

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

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

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

onde  $\theta$  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

$$H|\theta\rangle = E_0 \sum e^{in\theta}|n\rangle - \Delta \sum e^{in\theta}|n+1\rangle - \Delta \sum e^{in\theta}|n-1\rangle$$
$$= (E_0 - 2\Delta \cos\theta)|\theta\rangle, \qquad (1.4)$$

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  $\theta$  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  $\theta$  varia de  $-\pi$  a  $\pi$ , temos k variando de  $-\pi/a$  a  $\pi/a$ . 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  $\Delta$ , que está relacionado com a interação entre um sítio e seus primeiros vizinhos. Podemos observar que, à medida que  $\Delta$  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  $\Delta$  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  $E_{gap}^B$  e  $E_{gap}^W$  diferentes, onde as bandas de condução e valência apresentam degraus de potencial com alturas  $V_e$  e  $V_h$ , respectivamente.

Observando o esquema da Fig. 4, é fácil perceber que em uma heteroestrutura formada por uma camada de um material de gap menor  $E_{gap}^W$ , crescida entre duas camadas de outro material de gap maior  $E_{gap}^B$ , 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

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

que pode ser reescrita como

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

onde

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

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

е

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

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

$$E^{n}(\vec{k}) = E^{n}(0) + \langle u_{0}^{n} | H_{1} + H_{2} | u_{0}^{n} \rangle + \sum_{l \neq n} \frac{|\langle u_{0}^{l} | (H_{1} + H_{2}) | u_{0}^{n} \rangle|^{2}}{E^{n}(0) - E^{l}(0)},$$
(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  $H_1 \in H_2$ , dadas respectivamente pelas Eqs. (1.8b) e (1.8c), encontramos

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

Podemos reescrever a Eq. (1.10) na forma

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

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

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

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

$$m_{\alpha,\beta}^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E^n}{\partial k_\alpha \partial k_\beta}}.$$
(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 <sup>1</sup> 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

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>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 spinórbita 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 <sup>2</sup>

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

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

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

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

 $<sup>^2 \</sup>mathrm{Considerando}$ a velocidade da luzc=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  $\alpha'_D$  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  $\epsilon_z$  é a energia do confinamento na direção z, perpendicular ao plano. Assim, temos  $H_{corr} = H_D + H_{D3}$ , com

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

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

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,  $\alpha'_D$ . Ainda assim, existe um parâmetro controlável para a intensidade do acoplamento  $\alpha_D$ , que é a energia do confinamento vertical  $\epsilon_z$ , 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  $H_Z = g\mu \vec{B} \cdot \vec{S}$ . 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

$$H_{TB} = \sum_{i} (\epsilon_i + M_i) c_i^{\dagger} c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \tau_{ij} c_i^{\dagger} c_j + \tau_{ij}^* c_i c_j^{\dagger} \right), \qquad (1.21)$$

onde  $c_i(c_i^{\dagger})$  aniquila (cria) um elétron no sítio *i*, com energia  $\epsilon_i$ , e a soma é tomada apenas entre sítios primeiros vizinhos i e j, com parâmetro de hopping  $\tau_{ij}$ . 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  $\tau_{ij} \to \tau_{ij} \exp \left| i \frac{e}{\hbar} \int_{j}^{i} \vec{A} \cdot d\vec{l} \right|$ , onde  $\vec{A}$  é o potencial vetor que descreve o campo magnético. [122] 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  $y \in \exp\left[i\frac{e}{\hbar}\int_{j}^{i}\vec{A}\cdot d\vec{l}\right] = \exp\left[i\frac{2\pi x}{3a}\frac{\Phi}{\Phi_{0}}\right]$ 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  $\Phi = 3\sqrt{3}a^2B/2$  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  $\Delta a_{ij}$ , 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 un 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

$$H_{TB} = \tau \sum_{\langle i,j \rangle} \left( a_i^{\dagger} b_j + b_j^{\dagger} a_i \right), \qquad (1.22)$$

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

$$H_{TB} = \tau \sum_{k} \left[ g\left(\vec{k}\right) a_{k}^{\dagger} b_{k} + g^{*}\left(\vec{k}\right) b_{k}^{\dagger} a_{k} \right], \qquad (1.23)$$

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

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

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

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

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

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

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]

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

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  $\vec{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3a}}\right)$ , definindo as coordenadas do "espaço de Dirac" como  $k'_x = k_x - \frac{2\pi}{3a}$  e  $k'_y = k_x + \frac{2\pi}{3\sqrt{3a}}$ . Mantendo apenas os termos até a primeira ordem em  $k_x$  e  $k_y$ , obtemos

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

$$H_D^{\pm} = \hbar v_F \left( \begin{array}{cc} 0 & \pm k_x - ik_y \\ \pm k_x + ik_y & 0 \end{array} \right), \tag{1.30}$$

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  $K \in K'$ , 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

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

onde 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). <sup>3</sup> 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 quasipartícula 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. <sup>4</sup>

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

 $<sup>^{3}\</sup>mathrm{Um}$  Hamiltoniano similar pode ser encontrado para K' de maneira trivial.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>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 zitterbewequnq. [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 *zitterbewequnq* 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  $\mathbf{B}$  em seu interior. As linhas pontilhadas representam os caminhos pelos quais os elétrons passam, e as setas sólidas mostram a direção do potencial vetor  $\mathbf{A}$ .

Apesar da ausência de campo magnético na região pela qual os elétrons passam, existe ainda um potencial vetor  $\mathbf{A}$  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  $\mathbf{p} \to \mathbf{p} - q\mathbf{A}$ . Se temos um campo magnético no solenóide na forma  $\mathbf{B} = B\hat{k}$ , o potencial vetor pode ser escrito como  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_{\theta}$  (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  $\mathbf{A}$  aponta para a mesma direção que o momento  $\mathbf{p}$  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  $\phi_0$ , 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  $\theta$ , 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 <sup>5</sup>, 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. Aplicandose 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

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>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

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

podendo ser facilmente reescrito como

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

As autofunções deste Hamiltoniano são facilmente encontradas como  $\psi(\theta) = exp[in\theta]/\sqrt{2\pi}$ , onde  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  é o momento angular, e as autoenergias como

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

É fácil perceber que estas energias em função de  $\phi$  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  $\phi_0$ , 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, <sup>6</sup> o qual está confinado na borda do fio interno apenas devido à interação Coulom-

 $<sup>^6 {\</sup>rm Esta}$ situação, conhecida como "alinhamento de bandas do tipo-II"<br/>ocorre devido ao band-offset da hetero<br/>estrutura 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 canalanel 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 mostrouse 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, [90, 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 [91] 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

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

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  $T_{C0} = T_C(H_0 = 0),$ 

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

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são coeficientes característicos de cada material. O parâmetro  $\alpha$  depende da temperatura e a supercondutividade ocorre somente para  $\alpha < 0,^7$  enquanto  $\beta$  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  $\Psi \in \vec{A}$  são funções do espaço real, e a forma destas funções influencia na energia encontrada após a integração. Por outro lado, sabemos que  $\Psi \in \vec{A}$  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  $\Psi \in \vec{A}$ ; em outras palavras,  $\Psi \in \vec{A}$  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

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>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

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

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

onde a corrente supercondutora é

$$\vec{j}_s = \frac{c}{4\pi} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A}.$$
(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  $\xi \in \lambda$  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 [91] 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  $\kappa$ 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 [93] 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. [92]

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  $\lambda$  é a profundidade de penetração e  $\xi$  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, [94] 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 [95, 96, 97] quando os vórtices estão superpostos.

A partir daí, muitos trabalhos estudaram aspectos diferentes da interação entre vórtices em supercondutores. Por exemplo, Brandt [98] 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 [99] 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.* [100] 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, [101] 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.* [102], 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, [103], que usaram uma aproximação variacional baseada na função-tentativa de Clem [104] para calcular a força entre vórtices. Auzzi *et al.* [105] 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. [106, 107]

#### 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 [108]. 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 supercondutorferromagneto. 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 coexistentes 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  $\sigma \in \pi$  [109]. O MgB<sub>2</sub> 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 [110]. Por outro lado, até os supercondutores mais simples e elementares, como Pb, podem também ter dois gaps [111]. 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 [112]. 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 [114], outros discordando [115, 116] 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  $\kappa$ . 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 7, 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

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

tem como solução formal a expressão

$$\Psi(\overrightarrow{r}, t + \Delta t) = exp\left[-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right]\Psi(\overrightarrow{r}, t).$$
(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  $\Delta t = t - t_0$ :

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

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

$$\Psi(\overrightarrow{r}, t_0 + \Delta t) = \left[1 - \frac{i}{\hbar}H\Delta t + \frac{1}{2!}\left(-\frac{i}{\hbar}H\Delta t\right)^2 + \dots\right]\Psi(\overrightarrow{r}, t_0).$$
(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 [117]:

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

de forma que obtém-se

$$\left(1 - \frac{i}{2\hbar}H\Delta t\right)\Psi(\overrightarrow{r}, t + \Delta t) = \left(1 + \frac{i}{2\hbar}H\Delta t\right)\Psi(\overrightarrow{r}, t).$$
(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  $\Psi_i$  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  $A \in B$  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  $T \in V$  não comutam. De forma aproximada, podemos ter

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

onde desprezamos termos de ordem  $\Delta t^3$ . [118] 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  $\Delta t^2$ . Mostraremos que, apesar disso, considerando-se valores bem pequenos para  $\Delta t$ , conseguimos obter bons resultados, preservando-se as principais características dos sistemas estudados [182].

## 2.1 Hamiltonianos que não envolvem spin

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

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

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

$$\xi_i = exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V_i\Delta t\right]|\Psi_i\rangle_t .$$
(2.9)

O próximo passo é efetuar a multiplicação de  $\xi_i$  pela exponencial do termo cinético. Uma das maneiras de se fazer tal operação consiste em efetuar uma transformada de Fourier em  $\xi_i$ , 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

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

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

onde os elementos das matrizes são

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

е

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

com um espaçamento  $\Delta x_n$  na discretização da variável  $x_n$ . O lado direito da Eq. (2.13) pode ser multiplicado diretamente, uma vez que já conhecemos os  $\xi_i$  para todos os pontos *i* do grid. Resta agora apenas uma equação matricial para  $\eta_i$ , a qual resolvemos através da subrotina TRIDAG, que pode ser encontrada no Numerical Recipes.[120]

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

$$|\Psi_i\rangle_{t+\Delta t} = exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V_i\Delta t\right]\eta_i.$$
 (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 nãonula 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  $H_{\infty}$ , 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

$$H|\psi_i\rangle = \dots + \tau_{i-1}|\psi_{i-1}\rangle + E_0|\psi_i\rangle + \tau_{i+1}|\psi_{i+1}\rangle + \dots, \qquad (2.17)$$

onde  $\tau_j$  representa a energia de hopping do elétron entre os poços  $i \in j$ . Note que os estados  $|\psi_i\rangle$  ( $i = 1, 2, 3 \dots$ ) 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

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

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

$$H \approx H_{TB} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ddots & E_0 & t_{i-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_{i-1} & E_0 & t_i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_i & E_0 & t_{i+1} & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & t_{i+1} & E_0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$
(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. [120] 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

$$H_{ME}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2}\Psi_{i-1} + \left(\frac{\hbar^2}{m^*\Delta x^2} + V_i\right)\Psi_i - \frac{\hbar^2}{2m^*\Delta x^2}\Psi_{i+1},$$
 (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,  $i \in j$ , que determinam sua posição de maneira única. Por exemplo, em uma rede quadrada, podemos ter  $i \in j$  definindo respectivamente

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

$$H|\psi_{ij}\rangle \approx (E_0 + V_{ij})|\psi_{ij}\rangle + \tau_{(i-1)j}|\psi_{(i-1)j}\rangle + \tau_{(i+1)j}|\psi_{(i+1)j}\rangle + \tau_{i(j-1)}|\psi_{i(j-1)}\rangle + \tau_{i(j+1)}|\psi_{i(j+1)}\rangle,$$
(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. [121]



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. [122], 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. [122] Ao longo desta tese, usaremos a forma independente de gauge sugerida na Ref. [122] 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  $\tau_{ij}$  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

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

onde os operadores  $H_n$  e  $H_m$  são definidos como

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

е

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

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

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

onde o erro vem da não-comutatividade entre os operadores  $H_n \in H_m$ . 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

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

Esta equação é resolvida em três passos:

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

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

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

Usando novamente a forma de Cayley para as exponenciais, [117] podemos reescrever Eq. (2.26a) como

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

o que leva a

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

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

onde

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

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

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

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

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

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

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

onde  $S_i$  e S são, respectivamente, as componentes e o módulo do vetor  $\vec{S}$  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  $\vec{S}$  é definido como dependente do vetor de onda  $\vec{k}$ , teremos problemas para encontrar o módulo S e extrair seu seno e cosseno se estivermos trabalhando no espaço das posições, onde as componentes de  $\vec{k}$  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  $x \in y$ . 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

$$\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\left(H_{k}+H_{r}\right)\right] \approx$$
$$\exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}H_{r}\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_{k}\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}H_{r}\right]$$
(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

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

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

onde  $\vec{\kappa} = \Delta t v_F \vec{k}$ ,  $\kappa = |\vec{\kappa}| = \Delta t v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ,  $\vec{\varrho} = (A_x, A_y, M)$ ,  $\varrho = |\vec{\varrho}|$  e definimos as grandezas adimensionais  $\vec{A} = \Delta t v_F e \vec{A}/2\hbar$  e  $M = \Delta t M/2\hbar$ . 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:

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

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

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  $\Delta t$ , enquanto na ausência deles, o problema é resolvido exatamente por uma simples multiplicação matricial, para qualquer valor de  $\Delta t$ .

## 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:

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

е

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

onde a componente x da corrente de probabilidade é definida como

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

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

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

$$\langle J_x^{(j)} \rangle = \int_0^\infty dt J_x^{(j)}(x_r, t)$$
 (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,  $\langle J_x^{(j)} \rangle$ 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

$$J_T(x_i, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_i, y, t) dy,$$
 (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 [123], 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. [124]

## 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 [125] 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 [126, 127]. Uma outra maneira interessante de se resolver este problema foi sugerida por Arnold et al. [128], 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 [129], 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 [[129]] como

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

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

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

onde  $k_{min} = \sqrt{2m_e E_{min}/\hbar^2}$ . 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. [129]

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. [130, 131] 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:

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

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

$$|\Psi>_{t} = \sum_{n=0}^{\infty} a_{n} e^{-\frac{E_{n}\tau}{\hbar}} |\Phi_{n}\rangle = e^{-\frac{E_{0}\tau}{\hbar}} \left[ a_{0} |\Phi_{0}\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n} e^{-\frac{(E_{n}-E_{0})\tau}{\hbar}} |\Phi_{n}\rangle \right]$$
(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  $\tau$  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  $\Phi_2$ , inicia-se com uma função que é ortonormal a  $\Phi_1 \in \Phi_0$ , 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  $E \rightarrow -\infty$ , 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. [132]

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

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

onde  $E_n^{(y)} = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2m_e W^2$ , 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

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

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  $\varepsilon_i$  representando a massa efetiva e a energia cinética, respectivamente. O parâmetro  $\sigma$  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  $W = 100 \ \text{Å}$ , 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  $x_0 = -1100 \ \text{Å}$ ,  $\sigma = 200 \ \text{Å}$  e n = 1 (estado fundamental) ou 2 (primeiro estado excitado) (ver Eq. (3.2)).

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

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  $\varepsilon_3$ , 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  $\varepsilon_3$ , um para cada subbanda. Nossos resultados para  $\varepsilon_3$  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  $\Delta k_x$ , como ilustrado na Fig 13. Esta variação em  $k_x$  leva a uma distribuição de energias  $\Delta E$ , 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

$$\overline{\psi}(k_x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-i(k_x - k_x^i)x_0} e^{-(k_x - k_x^i)^2 \sigma^2/2} \phi_n(y).$$
(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<sup>-1</sup>. Com o último, podemos calcular a espessura  $\Delta E$  da distribuição de energias do pacote de onda :

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

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

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

Desta expressão, e com o valor de  $\Delta k_x$  mencionado anteriormente, obtemos  $\Delta E \sim 72$ , 90 e 108 meV, para  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_3$ , 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,  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2 \in \varepsilon_3$  (linhas tracejadas grossas) estão mostradas. As espessuras das distribuições de  $k_x \in E$  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  $\varepsilon_3$  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. [130] 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 [133], 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.* [134], 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  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  (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  $\varepsilon_1$  ( $\varepsilon_2$ ) 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,  $\varepsilon_1 \in \varepsilon_2$ , enquanto em (b), consideramos  $\varepsilon_3$  nas subbandas  $k_3^{(1)} \in k_3^{(2)}$ .

A probabilidade de transmissão T como função da energia do pacote de onda  $\varepsilon$  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  $\varepsilon$ , 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  $\varepsilon$ 

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 (nãonula) 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  $\varepsilon$  (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 ~ 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 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  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_3$ , 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  $\varepsilon_3$ , esta projeção pode ser dominante e maior que a projeção sobre a subbanda do estado fundamental. Apesar de  $\varepsilon_2$ 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  $\varepsilon_3$  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  $\pi$  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  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ , respectivamente. As Figs. 23 (a) e (b) são para  $\varepsilon_3$  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  $\varepsilon_1$ (preta),  $\varepsilon_2$  (vermelha) e  $\varepsilon_3$  (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)  $\varepsilon_1$ , (b)  $\varepsilon_2$  e (c)  $\varepsilon_3$ .

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  $\varepsilon_3$  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  $\varepsilon_1$  (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  $\varepsilon_2$ , 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  $\varepsilon_1$  ( $\varepsilon_2$ ), foram encontrados também para o sistema do fio T, como mencionado na Subseção 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 Subseção 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)  $\varepsilon_1$  e (b)  $\varepsilon_2$ .



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  $\sigma = 200 \text{ Å}$ , energia  $\varepsilon_3$  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  $\varepsilon_1$  (preta, sólida),  $\varepsilon_2$  (vermelha, tracejada) e  $\varepsilon_3$  (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  $\varepsilon_1$  (preta, tracejada) e  $\varepsilon_2$  (vermelha, pontilhada) na primeira subbanda, e com energia  $\varepsilon_3$  na primeira (azul, sólida) e segunda (verde, tracejada-pontilhada-pontilhada) subbandas, como funções do campo magnético, considerando conexões (a) simples e (b) suaves.

Para  $\varepsilon_3$  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  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ . De fato,  $\varepsilon_3$  é essencialmente diferente de  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$ , 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  $\phi = (n + p)$  $1/2)\phi_0$  (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  $\varepsilon_3$ . Assim, para estes valores de  $\phi$ , 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  $\varepsilon = 140 \text{ meV}$ , 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  $\varepsilon_1$  e  $\varepsilon_2$  também são não-nulas, mas elas se tornam dominantes sobre  $P_1$  apenas para  $\varepsilon_2$  e  $\varepsilon_3$ . Note, porém, que para  $\varepsilon_2$ , assim como para  $\varepsilon_1$ , 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  $\varepsilon_3$ . À medida que o campo magnético aumenta,  $P_2$  ( $P_1$ ) no canal da esquerda sofre apenas flutuações bastante pequenas, até mesmo para  $\varepsilon_3$  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  $\varepsilon_3$  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  $\langle J_x^{(3)} \rangle$  desta subbanda para a corrente é quase zero nestes casos, então, não vale a pena mostrá-la na figura. A soma das  $\langle J_x^{(j)} \rangle$  para estas três subbandas é mostrada como uma linha sólida azul, que reproduz qualitativamente as probabilidades de transmissão mostradas na Fig. 25 (a) para  $\varepsilon_3$ . Na Fig. 28 (a) observamos que, considerando um pacote de onda de energia  $\varepsilon_3$  na primeira subbanda, para um campo magnético correspondente a um fluxo igual a um inteiro (semi-inteiro) de  $\phi_0$ , 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  $\varepsilon_3$  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  $\pi$  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  $\pi$  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  $\pi$  às partes do pacote que foram espalhadas para outras subbandas, as quais já possuem uma diferença de fase intrínseca  $\pi$  entre os pacotes superior e inferior, obteremos agora uma diferença de fase  $2\pi$ , 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  $\pi$  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  $\langle J_x^{(j)} \rangle$  das subbandas dos estados fundamental (preta, tracejada), primeiro excitado (vermelha, pontilhada) e segundo excitado (verde, tracejadopontilhado) para a corrente de transmissão, como função do campo magnético *B*, calculadas no canal da direita, considerando-se pacotes de onda com energia  $\varepsilon_3$  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,  $\langle J_x^{(1)} \rangle + \langle J_x^{(2)} \rangle + \langle J_x^{(3)} \rangle$ .

# 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 Subseção 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:

$$\overline{V}(x,y) = -V_G \exp\left[-\frac{1}{2\sigma}[(x - x_{arm})^2 + (y - y_{arm})^2]\right].$$
(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  $(R_s = 300 \text{ Å})$ , respectivamente, considerando-se pacotes de onda com energia  $\varepsilon_3$  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  $\langle J_x^{(1)} \rangle$  (azul) e  $\langle J_x^{(2)} \rangle$  (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  $\langle J_x^{(2)} \rangle$  à medida que  $V_G$  aumenta, é completamente compensado por uma redução (um aumento) em  $\langle J_x^{(1)} \rangle$ , de forma que a probabilidade de transmissão permanece quase a mesma para qualquer  $V_G$ . Este efeito acontece apenas para  $\varepsilon_3$  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  $\varepsilon_3$  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  $\langle J_x^{(1)} \rangle = \langle J_x^{(2)} \rangle$ , 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  $\langle J_x^{(1)} \rangle = \langle J_x^{(2)} \rangle$  para um pacote de onda inicialmente na segunda subbanda, com  $k_3^{(2)}$ . As linhas  $\langle J_x^{(1)} \rangle = \langle J_x^{(2)} \rangle$  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. [135]. Ajustando a tensão na fonte, podemos selecionar elétrons propagando-se com energia  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  ou  $\varepsilon_3$  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. [135] 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)  $\varepsilon_2$  e (b)  $\varepsilon_3$ . 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  $\pi$  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  $\phi_0$  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  $\pi$ , 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  $\varepsilon_2$ . 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. A 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)  $\varepsilon_2$  e (b)  $\varepsilon_3$  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-pontilhadapontilhada). 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  $\varepsilon_2$  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  $\varepsilon_2$ , 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 [136, 137]. 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  $\theta$  como:

$$R_{i(o)}(\theta) = 2\Gamma \sqrt{\frac{L_C}{\overline{R_{i(o)}}}} \sum_{n>0} e^{\left(nL_C/2\overline{R_{i(o)}}\right)^2} \cos(n\theta + \varphi_n) + \overline{R_{i(o)}}$$
(3.8)

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

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{if } R_i \le \sqrt{x^2 + y^2} \le R_e \\ V_e & otherwise \end{cases}$$
(3.9)
onde  $V_e$  é o band-offset da banda de condução. Aplicamos este modelo para um anel GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, onde  $V_e = 262$  meV e a massa efetiva do elétron é  $m^*/m_0 = 0.067$ . [138]



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 (tracejadapontilhada) 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 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



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).

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 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



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).

levanta as degenerescências nos pontos de transição de momento angular, e este efeito se torna mais forte quando a amplitude  $\Gamma$  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 *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  $\vec{B} = B\hat{z}$ , descrito por um potencial vetor no gauge simétrico,  $\vec{A} = (-By/2, Bx/2, 0)$ , na ausência de efeitos Zeeman e spin-órbita.



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.

#### 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

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

е

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

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

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

$$H_{D} + H_{R} + H_{Z} = \frac{\alpha_{D}}{\hbar} \left[ -\left(p_{x} + \frac{eBy}{2}\right)\sigma_{x} + \left(p_{y} - \frac{eBx}{2}\right)\sigma_{y} \right] \\ + \frac{\alpha_{R}}{\hbar} \left[ \left(p_{y} - \frac{eBx}{2}\right)\sigma_{x} - \left(p_{x} + \frac{eBy}{2}\right)\sigma_{y} \right] + \frac{1}{2}g\mu B\sigma_{z} = \\ (\alpha_{R}k_{y} - \alpha_{D}k_{x})\sigma_{x} + (\alpha_{D}k_{y} - \alpha_{R}k_{x})\sigma_{y} \\ - \frac{eB}{2\hbar}(\alpha_{R}x + \alpha_{D}y)\sigma_{x} - \frac{eB}{2\hbar}(\alpha_{R}y + \alpha_{D}x)\sigma_{y} + \frac{1}{2}g\mu B\sigma_{z}.$$
(3.14)

Podemos reescrever agora

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

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

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

е

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

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

$$|\Psi\rangle_{t+\Delta t} = e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_1}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_0}e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_1}\cdot\overrightarrow{\sigma}}e^{-i\overrightarrow{S_2}\cdot\overrightarrow{\sigma}}|\Psi\rangle_t$$
(3.18)

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

$$|\Psi\rangle_{t+\Delta t} = M_2 \cdot M_1 \cdot M_2 \quad e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_0} \quad M_2 \cdot M_1 \cdot M_2 |\Psi\rangle_t .$$
 (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 auto<br/>estados de um ponto quântico plano circular de raio R<br/> = 100 Å, como função do campo magnético aplicado perpendicularmente a<br/>o 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  $\sigma_x$  são

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

Sendo assim, um estado puramente "up" ou "down", seria escrito na base dos auto<br/>estados de  $\sigma_x$  como

$$|+> = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_1 t/\hbar} |1> + e^{-iE_2 t/\hbar} |2>), \qquad |-> = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_1 t/\hbar} |1> - e^{-iE_2 t/\hbar} |2>), \tag{3.21}$$

respectivamente, podendo ser facilmente reescrito como

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \pm e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar}|2\rangle).$$
 (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  $|1 \rangle$  e  $|2 \rangle$ , 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 [139] 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  $\Phi$ . Estes espectros exibem cruzamentos e anticruzamentos. 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. [140] Apesar do anel armchair na Fig. 40(a) ser feito simplesmente conectandose 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. [141] 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, [142] 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  $\Phi_R$  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, 143, 144]: 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

$$M_i(r_i) = \pm M_0[2 + \tanh(r_i^+) + \tanh(r_i^-)]$$
(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  $\approx 170$  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), <sup>1</sup> o Hamiltoniano (1.31) em coordenadas polares é dado por

$$H_D = \hbar v_F \begin{bmatrix} \frac{M}{\hbar v_F} & -i\left(\Pi_r^* + \frac{\pi rB}{\Phi_0}\right) \\ -i\left(\Pi_r - \frac{\pi rB}{\Phi_0}\right) & -\frac{M}{\hbar v_F} \end{bmatrix},$$
(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 [145]

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

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

$$H_D = \begin{bmatrix} M & -e^{-i\phi} \left( \frac{d}{d\phi} + i\frac{\Phi_R}{\Phi_0} - \frac{i}{2} \right) \\ e^{i\phi} \left( \frac{d}{d\phi} + i\frac{\Phi_R}{\Phi_0} + \frac{i}{2} \right) & -M \end{bmatrix},$$
(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 [146] 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

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>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, [147, 148] 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. [149], 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  $\Psi_l = [A_R e^{il\phi}, iB_R e^{i(l+1)\phi}]^T$ , com energias dadas por

$$E = \pm \sqrt{\left(l + \frac{\Phi_R}{\Phi_0} + 1\right)\left(l + \frac{\Phi_R}{\Phi_0}\right) + \frac{1}{4} + M^2},$$
(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  $\approx 29$ 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  $\pi$  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  $E \approx \sqrt{(v_F e B R/2)^2 + (2l+1)\hbar^2 v_F^2 \pi B/\Phi_0 + M^2}$ .

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,  $\langle L_z \rangle \approx l\hbar \in \langle S_z \rangle \approx \hbar/2$ , enquanto no vale K',  $\langle L_z \rangle \approx (l+1)\hbar \in \langle Sz \rangle \approx -\hbar/2$ . Assim, para ambos os vales  $K \in K'$ , o momento



Figura 44: Níveis de energia com  $l=-10, \ldots, 10$  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

$$j = \frac{4v_F \left(m + 1/2 + \Phi/\Phi_0\right)}{E^2 - M^2}.$$
(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. [150] 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, tracejadapontilhada). 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, [143, 144] 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, 143, 144], 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. [143] e [144], 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:

$$\Psi_q(\vec{r}) = N \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2d^2} + i\vec{q} \cdot \vec{r}\right],$$
(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  $\theta$  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  $A \in B$ . 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  $V(x, y) \equiv 0, \vec{B} = 0 \text{ e } M = 0$ . No modelo de Dirac, um estudo parecido com este já foi feito por Maksimova *et al.* [151], 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  $V(x, y) \equiv 0, \vec{B} = 0 \text{ e } M = 0$ , já demonstramos que a Eq. (2.39) é solução exata para a evolução temporal, tal qual a solução dada na Ref. [151]. 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  $A \in B$ . Os átomos são indexados como  $\{n, m\}$  de acordo com seus índices de linha e coluna  $n \in m$ , 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  $(k_x, k_y)$ , 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  $K \in K'$ , 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. [152] 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. [151], 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<sup>-1</sup>, 0.02 Å<sup>-1</sup> e 0.04 Å<sup>-1</sup>. 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<sup>-1</sup> (tracejada) e 0.04 Å<sup>-1</sup> (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  $\phi$ , seguindo as definições de operadores e "geradores" no Capítulo 2. Em outras palavras, devemos também rotacionar os eixos  $x \in y$  por um ângulo  $\phi$  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  $x \to -y \in y \to x$ . O pseudo-spinor  $c_1 = c_2 = 1$ representa uma função de onda polarizada na direção x, isto é  $\langle \sigma_x \rangle > 0 \in \langle \sigma_z \rangle = \langle \sigma_y \rangle = 0$ . Da representação de Heisenberg, obtemos a velocidade na direção x para o pacote de onda proposto como sendo

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,  $v_y = dx/dt = v_F \sigma_x$ . Isto sugere que un 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  $v_u$ , 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 Subseção. 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. [151] (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:

$$\frac{v_y^f}{v_F} = 1 - \frac{1 - e^{-(k_y^0 d)^2}}{2(k_y^0 d)^2}.$$
(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<sup>-1</sup> (0.04 Å<sup>-1</sup>). 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  $x \in y$  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, [151] 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  $y \in -x$  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  $k_y^0 d \rightarrow 0$  na Eq. (4.9).

Apesar de já termos expandido um pouco mais os estudos de Maksimova *et al.* [151] em um sistema na ausência de massa, campos ou potenciais externos, tudo que fizemos com a equação de Dirac nesta Subseção 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 Subseções, 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  $q = \mathbf{k} = E/(\hbar v_F)$ , 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 Subseção 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  $\sigma_z$ 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  $\sigma_y$  (símbolos). Ao aumentarmos o valor de  $M_0$ , tornamos o termo em  $\sigma_z$  do Hamiltoniano de Dirac mais significativo, de forma que a amplitude das oscilações em  $\sigma_y$  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 = 300meV 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  $\langle y \rangle \in \langle x \rangle$  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 = $V_0\Theta(\mathbf{y})$ , onde  $\Theta(\mathbf{y})$  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,  $k_x = 0$  e  $k_y > 0$ ), 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  $\Delta k_x$ , inversamente proporcional a  $\Delta x$ . 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 dmaior, isto é, um  $\Delta x$  mais largo, o que leva a um  $\Delta k_x$  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, 153] de forma que na vizinhança de  $E = V_0$ , somente uma incidência muito próxima da normal pode levar à probabilidade de transmissão  $\approx 1$ . 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 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  $k_x \neq 0$ , 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 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  $V_0$ 



Figura 57: Curvas de nível da função de onda refletida por um degrau de potencial  $V_0 = 110 \text{ meV}$  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.

= (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  $\Re[\Psi(0, y)]$  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  $V = V_0 \Theta(\mathbf{y})$ , 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  $|\Psi(0, \mathbf{y})|^2$  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  $d \in E$ . 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  $V = V_0 \Theta(y)$ , para dois valores da altura do potencial:  $V_0 = 0$  (preta, sólida) e -250 meV (vermelha, tracejada).

Alguns artigos recentes na literatura [154] 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,  $\theta_i \in \theta_r$ , 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  $V = V_0 \Theta(\mathbf{y})$ , 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 y = 0 e segue para 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. [155] Assim, com este pseudospinor, 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  $y \ge 0$ . 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 Ke 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 Subseção, investigaremos a dinâmica de um pacote de onda com largura d = 200Å e vetor de onda inicial  $k_x^0 = 0$  e  $k_y^0 = 0.02$  Å<sup>-1</sup> 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  $y \ge 0$ , 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  $y \ge 0$ , 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 $\mu$ m (sólida, círculos), 0.8  $\mu$ m (tracejada, triângulos) e 0.6  $\mu$ m (pontilhada, quadrados). Todas as trajetórias formam semi-círculos na região  $y \ge 0$ , 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  $\mu$ m - 0.6  $\mu$ m de tensão no grafeno, o campo pseudo-magnético gerado é também dentro de  $\approx 5$  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<sup>-1</sup> 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  $R = 1 \ \mu m$  (sólida, círculos), 0.8  $\mu m$  (tracejada, triângulos) e 0.6  $\mu m$  (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]

$$B_{S}(x,y) = -4c \frac{\beta \Phi_{0}}{aL} \arcsin\left(\frac{L}{2R}\right) \cos\left[\frac{2x}{L} \arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right] \times \left[1 - \frac{R+y}{L} \arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right], \qquad (4.11)$$

onde  $\beta \approx 2$  e c é uma constante adimensional que depende dos detalhes dos deslocamentos atômicos. [6] Considerando-se  $L/R \rightarrow 0$  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  $\omega \approx 4.5 \times 10^4$  TÅ estimado numericamente na Ref. [74], obtemos campos pseudo-magnéticos dentro de  $B_S \approx 4.5$  T - 7.5 T para  $R = 1 \ \mu\text{m} - 0.6 \ \mu\text{m}$ , 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  $K \in K'$  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  $K \in K'$  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  $K \in K'$ .

#### 4.2.5 Filtro de vales

Consideremos agora a amostra tensionada da Fig. 63(b) com  $R = 1 \, \mu m$ . Comparandose 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  $\approx 4.9$  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  $y \ge 0$  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 forca 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<sup>-1</sup> em torno de K (símbolos) e K' (curvas), considerando-se uma folha de grafeno flexionada como um arco de círculo de raio  $R = 1 \ \mu$ m 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  $y \ge 0$  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  $\approx 5^{\circ}$  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  $y \ge 0,$  calculada como

$$P^{>}(t) = \sum_{n>} \sum_{m} |\Psi_{n,m}^{t}|^{2}, \qquad (4.12)$$

onde  $n^>$  representa as linhas de sítios atômicos com  $y \ge 0$ , 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  $y \ge 0$  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  $K \in K'$  na Eq. (4.10):

$$\Psi = \sqrt{\alpha}\Psi_{K'} + \sqrt{\beta}\Psi_K, \qquad (4.13)$$

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  $\beta$ , 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. [156] 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  $y \ge 0$ , para um pacote de onda inicial dado por uma combinação de distribuições Gaussianas em torno de ambos os pontos  $K \in K'$  de Dirac, para três valores diferentes de  $\beta$ , 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  $K \in K'$ , 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  $c_1 = 1 \text{ e } c_2 = e^{i\pi/4}$ . A área hachurada representa a região onde o campo magnético é não-nulo (y > 0).

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

Em um trabalho anterior, Rusin e Zawadzki [157] 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  $x \in y$ , o que eles dizem que deve-se ao fato do Hamiltoniano de Dirac não ser simétrico no momento  $\hat{p}_x \in \hat{p}_y$ . Apesar destes mesmos autores dizerem em um artigo subsequente [60] 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-ypor 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 Subseção, 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, pseudospinor  $c_1 = 1$  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 Subseção 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  $R = 1 \ \mu$ m, o que produz um campo pseudo-magnético de  $\approx 4.9$  T, como demonstrado na Subseção 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 [157] 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 [158] 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  $\varepsilon_y$  $(\varepsilon_x)$ .

onde s e  $\Phi$  são a distância e o ângulo de observação, respectivamente, e  $\epsilon_0$  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  $\varepsilon_y$  (sólida) nos pontos K (preta) eK' (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  $\varepsilon_y$ , 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, 159, ?] 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 *zitterbewequnq* 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 nãotensionada sob um campo magnético externo. Na Fig. 68(d), combinamos os efeitos da tensão  $R = 1 \ \mu m$  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), observase 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 [93] 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  $\kappa$ , 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)[94, 106]:

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

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

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

Nesta expressão,  $\psi$  é o parâmetro de ordem (um campo escalar complexo),  $\vec{A}$  é o potencial vetor eletromagnético e  $\alpha$  e  $\beta$  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  $\mu = 1$ ). [94] Definindo também  $\vec{A} = (2e/\hbar c)\vec{A}$  e  $\Psi = \sqrt{\beta/\alpha}\psi/\lambda$ , a expressão para o funcional de energia pode ser reescrita de forma adimensional como

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

onde a unidade de distância é a profundidade de penetração magnética  $\lambda$ , 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  $\Psi$  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

$$\frac{\partial F}{\partial \Psi} - \sum_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \frac{\partial F}{\partial (\frac{\partial \Psi}{\partial x_{i}})} = 0$$
(5.4a)

е

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

As Eqs. (5.4a) e (5.4b) resultam nas já conhecidas equações de Ginzburg-Landau. [161]

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  $2\pi$  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 [93] ou, de forma equivalente, resolver numericamente as equações diferenciais para essas variáveis, [94] iii) Construir um ansatz através de uma superposição entre as soluções de cada vórtice para  $\Psi \in \vec{A}$  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 vórticegigante, 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  $(r, \theta)$  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  $\vec{A} = na(r)\hat{\theta}/r$ , as equações de Euler-Lagrange Eqs. (5.4a) e (5.4b) para um único vórtice são

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

е

$$\frac{d^2a}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{da}{dr} - (a-1)f^2 = 0,$$
(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. [94] 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:

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

е

$$\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{Q}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{Q}{r}\right) - \left(1 + \frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{Q}{r}\right) = 0.$$
(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  $\gamma_1$  e  $\gamma_2$  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 [101] 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. [101], obtemos

$$E_{int}(d) = 2 \left[ n_1 n_2 \gamma_2^{(1)} \gamma_2^{(2)} K_0(d) - \gamma_1^{(1)} \gamma_1^{(2)} K_0(\mu d) \right],$$
(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 [99] 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 [93] e pode também ser obtida considerando-se fontes puntuais em uma teoria de campos linearizada. [99, 100].

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  $n_1n_2$  é sempre negativo, levando a um potencial atrativo  $E_{int}(d)$  para qualquer valor de  $\kappa$ . 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. [162], 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. [163, 164] 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. [165, 166]

A conjectura proposta na Ref. [162] 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 [167]

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

$$|\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A}| + sgn(n)\frac{1}{2}\left(|\Psi|^2 - 1\right) = 0.$$
(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 [168]

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

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

Substituindo-se estas fórmulas na Eq. (5.9) e descartando os termos de ordem superior em  $\sigma(r) \in Q(r)$  encontramos  $nQ = -sgn(n)r\frac{d\sigma}{dr}$  ou, usando-se a forma assintótica destas funções,  $n\gamma_2 r K_1(r) = -sgn(n)\gamma_1 r dK_0(r)/dr = sgn(n)\gamma_1 r K_1(r) \Rightarrow \gamma_1 = sgn(n)n\gamma_2$ . 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  $n_1n_2 < 0$ . 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. [162, 163, 164] 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. [162, 163, 164] 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. [162, 163, 164], 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  $\mu$ . 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. [94] 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  $\mu$ , como mostraremos na próxima Seção.

A força de interação  $\Omega$  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

$$\Omega(d) = 2 \left[ n_1 n_2 \gamma_2^{(1)} \gamma_2^{(2)} K_1(d) - \gamma_1^{(1)} \gamma_1^{(2)} \mu K_1(\mu d) \right].$$
(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 [94], 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 [106]. 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  $\theta_1 \in \theta_2$  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  $f \in \vec{A}$  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

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

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,  $\vec{A} = na(r)\hat{\theta}/r$ , 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, [94, 106] as equações de Euler-Lagrange não foram derivadas explicitamente. Nós derivamos as equações de Euler-Lagrange para o presente problema, que são dadas por

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

е

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

onde os vetores unidade para a coordenada angular em torno de cada vórtice podem ser reescritos como  $\hat{\theta}_j = (-y_j/r_j, x_j/r_j, 0)$ . 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. [95, 165, 166]

## 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. [120] O sistema bi-dimensional é dividido em uma malha quadrada uniforme  $601 \times 601$  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. [94] Funções analíticas de fitting serão propostas para as curvas obtidas numericamente, onde o erro no ajuste é definido pela variação [120]

$$\nu = \sum_{n=1}^{N} \frac{\left[G(n) - G_{fit}(n)\right]^2}{\left(N - N_p\right)},\tag{5.14}$$

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.<sup>1</sup>

## 5.3.1 Interação vórtice-vórtice



Figura 69: Força de interação vórtice-vórtice  $\Omega$  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  $\Omega_{max}$  (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  $\Omega_{max}$  são mostradas pelas curvas sólidas.

Os resultados numéricos para a interação V-V são mostrados na Fig. 69, para vários

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Um ajuste perfeito levaria a  $\nu \to 0$ .

valores de  $\mu$  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  $\mu$  aumenta a partir de zero, e outro onde o módulo da força diminui de volta a zero, à medida que  $\mu$  se aproxima de 1. Isto pode ser visto na Fig. 69(c), onde o extremo do pico de força  $\Omega_{max}$  (triângulos abertos, escala da esquerda) aumenta com  $\mu$  para pequenos valores de  $\mu$ , enquanto para  $0.6 < \mu < 1$ este pico diminui com  $\mu$ , 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  $\mu$ . 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 ( $\mu \rightarrow \infty$ ). 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 [169], e posteriormente por Brandt [170]. 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 [101] 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  $p, q, \gamma \in \delta$  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. [171, 172] 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

$$\Omega(d \to \infty) = \gamma d^{-\frac{1}{2}} \left( \delta e^{-d} - \sqrt{\mu} e^{-\mu d} \right), \qquad (5.15)$$

onde  $\gamma \in \delta$  são parâmetros de ajuste. Para pequenas separações, nossos resultados mostram que uma potência de d descreve a força satisfatoriamente, ou seja

$$\Omega(d \to 0) = pd^q, \tag{5.16}$$

com  $p \in q$  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  $\mu$ , exibindo valores entre  $\approx 2.7$  e  $\approx 2.8$  para todos os valores de  $\mu$  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  $\mu$  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:

$$\Omega_{fit}(d) = \eta_1 \frac{d^{\eta_3}}{1 + \eta_2 d^{\eta_3 + \frac{1}{2}}} \left( \eta_4 e^{-d} - \sqrt{\mu} e^{-\mu d} \right), \qquad (5.17)$$

onde  $\eta_i~(i=1$  - 4) são quatro parâmetros de ajuste.

Fig. 71 mostra o fitting obtido com a Eq. (5.17) para os mesmos valores de  $\mu$  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  $\eta_4$  para os maiores valores de  $\mu$ .

Os valores dos quatro parâmetros de ajuste são dados na Tabela I, para  $\mu$  variando entre 0.2 e 2.5. Note que a variação estimada  $\nu$  cresce com  $\mu$ , 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, [173, 174] 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  $\mu$ . A dependência deles em  $\mu$  é mostrada na Fig. 72. Três intervalos diferentes de  $\mu$ , delimitados pelas linhas pontilhadas verticais na Fig. 72, podem ser distinguidos. A explicação física para a existência de três comportamentos diferentes dos parâmetros

| $\mu$ | $\eta_1$               | $\eta_2$               | $\eta_3$ | $\eta_4$ | $\nu(\times 10^{-8})$ |
|-------|------------------------|------------------------|----------|----------|-----------------------|
| 0.2   | $6.564 \times 10^{-7}$ | $5.13 \times 10^{-7}$  | 6.135    | -83.611  | 1.42                  |
| 0.3   | $1.522 \times 10^{-5}$ | $7.268 \times 10^{-6}$ | 5.213    | -17.667  | 3.96                  |
| 0.4   | $5.698 \times 10^{-5}$ | $2.041 \times 10^{-5}$ | 4.950    | -8.014   | 5.06                  |
| 0.5   | $1.284 \times 10^{-4}$ | $3.911 \times 10^{-5}$ | 4.796    | -5.090   | 1.95                  |
| 0.6   | $4.474 \times 10^{-4}$ | $1.222 \times 10^{-4}$ | 4.440    | -1.538   | 0.448                 |
| 0.7   | $1.62 \times 10^{-3}$  | $3.968 \times 10^{-4}$ | 4.046    | 0.237    | 0.239                 |
| 0.8   | $4.12 \times 10^{-3}$  | $9.326 \times 10^{-4}$ | 3.760    | 0.766    | 0.215                 |
| 0.9   | $8.46 \times 10^{-3}$  | $1.79 \times 10^{-3}$  | 3.544    | 0.943    | 0.116                 |
| 1.1   | $1.546 \times 10^{-2}$ | $3.88 \times 10^{-3}$  | 3.489    | 1.049    | 0.139                 |
| 1.2   | $2.068 \times 10^{-2}$ | $5.37 \times 10^{-3}$  | 3.443    | 1.095    | 0.98                  |
| 1.3   | $2.67 \times 10^{-2}$  | $7.31 \times 10^{-3}$  | 3.410    | 1.140    | 3.16                  |
| 1.4   | $3.369 \times 10^{-2}$ | $9.78 \times 10^{-3}$  | 3.382    | 1.183    | 7.24                  |
| 1.5   | $4.175 \times 10^{-2}$ | $1.286 \times 10^{-2}$ | 3.358    | 1.225    | 13.8                  |
| 1.6   | $5.094 \times 10^{-2}$ | $1.664 \times 10^{-2}$ | 3.338    | 1.265    | 23.6                  |
| 1.7   | $6.136 \times 10^{-2}$ | $2.121 \times 10^{-2}$ | 3.320    | 1.304    | 36.8                  |
| 1.8   | $7.308 \times 10^{-2}$ | $2.667 \times 10^{-2}$ | 3.306    | 1.342    | 53.9                  |
| 1.9   | $8.618 \times 10^{-2}$ | $3.311 \times 10^{-2}$ | 3.294    | 1.378    | 75.3                  |
| 2.0   | 0.1008                 | $4.066 \times 10^{-2}$ | 3.283    | 1.414    | 101.1                 |
| 2.1   | 0.1169                 | $4.94 \times 10^{-2}$  | 3.275    | 1.449    | 131.6                 |
| 2.2   | 0.1347                 | $5.945 \times 10^{-2}$ | 3.268    | 1.483    | 166.7                 |
| 2.3   | 0.1542                 | $7.093 \times 10^{-2}$ | 3.262    | 1.517    | 206.6                 |
| 2.4   | 0.1756                 | $8.396 \times 10^{-2}$ | 3.258    | 1.549    | 251.1                 |
| 2.5   | 0.199                  | $9.866 \times 10^{-2}$ | 3.254    | 1.581    | 286.2                 |

Tabela 1: Parâmetros de ajuste  $\eta_i$  e o erro estimado  $\nu$  para a Eq. (5.17) no caso V-V, para diversos valores de  $\mu$ .

| 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                | $-4.221 \times 10^{-2}$ |
| $A_2$     | 13.845                  | $7.935 \times 10^{-2}$ | -0.9843                 |
| $B_2$     | -0.6218                 | -5.359                 | -379.321                |
| $C_2$     | -1.373                  | -0.9084                | $-1.057 \times 10^{-2}$ |
| $A_3$     | 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                       |
| $B_4$     | $-8.663 \times 10^{-2}$ | -0.1229                | 1                       |
| $C_4$     | -4.244                  | -6.022                 | 0.5                     |

Tabela 2: Parâmetros de ajuste nas Eqs. (5.18 a-d) para o caso V-V, para três intervalos diferentes de  $\mu$ .

 $\eta_i$  como função de  $\mu$  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  $\mu$  e outro regime onde ele diminui com  $\mu$ . 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

$$\eta_1(\mu) = e^{B_1(\mu^{C_1} + A_1)},\tag{5.18a}$$

$$\eta_2(\mu) = e^{B_2(\mu^{C_2} + A_2)},\tag{5.18b}$$

$$\eta_3(\mu) = A_3 + B_3 e^{C_3 \mu} \tag{5.18c}$$

е

$$\eta_4(\mu) = A_4 + B_4 \mu^{C_4},\tag{5.18d}$$

com parâmetros  $A_i$ ,  $B_i \in C_i$  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  $\eta_4$  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.

È importante salientar que os resultados obtidos para  $\eta_2$  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  $\approx 2.7$  e  $\approx 2.8$ . Isto é razoável, porque os termos exponenciais na Eq. (5.17) ainda influenciam no limite de pequenas distâncias d nesta

expressão, assim, o parâmetro  $\eta_2$  deve assumir um valor diferente de q para compensar estes termos. Os valores obtidos para  $\eta_4$ , 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  $\mu$  aumenta, a diferença entre  $\gamma_1^{(i)} \in \gamma_2^{(i)}$  é intensificada [99], o que leva a um erro  $\nu$  maior para maiores valores de  $\mu$ , como mostrado na Tabela I. Mesmo assim, esta escolha de  $\eta_4$  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  $n = n_1 + n_2 = 2$ . [94, 95, 96, 97] 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  $\mu$ nos 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  $\mu$  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  $\Omega$  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  $\Omega_{max}$  (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  $\Omega_{max}$  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  $\Omega_{max}$  como função de  $\mu$ , 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  $\mu$  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  $p, q, \gamma \in \delta$  são dados em cada figura.

interações assintóticas V-GV, simplesmente escolhendo-se  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  e mudando-se os parâmetros  $\gamma_1^{(i)} \in \gamma_2^{(i)}$  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  $\eta_i$  (i = 1 - 4) encontrados para cada valor de  $\mu$  no caso V-GV são mostrados na Tabela III, para  $\mu \in 0.2$  a 2.5. Como no caso V-V, o erro  $\nu$ 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  $\mu$  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  $\mu$  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  $\eta_i$  como função de  $\mu$  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

| $\mu$ | $\eta_1$               | $\eta_2$                | $\eta_3$ | $\eta_4$ | $\nu(\times 10^{-8})$ |
|-------|------------------------|-------------------------|----------|----------|-----------------------|
| 0.2   | $1.495 \times 10^{-9}$ | $6.073 \times 10^{-10}$ | 8.440    | -443.65  | 1.72                  |
| 0.3   | $2.347 \times 10^{-7}$ | $4.944 \times 10^{-8}$  | 6.929    | -58.765  | 16.2                  |
| 0.4   | $1.165 \times 10^{-6}$ | $1.69 \times 10^{-7}$   | 6.679    | -24.312  | 33.7                  |
| 0.5   | $2.302 \times 10^{-6}$ | $2.823 \times 10^{-7}$  | 6.628    | -19.433  | 22.6                  |
| 0.6   | $1.083 \times 10^{-5}$ | $1.230 \times 10^{-6}$  | 6.199    | -8.372   | 8.6                   |
| 0.7   | $6.775 \times 10^{-5}$ | $6.892 \times 10^{-6}$  | 5.681    | -1.661   | 2.6                   |
| 0.8   | $3.681 \times 10^{-4}$ | $3.283 \times 10^{-5}$  | 5.173    | 0.446    | 0.91                  |
| 0.9   | $1.54 \times 10^{-3}$  | $1.196 \times 10^{-4}$  | 4.706    | 0.942    | 0.41                  |
| 1.1   | $3.81 \times 10^{-3}$  | $3.847 \times 10^{-4}$  | 4.539    | 1.049    | 0.69                  |
| 1.2   | $5.98 \times 10^{-3}$  | $6.366 \times 10^{-4}$  | 4.423    | 1.095    | 6.0                   |
| 1.3   | $8.78 \times 10^{-3}$  | $1.01 \times 10^{-3}$   | 4.330    | 1.140    | 21.7                  |
| 1.4   | $1.237 \times 10^{-2}$ | $1.55 \times 10^{-3}$   | 4.248    | 1.183    | 54.0                  |
| 1.5   | $1.684 \times 10^{-2}$ | $2.3 \times 10^{-3}$    | 4.175    | 1.225    | 108.8                 |
| 1.6   | $2.177 \times 10^{-2}$ | $3.27 \times 10^{-3}$   | 4.148    | 1.265    | 196.0                 |
| 1.7   | $2.813 \times 10^{-2}$ | $4.57 \times 10^{-3}$   | 4.095    | 1.304    | 315.8                 |
| 1.8   | $3.561 \times 10^{-2}$ | $6.22 \times 10^{-3}$   | 4.048    | 1.342    | 474.8                 |
| 1.9   | $4.428 \times 10^{-2}$ | $8.28 \times 10^{-3}$   | 4.008    | 1.378    | 676.0                 |
| 2.0   | $5.421 \times 10^{-2}$ | $1.08 \times 10^{-2}$   | 3.973    | 1.414    | 676.0                 |
| 2.1   | $6.549 \times 10^{-2}$ | $1.384 \times 10^{-2}$  | 3.942    | 1.449    | 1218                  |
| 2.2   | $7.818 \times 10^{-2}$ | $1.747 \times 10^{-2}$  | 3.916    | 1.483    | 1564                  |
| 2.3   | $9.236 \times 10^{-2}$ | $2.174 \times 10^{-2}$  | 3.894    | 1.517    | 1962                  |
| 2.4   | 0.1081                 | $2.671 \times 10^{-2}$  | 3.876    | 1.549    | 2410                  |
| 2.5   | 0.1255                 | $3.245 \times 10^{-2}$  | 3.861    | 1.581    | 2911                  |

Tabela 3: Parâmetros de ajuste  $\eta_i$  e erros estimados  $\nu$  para a Eq. (5.17) no caso V-GV ( $n_1 = 1 \text{ e } n_2 = 2$ ), para  $\mu$  entre 0.2 e 2.5.

distintos dos parâmetros  $\eta_i$  como função de  $\mu$  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  $\mu$ , 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 [173, 174]

$$\vec{\Omega}_i = \sum_{j \neq i} \Omega\left( \left| \vec{r_i} - \vec{r_j} \right| \right) \hat{r}_{i,j}$$
(5.19)
| 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                  | $-1.779 \times 10^{-2}$ | -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         |
| $B_4$     | $-2.396 \times 10^{-2}$ | -0.7764                 | 1         |
| $C_4$     | -6.075                  | -5.113                  | 0.5       |

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  $\mu$ .

onde  $\vec{r_i}$  é a posição do vórtice  $i \in \hat{r}_{i,j} = (\vec{r_i} - \vec{r_j})/|\vec{r_i} - \vec{r_j}|$ . 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  $\mu$ , 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

$$\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A} + \left[\overrightarrow{A} - \frac{1}{r_1}\widehat{\theta}_1 - \frac{1}{r_2}\widehat{\theta}_2 - \frac{1}{r_3}\widehat{\theta}_3\right]f^2 = 0.$$
(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  $1.8\lambda$ , 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 [173, 174], a separação crítica  $d_c$  onde os vórtices começam a se misturar se aproxima de zero (como demonstrado na Subseção 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  $d = 3.2\lambda$  (1.8 $\lambda$ ), 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 Subseção 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  $\xi$  e  $\lambda$  são comparáveis.

#### 5.3.4 Interação vórtice-antivórtice

Nas Subseções 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 Subseção, 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 Subseções 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  $\mu$ . 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 [175] 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. [176] 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  $\mu$  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  $\lambda$  (de 15  $\lambda$  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  $\mu$ , 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  $\mu$  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  $\lambda$ ), 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 4.5 $\lambda$ , 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  $\mu$ . 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  $\approx 1$  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 Subseções 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. [177]).

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

$$\Omega(d) = -\Delta_1 K_1(d) - \Delta_2 K_1(\mu d),$$
(5.21)

onde  $\Delta_1$  e  $\Delta_2$  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  $\mu$  indo de 0.3 a 2.5 é dada na Tabela V. Uma lista destes parâmetros de ajuste também pode ser encontrada na Ref. [99], onde a relação entre nossos parâmetros de ajuste e os parâmetros  $q \in m$  do referido trabalho é  $\Delta_1 = m^2/2\pi^2 \in \Delta_2 = \mu q^2/2\pi^2$ . Seguindo o mesmo procedimento das Subseções anteriores, propomos funções de fitting

| -          | ), <b>1</b>  | 2   |
|------------|--|---|
| $\Delta_1$ | $\Delta_2$   | $\nu(\times 10^{-9})$                                 |
| 156.948    | 0.4203   | 0.918   |
| 67.315     | 0.7419   | 0.10  |
| 31.064     | 1.173  | 0.098   |
| 19.070     | 1.719  | 0.18  |
| 14.401     | 2.340  | 0.342   |
| 11.990     | 2.925  | 0.56  |
| 6.499      | 5.060  | 3.06  |
| 6.357      | 6.357  | 5.01  |
| 5.320      | 9.170  | 5.0   |
| 4.159      | 14.269   | 1.21  |
| 4.254      | 16.759   | 1.21  |
| 4.125      | 20.640   | 1.10  |
| 4.039      | 23.58  | 0.75  |
| 3.775      | 33.662   | 1.20  |
| 3.632      | 43.173   | 1.40  |
| 3.542      | 51.251   | 1.03  |
| 3.422      | 66.755   | 1.23  |
| 3.315      | 87.448   | 1.38  |
| 3.226      | 113.229  | 1.54  |
| 3.162      | 138.472  | 1.25  |
| 3.101      | 170.634  | 1.08  |
| 3.037      | 220.086  | 1.13  |
| 2.983      | 277.742  | 1.08  |
|            | $\begin{array}{r} \Delta_1 \\ 156.948 \\ 67.315 \\ 31.064 \\ 19.070 \\ 14.401 \\ 11.990 \\ 6.499 \\ 6.357 \\ 5.320 \\ 4.159 \\ 4.254 \\ 4.125 \\ 4.039 \\ 3.775 \\ 3.632 \\ 3.542 \\ 3.542 \\ 3.422 \\ 3.315 \\ 3.226 \\ 3.162 \\ 3.101 \\ 3.037 \\ 2.983 \end{array}$ | $\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$ |

Tabela 5: Parâmetros de ajuste  $\Delta_i$  e erro estimado  $\nu$  para a Eq. (5.21) no caso V-AV ( $n_1 = 1 e n_2 = -1$ ), para  $d > d_E$ .

para estes parâmetros como função do parâmetro de Ginzburg-Landau  $\mu$ ,

$$\Delta_1(\mu) = 2.879 + 3.415\mu^{-3.166} \tag{5.22a}$$

е

$$\Delta_2(\mu) = \mu(-0.2258 + 1.044e^{1.866\mu}), \qquad (5.22b)$$

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  $\Delta_1$  e  $\Delta_2$  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  $\mu$ , 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  $\mu$  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

$$\Omega(d) = -(2.879 + 3.415\mu^{-3.166})K_1(d) + (0.2258 - 1.044e^{1.866\mu})\mu K_1(\mu d),$$
(5.23)

que deve produzir uma descrição precisa da força de interação V-AV, para separações  $d > d_E$  e para qualquer valor de  $\mu$ .

### 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:

$$\mathcal{F} = \sum_{i=1,2} \alpha_i |\Psi_i|^2 + \frac{1}{2} \beta_i |\Psi_i|^4 + \frac{1}{2m_i} \left| \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi_i \right|^2 - \Gamma(\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*) + \frac{(\mathbf{h} - \mathbf{H})^2}{8\pi}.$$
(5.24)

Os dois condensados de pares de Copper são descritos por parâmetros de ordem  $\Psi_1 \in \Psi_2$ , H é o campo magnético aplicado e 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  $\tau$ , que se aproxima de zero à medida em que a temperatura T se aproxima da temperatura crítica  $T_c$  (na teoria de Ginzburg-Landau,  $\tau = \ln T_c/T$  [113]). 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 [115], 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  $\Psi$ , 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 [179], 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. [178], 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 <sup>2</sup>  $\alpha_i = -N(0)n_i\chi_i = -N(0)n_i(\tau - S_i/n_i\eta), \beta_i = N(0)n_i/W^2$  e  $\Gamma = N(0)\lambda_{12}/\eta$ , onde  $\lambda_{ij}$  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  $W^2 = 8\pi^2 T_c^2/7\zeta(3)$ . As constantes  $S_i$  e  $\eta$  são definidas como na Ref. [115]. Isto nos permite definir formalmente os comprimentos de coerência  $\xi_i = \frac{\hbar v_i}{\sqrt{6W}}$  e as profundidades de penetração  $\lambda_i = \sqrt{\frac{3c^2}{16\pi N(0)e^2 n_i v_i^2}}$ , assim como os parâmetros de Ginzburg-Landau  $\kappa_i = \lambda_i/\xi_i$  de cada condensado como se eles existissem separadamente. Note que  $\alpha_1$  e  $\alpha_2$  mudam de sinal em temperaturas diferentes, que podem ser definidas formalmente como as temperaturas críticas de cada condensado  $T_{c(i)} = T_c e^{-S_i/n_i \eta} < T_c$ . 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. [178], onde pelo menos um dos  $\alpha_i$  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

$$\frac{d^2 f_1}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_1}{dr} - \frac{n^2 (a-1)^2}{r^2} f_1 + (\chi_1 - f_1^2) f_1 + \gamma f_2 = 0,$$
(5.25a)

$$\frac{d^2 f_2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_2}{dr} - \frac{n^2 (a-1)^2}{r^2} f_2 + \alpha (\chi_2 - f_2^2) f_2 + \frac{\gamma}{\alpha} \frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2} f_1 = 0,$$
(5.25b)

$$\frac{d^2a}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{da}{dr} - (a-1)\left(\frac{f_1^2}{\kappa_1^2} + \alpha\frac{f_2^2}{\kappa_2^2}\right) = 0,$$
(5.25c)

onde  $\alpha ~=~ (v_1/v_2)^2$  é equivalente ao quadrado da razão entres os comprimentos de

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Parâmetros diferentes no funcional para duas bandas podem ter diferentes dependências na temperatura, especialmente no limite impuro [180]. Nossa aproximação pode ser facilmente adaptada ara estes casos, mas iremos nos restringir ao modelo padrão onde apenas  $\alpha_i$  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  $\xi_1$ , 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

$$(\chi_1 - a_1^2)a_1 + \gamma a_2 = 0 (5.26a)$$

$$(\chi_2 - a_2^2)a_2 + \frac{\gamma\kappa_2^2}{\alpha^2\kappa_1^2}a_1 = 0, (5.26b)$$

que podem ser desacopladas definindo-se a razão  $\rho = a_1/a_2$ , que então obedece a equação de quarta ordem

$$\frac{\gamma \kappa_2^2}{\alpha^2 \kappa_1^2} \rho^4 + \chi_2 \rho^3 - \chi_1 \rho - \gamma = 0.$$
 (5.27)

Este tipo de equação pode ser resolvido analiticamente através de um procedimento bastante extenso, conhecido como método de Ferrari [181], através do qual obtém-se

$$a_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho} + \chi_1}, \quad a_2 = \sqrt{\frac{\gamma \kappa_2^2}{\alpha^2 \kappa_1^2} \rho + \chi_2}.$$
 (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

$$\frac{d^2\sigma_1}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\sigma_1}{dr} + (\chi_1 - 3a_1^2)\sigma_1 + \gamma\sigma_2 = 0, \qquad (5.29a)$$

$$\frac{d^2\sigma_2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\sigma_2}{dr} + \alpha \left(\chi_2 - 3a_2^2\right)\sigma_2 + \frac{\gamma}{\alpha}\frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2}\sigma_1 = 0$$
(5.29b)

е

$$\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{Q}{r}\right) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{Q}{r}\right) - \left(\frac{\xi_{10}^2}{\lambda^2} - \frac{1}{r^2}\right) \left(\frac{Q}{r}\right) = 0, \qquad (5.29c)$$

onde definimos  $\lambda^{-2} = (a_1/\lambda_1)^2 + (a_2/\lambda_2)^2$ . Para qualquer valor de  $\gamma \in T$ , 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  $\sigma_i$  são desacopladas e então, devemos definir o operador  $\hat{L}_2 = \nabla^2 + \alpha (\chi_2 - 3a_2^2)$ , 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

$$\nabla^2 \nabla^2 \sigma_1 + C_1 \nabla^2 \sigma_1 + C_2 \sigma_1 = 0.$$
 (5.30)

Nesta expressão,  $C_1 = (\chi_1 - 3a_1^2) + \alpha (\chi_2 - 3a_2^2) e C_2 = \alpha (\chi_2 - 3a_2^2) (\chi_1 - 3a_1^2) - \gamma^2 \kappa_2^2 / \alpha \kappa_1^2$ . O operador  $\nabla^2$  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  $\beta^2$ . Destas quartro autofunções, apenas a última satisfaz a condição de que  $\sigma_i$  deve decair monotonicamente com r. Substituindo  $\nabla^2 K_0(\beta r) = \beta^2 K_0(\beta r)$  na Eq. (5.30), obtemos

$$\beta_{\pm} = \sqrt{\frac{-C_1 \pm \sqrt{C_1^2 - 4C_2}}{2}},\tag{5.31}$$

е

$$\sigma_1(r) = \delta_1 \cos(\omega) K_0(\beta_- r) - \delta_2 \sin(\omega) K_0(\beta_+ r), \qquad (5.32a)$$

$$\sigma_2(r) = \delta_1 \sin(\omega) K_0(\beta_r r) + \delta_2 \cos(\omega) K_0(\beta_r r).$$
(5.32b)

Note que nas Eqs. (5.32), cada  $\sigma_i$  deve conter ambas as funções de Bessel para  $\beta_{\pm}$ , numa combinação convenientemente escrita na forma de um ângulo de mistura  $\omega$ , para garantir a ortogonalidade destas funções. Substituindo as Eqs. (5.32) na equação diferencial Eq. (5.29a), obtemos

$$\tan(\omega) = \frac{\gamma}{\beta_+^2 + (\chi_1 - 3a_1^2)},$$
(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  $\delta_i$  nas expressões para Q(r),  $\sigma_1(r) \in \sigma_2(r)$  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 [99] para encontrar a interação vórtice-vórtice no limite  $r \to \infty$ , obtendo assim

$$E_{2B}(\mathbf{r}) = \delta_3^2 K_0\left(\frac{\mathbf{r}}{\lambda}\right) - \delta_1^2 K_0\left(\beta_-\frac{\mathbf{r}}{\xi_1}\right) - \delta_2^2 K_0\left(\beta_+\frac{\mathbf{r}}{\xi_1}\right),\tag{5.34}$$

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, [102] mostrada como Eq. (5.7) neste Capítulo, obtemos analogamente

$$E_{1B}(\mathbf{r}) = \delta_4^2 K_0 \left(\frac{\mathbf{r}}{\lambda_{1B}}\right) - \delta_5^2 K_0 \left(\sqrt{2}\frac{\mathbf{r}}{\xi_{1B}}\right), \qquad (5.35)$$

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. [178, 183], que vale apenas na ausência de acoplamento, que é uma situação irreal. ii) Os parâmetros  $\delta_i$ 

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  $E_{1B}(\mathbf{r})$  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-Landa<br/>u $\kappa_i$ para cada condensado em separado. Se<br/>  $\kappa_+^*$ e/ou $\kappa_-^*$  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  $\sigma_i$ depende exponencialmente do menor entre  $\beta_{-}$  e  $\beta_{+}$ . Assim, no caso acoplado, podemos não só definir uma única profundidade de penetração magnética  $\lambda$  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. [183], 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

$$H_{cc}^{2} = H_{c(1)}^{2}a_{1}^{2}(2\chi_{1} - a_{1}^{2}) + H_{c(2)}^{2}a_{2}^{2}(2\chi_{2} - a_{2}^{2}) + 4\gamma H_{c(1)}^{2}a_{1}a_{2}.$$
 (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 vórticevórtice 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

$$\psi_1'' = (A^2/2) \psi_1 - (\chi_1 - \psi_1^2) \psi_1 - \gamma \psi_2, \qquad (5.37a)$$

$$\psi_2'' = (A^2/2) \psi_2 - \alpha (\chi_2 - \psi_2^2) \psi_2 - \gamma \kappa_2^2 / (\alpha \kappa_1^2) \psi_1, \qquad (5.37b)$$

$$A'' = \left(\kappa_1^{-2}\psi_1^2 - \alpha\kappa_2^{-2}\psi_2^2\right)A,$$
(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:

$$\nabla^2 f_1 - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x \overline{Y} - A_y \overline{X}) + \vec{A}^2\right] f_1 + (\chi_1 - f_1^2) f_1 + \gamma f_2 = 0, \qquad (5.38a)$$

$$\nabla^2 f_2 - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x\overline{Y} - A_y\overline{X}) + \vec{A}^2\right]f_2 + \alpha\left(\chi_2 - f_2^2\right)f_2 + \frac{\gamma\kappa_2^2}{\alpha\kappa_1^2}f_1 = 0 \quad (5.38b)$$

е

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = -\left[\vec{A} - \frac{n_1\hat{\theta}_1}{r_1} - \frac{n_2\hat{\theta}_2}{r_2}\right] \left(\frac{f_1^2}{\kappa_1^2} + \alpha \frac{f_2^2}{\kappa_2^2}\right) = 0,$$
 (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 vórticevórtice em supercondutores de duas bandas, e as previsões descritas na Subseção 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 Subseção anterior, para parâmetros similares aos do MgB<sub>2</sub>, onde  $\kappa_1$  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. [180] 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 [116] 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  $\kappa^*$  e o sinal de  $E_S$ 



Figura 83: Diagrama de fases da interação de longo alcance para um cristal MgB<sub>2</sub>, 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  $\kappa^*$  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. [116], 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 curtoalcance) 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<sub>2</sub> 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  $\kappa_1 = 2.4$ . [184] 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 [184] 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  $(n_1/n_2 \text{ grande e } v_1/v_2 \text{ pequeno})$ , 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  $\lambda_{ij}$ . 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 spinórbita), 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 canalanel, 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<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>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, 144, 143] 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. [151] 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  $\Delta x$  do pacote, diminuímos a largura  $\Delta k$  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 pseudomagnético 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  $\mu$ , até mesmo no regime tipo-I. Ela depende quatro parâmetros, os quais podem ser obtidos para qualquer  $\mu$  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  $\mu$ , o que se confirma pelos nossos resultados numéricos e contradiz a conjectura proposta em artigos anteriores [162, 163, 164] 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  $\mu$ .

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  $\kappa^*$  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<sub>2</sub> 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  $x \in y$  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. [185] 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 spinórbita, 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  $\kappa/L$ , 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.

# 7 Summary

We have expanded the split-operator technique to study not only the Schrödinger Hamiltonian and its analog in the effective mass theory, but also the Dirac, Rashba and Dresselhaus (for spin-orbit interactions) Hamiltonians, as well as the tight-binding Hamiltonian.

We then present a theoretical study of the time evolution of a Gaussian wave packet in quantum rings and T-wires, where we investigate the effects of smooth channel-ring junctions, external magnetic fields and impurities on the transmission probability. Thus, we improved the previous works of Refs. [1] and [88] in the following way: 1) we have considered rings and injection channels with finite width, 2) we do not restrict the number of subbands in the system, i.e. we allow subband transitions, and 3) the connections between the ring and the channels are modeled in a more realistic way, where the curvature in the junction, which is unavoidable in a real experiment, is taken into account. While one would intuitively think that a smooth connection would always lead to a larger transmission probability, our results show that this strongly depends on the wave packet average energy: as the channel-ring junction acts as a confinement potential, where quantum resonances are present, the transmission probability is affected not only by the smoothness of the junction, but also by the energy of the incoming packet.

In the absence of a magnetic field, for higher wavepacket energies, the electron is scattered at the first lead-ring connection to other subbands states, but remarkably it is scattered back to the initial subband at the second lead-ring junction, so that the incoming and outgoing wavefunctions in the leads are always in the same subband. However, a magnetic field can influence strongly the interference at the second junction such that at the AB resonances we found complete destructive interference of only the initial subband state, which results in incoming and outgoing electrons ending up in different subbands. This effect strongly affects the transmission probabilities, changing the amplitude and the period of AB oscillations. Indeed, we observe that, increasing the magnetic field intensity, a periodic oscillation occurs not only in the transmission and reflection coefficients, as expected due to the AB effect, but also in the wave function projections on the other subbands states in the right (outgoing) channel.

The effect of asymmetry is analyzed by considering a negative impurity or a Gaussian potential localized in one of the ring arms. In the presence of such an asymmetry, it is possible to half the period of the AB oscillations and to reduce its amplitude. However, if two negative impurities are localized in diametrically opposite sides of the ring, the symmetry of the system is recovered, and so are the period and the amplitude of the AB oscillations. A similar behavior was observed previously [20] in the eigenenergies of electrons in a quantum ring with impurities.

The analysis of the probability density current as a function of time in specific points of the system helps us to understand the trajectory of the electron in these structures, which allows us to compare our results with those for a classical particle in a similar system. In some cases, specially for lower energies, the classical approach gives a reasonable result. For higher energies, on the other hand, the classical approach overestimates the electron velocity. In order to understand such discrepancy, one must remember that, for higher energies, part of the transmitted wave function is scattered to the second subband, which has lower k and, consequently, lower velocity. Moreover, we observe that the electron wave function moves forward and backward within the rings arms, so that more than one pulse contribute to the transmission and reflection coefficient as time evolves.

We also propose a simple model for describing rough surfaces in semiconductor quantum rings. The influence of the surface roughness on the electron energy spectrum of  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  QR, under an applied magnetic field perpendicular to the ring plane, was theoretically investigated. It was demonstrated that the existence of rough surfaces is responsible for a considerably shift on the energy levels. Furthermore, the degeneracy of the angular momentum transition points in the AB oscillations is lifted when rough surfaces are considered, and in special cases, the ground state energy oscillations can even be suppressed, which would make the AB effect harder to be experimentally detected in rough samples.

We show how the split-operator technique can be applied for the wave packet dynamics in systems described by the Rashba, Dresselhaus and Zeeman Hamiltonians, where we demonstrate that the time evolution operator for these Hamiltonians can be exactly expanded in a matricial form. This method is then used to investigate the time oscillations and broken degeneracy of the spin states in semiconductors under an external magnetic field.

After studying the electrons behavior in semiconductors, we then analyzed the case of electrons in graphene, where we first calculated the energy levels of graphene quantum rings under an applied magnetic field. We observed that the energy spectrum and the AB oscillations for these systems are strongly dependent on their geometry and edge structures.

The energy spectrum obtained from the TB model for hexagonal quantum rings with armchair edges exhibits six-fold sub-bands separated by narrow gaps, which become larger as the width of the ring increases. The spectrum does not have E = 0 states at zero magnetic field, but exhibits such states for certain values of magnetic flux. The main features of this energy spectrum can be obtained by a simplified model, which considers electrons obeying the Dirac equation for a circular ring with zero width. With such a simple model, one can estimate the energy levels and the period of AB oscillations or, alternatively, estimate the ring radius by analyzing its energy spectrum as a function of the magnetic field. The approximation is better suited for hexagonal rings with smaller widths and for lower energies and magnetic fields.

For zigzag rings, the spectrum is qualitatively different. The six-fold energy subbands, separated by large gaps, are more clearly seen than in the armchair case. When the inner and outer zigzag edges are aligned, the energy spectrum exhibits a sub-band around E = 0 and the lowest energy state is double degenerate. In addition, the system exhibits zero energy states for specific values of magnetic flux that can be approximated by  $\Phi_R = (n+1/2)\Phi_0$ . On the other hand, when these edges are anti-aligned, the spectrum is drastically modified: the degeneracy of the lowest energy level is broken and two subbands, separated by a small gap, are observed around E = 0. It is an interesting question whether the strong dependence of the energy spectrum on the edge structures, e.g. the oscillatory behavior of the spectra with changing ring width, can indeed be modelled by a continuum approach, which is an interesting topic to be analyzed in future works.

We also studied two cases of circular rings within the TB model: in the first, where the ring is cut from a graphene layer, we observe an energy spectrum composed by pairs of energy states which exhibit AB oscillations as the magnetic field increases. In the second, where the electrons are confined in a ring-like structure by an external site-dependent potential, the energy spectrum exhibits a gap around E = 0 and the ground state is doubly degenerate in the absence of a magnetic field. As the magnetic field increases, After analyzing the eigenstates in graphene, we studied the wave packet dynamics in these systems. In the case of free electrons, we observe the so called *zitterbewegung*, i. e. the trembling motion of the wave function. The results obtained by both the TB and continuum models in this case show good agreement with the analytical results in the literature, [151] within the limits of validity of the continuum approximation. We demonstrate that the presence of a mass term, which can be experimentally obtained by the influence of a substrate on the graphene hexagonal lattice, not only opens a gap in the energy spectrum, as discussed in recent works, but also leads to a stronger zitterbewegung, which might be used to help the experimental detection of this effect. This also rules out the possibility of using a mass barrier to simulate the reflection of a wave packet in the borders of a graphene flake: due to the zitterbewegung, the reflected wave packet oscillates in the transversal direction and ends up out of its initial axis of motion.

Using the split-operator method adapted to the Dirac Hamiltonian, we investigated the case of a Gaussian wave packet propagating in a graphene sheet with a potential barrier, where we observe all the effects predicted for electrons in this system, such as the Klein tunneling and the Snell law for the electrons "refraction" in these barriers. However, a small reflection is still observed for these Gaussian wave packets, even for a perpendicular incidence at the barrier, due to the k's distribution of the wave packet in the direction perpendicular to the motions direction y. Increasing the wave packet width  $\Delta x$ , the width  $\Delta k$  of the momentum distribution decreases, which reduces the reflection probability and helps the observation of the Klein tunneling. We also suggest a potential barrier configuration, in the shape of a quantum point contact, where the Snell law for the electron tunneling induces a quasi-bound state.

We have also studied the dynamics of Gaussian wave packets in graphene under external and strain-induced magnetic fields, where the latter is obtained by bending the graphene sheet into an arc of a circle. The dependence of the zitterbewegung on the initial pseudo-spin of the wave packet is investigated, and the results obtained by means of the tight-binding model and the Dirac equation are compared. We demonstrate that the combination of the pseudo-magnetic field, induced by bending the graphene sheet, along with an external magnetic field with appropriate strength can be used as an efficient valley filter. An incoming wave packet composed of momenta around the K and K'Dirac points is scattered such that all its components in one of the Dirac cones undergoes a strong Lorentz force and are readily reflected, while the components in the other cone are allowed to pass through the device with only small distortions in their trajectory, due to the very weak residual Lorentz force.

Our results also show that in the absence of external or strain-induced magnetic fields, the zitterbewegung is a transient effect, whereas in the presence of any of these fields, the oscillations persist in time. In a strained sample under an external magnetic field with the appropriate strength, the effective magnetic field in one of the Dirac cones is enhanced, whereas in the other cone it is practically cancelled. In this situation, a permanent zitterbewegung is observed only for wave packets in one of the Dirac cones. The wave packet oscillations produce electric field radiation, which can be detected experimentally.

Finally, we have also presented a theoretical study of the interaction between vortices in bulk superconductors within the Ginzburg-Landau theory. An analytical study of the asymptotic behavior of the vortex-vortex interaction shows that a combination of first order modified Bessel functions of the second kind describes the behavior of the numerically obtained forces for large vortex-vortex separation. At small distances, the fitting curves for V-V and V-GV interactions show that the force in this region behaves as a power function of the separation between vortices. We proposed a fitting function that combines both limiting behaviors, namely, the power law for small distances and the modified Bessel function behavior for large distances. This function, given by Eq. (5.17), gives fairly accurate fitting of the interaction force for any value of  $\mu$ , even in the type-I regime. It depends on four fitting parameters, which can be obtained for any value of  $\mu$ either by interpolating our data presented in Table I (Table III), for vortex-vortex (vortexgiant vortex) interactions, or by using Eqs. (5.18 a-d) with the parameters presented in Table II (Table IV).

Our analytical study of the V-AV interaction shows that the V-AV interaction force is attractive for any value of the GL parameter  $\mu$ , which is confirmed by our numerical results and contradicts the conjecture proposed in previous works [162, 163, 164] which implies that the V-AV interaction force is repulsive for  $\mu < 1$  (type-I). For large V-AV separation d, the interaction force decays with d as a combination of modified Bessel functions. However, for d smaller than a critical separation  $d_E$ , the conventional V-AV pair is no longer the lowest energy state. Instead, the lowest energy state exhibits a strong suppression of the super-current and amplitude of the order parameter in the region between the vortex and antivortex, which results in a different behavior of the force as a function of d in this case and, as a consequence, the V-AV interaction force is discontinuous at  $d_E$ . Furthermore, the conventional V-AV pair becomes unstable for d lower than the separation  $d_A$ , which is interpreted as the V-AV annihilation point. We fitted the interaction force for V-AV separations  $d > d_E$  by Eq. (5.21) and proposed an approximate analytical expression for the V-AV interaction force at these separations, given by Eq. (5.23), which is valid for any value of  $\mu$ .

The fitting functions for the V-V, V-GV and V-AV force given in this work will be useful, for instance, for the study of bulk and mesoscopic systems consisting of many vortices using molecular dynamics techniques. We nevertheless remark that, although deformations are taken into account in the interaction force between two vortices in this work, the deformations in a many vortices system are expected to be more complex. Hence, the molecular dynamics study of many vortices, even with the improved expressions for the interaction force provided in this paper, is still an approximate description of the system. As a method, the derivation and handling of the differential equations describing the interaction between vortices presented in this work can be further adapted to describe such interactions in e. g. two-band superconductors, or hybrid systems comprising different superconducting materials.

Indeed, we adapted our method for the study of V-V interactions in two band superconductors. We demonstrate how to use the vortex asymptotics to determine the effective penetration depth, coherence lenght and, consequently, the effective Ginzburg-Landau parameter  $\kappa^*$  for the Cooper-pair condensates in two band superconductors. These effective parameters allow one to directly predict the vortex-vortex interaction behavior in the long-range, whereas the short-range behavior is predicted by the sign of the surface energy for an interface between normal and superconducting states. This analysis allows an easy estimation of the magnetic behavior of the two band superconductors already known, such as MgB<sub>2</sub> and pnictides, and will be also useful for future studies on nanoscale superconductors, hybrids and artificial two component materials.

# 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).

## Erratum: Simplified model for the energy levels of quantum rings in single layer and bilayer graphene [Phys. Rev. B 81, 045431 (2010)]

M. Zarenia, J. Milton Pereira, A. Chaves, F. M. Peeters, and G. A. Farias (Received 16 July 2010; published 29 September 2010)

DOI: 10.1103/PhysRevB.82.119906

PACS number(s): 71.10.Pm, 73.21.-b, 81.05.U-, 99.10.Cd

The freezing of the radial motion was included in the calculations by means of the substitution  $\frac{\partial}{\partial \rho} \rightarrow 0$  in the Hamiltonians (1) and (16) for single layer and bilayer graphene, respectively, which resulted in the non-Hermitian Hamiltonians (4) and (18). Solving these non-Hermitian Hamiltonians resulted in unphysical non-real values for the energy levels around E=0. Similar erroneous substitutions were made in e.g. Ref. 1. It was shown in Ref. 2 that the radial part of the angular momentum must be taken zero  $\mathbf{p}_{a}$  $=-i\hbar(\frac{\partial}{\partial \rho}+\frac{1}{2\rho})=0$  in order to guarantee Hermitian Hamiltonians. Because  $\rho = R$  is fixed for a 1D ring we should have substituted  $\frac{\partial}{\partial \rho} \rightarrow -1/2R$  which leads now to Hermitian Hamiltonians and real eigenvalues. Any comments in the paper on imaginary energy are erroneous. Due to this small change many of the formulae and figures have to be modified.

On the left side of Eqs. (4), replace both  $(m+1+\beta)$  and  $(m+\beta)$  by  $(m+\beta+1/2)$  and then Eq. (5) becomes  $\epsilon = \pm \sqrt{(m+\beta+1)(m+\beta)+\delta^2+1/4}$ . Eqs. (6) and (7) should be removed. Now the energy values are real and therefore the discussion below Eq. (7) starting from the second sentence should be removed. In Eqs. (11) and (13) replace  $\beta$  by  $\beta + 1/2$  and replace Eq. (14) by

$$\frac{j}{v_F} = \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \beta}\right)_K + \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \beta}\right)_{K'} + (\epsilon^2 + \delta^2) \left[\frac{2(m+\beta)+1]}{\epsilon(\epsilon^2 - \delta^2)}\right].$$

Replace the sentence below Eq. (14) by: "Since for the ground state energy  $m+\beta=-1/2$  where  $\partial \epsilon / \partial \beta=0$  the last term in Eq. (14) is zero and the total current oscillates around zero."

In the first paragraph in Sec. II B replace the following formula  $E = \pm \sqrt{m(m+1)(\hbar v_F/R)^2 + \Delta^2}$  by

$$E = \pm \sqrt{[(m+1/2)(\hbar v_F/R)]^2 + \Delta^2}.$$

Also remove the following part from this paragraph: "Note that for m=0 and m=-1 the energy  $E=\pm\Delta$  is independent of *R* and all branches are two-fold degenerate" and the discussion at the end of this paragraph should be corrected as: "For small radii,  $E \simeq \pm \hbar v_F |m+1/2|/R$  and all branches diverge as 1/R."

In the third paragraph in Sec. II B replace  $\epsilon^2 - [(m + \Phi/\Phi_0) + 1/2]^2 = \delta^2 - 1/4$  by  $\epsilon^2 - [(m + \Phi/\Phi_0) + 1/2]^2 = \delta^2$ ;  $\delta = \Delta/E_0 = 1/2$  by  $\delta = \Delta/E_0 = 0$  and  $\delta > 1/2$  by  $\delta > 0$ . Remove Fig. 4 and the last sentences at the end of this paragraph should be corrected as "The energy in this case is  $\epsilon = \pm \sqrt{\beta(\beta+1) + \delta^2 + 1/4}$  which for  $\delta = 0$  becomes  $\epsilon = \pm |\beta + 1/2|$ ."

In the fourth paragraph the formula  $\Delta \epsilon = 2\sqrt{\delta^2 - 1/4}$ should be replaced by  $\Delta \epsilon = 2\delta$ . The following part also should be removed from the end of paragraph: "Notice also that the m=-2 level only exists for  $\Delta \ge E_0/2$ , i.e. for  $\Delta < E_0/2$  there is no real energy solution when m=-2."

In the last paragraph in Sec. II B the explanation about Fig. 8 should be corrected by "Note that the contribution from the *K*-valley  $j_K$  [Fig. 8(a)] and the *K'*-valley  $j_{K'}$  [Fig. 8(b)] are the same and they oscillate in phase around zero." Replace Eq. (18) by

$$-(\epsilon - \tau u_1)\phi_A(R) - \left(m + \beta - \frac{1}{2}\right)\phi_B(R) + t'\phi_C(R) = 0,$$
$$\left(m + \beta - \frac{1}{2}\right)\phi_A(R) + (\epsilon - \tau u_1)\phi_B(R) = 0,$$
$$t'\phi_A(R) - (\epsilon - \tau u_2)\phi_C(R) + \left(m + \beta + \frac{1}{2}\right)\phi_D(R) = 0,$$
$$\left(m + \beta + \frac{1}{2}\right)\phi_C(R) - (\epsilon - \tau u_2)\phi_D(R) = 0,$$

and Eq. (19) by

$$\begin{split} (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\tau}\boldsymbol{u}_1)^2 \bigg[ (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\tau}\boldsymbol{u}_2)^2 - \left(\boldsymbol{m} + \boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\right)^2 \bigg] - \left(\boldsymbol{m} + \boldsymbol{\beta} - \frac{1}{2}\right)^2 \\ \times \bigg[ (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\tau}\boldsymbol{u}_2)^2 - \left(\boldsymbol{m} + \boldsymbol{\beta} + \frac{1}{2}\right)^2 \bigg] - (\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\tau}\boldsymbol{u}_1)(\boldsymbol{\epsilon} - \boldsymbol{\tau}\boldsymbol{u}_2)t'^2 \\ = 0, \end{split}$$

and Eq. (20) by



FIG. 1. (Color online) Energy levels with m=-10, ..., 10 of single layer graphene quantum ring as function of ring radius *R* for  $B_0=0$  T (left panel) and  $B_0=3$  T (right panel) when the mass term is  $\Delta=50$  meV.



FIG. 3. (Color online) Electron and hole energy levels of a single layer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for (a)  $\delta = 1/2$ , (b)  $\delta = 3/8$ , (c)  $\delta = 1/4$ , and (d)  $\delta = 0$  with R = 50 nm, and total angular quantum number  $-10 \leq m \leq -1$  (red curves),  $1 \leq m \leq 10$  (blue curves), and m = 0 (green curves).

$$\begin{split} s^4 &- 2s^2 [(m+\beta)^2 + \delta^2 + (t')^2/2 + 1/4] + 4s\tau \delta(m+\beta) + [(m+\beta)^2 - 1/4]^2 - 2\delta^2 [(m+\beta)^2 - (t')^2/2 + 1/4] + \delta^4 = 0, \end{split}$$

and Eq. (21) by



FIG. 5. (Color online) (a) Electron and hole energy levels of a single layer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for  $\delta=2$  and R=50 nm. (b) An enlargement of the region which is shown in (a) by a rectangle.



FIG. 6. (Color online) Lowest energy levels of a single layer graphene quantum ring as function of the mass term  $\Delta$  with  $B_0 = 0$  T (left panels) and  $B_0=1$  T (right panels) for  $m \ge 0$  (upper panels) and m < 0 (lower panels) with R=50 nm.



FIG. 7. (Color online) (a) Electron energy levels of a graphene single layer quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for the same parameters as used in Fig. 5. Black curve shows the ground-state energy. (b) Ground-state expectation value of  $L_z/\hbar$  as function of magnetic field for both *K* (black dashed curve) and *K'* valleys (black dash-dotted curve). Expectation value of  $S_z/\hbar$  versus magnetic field is plotted in the upper inset for *K* valley and in the lower inset for *K'* valley. The blue solid curve shows the expectation value  $\langle J_z \rangle$  which is the same for both valleys.


FIG. 8. (Color online) The angular current density in the (a) K valley and (b) K' valley of a monolayer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for the ground-state energy shown by the black curve in Fig. 7(a).

$$s_{\pm}^{2} = (m + \beta)^{2} + (t')^{2}/2 + 1/4 \pm \sqrt{(t')^{4}/4 + (m + \beta)^{2}[(t')^{2} + 1/2] + (t')^{2}/4}.$$

After Eq. (21) the following part should be removed: "These are real when  $|m+\beta| \ge 1$ . In the opposite case of  $|m+\beta| < 1$  (or equivalently  $-1+\beta \le m \le 1-\beta$ ) we have  $s_{\perp}^2 \le 0$  and



FIG. 9. (Color online) Lowest energy levels of a bilayer graphene quantum ring as function of ring radius R with (a)  $B_0 = 0$  T and (b)  $B_0 = 5$  T for  $U_b = 100$  meV and total angular quantum number  $-10 \le m \le -1$  (red curves),  $1 \le m \le 10$  (blue curves), and m=0 (green curves). The insets are an enlargement of the small energy and small R region.



FIG. 13. (Color online) Lowest energy levels of a bilayer graphene quantum ring as function of the gate potential  $U_b$  when  $B_0=0$  T (left panels) and  $B_0=1$  T (right panels) for  $m \ge 0$  (upper panels) and m < 0 (lower panels) with R=50 nm.



FIG. 14. (Color online) (a) Electron energy levels of a bilayer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for a quantum ring of radius R=50 nm and with  $U_b=100$  meV for both the *K* valley (solid curves) and the *K'* valley (dashed curves). Black curve shows the ground-state energy of the energy spectrum in the *K* valley whereas the gray curve the corresponding ground-state energy of the *K'* valley. (b) Ground-state expectation values of  $L_z/\hbar$ ,  $S_z/\hbar$ , and  $\tau_z/\hbar$  as function of magnetic field in the *K* valley. The blue solid curve shows the expectation value of  $J_z/\hbar$  operator. (c) The same as (b) but for the *K'* valley.



FIG. 15. (Color online) The ground-state angular current density in the (a) K valley and (b) K' valley of a bilayer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  with  $U_b=100$  meV and R=50 nm.

consequently the corresponding energies are imaginary." Replace the formula  $s_{-}^{2}=(m+\beta)^{2}[(m+\beta)^{2}-1]/(t')^{2}$  by  $s_{-}^{2}=[(m+\beta)^{2}-1/4]^{2}/[(t')^{2}+1/2]$  and also replace Eq. (22) by

$$s \simeq \pm [(m+\beta)^2 - 1/4]/\sqrt{(t')^2 + 1/2}.$$

Replace Eq. (28) by

 $\phi$ 

$$\phi_A(R) = 1, \quad \phi_B(R) = -\frac{m+\beta-1/2}{\epsilon-\tau u_1},$$
  
$$\phi_C(R) = \frac{(\epsilon-\tau u_1)^2 - (m+\beta-1/2)^2}{t'(\epsilon-\tau u_1)},$$
  
$$p_D(R) = \frac{(m+\beta+1/2)[(\epsilon-\tau u_1)^2 - (m+\beta-1/2)^2]}{t'(\epsilon-\tau u_1)(\epsilon-\tau u_2)}$$

and Eq. (30) should be corrected as

$$j = \sum_{\tau = \pm 1} \frac{2v_F}{\epsilon - \tau u_1} \times \left[ (m + \beta - 1/2) + \frac{(m + \beta + 1/2)[(\epsilon - \tau u_1)^2 - (m + \beta - 1/2)^2]}{t'^2(\epsilon - \tau u_1)(\epsilon - \tau u_2)} \right].$$

In the first paragraph in Sec. III B the explanation for Fig. 9 should be corrected as follows: "As compared to the single layer quantum ring results of Fig. 1, we find that we have a second set of levels that for large *R* are displaced in energy by *t*." Replace the formula  $(m+\beta)^2[(m+\beta)^2-1]$  by  $[(m+\beta)^2-1/4]^2$  and remove these sentences: "For m=-1,0,1 the behavior of the spectrum is different and the corresponding energy levels do not diverge when  $R \rightarrow 0$ . The same behavior was found for the single layer results, but only for m=0,-1."

In the second paragraph of Sec. III B replace E(0) = E(1) = E(-1) by  $E(0) \approx E(1) \approx E(-1)$  and remove the following part: "Notice that here we found that for m=-1 and m=-2 no real energy solution is found for  $U_b$  below some critical value."

In Sec. IV replace the relation  $\Delta > \hbar v_F/2R$  by  $\Delta > 0$ .

Now by solving the Hermitian Hamiltonian for single layer graphene quantum rings all the values of the energy levels are uniformly shifted by  $|\Delta - \sqrt{\Delta^2 - (1/4)E_0^2}|$ . Therefore for the parameters in Fig. 2 the values of the energy levels are shifted by 0.43 meV while in Fig. 5 the energy levels are shifted by 0.8359 meV. In Fig. 5(b) replace  $E = \sqrt{\Delta^2 - (1/4)E_0^2}$  by  $E = \Delta$  (yellow points) and replace  $E = \Delta$ by  $E = \sqrt{\Delta^2 + (1/4)E_0^2}$  (orange points).

The shift in the energy levels of the bilayer graphene quantum rings is too small (i.e. of order 0.1 meV) and thus, Figs. 10, 11, and 12 remain unchanged.

Figures 8(c) and 15(c) are unchanged and are not repeated here.

The authors are grateful to B. Trauzettel for pointing out the non-Hermiticity of the Hamiltonian.

- <sup>1</sup>A. G. Aronov and Y. B. Lyanda-Geller, Phys. Rev. Lett. **70**, 343 (1993).
- <sup>2</sup>F. E. Meijer, A. F. Morpurgo, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 033107 (2002).

# Simplified model for the energy levels of quantum rings in single layer and bilayer graphene

M. Zarenia,<sup>1</sup> J. Milton Pereira,<sup>2</sup> A. Chaves,<sup>2</sup> F. M. Peeters,<sup>1,2,\*</sup> and G. A. Farias<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departement Fysica, Universiteit Antwerpen, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerpen, Belgium

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60455-760 Fortaleza, CE, Brazil

(Received 9 October 2009; revised manuscript received 4 January 2010; published 29 January 2010)

Within a minimal model, we present analytical expressions for the eigenstates and eigenvalues of carriers confined in quantum rings in monolayer and bilayer graphene. The calculations were performed in the context of the continuum model by solving the Dirac equation for a zero width ring geometry, i.e., by freezing out the carrier radial motion. We include the effect of an external magnetic field and show the appearance of Aharonov-Bohm oscillations and of a nonzero gap in the spectrum. Our minimal model gives insight on the energy spectrum of graphene-based quantum rings and models different aspects of finite width rings.

DOI: 10.1103/PhysRevB.81.045431

PACS number(s): 71.10.Pm, 73.21.-b, 81.05.U-

# I. INTRODUCTION

The investigation of low-dimensional solid-state devices has allowed the direct observation of quantum behavior in electron systems. These effects arise due to the confinement of carriers in structures that constrain their movement along one or more directions such as quantum wells, quantum wires, and quantum dots. One important class of such lowdimensional systems are quantum rings, in which a particular type of confinement together with phase coherence of the electron wave function allows the observation of effects such as the Aharonov-Bohm<sup>1</sup> and Aharonov-Casher<sup>2</sup> effects. Quantum rings have been extensively studied in semiconductor systems, both experimentally and theoretically,<sup>3</sup> and are expected to find application in microelectronics as well as in future quantum information devices.

In this paper we present analytical results for the eigenstates and energy levels of ideal quantum rings created with graphene and bilayer graphene. Graphene is an atomic layer of crystal carbon which has been the target of intense scrutiny since it has been experimentally produced.<sup>4–7</sup> Part of this interest stems from the unusual properties of carriers in graphene caused by the gapless and approximately linear carrier spectrum together with possible technological applications such as transistors, gas sensors, and transparent conducting materials in, e.g., photovoltaics. Additionally, it has been found that two coupled graphene sheets, also known as bilayer graphene, display properties that are distinct from single layer graphene as well as from graphite. The carrier spectrum of bilayer graphene is gapless and approximately parabolic at the vicinity of two points in the Brillouin zone.<sup>8,9</sup> In particular, the spectrum is strongly influenced by an external electric field perpendicular to the bilayer leading to the appearance of a gap.<sup>10</sup> The high quality of the single layer and bilayer graphene samples that have been obtained, together with the large mean free path of carriers, suggests that phase coherence effects may be observable in these systems. Recently, graphene-based quantum rings produced by lithographic techniques have been investigated on single layer graphene.<sup>11,12</sup> These systems have been studied theoretically by means of a tight-binding model, which does not provide straightforward analytical solutions for the eigen-states and eigenvalues.<sup>13–17</sup> For bilayer graphene also it was recently shown<sup>18</sup> that it is possible to electrostatically confine quantum rings with a finite width. The energy spectrum was obtained by solving the Dirac equation numerically.

In this paper we present a toy model that allows for analytical expressions for the energy levels of quantum rings in single layer and bilayer graphene. This model permits the description of several aspects of the physics of graphene quantum rings without the additional complications of edge effects and finite width of the quantum ring. We are able to obtain analytical expressions for the energy spectrum and the corresponding wave functions, the persistent current, and the orbital momentum as function of ring radius, total momentum, and magnetic field, which can be related to the numerical results obtained by other methods.

The paper is organized as follows: in Sec. II we present the theoretical model and numerical results for quantum rings in single layer graphene. Similar results for bilayer graphene are given in Sec. III. Section IV contains a summary of the main results and the conclusions.

#### **II. SINGLE LAYER GRAPHENE**

#### A. Model

The dynamics of carriers in the honeycomb lattice of covalent-bond carbon atoms of single layer graphene can be described by the Dirac Hamiltonian (valid for E < 0.8 eV). In the presence of a uniform magnetic field  $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$  perpendicular to the plane and finite mass term  $\Delta$ , which might be caused by an interaction with the underlying substrate.<sup>10,19</sup> The Hamiltonian in the valley isotropic form is given by<sup>13</sup>

$$H = v_F(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \tau \Delta \sigma_z, \tag{1}$$

where  $\tau$ =+1 corresponds to the *K* point and  $\tau$ =-1 to the *K'* point. **p** is the in-plane momentum operator, **A** is the vector potential,  $v_F \approx 1.0 \times 10^6$  m/s is the Fermi velocity, and  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  is the pseudospin operator with components given by Pauli matrices. The eigenstates of Eq. (1) are two-component spinors which, in polar coordinates, are given by

$$\Psi(\rho,\phi) = \begin{pmatrix} \phi_A(\rho)e^{im\phi} \\ i\phi_B(\rho)e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix},$$
(2)

where *m* is the angular momentum label. We follow the earlier very successful approach<sup>20,21</sup> of ideal one-dimensional

(1D) quantum rings in semiconductors with spin-orbit interaction where the Schrödinger equation was simplified by discarding the radial variation of the electron wave function. Thus, in the case of an ideal ring with radius R, the momentum of the carriers in the radial direction is zero. We treat the radial parts of the spinors in Eq. (2) as a constant,

$$\Psi(R,\phi) = \begin{pmatrix} \phi_A(R)e^{im\phi} \\ i\phi_B(R)e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix}.$$
 (3)

Because the radial motion is frozen in our model there will be no radial current and the persistent current will be purely in the angular direction. By solving  $H\Psi(R, \phi) = E\Psi(R, \phi)$ and using the symmetric gauge  $\mathbf{A} = (0, B_0 \rho/2, 0)$ , we obtain

$$(m+1+\beta)\phi_B(R) = (\epsilon - \tau\delta)\phi_A(R),$$
  
$$(m+\beta)\phi_A(R) = (\epsilon + \tau\delta)\phi_B(R), \qquad (4)$$

where the energy and mass terms are written in dimensionless units as  $\epsilon = E/E_0$ ,  $\delta = \Delta/E_0$ , with  $E_0 = \hbar v_F/R$ . The parameter  $\beta = (eB_0/2\hbar)R^2$  can be expressed as  $\beta = \Phi/\Phi_0$  with  $\Phi = \pi R^2 B_0$  being the magnetic flux threading the ring and  $\Phi_0 = h/e$  the quantum of magnetic flux. The homogeneous set of equations (4) is solvable for the energies

$$\boldsymbol{\epsilon} = \pm \sqrt{(m+\beta+1)(m+\beta)} + \delta^2. \tag{5}$$

This energy can also be written as

$$\epsilon = \pm \sqrt{(m - m_{-})(m - m_{+})}, \qquad (6)$$

where

$$m_{\pm} = -\left(\beta + \frac{1}{2}\right) \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \delta^2}.$$
 (7)

Note that the energy spectrum for an ideal single layer quantum ring for both *K* and *K'* points are the same. For  $|\delta| > 1/2$  we have that  $m_+=m_-^*$  is complex and  $\epsilon$  is real for any value of  $\beta$ . In the region  $-\frac{1}{2} < \delta < \frac{1}{2}$  the energy is real, except for  $m_- < m < m_+$ , when the energy is complex. For the gapless case, i.e.,  $\delta=0$ , we have  $m_+=-\beta$  and  $m_-=-\beta-1$  and the energy is real when  $m < -\beta - 1$  or when  $m > -\beta$  and imaginary otherwise.

The wave functions are eigenfunctions of the total angular momentum operator given by the sum of orbital angular momentum  $L_z$  and a term describing the pseudospin  $S_z$ ,

$$J_z = L_z + \hbar S_z, \tag{8}$$

where  $S_z = (1/2)\sigma_z$ , with  $\sigma_z$  being one of the Pauli matrices and the eigenvalues of  $J_z$  operator become  $[m+(1/2)]\hbar$ .

The current is obtained using  $j_{x,y}=v_F[\psi^{\dagger}\sigma_{x,y}\psi]$ . The total angular current  $j=v_F[\psi^{\dagger}\sigma_{\phi}\psi]$  can be calculated using the fact that  $\sigma_{\phi}=\xi(\phi)\sigma_{y}$ , where

$$\xi(\phi) = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} & 0\\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}.$$
 (9)

The current for the electrons in the K valley becomes



FIG. 1. (Color online) Energy levels with m=-10, ..., 10 of single layer graphene quantum ring as function of ring radius R for  $B_0=0$  T (left panel) and  $B_0=3$  T (right panel) when the mass term is  $\Delta=50$  meV.

$$j_K = v_F(\phi_A^* \phi_B + \phi_B^* \phi_A). \tag{10}$$

The total current is then given by  $j=j_K+j_{K'}$ . The radial parts of the two spinor components are

$$\phi_A(R) = 1, \quad \phi_B(R) = \frac{m+\beta}{\epsilon+\tau\delta}.$$
 (11)

Notice that the radial current can be calculated using  $j_r = v_F[\psi^{\dagger}\xi(\phi)\sigma_x\psi]$ , which leads to the following relation:

$$j_r = iv_F(\phi_A^*\phi_B - \phi_B^*\phi_A), \qquad (12)$$

where in the case of our ideal ring we have  $j_r=0$ . From Eqs. (10) and (11), one can find the following expression for the total angular current of a single layer quantum ring:

$$j = \frac{4v_F \epsilon (m+\beta)}{\epsilon^2 - \delta^2}.$$
 (13)

One can rewrite Eq. (13) in the following form:

$$\frac{j}{v_F} = \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \beta}\right)_K + \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \beta}\right)_{K'} + \frac{2(m+\beta)(\epsilon^2 + \delta^2) - (\epsilon^2 - \delta^2)}{\epsilon(\epsilon^2 - \delta^2)}.$$
(14)

Since for the ground-state energy  $\sqrt{\delta^2 - 1/4} \le \epsilon \le \delta$  and  $-1/2 \le m + \beta \le 0$  the last term in Eq. (13) is much smaller than the derivatives of the energy with respect to the flux ( $\Phi$ ) and oscillates around zero. Note that in 1D semiconductor rings the current is exactly given by  $\partial E/\partial \Phi$ , which is thus different from graphene where we have approximately

$$\frac{j}{v_F} \simeq \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \beta}\right)_K + \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \beta}\right)_{K'} \tag{15}$$

with  $\beta = \Phi / \Phi_0$ .

# **B.** Results

The energies as function of ring radius *R* are shown in Fig. 1, for  $\Delta = 50$  meV, with  $-10 \le m \le -1$  (magenta curves),  $1 \le m \le 10$  (blue curves), and m=0 (green curves). In the



FIG. 2. (Color online) Energy levels of a single layer graphene quantum ring as function of the quantum number *m* for  $B_0 = -5, 0, 5$  T with  $\Delta = 50$  meV and R = 50 nm.

absence of an external magnetic field, the energy is given by  $E = \pm \sqrt{m(m+1)}(\hbar v_F/R)^2 + \Delta^2$  and the energy branches have a 1/R dependence and approach  $E \to \pm \Delta$  for very large radii. Note that for m=0 and m=-1 the energy  $E=\pm \Delta$  is independent of R and all branches are twofold degenerate. For nonzero magnetic field (B=3 T), the right panel shows that the branches have an approximately linear dependence on the ring radius for large R; in particular we have E $\simeq \pm \sqrt{(\alpha R)^2 + \Delta^2}$ , with  $\alpha = v_F e B_0/2$ . For small radii, E $\simeq \pm \hbar \sqrt{m(m+1)}/R$  and all branches diverge as 1/R except for m=0 and m=-1. In those cases when  $R \to 0$  we have for m=0 the result  $E=\pm \sqrt{\Delta^2 + \alpha \hbar v_F}$ , while m=-1 gives E $= \pm \sqrt{\Delta^2 - \alpha \hbar v_F}$ .

Figure 2 presents results for the energy as function of total angular momentum index *m*, for  $\Delta = 50$  meV, R = 50 nm, and for three different values of magnetic field, namely,  $B_0 = -5$  T (diamonds),  $B_0 = 0$  T (circles), and  $B_0 = 5$  T (triangles). Notice that for a given  $B_0$  the electron energy obtains a minimum for a particular *m*, i.e., for  $B_0 = 0(5$  T, -5 T) it is m = 0(9, -10). In fact it is given by  $m = -(\Phi/\Phi_0 + 1/2)$  and is independent of  $\Delta$ .

The energy levels as function of the external magnetic field are shown in Fig. 3 for a quantum ring with (a)  $\delta$ =1/2, (b)  $\delta$ =3/8, (c)  $\delta$ =1/4, and (d)  $\delta$ =0 with R=50 nm for  $-10 \le m \le -1$  (red curves),  $1 \le m \le 10$  (blue curves), and m=0 (green curves). The magnetic-field dependence of the spectrum becomes evident if one rewrites Eq. (5) as  $\epsilon^2$  $-[(m+\Phi/\Phi_0)+1/2]^2 = \delta^2 - 1/4$ . Thus, for the special case of  $\delta = \Delta / E_0 = 1/2$  the gap is zero and the energy levels are straight lines given by  $\epsilon = \pm (m + 1/2 + \Phi/\Phi_0)$ . The energy spectra for  $\delta > 1/2$  resemble those found earlier by Recher et al.<sup>13</sup> in the case of a finite width graphene ring with infinite mass boundary conditions. An enlargement of Fig. 3 around E=0 is shown in Fig. 4. The spectrum has an interesting magnetic-field dependence with decreasing  $\delta$ . For  $\delta$ =0 the double degeneracy is restored at E=0. This behavior can be easily illustrated by considering m=0. The energy in



FIG. 3. (Color online) Electron and hole energy levels of a single layer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for (a)  $\delta = 1/2$ , (b)  $\delta = 3/8$ , (c)  $\delta = 1/4$ , and (d)  $\delta = 0$  with R = 50 nm, and total angular quantum number  $-10 \le m \le -1$  (red curves),  $1 \le m \le 10$  (blue curves), and m = 0 (green curves).

this case is  $\epsilon = \pm \sqrt{\beta(\beta+1) + \delta^2}$ , which for  $\frac{\delta=1/2}{\delta}$  becomes  $\epsilon = \pm (\beta+1/2)$  while for  $\delta=0$  it is  $\epsilon = \pm \sqrt{\beta(\beta+1)}$  and thus  $\epsilon \simeq \pm \sqrt{\beta}$  for  $\beta \simeq 0$ .

In Fig. 5(a) the energy spectrum is plotted vs magnetic field for  $\delta = 2$  where the energy has a hyperbolic dependence



FIG. 4. (Color online) The same as Fig. 3 for m=-1 (red curves), m=1 (blue curves), and m=0 (green curves) and different values of dimensionless mass term  $\delta$ .



FIG. 5. (Color online) (a) Electron and hole energy levels of a single layer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for  $\delta=2$  and R=50 nm. (b) An enlargement of the region which is shown in (a) by a rectangle.

on the applied magnetic field with minima at  $\Phi/\Phi_0 = -m - 1/2$  and a gap of  $\Delta \epsilon = 2\sqrt{\delta^2 - 1/4}$ . The exact location of the transitions (orange dots) and the location of the minima points (yellow dots) in the energy spectrum are clarified in Fig. 5(b). The dependence of the energy levels on the gap parameter  $\Delta$  is shown in Fig. 6 for zero magnetic field (left panels) and  $B_0=1$  T (right panels) when  $m \ge 0$  (upper panels) and m < 0 (lower panels). For  $B_0=0$  T the energy levels are twofold degenerate where E(m)=-E(-m-1). When a magnetic field is applied an energy gap is opened (see rightbottom panel in Fig. 6). Notice also that the m=-2 level only exists for  $\Delta \ge E_0/2$ ; i.e., for  $\Delta \le E_0/2$  there is no real energy solution when m=-2.

The corresponding ground-state expectation values for the operators in Eq. (8) are plotted as function of the magnetic field in Fig. 7(b) for both *K* (black dashed curve) and *K'* valley (black dash-dotted curve). Notice that for the *K* valley  $\langle L_z \rangle \simeq m\hbar$  and  $\langle S_z \rangle \simeq \hbar/2$ , whereas in the *K'* valley  $\langle L_z \rangle \simeq (m+1)\hbar$  and  $\langle S_z \rangle \simeq -\hbar/2$ . Thus, for both the *K* valley and the *K'* valley  $\langle J_z \rangle \simeq [m+(1/2)]\hbar$ , which is approximately quantized and on the average its value decreases linearly with the applied magnetic field.

The angular current density for a single layer graphene quantum ring is shown in Fig. 8(c). Note that the contributions from the *K*-valley  $j_K$  [Fig. 8(a)] and the *K'*-valley  $j_{K'}$  [Fig. 8(b)] are not the same; they have opposite signs and oscillate in phase around a nonzero average value  $-\tau v_F/4$ . The reason is that if for a given energy we have electrons in the *K* valley, the corresponding particles in the *K'* valley will behave as holes. The persistent current is a sawtooth shaped oscillating function of the magnetic field with period  $\Delta B_0 = \Phi_0/\pi R^2$ . This behavior is quantitatively very similar to those found for the standard Aharanov-Bohm oscillations in metallic and semiconductor quantum rings.



FIG. 6. (Color online) Lowest energy levels of a single layer graphene quantum ring as function of the mass term  $\Delta$  with  $B_0 = 0$  T (left panels) and  $B_0=1$  T (right panels) for  $m \ge 0$  (upper panels) and m < 0 (lower panels) with R=50 nm.

#### **III. BILAYER GRAPHENE**

#### A. Model

In the case of bilayer graphene the Hamiltonian in the vicinity of the K point is given by<sup>10</sup>

$$H = \begin{pmatrix} \tau U_1 & \pi & t & 0 \\ \pi^{\dagger} & \tau U_1 & 0 & 0 \\ t & 0 & \tau U_2 & \pi^{\dagger} \\ 0 & 0 & \pi & \tau U_2 \end{pmatrix},$$
(16)

where  $\tau = \pm 1$  distinguishes the two *K* and *K'* valleys.  $t \simeq 400 \text{ meV}$  is the interlayer coupling term,  $\pi = v_F[(p_x + eA_x) + i(p_y + eA_y)]$ , and  $U_1$  and  $U_2$  are the potentials, respectively, at the two graphene layers. Here we do not include any mass term because the gate potential across the bilayer is able to open an energy gap in the spectrum.<sup>10</sup> The eigenstates of Hamiltonian (16) are four-component spinors  $\Psi(r, \phi) = [\phi_A(\rho)e^{im\phi}, i\phi_B(\rho)e^{i(m-1)\phi}, \phi_C(\rho)e^{im\phi}, i\phi_D(\rho)e^{i(m+1)\phi}]^T$  (see Ref. 22). Following our earlier approach for an ideal ring with radius *R*, the wave function becomes

$$\Psi = \begin{pmatrix} \phi_A(R)e^{im\phi} \\ i\phi_B(R)e^{i(m-1)\phi} \\ \phi_C(R)e^{im\phi} \\ i\phi_D(R)e^{i(m+1)\phi} \end{pmatrix}.$$
 (17)

We use the symmetric gauge and obtain the following set of coupled algebraic equations:

$$-(\epsilon - \tau u_1)\phi_A(R) - (m + \beta - 1)\phi_B(R) + t'\phi_C(R) = 0,$$



FIG. 7. (Color online) (a) Electron energy levels of a graphene single layer quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for the same parameters as used in Fig. 5. Black curve shows the ground-state energy. (b) Ground-state expectation value of  $L_z/\hbar$  as function of magnetic field for both *K* (black dashed curve) and *K'* valleys (black dash-dotted curve). Expectation value of  $S_z/\hbar$  versus magnetic field is plotted in the upper inset for *K* valley and in the lower inset for *K'* valley. The blue solid curve shows the expectation value  $\langle J_z \rangle$  which is the same for both valleys.

$$(m+\beta)\phi_A(R) + (\epsilon - \tau u_1)\phi_B(R) = 0,$$
  
$$t'\phi_A(R) - (\epsilon - \tau u_2)\phi_C(R) + (m+\beta+1)\phi_D(R) = 0,$$
  
$$(m+\beta)\phi_C(R) - (\epsilon - \tau u_2)\phi_D(R) = 0,$$
 (18)

where  $t' = t/E_0$  and  $u_{1,2} = U_{1,2}/E_0$  are in dimensionless units. After some straightforward algebra we obtain the following polynomial equation that determines the energy spectrum:

$$(\epsilon - \tau u_1)^2 [(\epsilon - \tau u_2)^2 - (m + \beta)(m + \beta + 1)] - (m + \beta)(m + \beta - 1)[(\epsilon - \tau u_2)^2 - (m + \beta)(m + \beta + 1)] - (\epsilon - \tau u_1)(\epsilon - \tau u_2)t'^2 = 0.$$
(19)

After introducing the average potential  $u=(u_1+u_2)/2$  and half the potential difference  $\delta=(u_1-u_2)/2$  we can rewrite this quartic algebraic equation in a more comprehensive form:

$$s^{4} - 2s^{2}[(m + \beta)^{2} + \delta^{2} + (t')^{2}/2] + 4s\tau\delta(m + \beta) + (m + \beta)^{2}[(m + \beta)^{2} - 1] - 2\delta^{2}[(m + \beta)^{2} - (t')^{2}/2] + \delta^{4} = 0,$$
(20)

where  $s = \epsilon - \tau u$  is the energy shifted by the average potential. In the next section we report the results for the case of



FIG. 8. (Color online) The angular current density in the (a) K valley, (b) K' valley, and (c) the total current density of a monolayer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for the ground-state energy shown by the black curve in Fig. 7(a).

 $U_1 = -U_2 = U_b$  where the average potential *u* is zero. In the limit  $\delta \rightarrow 0$ , the quartic equation is reduced to a quadratic equation in  $s^2$  and we obtain the real solutions

$$s_{\pm}^{2} = (m+\beta)^{2} + (t')^{2}/2 \pm \sqrt{(t')^{4}/4} + (m+\beta)^{2}(1+t')^{2},$$
(21)

which results in four solutions for the energy. These are real when  $|m+\beta| \ge 1$ . In the opposite case of  $|m+\beta| < 1$  (or equivalently  $-1+\beta < m < 1-\beta$ ) we have  $s_{-}^{2} < 0$  and consequently the corresponding energies are imaginary. In the limit of  $t' \ge m+\beta$  we obtain  $s_{-}^{2} = (m+\beta)^{2}[(m+\beta)^{2}-1]/(t')^{2}$ and thus the low energy solutions are given by

$$s \simeq \pm \frac{1}{t'} \sqrt{(m+\beta)^2 [(m+\beta)^2 - 1]}.$$
 (22)

For bilayer graphene, the wave functions are eigenfunctions of the following operator:

$$J_z = L_z + \hbar \tau_z + \hbar S_z, \tag{23}$$

where now

$$\tau_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\mathbf{I} & 0\\ 0 & \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sigma_z & 0\\ 0 & -\sigma_z \end{pmatrix}$$
(24)

are  $4 \times 4$  matrices.

In bilayer graphene the components of the current density are given by

$$j_{x} = v_{F} \left[ \psi^{\dagger} \begin{pmatrix} \sigma_{x} & 0 \\ 0 & \sigma_{x} \end{pmatrix} \psi \right], \quad j_{y} = v_{F} \left[ \psi^{\dagger} \begin{pmatrix} -\sigma_{y} & 0 \\ 0 & \sigma_{y} \end{pmatrix} \psi \right].$$
(25)

The angular current can be calculated from the following relation:

$$j = v_F \left[ \psi^{\dagger} \begin{pmatrix} \sigma_y^* \xi(\phi) & 0\\ 0 & \xi(\phi) \sigma_y \end{pmatrix} \psi \right],$$
(26)

where  $\xi(\phi)$  is given by Eq. (9). We obtain for the angular current in the *K* valley,

$$j_{K} = v_{F}(\phi_{C}^{*}\phi_{D} + \phi_{D}^{*}\phi_{C} - \phi_{A}^{*}\phi_{B} - \phi_{B}^{*}\phi_{A}), \qquad (27)$$

and the total angular current is given by  $j=j_K+j_{K'}$  where the four spinor components are

 $\phi_A(R) = 1,$ 

$$\phi_{B}(R) = -\frac{m+\beta}{\epsilon - \tau u_{1}},$$

$$\phi_{C}(R) = \frac{(\epsilon - \tau u_{1})^{2} - (m+\beta)(m+\beta-1)}{t'(\epsilon - \tau u_{1})},$$

$$\phi_{D}(R) = \frac{(m+\beta)[(\epsilon - \tau u_{1})^{2} - (m+\beta)(m+\beta-1)]}{t'(\epsilon - \tau u_{1})(\epsilon - \tau u_{2})}.$$
(28)

Note that the radial current can be calculated through

$$j_r = v_F \left[ \psi^{\dagger} \begin{pmatrix} \sigma_x \xi(\phi) & 0\\ 0 & \xi(\phi) \sigma_x \end{pmatrix} \psi \right], \quad (29)$$

where  $j_r = iv_F(\phi_A^*\phi_B - \phi_B^*\phi_A + \phi_C^*\phi_D - \phi_D^*\phi_C) = 0$  for the case of an ideal ring. Using Eq. (27), the total current density becomes

$$j = \sum_{\tau=\pm 1} \frac{2v_F(m+\beta)}{\epsilon - \tau u_1} \times \left[ 1 + \frac{\left[(\epsilon - \tau u_1)^2 - (m+\beta)(m+\beta-1)\right]^2}{t'^2(\epsilon - \tau u_1)(\epsilon - \tau u_2)} \right].$$
 (30)

#### **B.** Results

The dependence of the spectrum on the ring radius for  $B_0=0$  T (upper panel) and  $B_0=5$  T (lower panel) is shown in Fig. 9, for a gate potential  $U_b=100$  meV, which for B=0 T opens up a gap in the energy spectrum. As compared to the single layer quantum ring results of Fig. 1, we find two main differences: (i) for  $R \rightarrow 0$  there are two states inside the gap, and (ii) we have a second set of levels that for large Rare displaced in energy by t. In the limit  $R \rightarrow 0$  the most important term in the dispersion relation is  $(m+\beta)^2[(m+\beta)^2-1]$ . For m=-1,0,1 the behavior of the spectrum is different and the corresponding energy levels do not diverge when  $R \rightarrow 0$ . The same behavior was found for the single



FIG. 9. (Color online) Lowest energy levels of a bilayer graphene quantum ring as function of ring radius R with (a)  $B_0 = 0$  T and (b)  $B_0 = 5$  T for  $U_b = 100$  meV and total angular quantum number  $-10 \le m \le -1$  (red curves),  $1 \le m \le 10$  (blue curves), and m=0 (green curves). The insets are an enlargement of the small energy and small R region.

layer results, but only for m=0,-1. Previously, we found that for rings with finite width<sup>18</sup> the spectrum exhibits anticrossing points which arise due to the overlap of gateconfined and magnetically confined states. In the present model the carrier motion along the radial direction is neglected and consequently we have level crossings instead of anticrossing points in the spectrum. The dependence of the energy eigenstates on the angular momentum index m is displayed in Fig. 10 for  $U_b=100$  meV, R=50 nm, with  $B_0=$ -5 T (diamonds), 0 T (circles), and 5 T (triangles). Due to the finite bias in this case, the fourth-order character of the dispersion Eq. (19) causes the curves to exhibit a Mexican hat shape. The energy minima for  $B_0 = -5, 0, 5$  T are, respectively, given by m = -1, -10, -20. In Fig. 11 the energy levels are plotted as function of magnetic field for a quantum ring with  $U_h=100$  meV and R=50 nm, and for  $-10 \le m \le -1$ (red curves),  $1 \le m \le 10$  (blue curves), and m=0 (green curves). These results are very similar to those found for a finite width ring and exhibit two local minima that are separated by a saddle point. In the case of finite width quantum rings there are additional energy levels corresponding with states that are partly localized outside the ring. Figures 11(a) and 11(b) show the asymmetry between the electron and hole states caused by the bias. It is seen that the electron and hole



FIG. 10. (Color online) Lowest energy levels of a graphene bilayer quantum ring as function of total angular momentum label *m* for  $B_0$ =-5,0,5 T with  $U_b$ =100 meV and *R*=50 nm.

energies are related by  $E_h(m,B_0) = -E_e(-m,-B_0)$ , where the indices h(e) refer to holes (electrons). In the absence of bias, the electron-hole symmetry is restored, as shown in Fig. 12, for a ring with R=50 nm and the parabolic energy spectrum is recovered with zero energy gap.

In Fig. 13, the energy branches are plotted as function of the bias, for both the zero field case (left panels) and for  $B_0=1$  T (right panels), with  $m \ge 0$  (upper panels) and m



FIG. 11. (Color online) Electron and hole energy states of a graphene bilayer quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for  $U_b=100$  meV and R=50 nm. The energy levels are shown for the quantum numbers  $-10 \le m \le -1$  (red curves),  $1 \le m \le 10$  (blue curves), and m=0 (green curves).





FIG. 12. (Color online) The same as Fig. 11, but for  $U_b=0$  meV.

<0 (lower panels). Notice that the figures are quantitatively similar to those found previously for a quantum ring made of a single layer of graphene where the gate potential  $U_b$  has a similar effect as the mass term  $\Delta$ . The differences are that for  $B_0=0$  T the degeneracies are now: (i) E(0)=E(1)=E(-1) and (ii) E(m)=E(-m) for |m|>1. In the presence of the magnetic field a gap is opened even for  $U_b=0$  meV, which is more clearly illustrated in the inset of the right-bottom panel of Fig. 13. Notice that here we found that for m=-1 and m=-2 no real energy solution is found for  $U_b$  below some critical value.



FIG. 13. (Color online) Lowest energy levels of a bilayer graphene quantum ring as function of the gate potential  $U_b$  when  $B_0=0$  T (left panels) and  $B_0=1$  T (right panels) for  $m \ge 0$  (upper panels) and m < 0 (lower panels) with R=50 nm.



FIG. 14. (Color online) (a) Electron energy levels of a bilayer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  for a quantum ring of radius R=50 nm and with  $U_b=100$  meV for both the K valley (solid curves) and the K' valley (dashed curves). Black curve shows the ground-state energy of the energy spectrum in the K valley whereas the gray curve the corresponding ground-state energy of the K' valley. (b) Ground-state expectation values of  $L_z/\hbar$ ,  $S_z/\hbar$ , and  $\tau_z/\hbar$  as function of magnetic field in the K valley. The blue solid curve shows the expectation value of  $J_z/\hbar$  operator. (c) The same as (b) but for the K' valley.

Figures 14(b) and 14(c) show the ground-state expectation value of the angular momentum versus the magnetic field together with the quantum number *m* (blue solid curve) which is an eigenvalue of the total momentum operator  $J_z$ . Notice that the expectation value of  $J_z$ , i.e., *m*, is different in the *K* and *K'* valleys which was not the case for monolayer graphene. The energy levels for the *K* (solid red curves) and *K'* (dashed blue curves) valleys are depicted in Fig. 14(a). The black curve (gray curve) shows the ground-state energy for the *K* valley (*K'* valley). Notice that in the considered case we find that the difference between  $\langle J_z \rangle = m\hbar$  and  $\langle L_z \rangle$  is about  $(0.7-0.8)\hbar$  for both *K* and *K'* valleys.

The ground-state angular current of a bilayer graphene as function of magnetic field  $B_0$  in the *K*-valley  $j_K$ , the *K'*-valley  $j_{K'}$ , and the total angular current *j* is shown respectively in Figs. 15(a)–15(c). In the case of a bilayer graphene quantum ring, the energy levels in the vicinity of the *K* and *K'* points are different because of the valley splitting and consequently the total angular current versus magnetic field is a more complicated sawtooth function. Notice that the angular current for the *K* or *K'* valley is not zero at  $B_0=0$  which is due to the valley polarization whereas the total current is zero at  $B_0=0$ .

#### **IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS**

In summary we considered the behavior of carriers in single and bilayer graphene quantum rings within a toy



FIG. 15. (Color online) The ground-state angular current density in the (a) K valley, (b) K' valley, and (c) the total current density of a bilayer graphene quantum ring as function of external magnetic field  $B_0$  with  $U_b=100$  meV and R=50 nm.

model. Our approach leads to analytic expressions for the energy spectrum. In our simple model we are not faced with the disadvantages of the nature of edge effects which appears in quantum rings created by cutting the layer of graphene (or lithography defined quantum rings).

We found an interesting behavior in the presence of a perpendicular magnetic field, which has no analog in semiconductor-based quantum rings. In single layer graphene quantum rings only for  $\Delta > \hbar v_F/2R$  we found the opening of a gap in the energy spectrum between the electron and hole states. For both single layer and bilayer graphene quantum rings the eigenvalues are not invariant under a  $B_0$  $\rightarrow -B_0$  transformation and in the case of bilayer the spectra for a fixed total angular momentum index m, their field dependence is not parabolic, but exhibit two minima separated by a saddle point. The persistent current exhibits oscillations as function of the magnetic field with period  $\Phi_0/\pi R^2$  which are the well-known Aharonov-Bohm oscillations. Because of the valley splitting in the energy spectrum of bilayer graphene the total current density versus magnetic field is a more complicated sawtooth function.

#### **ACKNOWLEDGMENTS**

This work was supported by the Flemish Science Foundation (FWO-VI), the Belgian Science Policy (IAP), the Bilateral program between Flanders and Brazil, and the Brazilian Council for Research (CNPq). SIMPLIFIED MODEL FOR THE ENERGY LEVELS OF ...

\*francois.peeters@ua.ac.be

- <sup>1</sup>Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- <sup>2</sup>Y. Aharonov and A. Casher, Phys. Rev. Lett. 53, 319 (1984).
- <sup>3</sup>A. Fuhrer, S. Lüscher, T. Ihn, T. Heinzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, and M. Bichier, Nature (London) **413**, 822 (2001).
- <sup>4</sup>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).
- <sup>5</sup>Y. Zhang, Y. W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, Nature (London) **438**, 201 (2005).
- <sup>6</sup>V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, Phys. Rev. Lett. **95**, 146801 (2005).
- <sup>7</sup>K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Nature (London) **438**, 197 (2005).
- <sup>8</sup>B. Partoens and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **74**, 075404 (2006).
- <sup>9</sup>T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, Science **313**, 951 (2006).
- <sup>10</sup>E. McCann and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805 (2006).
- <sup>11</sup>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).

- <sup>12</sup>F. Molitor, M. Huefner, A. Jacobsen, A. Pioda, C. Stampfer, K. Ensslin, and T. Ihn, arXiv:0904.1364 (unpublished).
- <sup>13</sup>P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya. M. Blanter, C. W. J. Beenakker, and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B **76**, 235404 (2007).
- <sup>14</sup>J. Wurm, M. Wimmer, H. U. Baranger, and K. Richter, arXiv:0904.3182 (unpublished).
- <sup>15</sup>T. Luo, A. P. Iyengar, H. A. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. B 80, 165310 (2009).
- <sup>16</sup>A. Rycerz, Acta Phys. Pol. A **115**, 322 (2009).
- <sup>17</sup>D. A. Bahamon, A. L. C. Pereira, and P. A. Schulz, Phys. Rev. B 79, 125414 (2009).
- <sup>18</sup>M. Zarenia, J. M. Pereira, Jr., F. M. Peeters, and G. A. Farias, Nano Lett. **9**, 4088 (2009).
- <sup>19</sup>P. Recher, J. Nilsson, G. Burkard, and B. Trauzettel, Phys. Rev. B **79**, 085407 (2009).
- <sup>20</sup>F. E. Meijer, A. F. Morpurgo, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B 66, 033107 (2002).
- <sup>21</sup>B. Molnár, F. M. Peeters, and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B 69, 155335 (2004).
- <sup>22</sup>J. M. Pereira, Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Nano Lett. 7, 946 (2007).

Semicond. Sci. Technol. 25 (2010) 033002 (9pp)

# Klein tunneling in single and multiple barriers in graphene

# J M Pereira Jr<sup>1</sup>, F M Peeters<sup>1,2</sup>, A Chaves<sup>1</sup> and G A Farias<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, Ceará 60455-760, Brazil
 <sup>2</sup> Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerpen, Belgium

Received 30 September 2009, in final form 22 November 2009 Published 3 February 2010 Online at stacks.iop.org/SST/25/033002

# Abstract

We review the transmission properties of carriers interacting with potential barriers in graphene. The tunneling of electrons and holes in quantum structures in graphene is found to display features that are in marked contrast with those of other systems. In particular, the interaction between the carriers with electrostatic potential barriers can be related to the propagation of electromagnetic waves in media with negative refraction indices, also known as metamaterials. This behavior becomes evident as one calculates the time evolution of wavepackets propagating across the barrier interface. In addition, we discuss the effect of trigonal warping on the tunneling through potential barriers.

(Some figures in this article are in colour only in the electronic version)

# 1. Introduction

The transmission of a particle through a classically forbidden region can be regarded as a quintessential quantum phenomenon, in the sense that it cannot be explained in the framework of Newtonian mechanics. The existence of such transmission, known as quantum tunneling, highlights the wave-particle duality that is at the core of the quantum picture of nature. The name of the phenomenon itself illustrates the counterintuitive aspect of the transmission, which takes place as if a particle, with some probability, could create a 'tunnel' which enables it to traverse a potential barrier that is higher than its energy. Although tunneling contradicts the expectations based on classical particle dynamics, it has a counterpart in optics, in the phenomenon of evanescent wave coupling, in which an electromagnetic wave is transmitted through a region where the solution of the corresponding wave equation is exponentially decaying. Likewise, the tunneling of a particle can be said to arise due to the coupling of the propagating solutions of Schroedinger's equation at either side of the potential barrier with decaying solutions in the barrier region, leading to non-zero transmission probability.

The concept of tunneling was first applied by Gamow [1] and, independently, by Condon and Gurney [2], in 1928 to explain nuclear alpha decay. In that case, the particle was a

helium nucleus and the potential barrier is provided by the confining nuclear potential. The success of that explanation soon led to the realization that tunneling is a general quantum phenomenon, and since then it has been observed in a variety of systems. Tunneling has also been exploited in the development of electronic devices, such as in the tunnel diode [3] and the resonant tunneling diode [4, 5].

Shortly after the introduction of quantum mechanics, several researchers started a search for a relativistic covariant version of the theory. That search culminated with the work of Dirac [6] in 1928, which presented an equation that provided a Lorentz-invariant description of the electron. That led to several important discoveries, such as the prediction of antimatter. One striking consequence of the theory was recognized by Klein [7]: for large potential steps, the Dirac equation generates results for tunneling that strongly contrast with the predictions of the non-relativistic theory. In particular, for a certain range of energies, the transmission probability for a single square barrier could reach 100%. The reason for this unusually high transmission is found in the overlap between positive and negative energy states outside and inside the barriers. That surprising result has been known as Klein tunneling [8].

Although there has been extensive experimental verification of the tunneling probability predictions of





Figure 1. Energy spectrum of graphene.

non-relativistic quantum mechanics, the detection of Klein tunneling has faced difficulties caused by the very large fields required for its observation. That situation has recently changed, as a consequence of an important development in solid state physics, a field that is apparently quite distant from the realm of relativistic quantum mechanics. That development was the fabrication of single layers of graphite, also known as graphene [9, 10], which in turn has spurred an extraordinary level of interest on the investigation of the properties of massless fermions (see e.g. [11] and [12]).

Graphene consists of single layers of graphite. It is a honeycomb lattice of covalent-bond carbon atoms, which can be treated as two interpenetrating triangular sublattices, labeled A and B, and can be pictured as unrolled, single-wall carbon nanotubes. An accurate microscopic description of the carrier dynamics of graphene is given by the tight-binding model. In this case, the free electron in each lattice site can hop to its neighboring sites. If one considers only nearest-neighbor hopping, the Hamiltonian can be written as

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} t_1 \left( a_i^{\dagger} b_j + b_j^{\dagger} a_i \right), \tag{1}$$

where  $t_1 \approx 2.8$  eV is the nearest-neighbor hopping parameter and  $a_m^{\dagger}(a_m)$  creates (destroys) an electron state at an *m*-labeled site in sublattice A, whereas the *b* and  $b^{\dagger}$  operators do the same for sublattice B. The Hamiltonian (1) can be easily diagonalized to give [13]

$$E = \pm t_1 \sqrt{3 + f(\mathbf{k})},\tag{2}$$

 $f(\mathbf{k}) = 2\cos(k_y a\sqrt{3}) + 4\cos(k_x 3a/2)\cos(k_y a\sqrt{3}/2)$ , (3) with *a* the lattice parameter. This spectrum displays six cones with vertices that cross E = 0, of which only two are inequivalent, labeled K and K' in figure 1. Their positions in the reciprocal space are

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right), \qquad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}\right). \tag{4}$$

Thus, in the vicinity of  $\mathbf{K}$  one can translate the momentum values as

$$k_x = k'_x - 2\pi/3a, \qquad k_y = k'_y - 2\pi/3\sqrt{3}a.$$
 (5)

By expanding the structure factor for the hexagonal lattice in the vicinity of the cones, and by retaining the first-order terms, the Hamiltonian in the vicinity of  $\mathbf{K}$  becomes

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F(k'_x - \mathbf{i}k'_y) \\ v_F(k'_x + \mathbf{i}k'_y) & 0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

where  $\hbar v_F \equiv 3at_1/2$ , and  $v_F$  gives the Fermi velocity of the electrons. The low-energy band structure of graphene is therefore gapless and the corresponding electronic states are found near the two cones located at inequivalent corners of the Brillouin zone. Thus, the low-energy carrier dynamics in the vicinity of the two cones is equivalent to that of a twodimensional (2D) gas of massless charged fermions, which is governed by the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = v_F(\sigma_x \tau_z p_x + \sigma_y p_y), \tag{7}$$

where  $\hat{\mathbf{p}} = (p_x, p_y)$  is the momentum operator,  $v_F$  is the effective speed of light of the system, which in this case corresponds to  $v_F \approx 1 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}$ , and  $\vec{\sigma}$  and  $\vec{\tau}$  are Pauli matrices describing the probability amplitudes for the states at each sublattice ( $\sigma_z$ ) and each inequivalent valley ( $\tau_z$ ), K and K'. In the absence of short range (i.e. of the order of *a*) potentials, the valley states are degenerate and the Hamiltonian can be written in the reduced form

$$\mathcal{H} = v_F(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}). \tag{8}$$

The Hamiltonian (7) acts on the states represented by the two-component spinors  $\Psi = [\psi_A, \psi_B]^T$ , where  $\psi_A$  and  $\psi_{\rm B}$  represent the envelope functions associated with the probability amplitudes at the respective sublattice sites of the honeycomb graphene structure. The low-energy spectrum of free carriers is  $E = \pm \hbar v_F (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$ , with  $k_x$  and  $k_y$  the wavevectors along the x and y axes, in the vicinity of the cones at the Brillouin zone; the +(-) sign refers to electron (hole) bands. Equation (8) also implies that the carriers in each valley are chiral particles, with the projection of the pseudospin ( $\sigma_p$ ) for electrons (holes) being aligned parallel (antiparallel) to the direction of propagation:  $\sigma_p = (\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})/|\mathbf{p}|$ . Since it commutes with the Hamiltonian, the chirality of the carriers remains conserved even in the presence of an external electrostatic field. One way of breaking this conservation is by adding a mass term in the Hamiltonian (8), which can be written as  $\mathcal{H}_m = m v_F^2 \sigma_z$ , that couples the different components of the in-plane pseudospin, and in turn introduces a gap in the spectrum.



**Figure 2.** Schematic depiction of a square barrier with height  $U_0$  and width *L*.

# 2. Klein tunneling in graphene

The absence of a gap in the spectrum, together with the conservation of chirality for carriers in graphene, leads directly to an important consequence: the suppression of backscattering by potential barriers. This unusual aspect of tunneling in this new material was first pointed out by Katsnelson *et al* [14], by calculating the tunneling coefficients for square barriers in single and bilayer graphene.

A potential barrier can be created in graphene by considering the effect of a gate voltage, which can be included in the Hamiltonian by adding a potential U. This leads to the equation

$$[v_F(\vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}})]\Psi = (E - U)\Psi.$$
(9)

Let us consider a square barrier of width *L* along the *x* axis given by  $U(x) = U_0 (1 - \theta(|x| - L/2)), U_0 > 0$  (see figure 2). Although the potential barrier is abrupt, one can assume that the potential is smooth on the scale of the lattice parameter. It can be shown that for smooth potentials, the general behavior of the transmission is qualitatively similar to the present case. Since in this case the *y* component of the momentum operator commutes with the Hamiltonian, we can consider solutions in the form  $\psi_C(x, y) = \phi_C(x) e^{ik_y y}, C = A, B$ , and obtain

$$d\phi_{\rm B}/d\xi + \beta\phi_{\rm B} = i(\epsilon - u)\phi_{\rm A},\tag{10}$$

$$\mathrm{d}\phi_{\mathrm{A}}/\mathrm{d}\xi - \beta\phi_{\mathrm{A}} = \mathrm{i}(\epsilon - u)\phi_{\mathrm{B}}, \qquad (11)$$

where  $\xi = x/L$ ,  $\beta = k_y L$ ,  $\epsilon = E L/\hbar v_F$ ,  $u = U(x) L/\hbar v_F$ are dimensionless.

The two coupled first-order differential equations, equations (9) and (10) can be transformed into a single second-order differential equation giving for  $\phi_A$  the result

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{u'}{(\epsilon - u)}\frac{\mathrm{d}\phi_{\mathrm{A}}}{\mathrm{d}\xi} - \left[\beta^2 + \beta\frac{u'}{(\epsilon - u)} - (\epsilon - u)^2\right]\phi_{\mathrm{A}} = 0,$$
(12)

where u' is the derivative of the potential. For a square well, these derivatives are Dirac delta functions. We can consider the solutions in the regions outside and inside the barriers, where u' = 0. Let us consider the propagating solutions  $\psi_A(x, y) = \phi_A(x) e^{ik_y y}$ , with

$$\phi_{\rm A}(x) = \begin{cases} {\rm e}^{{\rm i}\kappa\xi} + B_1 \, {\rm e}^{-{\rm i}\kappa\xi} & \xi < -1/2, \\ A_2 \, {\rm e}^{{\rm i}\alpha\xi} + B_2 \, {\rm e}^{-{\rm i}\alpha\xi} & -1/2 \leqslant \xi \leqslant 1/2, \\ A_3 \, {\rm e}^{{\rm i}\kappa\xi} & \xi > 1/2, \end{cases}$$
(13)



Figure 3. Contour plot of the electronic transmission through a single barrier with height  $U_0 = 50$  meV and width L = 50 nm.

where  $\kappa = [\epsilon^2 - \beta^2]^{1/2}$  and  $\alpha = [(\epsilon - u_0)^2 - \beta^2]^{1/2}$ . These solutions are similar to the ones obtained from Schroedinger's equation. However, the fact that in the present case the equations are of first order (which leads to the terms with the derivatives of the potential in the decoupled second-order equation) implies that the continuity of the derivatives of the spinor components at the barrier interfaces is not required. Thus, by matching the solutions at each region of constant potential, taking into account the continuity of  $\phi_A$  and  $\phi_B$  at the potential interfaces, one can obtain an explicit formula for the total transmission as  $T = |A_3|^2$ , where

$$A_{3} = \frac{(g_{+} - g_{-})(f_{+} - f_{-}) e^{-i\alpha}}{(g_{+} - f_{+})(g_{-} - f_{-}) e^{2i\kappa} - (g_{+} - f_{-})(g_{-} - f_{+})},$$
(14)

with  $g_{\pm} = (\beta \pm i\kappa)/(\epsilon - u_0)$  and  $f_{\pm} = (\beta \pm i\alpha)/\epsilon$ .

A contour plot of the transmission as a function of the momentum components of the incident electron is shown For normal incidence (i.e.  $k_v = 0$ ), the in figure 3. figure shows perfect transmission, characteristic of the Klein phenomenon. One important aspect of this result is the highly anisotropic character of the transmission in this system, with the appearance of several transmission peaks for nonperpendicular incidence. These resonance peaks are similar to Fabry-Pérot resonances in optical systems and can enhance the tunneling current for certain energies. This feature was investigated for smooth potential steps in single-layer graphene by Cheianov and Fal'ko [15]. These authors considered a smooth p-n junction and obtained, for incidence angles  $\theta \ll \pi/2$ , the transmission as a function of the angle for a potential step of width d as

$$T(\theta) = e^{-\pi (k_F d) \sin^2 \theta}, \qquad (15)$$

where  $k_F$  is the Fermi momentum of the carriers.

The fact that carriers in graphene can be reflected by potential steps for non-normal incidence implies that confined carrier states can be obtained, as long as they have a nonzero momentum component in the direction parallel to the barrier. Therefore, discrete energy levels may be found



**Figure 4.** Spectrum of confined states in a graphene *square* QW versus  $k_y$  for  $U_0 = 50$  meV and L = 200 nm. The lower inset shows (*a*)  $\phi_A$  and  $i\phi_B$  for the state shown by the solid triangle and (*b*) the related probability density.

for carriers in graphene-based quantum wires [16]. For a wire of width *L* defined by a square potential of the type  $U(x) = U_0 \theta(|x| - L/2), U_0 > 0$ , the energy eigenvalues can be found by solving a transcendental equation. Requiring the continuity of  $\phi_A$  and  $\phi_B$  at  $\xi = -1/2$  and  $\xi = 1/2$ , we obtain the following transcendental equation for the energy eigenvalues:

$$S_{-}(\epsilon, \beta, +1)S_{+}(\epsilon, \beta, +1) + S_{-}(\epsilon, \beta, -1)S_{+}(\epsilon, \beta, -1) = 0,$$
(16)

where  $S_{\pm}(\epsilon, \beta, s) = \beta - f_{\pm}(\epsilon) - s\alpha \delta^{\pm s}$  and  $\delta = \tan(\alpha/2)$ . The results are shown in figure 4 for  $U_0 = 50$  meV and L =200 nm. The dashed lines delimit the continuum region, which corresponds to free electrons  $(E \ge \hbar k_y + U_0)$  with energies larger than the barrier height, and free holes ( $E \leq$  $-\hbar v_F k_v + U_0$ ) that propagate in the system by means of the Klein tunneling mechanism. The cut-off at low wavevectors thus arises due to the conversion of confined electrons to free holes. That is a consequence of the gapless spectrum of graphene, which allows the existence of unoccupied states in the valence band in the barrier region at the energies of the incident electrons even for small values of  $U_0$ . For large values of  $k_y$ , the dispersion branches are given approximately by  $E = \hbar v_F [(n\pi/L)^2 + k_y^2]^{1/2}$ , where *n* is an integer. The lower inset (*a*) of figure 4 shows the two spinor components, for  $k_y = 0.03 \text{ nm}^{-1}$ , shown by the solid triangle, whereas the upper inset (b) of figure 4 shows the corresponding probability density in arbitrary units. The vertical dotted lines indicate the position of the walls of the barrier. The spinor function plots clearly indicate a discontinuity in the derivative of the spinor component functions at the barrier interfaces, while the probability density is continuous.

The massless character of the carriers in graphene allows for an analogy between their propagation and the behavior of light in dielectric media. In this regard, it has been recognized that the interaction of electrons and holes in graphene with p–n junctions is akin to that of light with media that display a *negative* refraction index, also known as *metamaterials*. This becomes evident if one calculates the deviation of an electron from the conduction band incident on a potential barrier with an angle  $\theta_c$ . The transmitted portion of the wavefunction propagates in the barrier region with a 'refraction' angle  $\theta_v$ , such that the relationship between these angles and the momenta is analogous to Snell's law of refraction:

$$\frac{\sin \theta_c}{\sin \theta_v} = -\frac{E}{|E - U_0|}.$$
(17)

Thus, the potential barrier can be interpreted as a region of negative refraction index  $n = -k_v/k_c$  (as opposed to the 'vacuum' region outside the barrier, with n = 1).

That realization has led to the prediction by Cheianov *et al* that the flow of electrons in this system can be focused by means of n–p–n junctions [17], producing what is known as a Veselago lens [18]. The analogy between light propagation in dielectric media and the dynamics of carriers in graphene is particularly evident if one investigates the propagation of wavepackets in this system [19]. One particularly powerful technique for that study is the method of *split operators*.

#### 3. Scattering of a wavepacket on a barrier

The propagation of wavepackets in ideal graphene has been recently studied, both numerically and analytically [20, 21], using a Green's function method which allowed the investigation of the oscillatory electronic motion (Zitterbewegung) that has been predicted from the relativistic analogy for the behavior of the electronic states in graphene. Below we show how the interaction of a Gaussian wavepacket with a potential barrier in graphene can be studied by a suitable application of the time evolution operator, using the split operator method. This technique has been successfully applied to investigate the properties of semiconductor structures [22] and can be readily extended to deal with carriers in graphene.

Let us first rewrite the Hamiltonian, including a mass term, which can be used to induce confinement or to mimic the effect of the edges of the graphene sheet,

$$\mathcal{H} = v_f \hbar(\sigma \cdot \mathbf{k}) + U(x, y)\mathbf{I} + F(x, y)\sigma_z, \tag{18}$$

where U(x, y) is the potential, F(x, y) is the mass term and **I** is the 2 × 2 unity matrix. In this method, the time evolution operator for carriers is written as a summation of two parts: one contains the potential and mass terms, which depend only on real space coordinates, whereas the other contains the momentum terms. Thus, the operator becomes

$$\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\Delta t\right] = \exp[-\mathrm{i}\Xi_{1}]$$
$$\times \exp[-\mathrm{i}\overrightarrow{\Xi}_{2}\cdot\overrightarrow{\sigma}]\exp[-\mathrm{i}\Xi_{1}] + O(\Delta t^{3}), \tag{19}$$

where  $\Xi_1 = \frac{\Delta t}{2\hbar} [F(x, y)\sigma_z - U(x, y)I]$  and  $\vec{\Xi}_2 = \Delta t v_F \vec{k}$ . The  $O(\Delta t^3)$  error is a consequence of the fact that  $\Xi_1$  and  $\vec{\Xi}_2 \cdot \vec{\sigma}$  do not commute. The exponentials can be expressed in terms of the matrices  $M_1$  and  $M_2$ , written in the space of positions and momenta, respectively, as

$$M_{1} = \begin{pmatrix} \exp\left[-i\frac{\Delta t}{2\hbar}(U+F)\right] & 0\\ 0 & \exp\left[-i\frac{\Delta t}{2\hbar}(U-F)\right] \end{pmatrix}$$
(20)

and

$$M_2 = \cos(\Xi_2)\mathbf{I} - \mathbf{i}\frac{\sin(\Xi_2)}{\Xi_2} \begin{pmatrix} 0 & \Xi_{2x} - \mathbf{i}\Xi_{2y} \\ \Xi_{2x} + \mathbf{i}\Xi_{2y} & 0 \end{pmatrix},$$
(21)

where  $\Xi_2 = \Delta t v_f \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$  is the magnitude of the vector  $\vec{\Xi}_2$ .

Now we can obtain the wavefunction at a posterior time starting from an initial wavefunction as

$$|\Psi\rangle_{t+\Delta t} \simeq M_1 \cdot M_2 \cdot M_1 |\Psi\rangle_t, \qquad (22)$$

where the terms of higher order in  $\Delta t$  are neglected, and where before (afterward) the multiplication of matrix  $M_2$ , we must perform a direct (inverse) Fourier transform on the function, in order to map it to the reciprocal (real) space. Note that if the Hamiltonian has neither external potentials nor mass terms, that is,  $U(x, y) \equiv 0$  and  $F(x, y) \equiv 0$ , the separation between the real and reciprocal space-dependent terms in equation (19) is no longer necessary, and the multiplication of the initial wavefunction by the matrix  $M_2$ , defined by equation (21), gives the exact solution of the time evolution of the wavepacket for any value of  $\Delta t$ . However, in the case where U(x, y) or F(x, y) is non-zero, the  $O(\Delta t^3)$  error induced by the non-commutativity of the terms of the Hamiltonian restricts the method to small values of  $\Delta t$ .

For the initial wavefunctions, we take Gaussian functions

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} \exp\left[\frac{(x-x_0)^2}{2\delta_x^2} + \frac{(y-y_0)^2}{2\delta_y^2} + ik_x^i x\right],$$
(23)

where now we have two parameters  $\delta_x$  and  $\delta_y$ , to describe the width of the initial wavepacket in the *x* and *y* directions, respectively. For the sake of simplicity, we consider a wavepacket with circular symmetry, i.e.  $\delta_x = \delta_y = \delta$ . Thus, the initial spinor becomes

$$\Psi(x, y) = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \psi(x, y), \tag{24}$$

where  $c_1$  and  $c_2$  define the initial pseudospin polarization.

Figure 5 shows the propagation of a wavepacket with width  $\delta = 50$  nm as it interacts with a potential step  $U = U_0\theta(y)$ . The figure shows a contour plot of the probability density for four different instants. In this case, the incident angle is  $\theta_i = \pi/4$ , which is obtained using  $c_1 = 1$  and  $c_2 = \exp[i\pi/4]$ , and E = 100 meV with  $U_0 = 200$  meV. Thus, in agreement with the modified Snell's law, equation (13), the refraction angle obtained is  $\theta_r = \pi/4$ . The figure shows the probability density as a function of the position at four different moments, namely before the arrival of the wavepacket at the interface (t = 0 fs), the initial deformation of the wavepacket (t = 140 fs), the splitting of the wavepacket into refracted



**Figure 5.** Time evolution of a wavepacket in graphene interacting with a potential step of height  $U_0$ , with  $E = U_0/2$  and incidence angle  $\theta_i = \pi/4$ .

and reflected components (t = 320 fs) and the subsequent propagation of the two components (t = 500 fs). It is seen that both the reflected and refracted components are significantly deformed in comparison with the original circular-symmetric incident wavepacket. In this case, the existence of a reflected wavepacket is a direct consequence of the non-zero incident angle, which leads to a non-zero wavevector component in the direction parallel to the barrier. This, as shown in figure 3 for the single barrier, reduces the transmission coefficient of the potential step. Additionally, the results of figure 5 are in striking contrast with the usual non-relativistic picture, which does not allow for a transmitted wavepacket when the potential step has  $E < U_0$ .

The transmission of a wavepacket through a square potential barrier is shown in figure 6. In this case, the width of the barrier is L = 50 nm, and the other parameters are the same as in the previous figure. The dashed lines indicate the trajectory of the refracted wavepacket, as well as the path in the absence of a barrier. The dotted lines delimit the width of the barrier. As shown, the potential barrier causes a shift of the path of the transmitted wavepacket. This shift agrees with the result obtained from the analogy to the geometrical optics expressions, taking into account the negative refraction index associated with the barrier. For a wavepacket reaching a barrier of thickness L with an incident angle  $\theta$ , a straightforward calculation, taking into account the refraction of the classical paths, gives a shift

$$d = L \frac{\sin(\theta_c + \theta_v)}{\cos \theta_v}.$$
 (25)

Using equation (17) this result can be expressed as

$$d = L\sin\theta_c \left(1 + \frac{\cos\theta_c}{\sqrt{(k_v/k_c)^2 - \sin^2\theta_c}}\right).$$
 (26)



**Figure 6.** Time evolution of a wavepacket in graphene interacting with a potential barrier of height  $U_0 = 200$  meV. The electron has average energy E = 100 meV and incidence angle  $\theta_i = \pi/4$ .

This shift is distinct from the one expected for a reflected wavepacket, known as the Goos–Hänchen effect, which has been recently investigated [23].

In the lower half of the graph some reflected components can be observed, which arise from the interaction of the wavepackets with each potential interface.

# 4. Multiple barriers

The lack of backscattering, the anistropy of the transmission of carriers in graphene, together with their long mean free path, suggest that resonance effects may be relevant to the properties of graphene-based quantum structures. This dependence becomes evident as one analyzes the conductance of multiplebarrier systems [24, 25]. For a single barrier, the total current for ballistic electrons presents oscillations as function of energy, due to an oscillation of the angular dependence of the transmission, caused by Fabry–Pérot-like resonances inside the barrier. The introduction of several barriers causes the appearance of additional resonance peaks in the transmission which, at low energies, causes additional oscillations of the carriers shows the appearance of minibands for non-normal propagation.

In order to simplify the discussion of the multiple-barrier case, let us rewrite the wavefunction for a region of constant one-dimensional potential  $U(x) = U_i$  in the matrix form as

$$\Psi(x) = \mathcal{G}_i \mathcal{M}_i \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}$$
(27)

where

$$\mathcal{G} = \begin{pmatrix} 1 & 1\\ g_{-}^{i} & g_{+}^{i} \end{pmatrix}, \qquad \mathcal{M} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha_{i}x} & 0\\ 0 & e^{-i\alpha_{i}x} \end{pmatrix}, \qquad (28)$$

and  $g_{\pm}^{i} = (k_{y} \pm \alpha_{i})/(\epsilon - u_{0})$  and  $\alpha_{i} = \sqrt{k_{y}^{2} - (\epsilon - u_{i})^{2}}$ . If we apply the continuity condition for the wavefunction at



Figure 7. Contour plot of the logarithm of the transmission in wavevector space components for a double barrier with height  $U_0 = 50$  meV, barrier width 50 nm and barrier separation d = 100 nm.

the interface of a potential step that separates two regions described by the potentials  $U_i$  and  $U_{i+1}$  at  $x = x_i$ , we can relate the amplitude coefficients at neighboring regions by

$$\begin{pmatrix} A_{i+1} \\ B_{i+1} \end{pmatrix} = \mathcal{N}_{i+1} \begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix}, \tag{29}$$

where  $\mathcal{N}_{i+1} = \mathcal{G}_{i+1}^{-1} \mathcal{M}_{i+1}^{-1} \mathcal{G}_i \mathcal{M}_i$  is the transfer matrix that relates the wavefunction in regions *i* and *i* + 1. Thus, if one considers a set of 2m square barriers, the transmission coefficient can be calculated as

$$T = \frac{1}{|[\mathcal{N}]_{22}|^2},\tag{30}$$

where  $[N]_{22}$  is an element of the matrix given by the product

$$\mathcal{N} = \mathcal{N}_{2m} \mathcal{N}_{2m-1} \cdots \mathcal{N}_1. \tag{31}$$

The dispersion relation is given by

$$2\cos(\kappa l) = \operatorname{Tr}(\mathcal{N}),\tag{32}$$

where  $\kappa = 2\pi m/L$ .

For a periodic potential profile, we have det[**T**] = 1. Assuming periodic boundary conditions we can write, for *P* unity cells,  $\mathcal{N}^P = 1$ . It follows that the eigenvalues of  $\mathcal{N}$  are  $e^{2\pi i m/P}$ , with *m* an integer, and its determinant is equal to 1.

A  $(k_y, k_x)$  contour plot of the logarithm of the transmission T through a double barrier is shown in figure 7. In this case, each barrier has height  $U_0 = 50$  meV and width L = 50 nm. The distance between the barriers is d = 100 nm. As seen, T depends on the direction of propagation or incident angle  $\theta$  (tan  $\theta = k_y/k_x$ ) and displays a similar behavior as for the single-barrier case. The main difference between single and double barriers is an oscillatory increase of the transmission for all regions when a double barrier is considered. This results from an additional resonance effect, caused by the quasiconfined electron states between the barriers.

The first two minibands of the dispersion relation for a 1D graphene-based superlattice are plotted in figure 8. In this case,



**Figure 8.** Dispersion relation in a 1D graphene SL with potential barriers of height  $U_0 = 100$  meV, width 10 nm and separation d = 10 nm. Only the first two bands around the Dirac point are shown.



**Figure 9.** Contour plot of the transmission *T* of relativistic fermions in a structure consisting of ten units with  $U_0 = 50$  meV, L = 50 nm and separation between barriers d = 100 nm.

the width of the wells and of the barriers is the same, and equal to 10 nm. Note that the form of the dispersion relation in the  $k_y$ direction, in contrast with the non-relativistic case, depends on the *x* component  $k_x$  of the wavevector. As a result, one cannot split the energy of the minibands as  $E_n = E_n(k_x) + v_F \hbar k_y$ . If  $k_y$  is sufficiently large, this dependence goes away and a linear relation between the energy and  $k_y$  is recovered, independently of the  $k_x$  component. Also, for  $k_y = 0$  the linear dispersion relation  $E(k_x, 0) = v_F \hbar k_x$  is unaltered by the periodic potential *U*, being only shifted by  $U_0/2$ .

Figure 9 shows a contour plot of the transmission for a multiple-barrier structure consisting of ten units. The main effect of having many units is a slight reduction in the continuous range of  $k_x$  for which perfect transmission occurs by the appearance of small gaps between regions of perfect transmission. This behavior remains essentially unaltered if the number of units is increased and is similar to that reported previously in the context of resonant tunneling through a double barrier [24].



**Figure 10.** Conductance through single (dashed curve), symmetric (solid curve) and asymmetric (dotted curve) double barrier versus Fermi energy *E* for barriers with L = 50 nm. The height of the first barrier  $U_0 = 100$  meV and that of the second  $U_0 = 100$  and 50 meV. The inter-barrier separation is d = 50 nm.

#### 5. Tunneling current

In an experimental setup, one usually measures the current *J* through the barrier. In the ballistic regime, the current is proportional to a weighted integral of the transmission  $T(k_x, k_y)$ . For the linear spectrum  $E = \hbar v_F k$  the current *J*, due to a voltage drop eV along the *x* direction, is given by  $(\lambda = 2ev_F/h^2)$ 

$$J = -\lambda \int T(E,\theta) [f(E) - f(E + eV)] E \, dE \cos\theta \, d\theta,$$
(33)

where f(E) is the Fermi function. For low temperatures we can approximate [f(E) - f(E + eV)] by  $-eV\delta(E - E_F)$  and extract the low-bias conductance from equation (28).

Figure 10 shows the conductance versus the Fermi energy for a single barrier (dashed curve) and for a double symmetric (solid curve) and asymmetric (dotted curve) barrier, for barrier width L = 50 nm. The height of the first barrier is  $U_0 =$ 100 meV and that of the second is  $U_0 = 100$  and 50 meV, for the solid and dotted curve, respectively. The inter-barrier separation is d = 50 nm. A pronounced resonant structure is found that is most explicit for symmetric barriers.

# 6. Trigonal warping effects

For an infinite, defect-free graphene sheet, the carrier states associated with each non-equivalent valley are degenerate. Nevertheless, there have been proposals to develop structures that can selectively act on these valley states, in order to create 'valleytronic' devices [26], in analogy with spintronic devices. Most of these proposals require the use of valleyselective interaction of carriers with the edges of graphene point contacts. Recently, there have been several works that investigated the effect of valley polarization on the tunneling through potential barriers [27, 28]. These studies focused on the effect of trigonal warping on the tunneling probability. Trigonal warping is a modification of the conical dispersion of the carriers as the energy scale increases, due to the symmetry of the crystal lattice. The results show that the inclusion of trigonal warping introduces an anisotropy in the transmission that is valley dependent.

The energy of the carriers in single-layer graphene in the vicinity of the Dirac points can be obtained from a tight-binding model by expanding the energy equation (3) around the K and K' points. The effect of trigonal warping is manifested in the higher order momentum terms, which become increasingly significant in comparison with the linear term as the carrier energy increases away from the charge neutrality point and causes the spectrum to deviate from the conical shape, modifying the constant energy curves in the momentum space from circles to approximately triangular shapes (see figure 1).

Thus, by taking into account the leading higher order terms in the structure factor expansion, the carrier energy can be expressed in the presence of a potential U as

$$E = \pm \hbar v_F \sqrt{k^2 (1 - 3sk_x a/2) + 2sk_x^3 a + k^4 a^2/16} + U, \quad (34)$$

where s = 1(-1) for electrons in the K (K') valley and *a* is the distance between nearest-neighbor carbon atoms in graphene ( $a \approx 0.142$  nm). The  $k_x$  ( $k_y$ ) component of the momentum corresponds to propagation along the armchair (zigzag) direction in the lattice.

In this case, the calculation of the transmission coefficient is similar to the one described in the previous sections, except that due to the trigonal warping effect; the results for large potentials become sensitive not only to the direction of the electron momentum with respect to the potential barrier but also with respect to the lattice. One may consider two cases: square barriers in which the potential interface runs parallel to the zigzag side of the lattice and barriers with the potential interface along the armchair side.

In the zigzag case, the solutions inside and outside the barrier are matched along the zigzag direction of the lattice. The *x*-component of the wavevector (i.e. the component perpendicular to the barrier) is given by

$$k_{x} = \pm \left[ -\frac{8}{a^{2}} \left( 1 - \frac{3ask_{y}}{2} \right) - k_{x}^{2} \right. \\ \pm \frac{8}{a^{2}} \sqrt{\left( 1 - \frac{3ask_{y}}{2} \right)^{2} - \frac{k_{y}^{3}a^{3}s}{2} + \frac{a^{2}}{4}(\epsilon - u)^{2}} \right]^{1/2}.$$
(35)

This shows that trigonal warping creates an anisotropy of the dispersion, given that the value of  $k_x$  is sensitive to the sign of  $k_y$ . Therefore, this anisotropy should be present in the transmission properties of electrons through potential barriers. This anisotropy creates the asymmetry in the angular dependence of the transmission shown in figure 11. The figure shows the transmission coefficient for carriers with E =50 meV, interacting with a square barrier of  $U_0 = 200$  meV and L = 500 nm. The solid line shows the results for s = 1(i.e. K valley), whereas the dashed line corresponds to s = -1(K' valley). For lower barrier heights (e.g.  $U_0 \leq 150$  meV), the asymmetry in the transmission becomes less evident, and the result for the conical dispersion is recovered.



**Figure 11.** Incidence angle dependence of the transmission coefficient for a single barrier in the zigzag orientation, for carriers associated with K (solid black lines) and K' (red dashed) valleys. The potential barrier has height  $U_0 = 200 \text{ meV}$  and width L = 500 nm, while the incident electron has energy E = 50 meV.



**Figure 12.** Transmission coefficient as a function of energy for a double barrier along the armchair orientation for carriers associated with K (solid black) and K' (dashed red) valleys for (*a*)  $k_x = 0.05 \text{ nm}^{-1}$  and (*b*)  $k_x = 0.01 \text{ nm}^{-1}$ .

For the armchair case, one has to find  $k_x$  by solving the equation

$$\frac{a^2}{16}k_x^4 + \left(\frac{as}{2}\right)k_x^3 + \left(1 + \frac{a^2}{8}k_y^2\right)k_x^2 - \left(\frac{3}{2}ask_y^2\right)k_x + \left[k_y^2 + \frac{a^2}{16}k_y^4 - (\epsilon - u)^2\right] = 0.$$
(36)

For a given energy, the values of  $k_x$  are expected to differ for different s. However, in contrast with the zigzag case, the transmission is expected to be invariant under a transformation of the momentum component parallel to the barrier,  $k_v \rightarrow -k_v$ . The asymmetry in the transmission in this case occurs between incoming electrons (i.e. moving 'to the right', with positive  $k_x$ ) and outgoing (moving 'to the left', with negative  $k_x$ ) electrons. The situation is reversed in each valley. Therefore, the large potential steps created in p-n junctions at an armchair orientation in graphene can create a valley-polarized current by means of a valley-selective transmission. Figure 12 shows results for a double barrier with  $U_a = U_b = 200$  meV,  $L_a = L_b = W = 100$  nm where (a)  $k_y = 0.05$  nm<sup>-1</sup> and (b)  $k_y = 0.01$  nm<sup>-1</sup>. The black solid line corresponds to incoming (outgoing) and the red dashed line to outgoing (incoming) carriers of the K (K') valley. As shown in [28], for the armchair case the total transmission

peaks of carriers through single and double barriers are shifted in energy depending on the valley label. This implies that the measured current as a function of the Fermi energy for potential barriers with  $U_0 \gtrsim 200$  meV, which are within reach of current experiments, could show double peaks which can be explained by the valley polarization effect.

# 7. Conclusions

The production of graphene is expected to lead to a variety of device applications, ranging from transistors, transparent conducting films, to gas sensors. Nevertheless, on a more fundamental level the study of the properties of charge carriers in graphene has helped to shed light on new aspects of the phenomenon of quantum tunneling, and may allow the observation of several transmission effects that would be difficult to investigate in other 'classical' systems. The long mean free path of electrons and holes in graphene, together with the high quality of the samples being produced means that the observation of Klein tunneling, as well as resonance effects associated with tunneling become feasible, as shown by recent experimental studies [29, 30]. This can also be the case for other effects, such as electron focusing. Additionally, by modulating the valley polarization of the electron current by means of external gates, graphene may become the substrate of a new class of devices that exploit the valley degrees of freedom to perform logical operations.

#### Acknowledgments

We want to acknowledge our collaborators in this work: P Vasilopoulos and M Barbier. This work was supported by the Brazilian Council for Research (CNPq), the Flemish Science Foundation (FWO-Vl) and the Belgian Science Policy (IAP).

#### References

- [1] Gamow G 1928 Z. Phys. 51 204
- [2] Condon E U and Gurney R W 1928 Nature (London) 122 439

- [3] Esaki L 1958 Phys. Rev. 109 603
- [4] Tsu R and Esaki L 1973 Appl. Phys. Lett. 22 562
- [5] Sollner T C L G, Goodhue W D, Tannenwald P E, Parker C D and Peck D D 1983 Appl. Phys. Lett. 43 588
- [6] Dirac P A M 1928 Proc. R. Soc. Lond. 117 610
- [7] Klein O 1929 Z. Phys. 53 157
- [8] Dombey N and Calogeracos A 1999 Phys. Rep. 315 41
- [9] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V and Firsov A A 2005 *Nature (London)* 438 197
- [10] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L and Kim P 2005 Nature (London) 438 201
- [11] Geim A K and Novoselov K S 2007 Nature Mater. 6 183
- [12] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S
- and Geim A 2009 Rev. Mod. Phys. 81 109
- [13] Wallace P R 1947 Phys. Rev. 71 622
- [14] Katsnelson M I, Novoselov K S and Geim A K 2006 Nature Phys. 2 620
- [15] Cheianov V V and Fal'ko V I 2006 Phys. Rev. B 74 041403
- [16] Pereira J M Jr, Mlinar V, Peeters F M and Vasilopoulos P 2006 Phys. Rev. B 74 045424
- [17] Cheianov V V, Fal'ko V and Altshuler B L 2007 Science 315 1252
- [18] Veselago V G 1968 Sov. Phys. Usp. 10 509
- [19] Sharma M and Ghosh S 2009 arXiv:0907.1631v2
- [20] Maksimova G M, Demikhovskii V Ya and Frolova E V 2008 Phys. Rev. B 78 235321
- [21] Lherbier A, Biel B, Niquet Y-M and Roche S 2008 Phys. Rev. Lett. 100 036803
- [22] Degani M H and Leburton J P 1991 Phys. Rev. B 44 10901
- [23] Beenakker C W J, Sepkhanov R A, Akhmerov A R and Tworzydlo J 2009 Phys. Rev. Lett. 102 146804
- [24] Pereira J M Jr, Vasilopoulos P and Peeters F M 2007 Appl. Phys. Lett. 90 132122
- [25] Barbier Michaël, Peeters F M, Vasilopoulos P and Milton Pereira J Jr 2008 Phys. Rev. B 77 115446
- [26] Rycerz1 A, Tworzydlo J and Beenakker C W J 2007 Nature Phys. 3 172
- [27] Garcia-Pomar J L, Cortijo A and Nieto-Vesperinas M 2008 Phys. Rev. Lett. 100 236801
- [28] Pereira J M Jr, Peeters F M, Costa R N and Farias G A 2009 J. Phys.: Condens. Matter 21 045301
- [29] Stander N, Huard B and Goldhaber-Gordon D 2009 Phys. Rev. Lett. 102 026807
- [30] Velasco J Jr, Liu G, Bao W and Lau C N 2009 New J. Phys. 11 095008

# Wave-packet dynamics and valley filter in strained graphene

Andrey Chaves,<sup>1,2,\*</sup> L. Covaci,<sup>1</sup> Kh. Yu. Rakhimov,<sup>1,3</sup> G. A. Farias,<sup>2,†</sup> and F. M. Peeters<sup>1,2,‡</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, Fortaleza, 60455-900 Ceará, Brazil

<sup>3</sup>Heat Physics Department, Uzbek Academy of Sciences, 100135 Tashkent, Uzbekistan

(Received 3 August 2010; revised manuscript received 18 October 2010; published 19 November 2010)

The time evolution of a wave packet in strained graphene is studied within the tight-binding model and continuum model. The effect of an external magnetic field, as well as a strain-induced pseudomagnetic field, on the wave-packet trajectories and zitterbewegung are analyzed. Combining the effects of strain with those of an external magnetic field produces an effective magnetic field which is large in one of the Dirac cones, but can be practically zero in the other. We construct an efficient valley filter, where for a propagating incoming wave packet consisting of momenta around the K and K' Dirac points, the outgoing wave packet exhibits momenta in only one of these Dirac points while the components of the packet that belong to the other Dirac point are reflected due to the Lorentz force. We also found that the zitterbewegung is permanent in time in the presence of either external or strain-induced magnetic fields, but when both the external and strain-induced magnetic fields are present, the zitterbewegung is transient in one of the Dirac cones, whereas in the other cone the wave packet exhibits permanent spatial oscillations.

DOI: 10.1103/PhysRevB.82.205430

PACS number(s): 73.23.-b, 72.80.Vp, 85.75.Hh

# I. INTRODUCTION

Since its first synthesis in 2004,<sup>1</sup> graphene has been attracting much interest due to its unique electronic properties arising from its singular energy spectrum, where in the vicinity of the points labeled as K and K' in reciprocal space, the charge carriers behave as massless quasiparticles and exhibit an almost linear dispersion.<sup>2</sup> These quasiparticles obey the Dirac-Weyl equations and therefore should be subject to quasirelativistic effects, such as zitterbewegung, i.e., a trembling motion caused by interference between positive and negative energy states.<sup>3-5</sup> The phenomenon of zitterbewegung was predicted in 1930 by Schrödinger<sup>6</sup> and has been subject of renewed interest over the past years. Previous theoretical works have suggested few ways of experimentally observing zitterbewegung, e.g., in narrow-gap semiconductors,<sup>7</sup> in III-V zinc-blende semiconductor quantum wells with spin-orbit coupling<sup>8</sup> and, more recently, in monolayer<sup>9</sup> and bilayer<sup>10</sup> graphene. An experimental simulation of the zitterbewegung of free relativistic electrons in vacuum was performed by Gerritsma et al.<sup>11</sup> by using trapped ions.

Strain engineering in graphene has recently become a widely studied topic.<sup>12–17</sup> The elastic properties of graphene nanoribbons were theoretically investigated by Cadelano *et al.*,<sup>18</sup> which studied the in-plane stretching and out-of-plane bending deformations by combining continuum elasticity theory and tight-binding (TB) atomistic simulations. Later, Cocco *et al.*<sup>19</sup> and Lu and Guo<sup>20</sup> showed that a combination of shear and uniaxial strain at moderate absolute deformations can be used to open a gap in the graphene energy spectrum. It has been shown recently that specific forms of strain produce a pseudomagnetic field in graphene, which does not break the time-reversal symmetry and which points in opposite directions for electrons moving around the *K* and *K'* points.<sup>21</sup> The strain-induced magnetic field is expected to produce Landau levels and, consequently, the quantum Hall

effect, even in the absence of an external magnetic field.<sup>22,23</sup> Guinea *et al.*<sup>24</sup> showed theoretically that an in-plane bending of the graphene sheet leads to an almost uniform field. Landau levels as a consequence of strain-induced pseudomagnetic fields greater than 300 T were recently observed with scanning tunneling microscopy in nanometer-sized nanobubbles.<sup>25</sup>

Although previous works have studied wave-packet propagation for the Dirac-Weyl Hamiltonian of graphene in the absence of external fields and potentials,<sup>26</sup> or in the presence of uniformly applied external magnetic fields,<sup>9,27–29</sup> there is still a lack of theoretical works on the wave-packet propagation through potential and (pseudo)magnetic field step barriers. Moreover, the time evolution of a wave packet in graphene within the TB model, where the intravalley scattering to higher energy states and intervalley scattering due to defects appear naturally, is still hardly found in the literature. It is also interesting to see whether the results from Dirac and TB approaches for graphene differ or are similar.

In this paper, we investigate the time evolution of wave packets in graphene within the TB model, based on the splitoperator technique for the expansion of the time-evolution operator. We trace a parallel between the results from the TB model and those obtained from the Dirac approximation for particles with momentum close to one of the Dirac cones of the Brillouin zone of graphene. The proposed method is then applied to the study of the dynamics of Gaussian wave packets in graphene under external magnetic fields. The effects of the pseudomagnetic field induced by bending the graphene sheet into an arc of circle are analyzed as well. Our results show that for an appropriate choice of strain and external magnetic field strength, the system exhibits a strong effective magnetic field for particles in one of the Dirac cones whereas in the other cone the external and pseudomagnetic fields cancel each other and the effective magnetic field is practically zero. We show that this effect is manifested as a transient (permanent) zitterbewegung for electrons in the cone where the effective magnetic field is zero (nonzero), which can be verified experimentally by detecting the electric field radiation emitted by the trembling wave packet.<sup>27</sup> Moreover, our results show that with such a choice of external and straininduced magnetic fields, one can construct an efficient valley filter, which can be useful for future valley-tronic devices.<sup>30</sup>

#### **II. TIME-EVOLUTION OPERATOR**

By solving the time-dependent Schrödinger equation, one obtains that the propagated wave function after a time step  $\Delta t$  can be calculated by applying the time-evolution operator on the wave packet at any instant *t* 

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-(i/\hbar)H\Delta t}\Psi(\vec{r}, t), \qquad (1)$$

where we assumed that the Hamiltonian H is time independent. Different techniques have been suggested for the expansion of the exponential in Eq. (1), e.g., the Chebyschev polynomials method<sup>31</sup> and the second-order differencing scheme.<sup>32,33</sup> The numerical method that we use for the application of the time-evolution operator in this work, namely, the split-operator method,<sup>34</sup> is the subject of this section, where we will show how this technique can be adapted for the study of the wave-packet dynamics in graphene within the tight-binding and Dirac approximations.

#### A. Tight-binding model

Graphene consists of a layer of carbon atoms forming a honeycomb lattice, which can be described by the Hamiltonian

$$H_{\rm TB} = \sum_{i} \epsilon_{i} c_{i}^{\dagger} c_{i} + \sum_{\langle i,j \rangle} [\tau_{ij} c_{i}^{\dagger} c_{j} + \tau_{ij}^{*} c_{i} c_{j}^{\dagger}], \qquad (2)$$

where  $c_i(c_i^{\dagger})$  annihilates (creates) an electron at the site *i*, with on-site energy  $\epsilon_i$ , and the sum is taken only between nearest-neighbor sites *i* and *j*, with hopping energy  $\tau_{ij}$ . The effect of an external magnetic field can be calculated by including a phase in the hopping parameters according to the Peierls substitution  $\tau_{ij} \rightarrow \tau_{ij} \exp[i\frac{e}{\hbar}\int_{j}^{i}\vec{A}\cdot d\vec{l}]$ , where  $\vec{A}$  is the vector potential describing the magnetic field.<sup>35,36</sup> In a strained graphene sheet, the distance between two adjacent sites i and j is changed by  $\Delta a_{ii} = a_{ii} - a_0$ , where  $a_0$  is the lattice parameter of unstrained graphene and  $a_{ii}$  is the distance between the sites after the stress. The change in the intersites distance affects the hopping energy between the sites, which becomes<sup>21</sup>  $\tau_{ii} \rightarrow \tau_{ii} (1+2\Delta a_{ii}/a_0)$ . A similar expression can be obtained by expanding Eq. (13) of Ref. 37 in Taylor series and neglecting higher-order terms in  $\Delta a_{ii}$ , i.e., considering small lattice deformations. The strain-induced change in the hopping energies leads to an effective pseudomagnetic field, which points to opposite directions in the valley K and K'<sup>22</sup> Notice that the pseudomagnetic field in our model is not introduced artificially by considering an additional vector potential in the Peierls phase but it rather appears naturally after the changes in the intersite distances due to the strain.

Let us label the sites *i* of the graphene lattice according to their line and column numbers *n* and *m*, respectively, as shown in Fig. 1(a). The basis vector state  $|n,m\rangle$  represents an



FIG. 1. (Color online) (a) Sketch of the honeycomb lattice of graphene, made out of two superimposed triangular lattices A and B. The atoms are labeled as  $\{n, m\}$  according to their line and column numbers n and m, respectively. (b) Reciprocal lattice of graphene, with K (black) and K' (gray) Dirac points, where the area defined by the reciprocal vectors  $\vec{b}_1 = (-2\pi/3a_0, \sqrt{3})$  and  $\vec{b}_2 = (4\pi/3a_0, 0)$  represents the first Brillouin zone. The numbers close to each Dirac point are explained in the text.

electron confined on the site of line *n* and column *m*. In a lattice consisting only of noninteracting sites, each  $|n,m\rangle$  is an eigenstate of  $H_{\text{TB}}$  with energy  $\epsilon_{n,m}$ , i.e.,  $H_{\text{TB}}|n,m\rangle = \epsilon_{n,m}|n,m\rangle$ . Limiting ourselves to nearest-neighbor interactions, we find

$$H_{\rm TB}|n,m\rangle = \epsilon_{nm}|n,m\rangle + T_{m+1}|n,m+1\rangle + T_{m-1}|n,m-1\rangle + T_{n+1}|n+1,m\rangle + T_{n-1}|n-1,m\rangle,$$
(3)

where  $T_{n\pm 1}$  and  $T_{m\pm 1}$  are equivalent to the hopping energies  $\tau_{ij}$  between the site  $i=\{n,m\}$  and the adjacent sites  $j=\{n\pm 1,m\}$  and  $j=\{n,m\pm 1\}$ , respectively. Equation (3) can be rewritten as

$$H_{\rm TB}|n,m\rangle = H_n|n,m\rangle + H_m|n,m\rangle,\tag{4}$$

where the operators  $H_n$  and  $H_m$  are defined as

$$H_n|n,m\rangle = T_{m+1}|n,m+1\rangle + T_{m-1}|n,m-1\rangle + \frac{\epsilon_{nm}}{2}$$
 (5a)

and

$$H_m|n,m\rangle = T_{n+1}|n+1,m\rangle + T_{n-1}|n-1,m\rangle + \frac{\epsilon_{nm}}{2}.$$
 (5b)

The wave function at any instant *t* is then written as a linear combination of the basis vector states  $\Psi_{n,m}^t = \sum_{n,m} b_{n,m}^t | n, m \rangle$ . The advantage of following the procedure described by Eqs. (3)–(5) lies in the fact that the operators  $H_n$  and  $H_m$  in Eq. (5) can be represented by tridiagonal matrices, which are easier to handle than the matrix representing the full Hamiltonian, Eq. (3).

The split-operator technique can now be applied to Hamiltonian (4) so that the time evolution operator is approximated by

$$e^{-(i/\hbar)H_{\rm TB}\Delta t} = e^{-(i/2\hbar)H_m\Delta t}e^{-(i/\hbar)H_n\Delta t}e^{-(i/2\hbar)H_m\Delta t} + O(\Delta t^3),$$
(6)

where the error comes from the noncommutativity between the operators  $H_n$  and  $H_m$ . We drop the  $O(\Delta t^3)$  terms by considering a small time step  $\Delta t=0.1$  fs. The propagated wave function is then obtained from Eq. (1), which in this case reads

$$\Psi_{n,m}^{t+\Delta t} = e^{-(i/2\hbar)H_m\Delta t} e^{-(i/\hbar)H_n\Delta t} e^{-(i/2\hbar)H_m\Delta t} \Psi_{n,m}^t.$$
(7)

This equation is solved in three steps

$$\eta_{n,m} = e^{-(i/2\hbar)H_m \Delta t} \Psi_{n,m}^t, \tag{8a}$$

$$\xi_{n,m} = e^{-(i/\hbar)H_n\Delta t} \eta_{n,m},\tag{8b}$$

$$\Psi_{n,m}^{t+\Delta t} = e^{-(i/2\hbar)H_m\Delta t} \xi_{n,m}.$$
(8c)

Using the Cayley form for the exponentials,<sup>38</sup> we can rewrite Eq. (8a) as

$$\eta_{n,m} = e^{-(i/2\hbar)H_m\Delta t} \Psi_{n,m}^t = \frac{1 - \frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m}{1 + \frac{i\Delta t}{4\hbar}H_m} \Psi_{n,m}^t + O(\Delta t^2), \quad (9)$$

which leads to

$$\left(1 + \frac{i\Delta t}{4\hbar} H_m\right) \eta_{n,m} \approx \left(1 - \frac{i\Delta t}{4\hbar} H_m\right) \Psi_{n,m}^t.$$
 (10)

As the wave function  $\Psi_{n,m}^t$  is already known, the matrix equation in Eq. (10) can be straightforwardly solved to obtain  $\eta_{n,m}$ . We repeat this procedure for the other two exponentials in Eqs. (8b) and (8c), and eventually obtain  $\Psi_{n,m}^{t+\Delta t}$ .

In fact, the form in Eq. (10) can also be applied to the full Hamiltonian  $H_{\text{TB}}$ , i.e., without splitting the  $H_m$  and  $H_n$  terms. However, this would lead to matrix equations involving pentadiagonal matrices, which are harder to handle than the tridiagonal matrices in Eq. (10). As the error produced by the splitting in Eq. (7) is smaller than the error produced by the (necessary) expansion of the exponential given by Eq. (10), it is worthy to split these terms in order to simplify the numerical calculations.

#### **B.** Dirac-Weyl equation

From the TB Hamiltonian (2), considering an infinite graphene sheet in the absence of external potential and magnetic fields, one obtains the energy band structure of graphene as

$$E(\vec{k}) = \pm \tau \sqrt{3} + f(\vec{k}),$$
  
$$f(\vec{k}) = 2\cos(\sqrt{3}k_y a_0) + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a_0\right)\cos\left(\frac{3}{2}k_x a_0\right),$$
  
(11)

which is gapless in six points of the reciprocal space where E=0, from which only two are inequivalent, labeled as *K* and *K'*, as shown in Fig. 1(b).<sup>2,39</sup> In the vicinity of each of these points, the dependence of the energy spectrum on the wave vector  $\vec{k}$  is almost linear and the electron can be described as a massless fermion by the Dirac Hamiltonian

$$H_D = [v_F \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e\vec{A}) + V(\mathbf{x}, \mathbf{y})\mathbf{I}]e^{-i\phi}, \qquad (12)$$

where  $v_F = 3\pi a_0/2\hbar$  is the Fermi velocity,  $\tilde{A}$  is the electromagnetic vector potential, V(x, y) is an external potential, **I** is the identity matrix,  $\sigma$  is the Pauli vector, and the wave functions are pseudospinors  $\Psi = [\Psi_A, \Psi_B]^T$ , with  $\Psi_{A(B)}$  as the probability of finding the electron in the sublattice A(B) that composes the honeycomb lattice of graphene.<sup>2</sup> The angle  $\phi$ is different for electrons around the *K* and *K'* Dirac cones. In the vicinity of the *k*th Dirac point [see labels for each Dirac point in Fig. 1(b)], one obtains  $\phi = -\pi/6 + k\pi/3$ , with k= 1–6. From here onward, we will refer to the coordinates in the Dirac (TB) model as  $\mathbf{x}(x)$  and  $\mathbf{y}(y)$ .

The exponential term in Eq. (12) is usually dropped because it can be considered as a phase in the state vectors in the Dirac model. However, this term has an important meaning when comparing with the TB model: this exponential can be identified as a rotation operator with angle  $\phi$ . Notice that an infinite graphene hexagonal lattice has  $C_{6v}$  symmetry, i.e., it is symmetric only for rotation angles  $k\pi/3$  (k integer). As a consequence, the Dirac Hamiltonian (12) without the exponential term is not symmetric in the momenta  $\hat{p}_x$  and  $\hat{p}_y$ , as already pointed out previously.9 So, what would be the meaning of the direction-dependent observables in the Dirac description of graphene, when they are not symmetric under rotation, exhibiting a privileged direction? Defining y(x) as the zigzag (armchair) direction, as in Fig. 1(a), the results obtained by the Dirac approximation for the x and y components of any observable are compared to the armchair and zigzag directions, respectively, after performing a rotation  $\phi$ in the coordinates of the Dirac model. From the possible values of  $\phi$ , one deduces straightforwardly that at any Dirac cone, the coordinate x(y) of the Dirac model is always related to one of the zigzag (armchair) directions of the real graphene lattice. On the other hand, for finite rectangular samples the different angles  $\phi$  represent two distinguishable situations, since the rectangle does not share the  $C_{6v}$  symmetry of the infinite graphene lattice: the x direction in the Dirac model for the odd (even) cones in Fig. 1(b) represents a diagonal (vertical) direction in the rectangle. The comparison between the TB model for a rectangular graphene flake and the Dirac approximation will be discussed in details further, in the following section.

In a recent work, Maksimova *et al.*<sup>26</sup> presented an analytical study of the time evolution of a Gaussian wave packet in graphene in the *absence* of external potentials and/or magnetic fields within the continuum model, i.e., using the Dirac-Weyl Hamiltonian for electrons in the vicinity of the Dirac point *K*. In this paper, we will use an alternative and more general way of calculating the dynamics of a wave packet in such a system,<sup>39</sup> based on the split-operator technique, which can be applied for systems under arbitrary external potentials and magnetic fields.

The Dirac-Weyl Hamiltonian  $H_D$  in Eq. (12) can be separated as  $H_D = H_k + H_r$ , where  $H_k = \hbar v_F \vec{\sigma} \cdot \vec{k}$  keeps only the terms which depend on the wave vector  $\vec{k}$  whereas  $H_r = v_F e \vec{\sigma} \cdot \vec{A} + V \mathbf{I}$  depends only on the real-space coordinates **x** and **y**. Following the split-operator method, the time-

evolution operator for the Hamiltonian  $H_D$  can be approximated as

$$\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}(H_{k}+H_{r})\right]$$

$$\approx \exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}H_{r}\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}H_{k}\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{2\hbar}H_{r}\right]$$
(13)

with an error on the order of  $O(\Delta t^3)$ , due to the noncommutativity of the operators involved. We invoke a well-known property of the Pauli vectors

$$\exp(-i\vec{S}\cdot\vec{\sigma}) = \cos(S)\mathbf{I} - i\frac{\sin(S)}{S}(\vec{S}\cdot\vec{\sigma})$$
(14)

for any vector  $\vec{S}$ , where  $S = |\vec{S}|$ , and rewrite the exponentials in real and reciprocal space, respectively, in matrix form

$$\mathcal{M}_{r} = \left[ \cos(\mathbf{A})\mathbf{I} - i\frac{\sin(\mathbf{A})}{\mathbf{A}} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A}_{x} - i\mathbf{A}_{y} \\ \mathbf{A}_{x} + i\mathbf{A}_{y} & 0 \end{pmatrix} \right] e^{-\frac{i\Delta t}{2\hbar}V},$$
(15a)

$$\mathbf{M}_{k} = \cos(\kappa)\mathbf{I} - i\frac{\sin(\kappa)}{\kappa} \begin{pmatrix} 0 & \kappa_{x} - i\kappa_{y} \\ \kappa_{x} + i\kappa_{y} & 0 \end{pmatrix}, \quad (15b)$$

where  $\mathbf{A} = |\vec{A}| = \Delta t v_F e |\vec{A}|/2\hbar$ ,  $\vec{\kappa} = \Delta t v_F \vec{k}$  and  $\kappa = |\vec{\kappa}| = \Delta t v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ , so that the time evolution of a wave packet  $\Psi_D(x, y) = [\phi_A, \phi_B]^T \Psi(x, y)$  can be calculated as a series of matrix multiplications

$$\Psi(\vec{\mathbf{r}}, t + \Delta t) = \mathbf{M}_r \cdot \mathbf{M}_k \cdot \mathbf{M}_r \Psi(\vec{\mathbf{r}}, t) + O(\Delta t^3).$$
(16)

The matrix multiplication by  $\mathbf{M}_k$  is made in reciprocal space by taking the Fourier transform of the functions. In the absence of magnetic fields and external potentials, one has  $\mathbf{M}_r = \mathbf{I}$  and

$$\Psi(\vec{\mathbf{r}}, t + \Delta t) = \mathbf{M}_k \Psi(\vec{\mathbf{r}}, t), \tag{17}$$

where the matrix multiplication in reciprocal space gives the exact result for the time evolution of the wave packet, since there is no error induced by noncommutativity of operators or matrices in this case. This shows that the split-operator method provides a way to study the dynamics of wave packets in graphene within the continuum model where, in the presence of magnetic fields and/or external potentials, one can control the accuracy of the results by making  $\Delta t$  smaller, while in their absence, the problem is solved exactly by a simple matrix multiplication for any value of  $\Delta t$ .

## **III. RESULTS AND DISCUSSION**

We shall now discuss the results obtained for a graphene lattice with  $2000 \times 3601$  atoms, with armchair (zigzag) edges in the x(y) direction. The nearest-neighbor hopping parameter and the lattice constant of graphene are taken as  $\tau = -2.7$  eV and  $a_0 = 1.42$  Å, respectively.

As initial wave packet, we consider a Gaussian centered at  $\vec{r_0} = (x_0, y_0)$  in real space and  $\vec{q} = (q_x^0, q_y^0)$  in reciprocal space,

$$\Psi_{q}(\vec{r}) = N \binom{c_{1}}{c_{2}} \exp\left[-\frac{(x-x_{0})^{2} + (y-y_{0})^{2}}{2d^{2}} + i\vec{q}\cdot\vec{r}\right],$$
(18)

where N is the normalization factor. Notice that we have included a pseudospinor  $[c_1, c_2]^T$  in the initial wave packet, where  $c_{1(2)}$  is the probability of finding the electron in the triangular sublattice A(B) that composes the graphene hexagonal lattice. One can also rewrite the pseudospinor as  $[1, e^{i\theta}]^T$ , where the pseudospin polarization angle  $\theta$  is shown explicitly. The pseudospin is a concept normally attributed to the Dirac description of graphene. Indeed, the pseudospin of a wave function in the Dirac model is related to the expectation values of the Pauli matrices  $\langle \sigma_i \rangle$ , which can involve integrals of the product between wave functions for sublattices A and B. Such a definition fails for the TB wave functions since in this case they are defined in different points of the lattice, so that any integral that mixes functions of both sublattices gives zero. Even so, the study of the pseudospin related to the initial discrete wave packet helps to understand the wave-packet dynamics obtained from the TB model, as we will see further in this section.

#### A. Initial pseudospin polarization and zitterbewegung revisited

In this section, we will use the TB model to review some of the main properties of the wave-packet dynamics in graphene. Within the TB model, we consider the initial wave packet as a discrete form of the Gaussian distribution in Eq. (18) for the graphene hexagonal lattice, where we multiply the Gaussian function by  $c_{1(2)}$  in the sites belonging to the triangular sublattice A(B). From Eq. (11), it is clear that in momentum space, the region of interest is the vicinity of the Dirac points K and K', since the energy corresponding to wave vectors out of this region is very high.

In the TB model for two-dimensional crystals, one usually considers the same Gaussian distribution for all the sites of the lattice.<sup>40</sup> This is equivalent as choosing  $c_1 = c_2 = 1$  in Eq. (18). Figure 2(a) shows the contour plots of the squared modulus of the propagated wave functions at t=40 fs for these values of  $c_i$ , considering an initial wave vector  $\vec{q}$  $=(0, k_v^0) + K$ , i.e., in the vicinity of the K point labeled as 2 in Fig. 1(b). As shown in Ref. 26, the wave-packet dynamics near the Dirac cones in graphene does not depend separately on the momentum  $k_v^0$  or on the width d but rather on the dimensionless quantity  $k_v^0 d$ . This result was obtained from the Dirac model for graphene, i.e., considering that even high energies states exhibit linear dispersion. Within the TB model we expect that wave packets with the same  $k_v^0 d$  behave alike only if  $k_v^0$  is not too far from the Dirac cone and if d is not too small, so that the packet is well localized in energy space. Within these conditions, Fig. 2 shows the time evolution for different values of this dimensionless quantity:  $k_{y}^{0}d=1$  and 2, with d=100 Å, and  $k_{y}^{0}d=4$ , with d=200 Å. We observe that the dispersion of the wave packet is stronger for smaller values of  $k_v^0 d$ , where it becomes distorted into an arclike shape. For larger  $k_v^0 d$ , on the other hand, the wave packet keeps its circularly symmetric shape for longer times.



FIG. 2. (Color online) (a) Contour plots of the squared modulus of the wave function after a time evolution of t=40 fs, for three different values of the dimensionless parameter  $k_y^0 d$ . (b) Expectation value of the position and (c) velocity in y direction as a function of time. The results obtained from the TB (Dirac) model are presented as curves (symbols), for  $k_y^0 d=1$  (solid, circles), 2 (dashed, triangles), and 4 (dotted, squares)

As explained in the previous section, in order to obtain the Dirac Hamiltonian Eq. (12), one must shift the origin of the wave vectors  $\vec{k}$  to one of the six Dirac points shown in Fig. 1(b). Besides, one must also rotate the *x* and *y* axis by an angle  $\phi$  which depends on the *K* or *K'* point that is considered as the origin in momentum space. For the *K* =(0,4 $\pi/3\sqrt{3}a_0$ ) point, labeled as 2 in Fig. 1(b), the Dirac Hamiltonian (12) is obtained by rotating the axis by 90°, with other words, by a transformation of the coordinates as  $x \rightarrow -y$  and  $y \rightarrow x$ . The pseudospinor  $c_1 = c_2 = 1$  represents a wave packet polarized in x direction, i.e.,  $\langle \sigma_x \rangle > 0$  and  $\langle \sigma_z \rangle$ = $\langle \sigma_y \rangle = 0$ . From the Heisenberg picture, we obtain the velocity in the x direction for the proposed wave packet as

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{x}, H_D] = v_F \sigma_x. \tag{19}$$

Performing the appropriate coordinate transformations, the velocity obtained from the TB model for the y direction must be consistent with the prediction from the Dirac approximation, namely,  $v_y = dx/dt = v_F \sigma_x$ . This suggests that such a wave packet propagates toward the positive y direction, but with nonconstant velocity, since  $\sigma_x$  does not commute with  $H_D$ . The expectation value of the y position of the packet  $\langle y \rangle$  is shown as a function of time by the curves in Fig. 2(b), for  $k_y^0 d = 1$  (solid), 2 (dashed), and 4 (dotted), where the results obtained by the Dirac equation are shown as symbols for comparison. A different linear behavior is already observed for each wave packet at large time, implying that they have different velocities, which is kind of counterintuitive, since low-energy electrons in graphene are expected to propagate always with the same Fermi velocity  $v_F$ . Figure 2(c) shows



FIG. 3. (Color online) Final velocities for the Gaussian wave packet in Eq. (18), with pseudospin  $c_1=c_2=1$  and momentum  $\vec{q} = (0, k_y^0) + K$  as a function of (a) the momentum  $k_y^0$ , for widths d = 50 Å, 100 Å and 200 Å, and (b) the width d, for momenta  $k_y^0 = 0.01$  Å<sup>-1</sup>, 0.02 Å<sup>-1</sup>, and 0.04 Å<sup>-1</sup>. The symbols (curves) are obtained from the TB (Dirac) model. In (b), the results from the Dirac model for  $k_y^0=0.02$  Å<sup>-1</sup> (dashed) and 0.04 Å<sup>-1</sup> (solid) are multiplied by 0.985 and 0.97, respectively.

the velocity  $v_y$ , calculated by taking the derivative of the TB results for  $\langle y \rangle$  with respect to time, which exhibits clear oscillations that are damped as time evolves, converging to a final value  $v_y^f < v_F$  that depends on the initial wave packet's width *d* and wave vector  $k_y^0$ . The velocities obtained by the Dirac model are shown by symbols, where the same qualitative behavior is observed as obtained from the TB model, though for higher wave-packet momentum and width, a small quantitative difference is observed, which is a consequence of the different energy-momentum dispersion.

The oscillatory behavior of the velocity is a manifestation of the zitterbewegung, i.e., a trembling motion of the wave packet due to the interference between positive and negative energy states that makes up the initial Gaussian wave packet.<sup>3,9</sup> This effect is well known for relativistic particles, which are described by the Dirac equation, and is also observed for electrons in graphene in the vicinity of the *K* and *K'* points, since they can be described as massless quasiparticles by the Dirac equation as well. The velocity wiggles with shorter period and smaller amplitudes for larger values of  $k_y^0 d$ . The convergence of the velocities demonstrates that the zitterbewegung is not a permanent but a transient effect.<sup>9</sup>

Figure 3 shows the converged velocity  $v_y^f$  as a function of (a) the momentum  $k_y^0$  and (b) the width d of the Gaussian wave packet. The TB results (symbols) are compared to those calculated from Eq. (31) in Ref. 26 (curves), which was obtained analytically from the Dirac approximation in the  $t \rightarrow \infty$  limit and is repeated here just for completeness

$$\frac{v_y^f}{v_F} = 1 - \frac{1 - e^{-(k_y^0 d)^2}}{2(k_y^0 d)^2}.$$
 (20)

Within the Dirac model, one can observe that increasing d or  $k_{y}^{0}$  in Eq. (20), the final velocity increases monotonically and approaches  $v_F$ , which is reasonable, since a wider packet in real space leads to a narrower distribution in k space, whereas a higher value of the wave vector makes the center of the packet lay far from E=0. In both cases, the interference with negative energy states is reduced and, consequently, zitterbewegung effects are less significant. However, since the analytical formula (20) does not take into account any effect such as the curvature of the energy bands for higher energy states or trigonal warping effects, this formula is not expected to give accurate results for larger  $k_{v}^{0}$ . Indeed, Fig. 3(a) shows that a very good agreement between TB and Dirac results can be observed only for small values of  $k_y^0$  whereas for large  $k_y^0$ , the final velocities obtained from the TB model are lower than those obtained from the Dirac model and do not increase monotonically, but decreases slowly for very large  $k_v^0$ , as a consequence of the curvature of the energy bands. On the other hand, in Fig. 3(b) we observe that varying the wave packet width for a fixed momentum, good *qualitative* agreement with the Dirac model is obtained for almost any value of d. The curves for larger values of  $k_{y}^{0}$ (solid and dashed) are just quantitatively different from those obtained by the TB model, and they are comparable to the TB results after multiplication by a factor 0.985 (0.970) for  $k_v^0 = 0.02$  Å<sup>-1</sup> (0.04 Å<sup>-1</sup>). Worse qualitative agreement between TB and Dirac results in this case is observed only for very small d, where the Gaussian width in energy space, given by  $\Delta E = v_F \hbar d^{-1}$ , incorporates higher energy values, leading to deviations in  $v_y^f$  obtained from the TB model as compared to those from the Dirac model.

In Fig. 4(a) we show contour plots of the squared modulus of the wave function at t=40 fs for three different choices of wave vectors  $\vec{q} = (k_x^0, k_y^0) + K$  and initial pseudos-pinors: (1)  $\begin{bmatrix} 1, 0 \end{bmatrix}^T$ , with  $k_x^0 = 0$  and  $k_y^0 d = 4$ , (2)  $\begin{bmatrix} 1, i \end{bmatrix}^T$ , with  $k_x^0 = 0$  and  $k_y^0 d = 4$ , and (3)  $[1, i]^T$ , with  $k_x^0 d = 4$  and  $k_y^0 = 0$ . The curves (symbols) in Fig. 4(b) show the expectation value  $\langle x \rangle$ for each case obtained by the TB (Dirac) model. In case 1 (solid, circles), the pseudospinor points in the z direction, so that  $\langle \sigma_{\rm x} \rangle = \langle \sigma_{\rm y} \rangle$  and, consequently, the velocity for both inplane directions must be zero. Indeed, the wave packet splits into two equal parts that propagate in opposite y directions, leading to  $v_y=0$ . In the x direction, although there is still a small zitterbewegung,  $\langle x \rangle$  rapidly converges to a constant, leading to  $v_x=0$ . In case 2 (dashed, triangles), the pseudospinor points in the y direction but the momentum of the wave packet in this direction is zero, so that the packet splits in the y direction, since  $v_y = v_F \sigma_x = 0$ , but drifts slowly in the -xdirection (or, equivalently, y). In case 3 (dotted, squares), both the pseudospin and the momentum are in the y direction, so that the wave packet propagates in this direction without any splitting. This situation is comparable to the one in Fig. 2(a), since in both cases the pseudospin and momentum are in the same direction and, as a consequence, the wave packet propagates in this direction practically preserv-



FIG. 4. (Color online) (a) Contour plots of the squared modulus of the wave function after a time evolution of t=40 fs, for three initial configurations of pseudospin  $[c_1, c_2]^T$  and momentum  $\vec{q}_0$ : (1)  $[1,0]^T$ ,  $k_x^0 = 0$  and  $k_y^0 d = 4$ ; (2)  $[1,i]^T$ ,  $k_x^0 = 0$  and  $k_y^0 d = 4$ ; and (3)  $[1,i]^T$ ,  $k_x^0 d = 4$ ,  $k_y^0 = 0$ . (b) Expectation value of x obtained by the TB model for the initial wave packets 1 (solid), 2 (dashed), and 3 (dotted) as a function of time. The results obtained by the Dirac model, after the appropriate coordinates rotation (see text), are shown as circles, triangles, and squares, respectively. The inset shows the trajectory of the wavepacket obtained from the TB model for the initial wave packet 3.

ing its circular symmetry. However, in the case 3, the packet still presents a very weak oscillation in the v direction, and also drifts very slowly in this direction, as one can see from the trajectory of the packet in the x-y plane for this case, shown in the inset of Fig. 4(b). This oscillation and drift are related to the contributions of higher energy states in the wave packet: a wave packet centered around  $k_x^{(0)}=0$  and  $k_{y}^{(0)} \neq 0$ , as in Fig. 2(a), has a symmetric distribution of momenta in x direction even for higher energies and, consequently, there is no additional oscillation in this direction. On the other hand, a packet centered around  $k_x^{(0)} \neq 0$  and  $k_y^{(0)}$ =0, as in Fig. 4(b), does not have a symmetric distribution of momenta in the y direction due to the trigonal warping for higher energies and, consequently, some oscillations are observed in this direction. As the standard Dirac Hamiltonian  $H_D$  for graphene does not take trigonal warping into account, this effect is not observed in the Dirac model.

In the numerical work of Thaller,<sup>3</sup> as well as in the analytical work of Maksimova,<sup>26</sup> it is demonstrated within the Dirac model that even when  $k_y^0 = k_x^0 = 0$ , wave packet motion is still observed due to zitterbewegung effects. The velocities of the wave packet obtained from our TB model of graphene for wave-packet momenta exactly at the K' and K, i.e., points 1 and 2 in Fig. 1(a), respectively, are shown in Fig. 5. The velocities exhibit a damped oscillation with the same time-dependent modulus for any pseudospin and Dirac point, though they point in different directions: for  $[1,1]^T$  (solid) and  $[1,i]^T$  (circles) in K, the velocity is in the y and -xdirections of the lattice, respectively, which are exactly the



FIG. 5. (Color online) (a) Expectation value of the velocity as a function of time, for wave packets with  $k_y^0 = k_x^0 = 0$  and pseudospinor  $[1,1]^T$  (solid) and  $[1,i]^T$  (circles) at the Dirac point  $K = (0,4\pi/3\sqrt{3}a_0)$  [point 2 in Fig. 1(b)], and  $[1,1]^T$  (triangles) at  $K' = (2\pi/3a_0, 2\pi/3\sqrt{3}a_0)$  [point 1 in Fig. 1(b)]. The *x* and *y* components of the velocity in the latter case are shown as dashed and dotted curves, respectively.

directions of polarization of these pseudospinors after the  $\phi = \pi/2$  rotation required by the *K* cone 2. In the *K'* cone 1, the rotation angle is  $\phi = \pi/6$  and, accordingly, the velocity points in this direction, as one can see by the decomposition of the velocity in the components  $\langle v_x \rangle$  (dashed) and  $\langle v_y \rangle$  (dotted), which obey exactly the relations  $\langle v_x \rangle = (\sqrt{3}/2) \langle v \rangle$  and  $\langle v_y \rangle = (1/2) \langle v \rangle$ . Notice that the velocities converge exactly to  $v_F/2$ , a value that can also be obtained analytically by making  $k_y^0 d \rightarrow 0$  in Eq. (20).

Henceforth, we will consider initial wave vectors  $\vec{q}_0$  around the Dirac points 2 and 5 of Fig. 1(b), namely,

$$K = \left(0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right) \quad \text{and} \quad K' = \left(0, -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}\right), \qquad (21)$$

respectively. This choice is very convenient, since the rotation angles for these points are  $\phi = \pi/2$  and  $3\pi/2$ , respectively, so that the pseudospinor  $[1,1]^T$  points to the y (-y) direction in the former (latter) case. Hence, with this pseudospinor, wave packets in K (K') will propagate with positive (negative) velocity in the vertical zigzag direction.

#### B. External magnetic fields and strain

Recently,<sup>24</sup> it was shown theoretically that bending a graphene sheet into an arc of a circle produces a strong and almost uniform pseudomagnetic field profile. Figure 6(a) illustrates such a strained system, where the rectangular graphene sample of width *W* and height *L* is bent into an arc of a circle with inner radius *R*. As the (pseudo)magnetic field points in the same direction (opposite directions) at each *K* and *K'* points,<sup>21</sup> the combination of both external and strain-induced magnetic field effects provides a valley-dependent magnetic field. If one applies the appropriate external magnetic field for some configuration of the strained graphene, one can obtain an almost perfect suppression of the effective



FIG. 6. (Color online) (a) Sketch of the strained graphene sheet: we consider a rectangular sample of width W and height L, bent into an arc of circle with inner radius R. The unstrained graphene sheet is shown as open circles, for comparison. (b) Strain-induced magnetic field barrier step, obtained by bending the graphene lattice only in the  $y \ge 0$  region. The number of atoms was reduced in both figures, in comparison to the lattices studied in this work, in order to improve the visualization.

magnetic field at one of the Dirac cones, while the effective field in the other cone is enhanced. This leads to a complicated system to be studied within the Dirac approximation, since one has two completely different systems for the K and K' valleys. Namely, Landau levels would be present only around one of the cones (though one cannot expect a perfect Landau level spectrum, since the strain-induced magnetic field is not perfectly uniform in space), whereas in the other cone, the usual continuum spectrum would be observed. This motivated us to analyze the trajectories of a wave packet in such a system within the TB model, where we do not need to include the pseudomagnetic fields artificially in the Dirac cones, since they appear naturally when we consider the effect of the strain-induced changes in the inter-site distances on the hopping energies, as explained in the previous section.

In this section, we investigate the dynamics of a wave packet with width d=200 Å and initial wave vector  $k_x^0=0$ and  $k_v^0 = 0.02$  Å<sup>-1</sup> around the Dirac points K and K' of Eq. (21) in the presence of external and strain-induced magnetic field barrier steps. As in the K' valley the pseudospinor  $[1,1]^T$  is polarized in the negative y direction of the graphene lattice, we choose  $[1, -1]^T$  for this case, so that a wave packet in this valley will also propagate in the positive y direction. In order to obtain a pseudomagnetic field barrier step, we consider that the graphene layer is strained only in the  $y \ge 0$  region, as sketched in Fig. 6(b). We also consider an external magnetic field  $\vec{B} = B\Theta(y)\hat{z}$ , where  $\Theta(y)$  is the Heaviside step function, which leads to a magnetic barrier step for  $y \ge 0$ , described by the vector potential  $\vec{A} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$  $-By\Theta(y), 0, 0$ ]. In order to avoid effects due to zitterbewegung in the (pseudo) magnetic field region, the wave packet starts at the position  $x_0=0$ ,  $y_0=-420$  Å, so that it can travel for some time in the magnetic field-free region y < 0until its velocity converge to a time-independent value.

The influence of the external and strain-induced magnetic field barriers on the trajectories of the wave packet are analyzed separately in Fig. 7, which shows the trajectory of the centroid of the wave packets in *K* (symbols) and *K'* (curves) points, calculated as  $\langle r \rangle = (\langle x \rangle, \langle y \rangle)$ , (a) in a nonstrained graphene sheet with magnetic field barriers B=5 T (solid, circles), 7 T (dashed, triangles) and 10 T (dotted, squares)



FIG. 7. (Color online) Trajectories of the wave packet in the *x*-*y* plane, obtained by the TB method for such a system, for initial momentum  $k_y^0=0.02$  Å<sup>-1</sup> around *K* (symbols) and *K'* (curves) points, for (a) nonstrained graphene with magnetic barrier height B=5 T (solid, circles), 7 T (dashed, triangles), and 10 T (dotted, squares), and for (b) a graphene sheet bent into an arc of circle with radius R=1  $\mu$ m (solid, circles), 0.8  $\mu$ m (dashed, triangles), and 0.6  $\mu$ m (dotted, squares), considering B=0 T. In (b), symbols and curves coincide for each value of *R*.

and (b) in a strained graphene sheet with radius  $R=1 \mu m$ (solid, circles), 0.8  $\mu m$  (dashed, triangles) and 0.6  $\mu m$  (dotted, squares). All the trajectories form semi-circles in the  $y \ge 0$  region, which is due to the Lorentz force produced by the (pseudo) magnetic field. As the external magnetic field (radius of the strained region) increases (decreases), the radii of these semicircular trajectories are reduced, since a higher (pseudo)magnetic field produces a stronger modulus of the Lorentz force. Notice that the radii of trajectories in the external and pseudomagnetic fields cases are comparable, which means that for radii  $R=1-0.6 \mu m$  of the strained graphene, the generated pseudomagnetic field is also within  $\approx 5$  T and 10 T. Indeed, the strain induced pseudomagnetic field distribution for the bend graphene ribbon is given by<sup>24</sup>

$$B_{S}(x,y) = -4c \frac{\beta \Phi_{0}}{aL} \arcsin\left(\frac{L}{2R}\right) \cos\left[\frac{2x}{L} \arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right] \times \left[1 - \frac{R+y}{L} \arcsin\left(\frac{L}{2R}\right)\right], \quad (22)$$

where  $\beta \approx 2$  and *c* is a dimensionless constant which depends on the details of the atomic displacements.<sup>22</sup> Considering  $L/R \rightarrow 0$  in Eq. (22) the pseudomagnetic field can be approximated as  $B_S \approx -c\beta \Phi_0/aR = \omega/R$ . Using the value  $\omega \approx 4.5 \times 10^4$  T Å estimated numerically in Ref. 23, one obtains pseudomagnetic fields within  $B_S \approx 4.5 - 7.5$  T for  $R = 1 \ \mu m - 0.6 \ \mu m$ , which are of the same order of magnitude as the external magnetic field barrier, the trajectories of wave packets in *K* and *K'* points form circles in opposite directions, as shown in Fig. 7(a), which is reasonable, since these packets have opposite momentum, which causes a sign change in the Lorentz force. Conversely, considering the strain-induced magnetic barrier illustrated in Fig. 6(b), the trajectories of



FIG. 8. (Color online) (a) Trajectories on the *x*-*y* plane for wave packets with initial momentum  $k_y^0 = 0.02$  Å<sup>-1</sup> around *K* (symbols) and *K'* (curves) points, considering a graphene sheet bent into an arc of circle with radius R=1  $\mu$ m and an external magnetic field B=0 T (open, solid) and 4.9 T (full, dashed). The thin solid curves show the results for two other magnetic field intensities for the *K* packet. (b) Probability of finding the particle in  $y \ge 0$  as a function of time, for wave packets with the same configurations as in (a).

wave packets in K and K' curve in the same direction, since, although their momenta have opposite signs, the pseudomagnetic fields also point in opposite directions at each Dirac cone K and K'.

#### C. Strain-induced valley filter

Let us consider the strained sample in Fig. 6(b) with R =1  $\mu$ m. By comparing the radius of the semicircular trajectory of the wave packet in such a system with those obtained for different intensities of the external magnetic field barrier, one obtains the strain-induced magnetic field for this value of *R* as  $\approx 4.9$  T. Figure 8(a) shows the trajectories in the x-y plane of the centroid of the wave packets in a system where we combine a R=1  $\mu m$  strain for  $y \ge 0$  with an external magnetic field barrier B=0 T (solid, open) and 4.9 T (dashed, full), for wave packets in the K (symbols) and K'(curves) Dirac points. In the absence of the external magnetic field, both the K and K' packets exhibit the same semicircular trajectory, as discussed earlier. However, when we combine the effect of the strain-induced and external magnetic field barriers, the wave packet in K' undergoes a stronger Lorentz force and is readily reflected, whereas the one in the K point performs a practically straight trajectory, as if this packet is not influenced by any Lorentz force. This is a consequence of the fact that combining the effects of a pseudomagnetic field produced by a  $R=1 \ \mu m$  strain and a B =4.9 T external magnetic field produces a stronger magnetic field in the K' point, while in the K point these fields equilibrate, producing a practically magnetic field-free region for particles in this cone. In this situation, the system works as a valley filter, where only wave packets in the K Dirac cone are allowed to pass through the strained region, whereas the wave packets in K' are reflected. The results for the wave packet in K for two other values of the external magnetic field are shown as thin solid lines, showing that within a range of  $\Delta B = \pm 0.2$  T around B = 4.9 T, which is a reasonable range for magnetic field intensities in experiments, only



FIG. 9. (Color online) Probability of finding the electron in the filter region  $y \ge 0$ , for an initial wave packet given by a combination of Gaussian distributions around both *K* and *K'* Dirac points, for three different values of the *K* component of the wave packet  $\beta$ .

a weak Lorentz force is observed and the valley filter works fine.

The results of Fig. 8 are obtained for both external and pseudomagnetic field barriers starting at the same position y=0. It is straightforward to verify that if there is a mismatch between the starting points of the strained and external field regions, some deviations will occur in the trajectories of the wave packets but, provided the length of the mismatch is much smaller than the magnetic length, the filtering effect is still stable. As an example, a 30 Å mismatch between the external and pseudomagnetic field barriers in the system analyzed in Fig. 8 would produce a  $\approx 5^{\circ}$  deviation in the otherwise vertical trajectory of the wave packet in K whereas the wave packet in K' is still readily reflected by the combination of magnetic fields in the filter region.

The probability  $P^>$  of finding the particle in the strained  $y \ge 0$  region, calculated as

$$P^{>}(t) = \sum_{n^{>}} \sum_{m} |\Psi_{n,m}^{t}|^{2}, \qquad (23)$$

where  $n^>$  represents the lines of atomic sites with  $y \ge 0$ , is shown as a function of time in Fig. 8(b). In the B=0 T case, both wave packets in K (open circles) and K' (solid) stay in the strained  $y \ge 0$  region until  $t \approx 300$  fs, when they turn back into the y < 0 region, reflected by the Lorentz force induced by the strain. However, for B=4.9 T,  $P^>$  already approaches zero at  $t \approx 175$  fs for the packet in K' (dashed), whereas for K (full circles), it remains close to 1 even for large t.

The efficiency of the proposed valley filter is confirmed by Fig. 9, where we present  $P^{>}$  as a function of time for initial wave packets given by a combination of Gaussians around the *K* and *K'* points in Eq. (21),

$$\Psi = \sqrt{\alpha}\Psi_{K'} + \sqrt{\beta}\Psi_K, \qquad (24)$$

where  $\Psi_{K(K')}$  is the Gaussian wave packet in Eq. (18) with momentum  $\vec{q}$  around the K(K') Dirac point. The results are presented for three different values of  $\beta$ , where one can easily see that the probability of finding the packet in the strained region exhibits a peak at  $t \approx 80$  fs but, as the K' part of the packet is reflected by the magnetic barrier, this probability decays, reaching exactly  $P^> = \beta$  for large t. Such a system proves to be a perfect valley filter, which is able to reflect all the components of the incoming packet that are in the K' point and transmit a wave packet that is composed only of particles with momentum in the vicinity of K.

We point out that when a wave packet reaches the edges of a graphene nanoribbon, it can be scattered to a different Dirac cone.<sup>41</sup> Consequently, the efficiency of the valley filter could be compromised if one considers a thin nanoribbon, so that the filtered wave packet could still reach its boundaries and scatter back to the other valley. In order to avoid such an effect, we have considered a wide nanoribbon, so that for the time intervals we study in this work, boundary effects are not significant.

# D. External and pseudomagnetic field effects on the zitterbewegung

In a previous paper, Rusin and Zawadzki<sup>9</sup> used the Dirac Hamiltonian for graphene to show that the zitterbewegung. which is transient for B=0, as discussed earlier, is permanent for  $B \neq 0$ . Furthermore, the authors showed that for a Gaussian wave packet, the time evolution of the average value of the current is different in x and y directions, which they explain as due to the fact that the Dirac Hamiltonian is not symmetric in the momenta  $\hat{p}_x$  and  $\hat{p}_y$ . Although the same authors say in their subsequent paper<sup>27</sup> that this effect is unphysical because it violates the rotational symmetry of the x-y graphene plane, we believe this result is still physical: one must remember that the Dirac model of graphene comes from the tight-binding approach for this system, which describes a honeycomb lattice of atoms that is not symmetric in the x-y plane by definition, exhibiting  $C_{6v}$  symmetry, as mentioned in previous section. For each K and K' point, the coordinates x and y in the Dirac Hamiltonian represent different directions in the real honeycomb lattice of graphene, where for an infinite sample the x(y) coordinate in the Dirac equation is related to one of the zigzag (armchair) directions of the real sample. In this section, we use our TB model of graphene to extend the previous study of Rusin and Zawadzki<sup>9</sup> to different situations.

We now study the dynamics of a wave packet with width d=200 Å, pseudospinor  $c_1=1$  and  $c_2=1$  and initial wave vector  $k_x^0 = k_y^0 = 0$ , i.e., exactly at one of the Dirac points *K* and *K'* in Eq. (21), in the presence of an uniform applied external magnetic field  $\vec{B} = B\hat{z}$ , instead of the magnetic field barrier step considered in the previous subsection. We also consider a pseudomagnetic field obtained by bending the whole rectangular graphene sample into an arc of a circle with radius *R*, as illustrated in Fig. 6(a). The radius of the circle is considered as  $R=1 \ \mu$ m, which produces a  $\approx 4.9$  T pseudomagnetic field, as demonstrated in the previous section. Accordingly, we consider the external uniform magnetic field as B=4.9 T.

A few experimental techniques have been suggested in the literature for the observation of zitterbewegung.<sup>8,11</sup> An interesting one<sup>27</sup> is based on the fact that the wave packet  $\Psi(\vec{r},t)$ 



FIG. 10. (Color online) Electromagnetic dipole radiation as a function of time for wave packets with initial pseudospinor  $[1,1]^T$  at *K* (thin curves) and *K'* (thick curves), considering a graphene sheet (a) in the absence of strain and magnetic fields, (b) under an uniformly applied magnetic field *B*=4.9 T, (c) bent into an arc of circle with radius *R*=1  $\mu$ m (see Fig. 6) and (d) with both the uniform magnetic field *B*=4.9 T and the *R*=1  $\mu$ m bending. Solid (dashed) curves are the results for the  $\varepsilon_{\gamma}$  ( $\varepsilon_x$ ) component.

exhibits an electric dipole moment  $\vec{D}(t) = \langle \Psi(\vec{r}, t) | \vec{r} | \Psi(\vec{r}, t) \rangle$ and, consequently, the zitterbewegung yields an oscillation of this dipole moment, which is a source of electromagnetic radiation, described classically<sup>42</sup> by the equation

$$\vec{\varepsilon}(t) = \frac{d^2 \vec{D}(t)}{dt^2} \frac{\sin \Phi}{4\pi\epsilon_0 s},\tag{25}$$

where s and  $\Phi$  are the distance and angle of observation, respectively, and  $\varepsilon_0$  is the vacuum permittivity.

Figure 10 shows the effects of external and strain-induced magnetic fields on the electric field radiation produced by the zitterbewegung, written in units of  $\varepsilon_c = \sin \Phi / 4\pi \epsilon_0 s$ . Only weak oscillations are expected in the armchair (x) direction, since the pseudospin  $[1,1]^T$  points in the x direction in the Dirac model which, as mentioned earlier, is related to the zigzag (y) direction of the honeycomb lattice. Indeed, in Figs. 10(a)-10(d), the x component of the electric field (dashed) is always close to zero. In Fig. 10(a), we present the results in the absence of strain and magnetic fields, for comparison. In this case, the oscillations on the electric field are suppressed for larger time, which is due to the transient character of the zitterbewegung. Besides, the results for  $\varepsilon_{v}$  (solid) in the K (thin curves) and K' (thick curves) points have opposite signs, since for these points the axis of the Dirac cones are rotated by angles which differ by  $\pi/2$  difference. In Fig. 10(b), the uniformly applied magnetic field B=4.9 T in an unstrained sample leads to persistent oscillations in  $\varepsilon_v$ , which is related to the discrete Landau-level spectrum created by this field. Each Landau level that is populated by the Gaussian distribution contributes with a different frequency.<sup>9</sup> Figure 10(c) shows that such a persistent behavior is also obtained by bending the graphene sheet into an arc of circle with radius R=1 µm, which produces a pseudomagnetic field of the same order of magnitude. Notice that the amplitude of oscillations in this case is four times smaller than those found in Fig. 10(b) for the unstrained sample under an external magnetic field. In fact, these two cases are not expected to produce the same zitterbewegung, because, although both samples exhibit approximately the same magnitude of magnetic field, the strained sample has not only the pseudomagnetic field, but also a different distribution of atomic sites. Thus, in the strained case, there is an additional change in the direction of the pseudospin polarization as the wave-packet drifts, due to the lattice distortion itself. As we have demonstrated in Sec. III A, the zitterbewegung strongly depends on the pseudospin polarization and hence, the different interplay between the strained atomic sites and the initial pseudospin polarization produces a different zitterbewegung for the strained case, as compared to the one of the unstrained sample under an external field.

In Fig. 10(d), we combine the effects of the  $R=1 \mu m$ strain and B=4.9 T external field to produce a system where the magnetic field is practically zero in the K point, but is nonzero in the K' point, so that only the packet in the K' point exhibits persistent oscillations. For the K point, the external field compensates only the effect of the pseudomagnetic field, namely, the persistent zitterbewegung but it does not remove the effect of the lattice distortion. As a result, comparing the results for K (thin curves) in Figs. 10(a) and 10(d), one observes that the oscillations are transient in both cases, since there is no effective magnetic field, but they still exhibit a different oscillation profile at small t, due to the lattice distortion in the latter case, which is absent in the former.

#### **IV. CONCLUSION**

We presented a study of the dynamics of Gaussian wave packets in graphene under external and strain-induced magnetic fields, where the latter is obtained by bending the graphene sheet into an arc of a circle. The dependence of the zitterbewegung on the initial pseudospin of the wave packet is investigated, and the results obtained by means of the tight-binding model and the Dirac equation are compared. We demonstrate that the combination of the pseudomagnetic field, induced by bending the graphene sheet, along with an external magnetic field with appropriate strength can be used as an efficient valley filter. An incoming wave packet composed of momenta around the K and K' Dirac points is scattered such that all its components in one of the Dirac cones undergoes a strong Lorentz force and are readily reflected, while the components in the other cone are allowed to pass through the device with only small distortions in their trajectory, due to the very weak residual Lorentz force.

Our results also show that in the absence of external or strain-induced magnetic fields, the zitterbewegung is a transient effect whereas in the presence of any of these fields, the oscillations persist in time. In a strained sample under an external magnetic field with the appropriate strength, the effective magnetic field in one of the Dirac cones is enhanced, whereas in the other cone it is practically cancelled. In this situation, a permanent zitterbewegung is observed only for wave packets in one of the Dirac cones. The wave packet oscillations produce electric field radiation, which can be detected experimentally.

Finally, we believe the present work contributes to a better understanding of the relation between the results obtained from TB and Dirac approaches for graphene and those to be

- \*andrey@fisica.ufc.br
- †gil@fisica.ufc.br
- <sup>‡</sup>francois.peeters@ua.ac.be
- <sup>1</sup>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).
- <sup>2</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>3</sup>B. Thaller, arXiv:quant-ph/0409079 (unpublished).
- <sup>4</sup>W. Zawadzki and T. M. Rusin, Phys. Lett. A 374, 3533 (2010).
- <sup>5</sup>G. Dàvid and J. Cserti, Phys. Rev. B **81**, 121417(R) (2010).
- <sup>6</sup>E. Schrödinger, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., Phys. Math. Kl. **24**, 418 (1930).
- <sup>7</sup>W. Zawadzki, Phys. Rev. B **72**, 085217 (2005).
- <sup>8</sup>J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt, Phys. Rev. Lett. 94, 206801 (2005).
- <sup>9</sup>T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B 80, 045416 (2009).
- <sup>10</sup>Y.-X. Wang, Z. Yang, and S.-J. Xiong, EPL **89**, 17007 (2010).
- <sup>11</sup>R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zähringer, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos, Nature (London) **463**, 68 (2010).
- <sup>12</sup>V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **103**, 046801 (2009).
- <sup>13</sup>S.-M. Choi, S.-H. Jhi, and Y.-W. Son, Phys. Rev. B **81**, 081407(R) (2010).
- <sup>14</sup>F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella, and R. Pucci, Phys. Rev. B 81, 035411 (2010).
- <sup>15</sup>O. Bahat-Treidel, O. Peleg, M. Grobman, N. Shapira, M. Segev, and T. Pereg-Barnea, Phys. Rev. Lett. **104**, 063901 (2010).
- <sup>16</sup>T. Fujita, M. B. A. Jalil, and S. G. Tan, Appl. Phys. Lett. **97**, 043508 (2010).
- <sup>17</sup>Z. Wu, F. Zhai, F. Peeters, H. Xu, and K. Chang, arXiv:1008.4858 (unpublished).
- <sup>18</sup>E. Cadelano, S. Giordano, and L. Colombo, Phys. Rev. B 81, 144105 (2010).
- <sup>19</sup>G. Cocco, E. Cadelano, and L. Colombo, Phys. Rev. B 81, 241412 (2010).
- <sup>20</sup>Y. Lu and J. Guo, Nano Res. **3**, 189 (2010).
- <sup>21</sup>M. Vozmediano, M. Katsnelson, and F. Guinea, Phys. Rep. 496,

observed in future experiments on strained graphene-based structures.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This work was financially supported by CNPq under NanoBioEstruturas Contract No. 555183/2005-0, PRONEX/ CNPq/FUNCAP, CAPES, the Bilateral program between Flanders and Brazil, the Belgian Science Policy (IAP), and the Flemish Science Foundation (FWO-VI).

- 109 (2010).
- <sup>22</sup>F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim, Nat. Phys. 6, 30 (2010).
- <sup>23</sup>T. Low and F. Guinea, Nano Lett. **10**, 3551 (2010).
- <sup>24</sup>F. Guinea, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov, Phys. Rev. B **81**, 035408 (2010).
- <sup>25</sup>N. Levy, S. A. Burke, K. L. Meaker, M. Panlasigui, A. Zettl, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and M. F. Crommie, Science **329**, 544 (2010).
- <sup>26</sup>G. M. Maksimova, V. Ya. Demikhovskii, and E. V. Frolova, Phys. Rev. B **78**, 235321 (2008).
- <sup>27</sup>T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B 78, 125419 (2008).
- <sup>28</sup>E. Romera and F. de los Santos, Phys. Rev. B **80**, 165416 (2009).
- <sup>29</sup>V. Krueckl and T. Kramer, New J. Phys. **11**, 093010 (2009).
- <sup>30</sup>A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, Nat. Phys. 3, 172 (2007).
- <sup>31</sup>A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann, and H. Fehske, Rev. Mod. Phys. **78**, 275 (2006).
- <sup>32</sup>S. Mahapatra and N. Sathyamurthy, J. Chem. Soc., Faraday Trans. **93**, 773 (1997).
- <sup>33</sup>R. Kosloff, J. Phys. Chem. **92**, 2087 (1988).
- <sup>34</sup>A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters, and B. Szafran, Phys. Rev. B 80, 125331 (2009).
- <sup>35</sup>D. A. Bahamon, A. L. C. Pereira, and P. A. Schulz, Phys. Rev. B 79, 125414 (2009).
- <sup>36</sup>M. Governale and C. Ungarelli, Phys. Rev. B **58**, 7816 (1998).
- <sup>37</sup> V. M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres, Phys. Rev. B 80, 045401 (2009).
- <sup>38</sup>N. Watanabe and M. Tsukada, Phys. Rev. E **62**, 2914 (2000).
- <sup>39</sup>J. M. Pereira, A. Chaves, G. A. Farias, and F. M. Peeters, Semicond. Sci. Technol. 25, 033002 (2010).
- <sup>40</sup>H. N. Nazareno, P. E. de Brito, and E. S. Rodrigues, Phys. Rev. B 76, 125405 (2007).
- <sup>41</sup>J.-H. Chen, W. G. Cullen, C. Jang, M. S. Fuhrer, and E. D. Williams, Phys. Rev. Lett. **102**, 236805 (2009).
- <sup>42</sup>J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1975).

# Wave packet dynamics in semiconductor quantum rings of finite width

Andrey Chaves,<sup>1,\*</sup> G. A. Farias,<sup>1,†</sup> F. M. Peeters,<sup>1,2,‡</sup> and B. Szafran<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

<sup>2</sup>Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium

<sup>3</sup>Faculty of Physics and Applied Computer Science, AGH University of Science and Technology, al. Mickiewicza 30,

30-059 Kraków, Poland

(Received 27 July 2009; revised manuscript received 20 August 2009; published 25 September 2009)

The time evolution of a wave packet injected into a semiconductor quantum ring is investigated in order to obtain the transmission and reflection probabilities. Within the effective-mass approximation, the time-dependent Schrödinger equation is solved for a system with nonzero width of the ring and leads and finite potential-barrier heights, where we include smooth lead-ring connections. In the absence of a magnetic field, an analysis of the projection of the wave function over the different subband states shows that when the injected wave packet is within a single subband, the junction can scatter this wave packet into different subbands but remarkably at the second junction the wave packet is scattered back into the subband state of the incoming wave packet. If a magnetic field is applied perpendicularly to the ring plane, transmission and reflection probabilities exhibit Aharonov-Bohm (AB) oscillations and the outgoing electrons may end up in different subband states from those of the incoming electrons. Localized impurities, placed in the ring arms, influence the AB oscillation period and amplitude. For a single impurity or potential barrier of sufficiently strong strength, the period of the AB oscillations is halved while for two impurities localized in diametrically opposite points of the ring, the original AB period is recovered. A theoretical investigation of the confined states and time evolution of wave packets in T wires is also made, where a comparison between this system and the lead-ring junction is drawn.

DOI: 10.1103/PhysRevB.80.125331

PACS number(s): 73.21.Hb, 73.63.Nm, 73.43.Cd

# I. INTRODUCTION

Aharonov-Bohm (AB) (Ref. 1) effect is a fundamental problem at the heart of quantum mechanics. This effect can be observed in an interference experiment, e.g., as an oscillating current flowing through a loop that is threaded by a magnetic flux. It was first observed in a metal ring<sup>2</sup> and subsequently in a two-dimensional electron-gas ring<sup>3</sup> and has been intensively studied over the years both experimentally and theoretically. Due to recent advances in growth of semiconductor structures and nanolithography it has become possible to fabricate well-defined nanoring structures of high quality with controllable dimensions.<sup>4</sup> Recently, Martins et al.5 combined scanning gate microscopy experiments and simulations to demonstrate low-temperature imaging of the electron probability density in InGaAs/InAlAs quantum rings. It was also shown that a tip-induced modulation of the conductance arises from electron wave-function interferences. A theoretical analysis of these AB rings was made later, by Pala et al.,<sup>6</sup> where a generalized Kramers-Kronig relation was demonstrated between the local density of states and the conductance variation due to the scanning tip. Van der Wiel et al.<sup>7</sup> have studied the AB effect in a mesoscopic semiconductor ring with tunnel barriers defined by metallic gates on each ring arm, which enabled them to apply a welldefined potential difference between the two halves of the ring. By tuning the voltage, they were able to control the amplitude and phase of the AB oscillations in the conductance. Interference effects of single electrons in a solid-state environment were also observed experimentally by Gustavsson et al.,<sup>8</sup> the time-resolved detection of electrons passing through a double quantum dot embedded in an AharonovBohm interferometer was demonstrated, where it was observed that, even though the electrons travel one-by-one through the system, a well-pronounced AB interference is still built up.

In a previous theoretical work by Szafran and Peeters,<sup>9</sup> it was shown that the Lorentz force leads to an asymmetric injection of the electrons into the ring arms which resulted in a smaller interference effect and, consequently, to a reduction in the amplitude of the AB oscillations.<sup>10</sup> In Refs. 9 and 10, the leads and the ring were effectively one dimensional, i.e., the magnetic field cannot deflect the electron wave functions in the leads and the ring, and the Lorentz deflection is only active in the junction region. Furthermore, the electron was locked in the lowest subband and higher subbands were not taken into account.

In the present paper, we extend Refs. 9 and 10 as follows: (1) we include the finite width of the leads and ring, (2) we do not limit the number of subbands and, therefore, allow transitions between subbands, and (3) the lead-ring connection is modeled more realistically, i.e., the broadening of the junction is included, which is unavoidable in a real experiment. We found that this adiabatic connection between the leads and the ring has several consequences: (i) it influences strongly the injection efficiency from the lead into the ring, (ii) it leads to additional interferences, (iii) it acts as a scattering center inducing transitions between the different subbands, and (iv) it leads to localized and resonant states in the junction. The finite width of the ring and the leads results in subband selection effects which are absent in the pure onedimensional models. Although most of the experiments up to now consider rings with typical radii and widths of order 100 nm, the present work is focused on narrower systems, where the separation between subbands is larger, in order to get a



FIG. 1. (Color online) Potential profiles for (a) rings and (b) T wires, considering (top) right-angle and (bottom) smooth connections. The smooth connections are described by circles of radius  $R_s=300$  Å. The width in both systems is W=100 Å and the average radius is  $R_{av}=600$  Å. The potential is defined as V(x,y)=0 inside ring and channel regions (blue) and  $V_e$  outside (white).

better control on how many subbands are accessible for the wave packets.

Our theoretical approach follows the one of Refs. 9 and 10, where we inject a Gaussian wave packet into the ring from the left lead in a particular subband and calculate numerically "exact" (i.e., the results can be calculated for a given accuracy) its time evolution by solving the timedependent Schrödinger equation. This approach allows us to find the transmission and reflection coefficient and also possible bound states in the junctions.

The paper is organized as follows: in Sec. II, we present our theoretical model and discuss the numerical technique to solve the time-dependent Schrödinger equation. Symmetric rings are discussed in Sec. III. The influence of asymmetry between the upper and lower arms of the ring on the AB effect is studied in Sec. IV by inserting a Gaussian potential barrier or an impurity in the ring arm. Our conclusions are presented in Sec. V. The bound and resonant states in the lead-arm junction are investigated in the Appendix.

#### **II. THEORETICAL MODEL**

Our system consists of a planar quantum ring and channels for electron injection so that the motion of the electrons is constrained to be in the (x, y) plane (see Fig. 1). The electrons are considered within the effective-mass approximation and they are confined by a step potential, i.e., V(x,y)=0 inside the quantum ring and leads, and  $V(x,y)=V_e$  otherwise, where  $V_e$  is the conduction-band offset. In order to understand the dynamics of a wave packet passing through a channel-ring connection, we made also a brief study of a T-shaped wire.

Figure 1 shows a schematic view of our (a) rings and (b) T wires. The quantum ring is defined by two concentric circles of radii  $R_i$ =550 Å and  $R_o$ =650 Å so that the average radius of the system is  $R_{av}=(R_i+R_o)/2=600$  Å and the width is W=100 Å. The same width W is considered for the

left and right leads. For T wires, all channels have the same width W. Two different lead-ring connections will be studied: (1) a right-angle connection and (2) a smooth (adiabatic) connection. The smooth connections are described by circles of radius  $R_s$ , which are tangent to the walls of the channels and to the external circle of the ring. In the examples of Fig. 1 (bottom), the circles describing the smooth connections have radius  $R_s$ =300 Å.

An electron confined in a quasi-one-dimensional channel of width *W* has subband energy

$$E_n(k_x) = E_n^{(y)} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e},$$
 (1)

where  $E_n^{(y)} = n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2m_e W^2$ , if  $V_e$  is very large (for our numerical results we calculated  $E_n^{(y)}$  numerically for finite  $V_e$  value). In our approach, we inject a Gaussian wave packet, propagating in the x direction, from left to right,

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

where  $\phi_n(y)$  is the wave function of the *n*th eigenstate of the quantum well in the *y* direction, and  $k_x^i = \sqrt{2m_e \varepsilon_i / \hbar^2}$ , with  $m_e$  and  $\varepsilon_i$  as the electron effective mass and kinetic energy, respectively. The parameter  $\sigma$  gives the width of the wave packet, in the *x* direction.

The time evolution of the wave packet is studied by means of the split-operator technique, which consists in separating kinetic and potential terms in the time-evolution operator,

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{iH\Delta t}{\hbar}\right]\Psi(\mathbf{r}, t)$$
$$= e^{-iV\Delta t/2\hbar}e^{-iT_x\Delta t/\hbar}e^{-iT_y\Delta t/\hbar}e^{-iV\Delta t/2\hbar}\Psi(\mathbf{r}, t)$$
$$+ O(\Delta t^3), \qquad (3)$$

where  $T_{x(y)}$  is the kinetic-energy operator for x(y) direction and the error  $O(\Delta t^3)$  is a consequence of the noncommutativity of kinetic and potential terms.<sup>11</sup> If a magnetic field is present, an additional  $O(\Delta t^2)$  error appears in this expression because of the position-dependent vector potential in the kinetic terms. The potential terms are directly multiplied by the functions whereas the kinetic terms are rewritten in the Cayley form<sup>12</sup> and a finite difference scheme is used to calculate the derivatives.<sup>13–15</sup> The main advantage of this technique lies in the separation of the kinetic terms for each direction; this separation allows one to study a system of many degrees of freedom without dealing with gigantic matrices; instead, only a set of small matrices, one for each direction, appears in this approach.

Special care has to be taken for the boundary conditions at the entrance and exit of the leads. The main problem is that, as the wave packet reaches the edges of the computational box, it undergoes a spurious reflection, when one imposes that the wave function is zero at the boundaries. One possible way to overcome this problem is to consider a very long channel so that the wave packet would take a long time to reach the edge of the system, as was done in Refs. 9 and 10. However, this would lead to large computational costs, hence, alternative ways to deal with this problem have been developed. Kosloff and Kosloff<sup>16</sup> suggested the use of absorbing (imaginary) potentials at the edges, in addition to the real confinement potential of the system. Such an imaginary potential gradually absorbs the wave function before it reaches the edges, avoiding spurious reflection effects. Several forms of imaginary potential has been suggested and analyzed.<sup>17,18</sup> Another interesting way to solve this problem was suggested by Arnold et al.,<sup>19</sup> where completely transparent discrete boundary conditions were developed, based on the Laplace method for solving the time-dependent Schrödinger equation. However, the method was developed only for one-dimensional problems, using the Cayley form and the Crank-Nicolson scheme. A generalization of this method to two dimensions within the split-operator treatment would be needed in our case. Therefore, in this paper we considered the imaginary potential suggested by Manolopoulos,<sup>20</sup> which can be tuned to be free of reflections on the edge of the system and also at the beginning of the imaginary potential region, for a wide range of initial energies. This imaginary potential, which depends only on the direction of propagation x, is given by

$$V_{\rm im}(\bar{x}) = -iE_{\rm min} \left[ a\bar{x} - b\bar{x}^3 + \frac{4}{(c-\bar{x})^2} - \frac{4}{(c+\bar{x})^2} \right], \quad (4)$$

where  $a=1-16/c^3$ ,  $b=(1-17/c^3)/c^2$ , c=2.62206 and  $E_{\min}$  is the lowest electron energy allowed to be considered, which can be calculated from Eq. (2.27) of Ref. 20 as

$$E_{\min} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \frac{c}{2(x_2 - x_1)\delta} \right]^2, \tag{5}$$

for an imaginary potential localized between  $x_1$  and  $x_2$ . The accuracy parameter  $\delta$  is chosen as 0.2, to minimize reflections at  $x_1$ . The variable  $\overline{x}$  depends on x as

$$\bar{x} = 2k_{\min}\delta/(x - x_1), \tag{6}$$

where  $k_{\min} = \sqrt{2m_e E_{\min}/\hbar^2}$ . With these expressions, we choose  $x_2$  as the edge of the system and  $x_1 = 420$  Å before the edge, leading to a minimum energy  $E_{\min} \sim 25$  meV for  $m_e/m_0 = 0.041$ .

The transmission T and reflection R probabilities are calculated by integrating the component of the probability current in the direction of propagation, at some fixed points  $x_R$ and  $x_L$ , localized in the right and left channels, respectively,

$$T = \int_0^\infty dt \int_{-\infty}^{+\infty} dy J_x(x_R, y, t) \tag{7}$$

and

$$R = -\int_0^\infty dt \int_{-\infty}^{+\infty} dy J_x(x_L, y, t), \qquad (8)$$

where the x component of the probability current is defined as

$$J_{x}(x,y,t) = -i\frac{\hbar}{2m_{e}} \left(\Psi^{*}\frac{\partial}{\partial x}\Psi - \Psi\frac{\partial}{\partial x}\Psi^{*}\right) + \frac{e}{m_{e}}A_{x}\Psi^{*}\Psi.$$
(9)

The time integrals in Eqs. (7) and (8) are performed numerically up to a large value of time, in order to let the wave packet pass entirely through the point where  $J_x$  is measured. We checked carefully that the sum of transmission and reflection probabilities is T+R=1 with an accuracy of at least 0.1%. The wave packets passing through the points  $x_R$  and  $x_L$ travel in opposite directions, hence, a minus sign is put in the expression for R [Eq. (8)]. The magnetic field is always considered perpendicular to the plane of motion, i.e., in the *z* direction and the vector potential is taken in the Coulomb gauge  $\mathbf{A} = (-y, x, 0)B/2$ .

In order to study the scattering of the electron into different subbands, we project the wave function on the *j*th eigenstate of the quantum well at a fixed point  $x_i$ ,

$$P_j(x_i,t) = |\langle \Psi | \phi_j \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} dy \Psi(x_i,y,t) \phi_j(y) \right|^2.$$

This is the probability to find the electron in the *j*th subband at position  $x_i$  per length in x direction. The contribution of each subband state to the probability current can be calculated by

$$J_{x}^{(j)}(x,t) = -i\frac{\hbar}{2m_{e}} \left( \overline{P}_{j}^{*} \frac{\partial}{\partial x} \overline{P}_{j} - \overline{P}_{j} \frac{\partial}{\partial x} \overline{P}_{j}^{*} \right), \tag{10}$$

where the function  $\overline{P}_j(x,t) = \langle \phi_j | \Psi \rangle$  gives the part of the time-dependent wave function which is in the *j*th subband. The quantity

$$\langle J_x^{(j)} \rangle = \int_0^\infty dt J_x^{(j)}(x_r, t) \tag{11}$$

is the total (or time averaged) current in the *j*th subband passing through the cross section of the channel at  $x=x_r$ . Notice that, since the function  $\overline{P}_j(x,t)$  is not normalized,  $\langle J_x^{(j)} \rangle$  is not a probability and therefore, its value can be larger than one. Finally, the time-dependent probability current at a point  $x_i$  is given by

$$J_T(x_i,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_i,y,t)dy$$
(12)

and will help to understand the trajectory of the wave packet through the channels. Notice, however, that the timedependent probability current  $J_T$  defined in Eq. (12) measures only the propagation of a pulse in a system in the absence of a bias between the leads, hence it is not related to a steady-state current, but rather to a transient current, which is different from the currents defined in previous papers,<sup>21</sup> which were obtained by means of Green's functions.

With the present approach, we are also able to find bound states, by propagating an arbitrary initial wave function in the imaginary time domain.<sup>13</sup> Since any wave function can be written as a linear combination of eigenstates

$$|\Psi\rangle_t = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{-iE_n t/\hbar} |\Phi_n\rangle, \qquad (13)$$

where  $\Phi_n$  and  $E_n$  are, respectively, the eigenfunctions and eigenenergies of the *n*th eigenstate. If one takes  $\tau=it$ , with  $\tau \rightarrow \infty$ , the term corresponding to the ground state will dominate over the others and the function must converge to the ground state of the system as  $\tau$  increases. Excited states can also be obtained by using Gram-Schmidt orthonormalization by choosing as an initial wave-function one that is orthonormal to the ground state. Consequently, the ground-state wave function will be absent in the sum of Eq. (13), thus, the lowest-energy term in the sum is  $E_1$  and hence, the wave function will converge to  $|\Phi_1\rangle$  as  $\tau \rightarrow \infty$ . To obtain  $\Phi_2$ , one starts with a function which is orthogonal to  $\Phi_1$  and  $\Phi_0$ , and so on.

#### **III. SYMMETRIC RING**

We used our model to study the quantum confinement and the time evolution of a wave packet as described in the previous section, with  $x_0$ =-1100 Å,  $\sigma$ =200 Å, and n=1 (ground state for transverse motion) or 2 (first-excited state) [see Eq. (2)], inside a InGaAs/InAlAs heterostructures, where the conduction-band effective mass and band offset are taken as  $m_e$ =0.041  $m_0$  and  $V_e$ =600 meV, respectively. For a channel with width W=100 Å, this leads to subband energies  $E_n^{(y)} \approx 53$ , 207, and 443 meV, for n=1, 2, and 3, respectively. The corresponding values for  $V_e \rightarrow \infty$  are 91.7, 366.8, and 825.3 meV. Notice that the results for finite  $V_e$ satisfies approximately  $E_2^{(y)} \sim 4E_1^{(y)}$  and  $E_3^{(y)} \sim 9E_1^{(y)}$ .

#### A. Geometry-induced localized states

It is well known that a right-angle connection in T wires leads to one, and only one, confined state.<sup>13,22</sup> At the crossing point, the confined state has a zero-point energy lower than the ground-state energy of the quantum wells formed in the leads, which then act like barrier potentials around the region of the junction (see the Appendix for more details). Since the connections between the leads and the ring are similar to T-wire junctions, it is expected that two (degenerate), and only two, confined states would be observed in the channelring system, since, in this case, two connections are involved, leading to symmetric and antisymmetric states. This is observed, indeed, for simple channel-ring connections, as shown in Fig. 2(a). No confined excited state is observed. besides the practically degenerate antisymmetric state. The binding energy of this degenerate state is found to be  $E_0$  $\simeq 46$  meV, which is 7 meV lower than the ground-state energy of the quantum well mentioned earlier,  $E_0^{(y)} \simeq 53$  meV.

However, real systems have smooth connections, which can result in several nondegenerate bound states. We found that in this case, it is possible to have excited bound states that are localized at the lead-arm crossing region, as illustrated in Figs. 2(b) and 2(c), where the wave functions for the ground and second-excited states are shown, respectively, for a smooth connection with  $R_s$ =300 Å.



FIG. 2. (Color online) (a) Ground-state squared wave function (ground and first-excited states are degenerate states with symmetric and antisymmetric wave functions), for sharp channel-ring connections. (b) Ground and (c) second-excited-states squared wave functions, for smooth connections. Black lines illustrate the limits of the channel-ring profiles.

#### **B.** Time evolution for B=0

Three wave packets were considered, with average kinetic energies  $\varepsilon_1 = 70$  meV,  $\varepsilon_2 = 120$  meV, and  $\varepsilon_3 = 180$  meV, and  $\phi_{n=1}(y)$ , i.e., localized in the lowest subband. The corresponding average wave vector  $k_r^i$  is qualitatively illustrated in Fig. 3, where the parabolic energy subbands of the quantum well of width W created by the channels and ring arms are also shown. For  $\varepsilon_3$ , we have deliberately chosen a value larger than the energy of the second subband of the quantum well, which is about 153 meV above the first subband. This will allow us to observe the influence of this subband on the wave packet and on the physical properties of the system as well. As illustrated in Fig. 3, two values of  $k_x$ , defined as  $k_3^{(1)}$ and  $k_3^{(2)}$ , are possible for  $\varepsilon_3$ , one for each subband. Our results for  $\varepsilon_3$  are for  $k_3^{(1)}$  by default, except when explicitly mentioned that we are dealing with  $k_3^{(2)}$ . Since we are considering a wave packet, the initial wave function does not contain a single  $k_x$  value but rather a distribution of  $k_x$ 's around  $k_x^{(i)}$ , with width  $\Delta k_x$ , as illustrated in the right part of Fig. 3. This variation in  $k_x$  yields an energy distribution  $\Delta E$ , as illustrated in Fig. 3. For an initial wave packet as given by Eq. (2), the width in  $k_x$  space can be easily obtained from a Fourier transform of the wave function

$$\overline{\psi}(k_x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-i(k_x - k_x^{(i)})x_0} e^{-(k_x - k_x^{(i)})^2 \sigma^2/2} \phi_n(y).$$
(14)

It is easily seen that in reciprocal space the squared wave function is also a Gaussian but with a width proportional to



FIG. 3. (Color online) Energy versus wave-vector  $k_x$  diagram for a quantum wire (solid curves). The average energies of the considered three wave packets,  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ , and  $\varepsilon_3$  (thick dotted lines) are indicated. The widths of  $k_x$  and *E* distributions of the initial wave packet  $\varepsilon_3$  are represented by horizontal and vertical Gaussians, respectively. The wave vector  $k_3^{(1)}$  is related to the energy  $\varepsilon_3$  of the ground-state subband whereas  $k_3^{(2)}$  is for the same energy but for the first-excited subband.

 $1/\sigma$ . For the parameters chosen in the present work, we calculate from the full width at half maximum  $\Delta x = 2\sqrt{2} \ln 2\sigma \sim 470.96$  Å and  $\Delta k_x = 2\sqrt{2} \ln 2/\sigma \sim 0.011774$  Å<sup>-1</sup>. With the later, we can calculate the width  $\Delta E$  of the energy distribution of the wave packet

$$\frac{\hbar^2 (k_x^i + \Delta k_x)^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k_x^{i2}}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_x^i \Delta k_x}{m_e} + \frac{\hbar^2 \Delta k_x^2}{2m_e}, \quad (15)$$

where we identify  $\hbar^2 k_x^{i2}/2m_e$  as the energy  $\varepsilon_i$  and

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k_x^i \Delta k_x}{m_e} + \frac{\hbar^2 \Delta k_x^2}{2m_e}.$$
 (16)

From this expression and the value for  $\Delta k_x$  mentioned previously, we obtain  $\Delta E \sim 72$ , 90, and 108 meV, for  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ , and  $\varepsilon_3$ , respectively.

Solving the time-dependent Schrödinger equation gives us  $\Psi(x, y, t)$ . The projections of the time-dependent wave function on the ground (black,  $P_1$ ) and first-excited (red,  $P_2$ ) subband states of the channels were calculated numerically as functions of time at three different points of the system:  $x_l = -1100$  Å (left channel),  $x_a = 0$  Å, (upper arm) and  $x_r$ =1100 Å (right channel). The results are depicted in Figs. 4(a)–4(c), for  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ , and  $\varepsilon_3$ , respectively. A few remarkable facts are observed: (1) the electron is reflected and transmitted through the channels in packages, which are a consequence of the reflections at the lead-ring intersection points. (2) The wave function in the left and right channels is restricted to the lowest subband and thus has zero projection over the first-excited state. Remarkably, inside the ring, the wave function is partially scattered to the second subband. For  $\varepsilon_3$ , the projection on the second subband can even be dominant and larger than the projection on the ground state. Although  $\varepsilon_2$  is below the second subband, there is still a small nonzero projection  $P_2$  on the second subband, due to



FIG. 4. (Color online) Time evolution of the projection of the wave function on the ground (black) and first-excited (red) subbands of a quantum well of width W=100 Å, calculated at three different locations: left channel, upper arm of the ring, and right channel. The injected wave packet is in the lowest subband and has average energy (a)  $\varepsilon_1$ , (b)  $\varepsilon_2$ , and (c)  $\varepsilon_3$ . [see Fig. 3]

the wide distribution of  $k_x$ 's of the initial wave functions. Thus, the electron wave packet partly scatters to the second subband at the first lead-arm connection but it scatters back to the lowest subband at the second lead-arm connection, leading to an outgoing wave function that fully resides in the lowest subband. In Fig. 5, we consider a wave packet with average energy  $\varepsilon_3$  that is centered around  $k_3^{(2)}$ , in the second subband, so that the projection  $P_1$  is zero at both leads. Again, the projections  $P_1$  and  $P_2$  are nonzero inside the quantum ring arm. Although not shown in the figures, we have also calculated the projections over the second-excited state  $P_3$  and we found zero for the three cases of energy, inside the leads and the ring arms. However, as depicted in Fig. 6, considering a wave packet in the second subband with energy 430 meV, which is above the edge of the third subband of the system, which is about 390 meV, the projection  $P_3$  (blue) is nonzero inside the quantum ring arm. Notice that the peaks of  $P_2$  and  $P_3$  are shifted to larger time as compared to the peaks in  $P_1$ . This time delay is a consequence of the fact that  $k_x^{(1)} > k_x^{(2)} > k_x^{(3)}$  so that the wave packets in higher subbands move with lower velocity. These results clearly show that, owing to the fact that we are dealing with a finite width system, the wave function is not only allowed to reflect at the walls of the confinement potential of the ring and channels but it is also allowed to access other subbands, when it is inside the ring, as a consequence of scattering at the arm-ring connections. At the connection between the ingoing lead and the ring the wave packet can scatter into other


FIG. 5. (Color online) The same as Fig. 4(c) but now we consider the wave packet with energy  $\varepsilon_3$  to be in the second subband, with wave vector  $k_3^{(2)}$ .

subbands if energy conservation is satisfied. When part of the wave is scattered to the other subbands, a difference in phase of  $\pi$  is picked up between the left- and right-going waves (as viewed from the direction of the incoming wave) that leads to a destructive interference at the outgoing lead.

Both characteristics can also be illustrated by the time evolution of the contour plots of the squared wave functions. They are shown in Figs. 7(a) and 7(b), for four different time steps, starting with wave packets of energy  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$ , respectively. Figures 8(a) and 8(b) are for  $\varepsilon_3$  in subbands  $k_3^{(1)}$  and  $k_3^{(2)}$ , respectively. Right-angle (left panels) and smooth (right panels) lead-ring connections were considered. For the smooth case, the wave function exhibits a complicated interference pattern at the connections.

The presence of the packages observed in Fig. 4, due to the reflections at the lead-ring intersection points, can be



FIG. 6. (Color online) Time evolution of the wave-function projections on the ground (black), first-excited (red), and second-excited (blue) subband states of a quantum well of width W = 100 Å, calculated at the upper arm of the ring, for a wave packet in the second subband with energy 430 meV.



FIG. 7. (Color online) Contour plots of the time evolution of the squared wave function, for right-angle (left panels) and smooth (right panels) lead-ring connections. The initial wave packet is in the lowest subband with width  $\sigma$ =200 Å and energy (a)  $\varepsilon_1$  and (b)  $\varepsilon_2$ .

better understood if one looks at the time-dependent probability current in Fig. 9, which is calculated over the same three points,  $x_l$ ,  $x_a$ , and  $x_r$ , where the wave-function projections were calculated previously, for  $\varepsilon_1$  (black, solid),  $\varepsilon_2$ (red, dashed), and  $\varepsilon_3$  (blue, dotted). It is easily seen that there is more than one peak in the probability current in left and right leads. At the left channel, the positive peak is due to the incoming packet and the negative peaks are the reflected waves, which are separated by a region of zero probability current. This can also be understood from the time snapshots of the electron density shown in Figs. 7 and 8. In the upper arm of the ring, the probability current has both positive and negative peaks, meaning that the wave function traveled back and forth inside the ring arms. At the right lead, more than one positive peak is observed. This effect can be understood if one analyzes the trajectory of the wave packets through the system; the parts of the wave function which come from the first junction and travel through the upper and lower arms of the ring interfere at the second junction, and from this interference, part of the wave function is transmitted to the right channel, giving a contribution to the transmission probability while the other part travels back through the arms to the first junction (see Figs. 7 and 8). Back at the first junction, these waves interfere again, resulting in a wave that is transmitted into the left channel, hence, contributing to the reflection probability, and another pair of waves travels through the upper and lower arms of the ring toward the second junction again, and so on.

We estimate the times for a classical particle to perform these trajectories and found good agreement with our quantum simulations. For  $\varepsilon_1$  (black-solid lines) in Fig. 9, the first negative peak in the left channel and the first positive peak in



FIG. 8. (Color online) Contour plots of the time evolution of the squared wave function, for right-angle (left panels) and smooth (right panels) lead-ring connections. The initial wave packet has width  $\sigma$ =200 Å, energy  $\varepsilon_3$ , and is in the (a) lowest subband with wave vector  $k_3^{(1)}$ , and in the (b) second subband with wave vector  $k_3^{(2)}$ .

the right channel are found at 128.8 and 371.8 fs whereas for a classical particle, the reflected and transmitted times are 129.0 and 372.3 fs, respectively. The first positive peak in the upper arm of the ring is observed at 186.1 fs, which agrees with the time for a classical electron to reach this point,



FIG. 9. (Color online) Time-dependent probability current, calculated at three points: left channel, upper arm of the ring, and right channel, for wave packets with energies  $\varepsilon_1$  (black, solid),  $\varepsilon_2$  (red, dashed), and  $\varepsilon_3$  (blue, dotted) in the case of sharp lead-ring connections.



FIG. 10. (Color online) Transmission probabilities T for wave packets with energies  $\varepsilon_1$  (black, dashed) and  $\varepsilon_2$  (red, dotted) in the first subband, and with energy  $\varepsilon_3$  in the first (blue, solid) and second (green, dashed-dotted) subbands, as functions of the magnetic field, for (a) right-angle and (b) smooth lead-ring connections.

estimated as 186.2 fs. For the second reflected and transmitted packets, i.e., second negative (positive) peak in left (right) channel, which occur, respectively, at 594.8 and 832.2 fs, the times for a classical particle are slightly larger, 615.5 fs for reflection and 858.7 fs for transmission. Besides, the time for the second (negative) peak in the upper arm is 413.0 fs while for a classical particle, this time is estimated as 429.4 fs. Contrarily, considering a wave packet with energy  $\varepsilon_2$ , the times for reflected (transmitted) classical particles are found as 98.6 (284.3) fs, which are lower than the values found for the first negative (positive) peak in left (right) channel, which occurs at 112.4 (318.0) fs. The upper arm first peak is at 161.0 fs while for a classical particle, this time is also lower, 142.2 fs.

The snapshots shown in Figs. 7 and 8 illustrate clearly: (i) wave interference at the junctions, (ii) the transmission of the injection lead into the arms of the ring and the backscattering into the leads, and (iii) the radial distribution of the electron in the ring arm, i.e., with a maximum in the center of the channel for an electron wave packet in the lowest subband or a two-peak radial structure in case of an electron propagating in the second subband [see, e.g., t=120 fs pictures in Figs. 7(b), 8(a), and 8(b)]. In the latter case, the maxima of the wave function traces the classical path of an electron bouncing off the inner and outer ring boundaries.

#### C. Time evolution for nonzero B

The interference of the electron wave packet can be influenced by threading a magnetic flux through the ring. Figure 10 shows the calculated transmission probability T as a function of the applied magnetic field, for the previous three values of the wave packet energy. The well-known AharonovBohm periodic oscillations in T are clearly seen and the amplitude of such oscillations decreases as the magnetic field increases, an effect that is due to the imbalance of injection into the upper and lower arms of the ring as a consequence of the Lorentz force.<sup>9</sup>

Comparing the results for right-angle and smooth leadring connections in Figs. 10(a) and 10(b), respectively, we notice that, depending on the energy of the wave packet, the transmission probability and the amplitude of the AB oscillations can be either increased or reduced by the smoothness of the connection. This is surprising because one would intuitively expect that a smooth connection should always increase the transmission probability since the effective area in the junction is larger for the smooth case. However, one must remember that the lead-ring junction acts like a confining potential, as discussed in Sec. III A, where quantum resonance effects are present for some electron energies, and the existence of a smooth junction changes this resonances spectrum, which suggests that both the wave packet energy and the smoothness of the junction must play an important role in the transmission probability. This effect is discussed in more details in the Appendix, for a T-wire junction.

For  $\varepsilon_3$  in the first subband, the oscillations in the transmission probability have a very small amplitude and the average transmission in both cases of sharp and smooth junctions are practically the same. In the case of a sharp junction, the amplitude of the AB oscillations is very weak and more minima are observed as compared to the results for  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$ . The fact that in this case the transmission probability is far from 0 at  $\Phi = (n+1/2)\phi_0$ , where  $\phi_0$  is the flux quantum (although it shows a small minimum), as one would expect for an ideal QR, suggests that the interference that occurs in ideal rings, which is responsible for T=0 at these points, is not completely destructive in our system, specially for  $\varepsilon_3$ . Thus, for these values of  $\Phi$ , part of the wave packet undergoes destructive interference, which reduces the transmission probability and results in a small minimum but the other part continues and circles again over the ring so that a new interference occurs at the other junction, resulting in a doubling of the AB frequency or equivalently minima for  $\Phi$  $=(n+1/2)\phi_0/2$ . This behavior can also be observed in Fig. 11(a), where the transmission probability T is shown as a function of the magnetic field for three values of wave packet energy,  $\varepsilon = 140$  (black, dashed), 160 (red, dotted), and 170 (blue, solid) meV. The latter two energy values are higher than the second subband energy. For  $\varepsilon = 140 \text{ meV}$ , T exhibits the common AB oscillations, but for the other energies, the oscillation can be described by a superposition of two patterns of oscillations, one with minima at  $\Phi = (n+1/2)\phi_0$  and the other at  $\Phi = (n+1/2)\phi_0/2$  in case of sharp lead-ring connection. For smooth lead-ring connections, this effect is not observed, as shown in Fig. 11(b) because of a stronger interference effect at the junctions.

If a B=0.18 T magnetic field is applied perpendicular to the ring plane, as shown in Fig. 12(a) for  $k_3^{(1)}$ , the outgoing wave function in the right lead exhibits two peaks. From this result, one can infer that the outgoing wave function has a large projection  $P_2$  in the right channel, i.e., it can occupy the second subband in this channel. Conversely, if we inject a wave packet in the second subband with wave vector  $k_3^{(2)}$ , as



FIG. 11. (Color online) Transmission probabilities *T* for wave packets injected in the lowest subband with different energies  $\varepsilon$  = 140 (black, dashed), 160 (red, dotted), and 170 meV (blue, solid), as functions of the magnetic field, considering (a) right-angle and (b) smooth with  $R_s$ =300 Å lead-ring connections.

shown in Fig. 12(b), the outgoing wave function has a maximum in the center of the lead, which suggests that the projection  $P_1$  is large in the right lead for this value of magnetic field. This is an effect that was absent when B=0. For non-



FIG. 12. (Color online) Contour plots of the time evolution of the electron density, for right-angle (left panels) and smooth (right panels) lead-ring connections, in the presence of an applied magnetic field B=0.18 T, perpendicular to the ring plane. The initial wave packet has width  $\sigma=200$  Å, energy  $\varepsilon_3$  and is in the (a) lowest subband with wave vector  $k_3^{(1)}$ , and in the (b) second subband with wave vector  $k_3^{(2)}$ .



FIG. 13. (Color online) Contributions  $\langle J_x^{(j)} \rangle$  of the ground (black, dashed), first-excited (red, dotted), and second-excited (green, dashed-dotted) subband states to the transmission current, as functions of the magnetic field *B*, calculated at the right channel, considering wave packets with energy  $\varepsilon_3$  in the (a) first and (b) second subband, and (c) with energy  $\varepsilon = 430$  meV in the second subband. The blue solid line is the sum of the contributions due to the three subband states,  $\langle J_x^{(1)} \rangle + \langle J_x^{(2)} \rangle + \langle J_x^{(3)} \rangle$ .

zero magnetic field the projection  $P_2$  at the right channel for wave packets with energies  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$  are also nonzero but they become strongly dominant over  $P_1$  only for  $\varepsilon_2$  and  $\varepsilon_3$ . Notice, however, that for  $\varepsilon_2$ , as well as for  $\varepsilon_1$ , the transmission probability at this magnetic field intensity is almost zero [see Fig. 10(a)] so that this effect is better observed for  $\varepsilon_3$ . As the magnetic field increases,  $P_2$  ( $P_1$ ) at the left channel undergoes just very small fluctuations, even for  $\varepsilon_3$  in the first (second) subband.

The time-averaged contributions  $\langle J_x^{(j)} \rangle$  of the states of the first (black, dashed), second (red, dotted), and third (green, dashed-dotted) subbands to the probability current are plotted in Fig. 13 as a function of the magnetic flux, for wave packets with energy  $\varepsilon_3$  in the first (a) and second (b) subbands, and with energy 430 meV in the second subband (c). Since in (a) and (b) the wave packet energy is much lower than the third subband edge, the contribution  $\langle J_x^{(3)} \rangle$  of this state to the current is almost zero, then, it is not shown. The sum of  $\langle J_x^{(j)} \rangle$  for these three subband states is shown as a blue solid line, which mimics the transmission probabilities shown in Fig. 10(a) for  $\varepsilon_3$ , in a qualitative way. In Fig. 13(a) we observe that, considering a wave packet of energy  $\varepsilon_3$  in the first subband, for a magnetic field corresponding to a flux equal to an integer (half integer) of the quantum flux, the outgoing wave function on the right channel is predominantly in the first (second) subband. Similar conclusions can be drawn by analyzing the results in Figs. 13(b) and 13(c). In other words, these effects suggest that, besides the wellknown periodic AB oscillations in transmission probabilities, observed in Fig. 10, when we consider a wave packet with energy higher than the second subband edge, the projections of the outgoing wave packet over the subbands states in the right lead also present AB oscillations with period  $\phi_0 = h/e$ . These results were obtained considering a right-angle lead-ring connection but similar effects are also observed for smooth junctions (not shown in this work).

It is worthy to point out that if one considers a strong magnetic field or a wide lead, a mixing of subband states is also expected in the leads because of the magnetic force, which can deflect the wave function and make it move in a zigzag trajectory along the channels. This effect could not be observed in previous theoretical works,<sup>9,10</sup> where the traveling wave packet was described as a sequence of Gaussian basis functions centered along the same axis so that the magnetic force is not active in the leads and hence, the magnetic field could not deflect the wave function in the leads. However, for our finite width channels the magnetic force is active in the leads. Yet, for the weak magnetic fields we have considered so far, our channels are narrow enough to suppress the deflection of the wave function due to the magnetic field, and the period of a possible zigzag trajectory of the wave packet would be much longer than the leads extent.

#### IV. ASYMMETRIC RING: EFFECTS OF GAUSSIAN POTENTIALS AND IMPURITIES

As discussed in Sec. III C, in the absence of a magnetic field and when the wave packet is injected in a single subband, after it passes through the first lead-ring junction, it is scattered to other accessible subband states. However, as it reaches the second lead-ring junction, a completely destructive interference occurs for these other subband states so that the wave function leaves the ring in the initial subband state. This scenario no longer holds when a magnetic field is present and the outgoing wave function can be distributed over several subband states in the right lead. Actually, for  $\Phi = (n+1/2)\phi_0$  (n=integer), the AB effect is responsible for a completely destructive interference of the initial subband state of the wave function, consequently, the backscattered wave function has no projection over this state and is therefore situated in the other subband states, as observed in Fig. 13. Any extra phase shift in the wave function when propagating in the arms of the ring will disturb the destructive interference at the second junction. Such an extra phase shift can be induced by a magnetic field or through an electric field, i.e., potential variations. In the latter case, it is called the electrostatic AB effect. As an example, we consider a Gaussian quantum-well potential that is localized in the arm of the ring

$$\overline{V}(x,y) = -V_G \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_G}[(x - x_{arm})^2 + (y - y_{arm})^2]\right\}.$$
(17)

First we take the potential in the middle of the upper arm of the ring, i.e., at  $(x_{arm}, y_{arm}) = (0, R_{av})$ . The transmission probabilities for this case are plotted as functions of the potential depth  $V_G$  in Figs. 14(a) and 14(d), for rings with right-angle and smooth  $(R_s=300 \text{ Å})$  lead-ring connections, respectively,



FIG. 14. (Color online) [(a),(d)] Transmission probability as a function of the depth  $V_G$  of the Gaussian well, for wave packets with energy  $\varepsilon_3$  in the first subband  $(k_3^{(1)})$  and in the second subband  $(k_3^{(2)})$ , considering quantum rings with right-angle (left panels) and smooth, with  $R_s$ =300 Å, (right panels) lead-ring connections. Two values of the magnetic field *B* are considered: 0 T (solid) and 0.18 T (dotted). [(b),(e)] Time-averaged currents  $\langle J_x^{(1)} \rangle$  and  $\langle J_x^{(2)} \rangle$ , of the first and second subbands, respectively, considering a wave packet initially in the first subband, with  $k_3^{(1)}$ . [(c),(f)] Time-averaged currents  $\langle J_x^{(1)} \rangle$  and  $\langle J_x^{(2)} \rangle$  for a wave packet initially in the second subband, with  $k_3^{(1)}$ . (c),(f)] Time-averaged currents  $\langle J_x^{(1)} \rangle$  and  $\langle J_x^{(2)} \rangle$  for a wave packet initially in the second subband, with  $k_3^{(1)}$ . The lines  $\langle J_x^{(1)} \rangle$  and  $\langle J_x^{(2)} \rangle$  for *B*=0.18 T (dotted) were shifted by +0.5, for clarity [except in (c), where they were shifted by +1.0].

considering wave packets with energy  $\varepsilon_3$  initially in the first  $(k_3^{(1)})$  and second  $(k_3^{(2)})$  subband. Two values of magnetic field are considered, B=0 (solid, black) and 0.18 T (dotted, red), where the later corresponds to  $\Phi = \phi_0/2$ . If the wave packet starts in the first subband, with  $k_3^{(1)}$ , for a system with right-angle connections, the phase shift due to the Gaussian well is not able to disturb too much the transmission probabilities, and their values for both values of the magnetic field are almost the same. However, for smooth junctions or for wave packets with wave vector  $k_3^{(2)}$ , the Gaussian well potential in one of the arms of the ring is responsible for oscillations in the transmission probability, as its depth  $V_G$  increases. An analysis of the time-averaged currents  $\langle J_x^{(1)} \rangle$ (blue) and  $\langle J_x^{(2)} \rangle$  (green) propagating in the subband state j = 1 and j=2, respectively, as illustrated in Figs. 14(b) and 14(e), for  $k_3^{(1)}$ , and (c) and (f), for  $k_3^{(2)}$ , helps us to understand the behavior of the transmission probabilities. As observed in Fig. 14(b), for B=0 T (0.18 T), all the enhancement (reduction) in  $\langle J_x^{(2)} \rangle$  as  $V_G$  increases, is completely compensated by



FIG. 15. (Color online) Transmission probability as a function of the magnetic field for wave packets with energy (a)  $\varepsilon_2$  and (b)  $\varepsilon_3$ in the first subband  $(k_3^{(1)})$ , considering quantum rings with smooth  $R_s=300$  Å lead-ring connections, for several values of depth  $V_G$  of the Gaussian well: 0 (black, solid), 10 (red, dashed), 20 (blue, dotted), 30 (green, dashed-dotted), and 40 V (yellow, dashed-dotteddotted). The latter four curves are shifted in order to help visualization and the amount of shift is indicated on top of the curves.

a reduction (enhancement) in  $\langle J_x^{(1)} \rangle$  so that the transmission probability remains almost the same for any  $V_G$ . This effect happens only for  $\varepsilon_3$  in a structure with right-angle junction, which is a system where the AB oscillations in *T* exhibit halved period and small amplitudes (cf. Fig. 10 blue solid curve). For all the other cases, such a compensation is not present, so that the curves for B=0 and 0.18 T are strongly dependent on  $V_G$ . In all cases, the phase shift between wave functions traveling through the upper and lower ring arms is responsible for disturbing the otherwise completely destructive interference for other subband states in the second leadring junction, allowing for an outgoing wave function which has projections over both subbands in the right channel when  $V_G \neq 0$ .

This effect can be verified using a similar experimental setup as in Ref. 7. By tuning the back gate voltage one can select electrons traveling with energy  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ , or  $\varepsilon_3$  through the ring. The gate electrode localized over the center of one of the ring arms induces a localized potential that is tunable by the voltage applied on this gate. Besides, the experimental results of Ref. 7 suggest that the presence of an electrostatic potential in one of the ring arms induces a phase shift in the AB oscillations. The transmission probabilities calculated with our model for a smooth ( $R_s$ =300 Å) ring are shown as functions of the magnetic field in Fig. 15 for several values of  $V_G$ , considering incoming wave packets in the first subband with energies (a)  $\varepsilon_2$  and (b)  $\varepsilon_3$ . In fact, a change in the position of the transmission minima occurs as  $V_G$  increases from 0 (black, solid) to 40 V (yellow, dashed-dotted-dotted),



FIG. 16. (Color online) Transmission probabilities for a wave packet with energy  $\varepsilon_2$ , as functions of the magnetic field, considering smooth channel-ring connections, in the presence of (a) one impurity, localized at three different distances  $z_{imp1}$  from the ring plane: 1 Å (black, solid), 100 Å (red, dashed), and 400 Å (blue, dotted), and (b) two impurities, each one localized symmetrically in one arm of the ring, at distances  $z_{imp1}=1$  Å and  $z_{imp2}=1$  Å (black, solid) or  $z_{imp2}=100$  Å (red, dashed).

which can be interpreted as a phase shift of  $\pi$  in the AB oscillations. Actually, the results for intermediate values of  $V_G$ , namely, 10 (red, dashed), 20 (blue, dotted), and 30 V (green, dashed-dotted), show that the Gaussian potential is responsible for a reduction (increase) in the transmission probability at  $\Phi = n\phi_0 [\Phi = (n+1/2)\phi_0]$  so that the oscillations are shifted over  $\phi_0$  when  $V_G = 40$  V. The reason for this flip in the AB oscillations is owing to the fact that when the wave function hits a resonance of the potential well, it picks up a phase of  $\pi$ , which turns the AB maxima into minima and vice versa.<sup>9,10</sup>

Similarly, the influence of the presence of one negative impurity, localized at  $\mathbf{r}_{imp} = (0, R_{av}, z_{imp})$  (i.e., in the middle of the upper arm of the ring, at a distance  $z_{imp}$  from the ring plane) on the transmission T and reflection R probabilities is illustrated in Fig. 16(a), for a wave packet with energy  $\varepsilon_2$ . Smooth lead-ring connections are considered in Figs. 16(a) and 16(b). If the impurity is close to the plane, at  $z_{imp}$ =1 Å (black, solid), the AB oscillations are significantly affected; the period of such oscillations on the transmission and the reflection probabilities as a function of the magnetic field is halved. This behavior is similar to that found by Szafran and Peeters<sup>9</sup> in mesoscopic one-dimensional rings, when a Gaussian potential is inserted in one of the ring arms. As the impurity is put far from the ring plane, the original period of AB oscillations is recovered, though the presence of the impurity still affects the peak-to-valley difference in these oscillations, as observed for  $z_{imp}=100$  Å (red, dashed) and 400 Å (blue, dotted), for instance. Actually, the presence of an impurity in only one of the ring arms strongly breaks the azimuthal symmetry of the system, which is decisive for AB oscillations. If one considers two impurities localized in diametrically opposite sides of the ring, as  $\mathbf{r}_{imp1}$ = $(0, R_{av}, z_{imp1})$  and  $\mathbf{r}_{imp2} = (0, -R_{av}, z_{imp2})$ , for instance, the imbalance between the arms is removed and the original period of AB oscillations is recovered, as shown in Fig. 16(b), even if  $z_{imp1} \neq z_{imp2}$  (red, dashed). The peak-to-valley difference is also almost recovered for  $z_{imp1} = z_{imp2}$ , even when the impurities are very close to the ring plane, as can be observed if one compares the results for  $z_{imp1} = z_{imp2} = 1$  Å (black, solid) with those for  $\varepsilon_2$  in smooth channel-ring systems in the absence of impurities [see Fig. 10(b), red-dashed curve]. The recovering of AB oscillations when two impurities are localized in diametrically opposite sides of a quantum ring confirms the recent results of Farias et al.<sup>14</sup> for the case of quantum rings without leads.

#### **V. CONCLUSIONS**

We presented a theoretical study of the time evolution of a Gaussian wave packet in semiconductor quantum rings and T wires, where we studied the effects due to smooth leadring connections, magnetic fields, the presence of a Gaussian potential or an impurity in the ring arm(s) on the transmission probabilities. Although one would intuitively expect that a smooth connection will lead to a higher transmission probability, our results show that this depends strongly on the wave packet energy since such connections act like confining potentials, where quantum resonances are present, the transmission probability is affected not only by the smoothness of the junction but also by the energy of the incoming wave packet.

In the absence of a magnetic field, for higher wave packet energies, the electron is scattered at the first lead-ring connection to other subbands states but remarkably it is scattered back to the initial subband at the second lead-ring junction so that the incoming and outgoing wave functions in the leads are always in the same subband. However, a magnetic field can influence strongly the interference at the second junction such that at the AB resonances we found complete destructive interference of only the initial subband state, which results in incoming and outgoing electrons ending up in different subbands. This effect strongly affects the transmission probabilities, changing the amplitude and the period of AB oscillations.

The effect of asymmetry is analyzed by considering a negative impurity or a Gaussian potential localized in one of the ring arms. In the presence of such an asymmetry, it is possible to half the period of the AB oscillations and to reduce its amplitude. However, if two negative impurities are localized in diametrically opposite sides of the ring, the symmetry of the system is recovered and so are the period and the amplitude of the AB oscillations.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This work was financially supported by the Brazilian National Research Council (CNPq), under Contract No. Nano-



FIG. 17. (Color online) Energies of four low-lying bound states of a T-wire junction [see Fig. 1(b)], as functions of the radius of the circle describing the smooth junction. The insets show the probability density of the four bound states in case of  $R_s/W=4$ .

BioEstruturas 555183/2005-0, Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (Funcap), CAPES, Pronex/CNPq/Funcap, the Bilateral program between Flanders and Brazil, and the Belgian Science Policy (IAP).

#### APPENDIX: LOCALIZED STATES AND TIME EVOLUTION IN T WIRES

To understand better the importance of the lead-ring connection on the transmission, we study here the T-shaped wire structure. This structure, as shown in Fig. 1(b), is formed by a junction of two perpendicular quantum wells. Classically, this system exhibits unbound motion but it has been shown that this geometry can support one quantum bound state.<sup>13</sup> Other systems with classical unbound motion, such as crossshaped potentials, bend wires, and quantum cavities with channels, have been studied previously,<sup>22</sup> where quantum bound states were also found. The origin of these quantum bound states lies in the fact that the quantum wells forming the channels are responsible for a discrete energy spectrum in these regions, with nonzero ground-state energy. Therefore, in the intersection between the channels, the electron can occupy a state which has an energy lower than the zeropoint energy in the leads and, hence, it will not be able to propagate through the leads.

In Fig. 17, the eigenenergies for T wires with smooth connections are shown as functions of the radius  $R_s$  of the circle describing the connection, considering channels of width W=100 Å. The eigenstate energies are divided by the ground-state energy  $E_1^{(y)}$  of the channels while the radii  $R_s$  are divided by the channel width W. Notice that, for a simple connection, i.e., for  $R_s=0$  Å, only one confined state can be found, but, as  $R_s$  increases, more states are localized at the junction. The insets illustrate the squared modulus of the wave functions for each confined state when  $R_s=400$  Å. Results of Fig. 17 for T-shaped wires can be compared to the results for the W=100 Å lead-ring system, studied in Sec. III A. For a right-angle connection, there is only one bound state in both systems, which has energy  $E_0=44(46)$  meV for



FIG. 18. (Color online) Time-dependent probability current, calculated at the vertical (black, dotted) and horizontal (red, solid) leads of a W=100 Å T-shaped wire, at a distance 1400 Å from the center of the junction, considering right-angle and smooth, with  $R_s=300$  Å, connections. In (a), two values of wave packet energy were considered,  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$  while in (b), we consider  $\varepsilon_3$  in subbands  $k_3^{(1)}$  and  $k_3^{(2)}$ .

the T-wire (lead-ring) case. The small difference in energy is a consequence of the bending of the ring arms at the junction. For a smooth connection, with  $R_s=300$  Å, the T-shaped wire has four bound states, with energies  $E_0 \approx 16$  meV,  $E_1 \approx 33$  meV,  $E_2 \approx 38$  meV, and  $E_3 \approx 48$  meV whereas the lead-ring system presents two pairs of degenerated states, with energies  $E_0=E_1\approx 26$  meV and  $E_2=E_3\approx 50$  meV. In this case, the difference in energies is a consequence of the fact that for a smooth lead-ring junction the effective area where the bound state can reside is smaller than in the case of a smooth T junction.

T-shaped wires has attracted much interest also because these structures provide the possibility of constructing transistors acting by quantum modulation. The transport properties of T-shaped wires was theoretically studied by Sols et al.<sup>23</sup> where they calculated the transmission probability as a function of the electron energy and effective length of the lead perpendicular to the electrons motion for straight junctions. In Fig. 18, the time-dependent probability current is calculated at the horizontal (red, solid) and vertical (black, dotted) leads, at a distance of 1400 Å from the center of the junction. The probability current in the horizontal (vertical) lead is related to the reflected (transmitted) part of the wave packet. The initial wave packet starts in the horizontal lead, at  $x_0 = -1100$  Å. For a right-angle connection, sharp peaks for transmitted (dotted) and reflected (solid) packets are observed in Fig. 18(a) for  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$ . Since the distance from the junction is the same for the points where  $J_T$  is computed in vertical or horizontal leads, both peaks were expected to present maximum values at the same time. However, a small time delay of about 6 fs, between the transmitted and reflected maxima is observed. Besides, the time for a classical particle with energy  $\varepsilon_1$  ( $\varepsilon_2$ ) traveling through the same dis-



FIG. 19. (Color online) (a) Calculated transmission times for a classical particle traveling in a T-shaped wire (black circles) and the time where the maximum value of  $J_T$  occur in the vertical lead (red triangles), as functions of the wave packet energy  $\varepsilon$ , for leads of W=100 Å width, considering right-angle connections. (b) Time-averaged currents in the first  $\langle J_x^{(1)} \rangle$ , black) and second  $\langle J_x^{(2)} \rangle$ , red) subbands.

tances is about 322 (247) fs whereas the times where the peaks of transmitted and reflected waves occur are both lower (higher). The times for the classical approximation are shown as vertical dashed lines in Fig. 18 (top), for comparison. Actually, lower (higher) values for classical times, for a particle with energy  $\varepsilon_1(\varepsilon_2)$ , were found also for the lead-ring system, as mentioned in Sec. III B. A comparison between the times where the maxima of the transmission peaks occur (red triangles) and the transmission times for classical particles (black circles), as functions of the wave packet energy, in a W=100 Å T wire, is shown in Fig. 19(a). It is observed that, for energies higher than  $\sim$ 75 meV, the classical approach underestimates the transmission time in these systems. Actually, as the energy increases, the projection of the transmitted wave packet over the second subband state becomes larger, as observed in Fig. 19(b) and since the wave vector k for this subband is lower than that of the first subband, for the same energy, the wave function slows down, which explains the higher transmission time, as the classical approach accounts only for the first subband state. For a smooth connection with  $R_s = 300$  Å, as well as for energy  $\varepsilon_3$ , due to interferences at the junction, the outgoing waves do not yield sharp peaks in  $J_T$ , thus it becomes difficult to discuss the problem in comparison with a classical traveling particle in this case.

The transmission probability *T* as a function of the wave packet energy  $\varepsilon$  for a T-shaped wire with leads of width *W* =100 Å is shown in Fig. 20(a), for several values of the radius  $R_s$  of the circle describing the smoothness of the junc-



FIG. 20. (Color online) (a) Transmission probability as a function of the wave packet energy  $\varepsilon$  (in the lowest subband) for a T-shaped wire with leads of W=100 Å, considering several values of radius  $R_s$  for smooth connections. (b) Square root of the energies of the peaks and valleys for each curve shown in (a). The straight lines are linear fits to the symbols. Similar types of curves in (a) and (b) correspond to the same  $R_s$ .

tion. In Fig. 10, if one compares the results for (a) rightangle and (b)  $R_s = 300$  Å lead-ring connections, one observes that, for  $\varepsilon_1$  ( $\varepsilon_2$ ), the presence of smooth connections reduces (increases) the transmission probability. This is also observed for the T-wire case, if we analyze the results for right angle (black solid) and  $R_s$ =300 Å (yellow dashed-dotted-dotted), for energies  $\varepsilon = 70$  and 120 meV. Moreover, the transmission probability as a function of the wave packet energy exhibits an oscillatory behavior, which strongly depends on the radius  $R_s$  of the smooth connection. This oscillatory behavior resembles the one observed in the transmission coefficients for a one-dimensional quantum-well structure, when one considers electron energies which are higher than the barriers height. Indeed, our T-wire structure can be interpreted as a system consisting of two barriers, created by the zero-point energy of the channels, and a well, localized at the junction so that the incoming wave packet in the horizontal channel has energies which are, by definition, higher than these barrier heights. For a one-dimensional square well of width L and considering electrons with energy higher than the barrier height, a maximum of transmission probability is obtained when half the wavelength fits the well width L, i.e.,  $n\lambda/2$ =L, resulting in the resonant energy

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2,\tag{A1}$$

for the *n*th transmission peak. From this expression, it is expected that  $\sqrt{\varepsilon_n}$  increases linearly with *n*.

Such a linear trend is observed in the results for T wires, as shown in Fig. 20(b), where the square root of the wave packet energies  $\varepsilon^{1/2}$  for the *n*th maximum or minimum of

transmission probability, observed in Fig. 20(a), are plotted as symbols, for several values of radius  $R_s$  of the smooth connection between leads. Actually, the analogy between our T-wire system and a one-dimensional square well is of course not perfect, specially when smooth connections are considered. Also, we are dealing with a wave packet, not with a simple plane wave, and the resonances obtained by means of Eq. (A1) for a square well are not expected to be the same as for a Gaussian wave packet. Nevertheless, the linear fits of the symbols in Fig. 20(b), which are shown as curves, are an interesting tool to understand qualitatively the behavior of transmission probabilities in T wires, in compari-

\*andrey@fisica.ufc.br

#### <sup>†</sup>gil@fisica.ufc.br

- <sup>‡</sup>francois.peeters@ua.ac.be
- <sup>1</sup>Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- <sup>2</sup>R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, and R. B. Laibowitz, Phys. Rev. Lett. **54**, 2696 (1985).
- <sup>3</sup>G. Timp, A. M. Chang, J. E. Cunningham, T. Y. Chang, P. Mankiewich, R. Behringer, and R. E. Howard, Phys. Rev. Lett. 58, 2814 (1987).
- <sup>4</sup>B. Hackens, F. Martins, T. Ouisse, H. Sellier, S. Bollaert, X. Wallart, A. Cappy, J. Chevrier, V. Bayot, and S. Huant, Nat. Phys. **2**, 826 (2006).
- <sup>5</sup>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).
- <sup>6</sup>M. G. Pala, B. Hackens, F. Martins, H. Sellier, V. Bayot, S. Huant, and T. Ouisse, Phys. Rev. B **77**, 125310 (2008).
- <sup>7</sup>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).
- <sup>8</sup>S. Gustavsson, R. Leturcq, M. Studer, T. Ihn, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard, Nano Lett. 8, 2547 (2008).
- <sup>9</sup>B. Szafran and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 72, 165301 (2005).
- <sup>10</sup>B. Szafran and F. M. Peeters, Europhys. Lett. **70**, 810 (2005).

son to a one-dimensional well. From these linear fits, one can estimate the effective width of the confinement potential of the T-wire junction in this quantum-well picture. The slopes s of the  $\varepsilon^{1/2}xn$  curves can be obtained from Eq. (A1), for a square well, as  $s = \sqrt{\hbar^2/2m\pi/L}$ . For  $R_s=0$  (black, solid), 50 (red, dashed), 100 (blue, dotted), and 150 (green, dashed-dotted) in the T-wire system, the slopes of the lines shown in Fig. 20(b) correspond to one-dimensional quantum-well widths L of ~255.9, 302.4, 402.0, and 496.5 Å, respectively. The increase in L with  $R_s$  is intuitively expected because of the increasing area of the connection with  $R_s$ .

- <sup>11</sup>M. Suzuki, Phys. Lett. A 146, 319 (1990).
- <sup>12</sup>N. Watanabe and M. Tsukada, Phys. Rev. E 62, 2914 (2000).
- <sup>13</sup>M. H. Degani, Phys. Rev. B 66, 233306 (2002).
- <sup>14</sup>G. A. Farias, M. H. Degani, J. A. K. Freire, J. Costa e Silva, and R. Ferreira, Phys. Rev. B 77, 085316 (2008).
- <sup>15</sup>A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, and G. A. Farias, Microelectron. J. **39**, 455 (2008).
- <sup>16</sup>R. Kosloff and D. Kosloff, J. Comput. Phys. 63, 363 (1986).
- <sup>17</sup>D. Neuhasuer and M. Baer, J. Chem. Phys. **90**, 4351 (1989).
- <sup>18</sup>S. Mahapatra and N. Sathyamurthy, J. Chem. Soc., Faraday Trans. **93**, 773 (1997).
- <sup>19</sup>A. Arnold, M. Ehrhardt, and I. Sofronov, Commun. Math. Sci. 1, 501 (2003).
- <sup>20</sup>D. E. Manolopoulos, J. Chem. Phys. **117**, 9552 (2002).
- <sup>21</sup>G. Stefanucci and C.-O. Almbladh, Phys. Rev. B 69, 195318 (2004); V. Moldoveanu, V. Gudmundsson, and A. Manolescu, *ibid.* 76, 085330 (2007); A. Stan, N. E. Dahlen, and R. van Leeuwen, J. Chem. Phys. 130, 224101 (2009).
- <sup>22</sup>F. M. Peeters, Science and Engineering of One- and Zero-Dimensional Semiconductors, edited by S. P. Beaumont and C. M. Sotomayor Torres (Plenum, New York, 1990), p. 107.
- <sup>23</sup> F. Sols, M. Macucci, U. Ravaioli, and K. Hess, Appl. Phys. Lett. 54, 350 (1989).



Microelectronics Journal 39 (2008) 455-458

Microelectronics Journal

www.elsevier.com/locate/mejo

# The role of surface roughness on the electron confinement in semiconductor quantum rings

A. Chaves\*, J. Costa e Silva, J.A.K. Freire, G.A. Farias

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

Available online 31 August 2007

#### Abstract

The electron energy spectrum of  $GaAs/Al_{0.30}Ga_{0.70}As$  quantum rings under applied magnetic fields is calculated, taking into account the existence of rough interfaces between materials. The Schrödinger equation, within the effective mass approximation, is solved in a realistic model, not limited to small perturbations. Our numerical results show that the existence of roughness on the ring surface modifies significantly the electron confinement energy, lifts the degeneracy of the electron angular momentum transition points of the Aharonov–Bohm oscillations, and in some special cases, it can even suppress the ground state energy oscillations.

© 2007 Elsevier Ltd. All rights reserved.

PACS: 73.61.Ey

Keywords: Interface roughness; Quantum rings; Aharonov-Bohm effect

#### 1. Introduction

Recently, several research groups reported the growth of self-assembled ring-shaped semiconductor structures, which have attracted much interest due to the possibility of studying quantum topological effects [1,2]. Under applied magnetic fields perpendicular to the ring plane, periodic oscillations on the confinement energies are expected in such structures due to angular momentum transitions, as the magnetic field intensity increases, which is the so-called Aharonov–Bohm (AB) effect [3,4].

Most of the experimental works on quantum rings in the literature have shown that these structures have rough surfaces, instead of a perfect circular shape [5,6]. The aim of this work is to study the influence of the surface roughness on the electron confinement energies in GaAs/AlGaAs quantum rings, in the presence of an applied magnetic field parallel to the ring axis. A simple model is used to describe the roughness, where internal and external

\*Corresponding author.

E-mail address: andrey@fisica.ufc.br (A. Chaves).

ring radii are defined as depending on the angular coordinate. The Schrödinger equation for such a system is solved by a time evolution method in a realistic model, with finite barrier potentials and not limited to small perturbations. Numerical results show that the existence of rough surfaces lifts the degeneracy of the AB oscillations and it is also responsible for a significant shift on the energy levels.

#### 2. Theoretical model

Our model consists of a single QR in the presence of a magnetic field, applied perpendicular to the ring plane,  $\vec{B} = B\hat{z}$ . The QR is limited by internal and external radii defined as  $R_i$  and  $R_e$ , respectively. In order to reproduce the surface roughness of a real ring, a simple model is proposed, where the internal (external) ring radius depends on the angular variable  $\theta$  as

$$R_{i(e)}(\theta) = 2\sigma \sqrt{\frac{L_c}{R_{i(e)}}} \sum_{n>0} e^{(nL_c/2\overline{R_{i(e)}})^2} \times \cos(n\theta + \varphi_n) + \overline{R_{i(e)}}, \qquad (1)$$

<sup>0026-2692/</sup> $\$  - see front matter  $\$  2007 Elsevier Ltd. All rights reserved. doi:10.1016/j.mejo.2007.07.019



Fig. 1. Potential profiles for (a) an ideal ring and for rings with roughness on (b) internal, (c) external, and (d) both surfaces, considering  $R_i = 140$  Å,  $R_e = 240$  Å,  $\sigma = 2$  Å and  $L_c = 10$  Å.



Fig. 2. (a) Electron energy spectrum and (b) transition energies from ground state (solid) to first (dashed), second (dotted) and third (dashed-dotted) excited states, as a function of the magnetic field in an ideal QR, considering  $\overline{R_i} = 140$  Å and  $\overline{R_e} = 240$ .

where  $\sigma$  denotes the roughness amplitude,  $\overline{R_{i(e)}}$  is the internal (external) average radius,  $L_c$  is the correlation length and  $\phi_n$  is a random phase. The confinement



Fig. 3. Electron energy spectrum as a function of the magnetic field in QR with roughness on (a) internal, (b) external and (c) both surfaces, considering  $L_c = 5 \text{ Å}$ , for  $\sigma = 2 \text{ Å}$  (solid) and  $\sigma = 10 \text{ Å}$  (dotted).

potential is then defined as

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{if } R_{i} \leq \sqrt{x^{2} + y^{2}} \leq R_{e}, \\ V_{e} & \text{otherwise,} \end{cases}$$
(2)

where  $V_e$  is the electron band offset.

The Schrödinger equation for this system is solved by the time evolution of an arbitrary wave function in imaginary time domain,  $\tau = it$ . After some steps in time, the initial state converges to the ground state of the system [7]. Excited states are found by mixing this procedure with the Gram–Schmidt orthonormalization method.

#### 3. Results and discussion

The electron confinement energies in GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As QR under applied magnetic fields were calculated. In these systems, the conduction band offset and electron effective mass are given by  $V_e = 262 \text{ meV}$  and  $m_e/m_0 = 0.067$ , respectively [8].

Fig. 1 shows the potential profiles for the four cases of QR analyzed in this work: (a) an ideal ring, i.e. with no rough surfaces, and rings with roughness on (b) internal,



Fig. 4. Electron energy spectrum as a function of the magnetic field in QR with roughness on (a) internal, (b) external and (c) both surfaces, considering  $L_c = 20 \text{ Å}$ , for  $\sigma = 2 \text{ Å}$  (solid) and  $\sigma = 10 \text{ Å}$  (dotted).

(c) external, and (d) both surfaces. The internal and external average radii are  $\overline{R_i} = 140 \text{ Å}$  and  $\overline{R_e} = 240 \text{ Å}$ , respectively, and the parameters of the surface roughness are  $\sigma = 2 \text{ Å}$  and  $L_c = 5 \text{ Å}$ .

The electron (a) energy spectrum and (b) transition energies, as a function of the magnetic field for an ideal QR (see Fig. 1(a)), are shown in Fig. 2. Energy oscillations as the magnetic field increases, due to electron angular momentum transitions (AB effect), are clearly seen, and the degeneracy at the angular momentum transition points can be observed as well.

The energy spectra as a function of the magnetic field in QR with (a) internal, (b) external and (c) both rough surfaces were calculated for two different sets of roughness parameters: Fig. 3 presents the results obtained considering  $L_c = 5 \text{ Å}$ , for  $\sigma = 2 \text{ Å}$  (solid) and  $\sigma = 10 \text{ Å}$  (dotted), whereas Fig. 4 shows the results when one considers  $L_c = 20 \text{ Å}$ , for  $\sigma = 2 \text{ Å}$  (solid) and  $\sigma = 10 \text{ Å}$  (dotted). In the presence of rough surfaces, the AB oscillations become weaker and the confinement energies are shifted, specially when both surfaces are rough.

The electron transition energies from ground to first  $(E_1 - E_0)$  and second  $(E_2 - E_0)$  excited states, as a



Fig. 5. Transition energies from ground state to first and second excited states, as a function of the magnetic field in QR with roughness on internal (dotted), external (dashed) and both (solid) surfaces, considering  $L_c = 5 \text{ Å}$ , for (a)  $\sigma = 2 \text{ Å}$  and (b)  $\sigma = 10 \text{ Å}$ .

function of the magnetic field, in QR with internal (dashed), external (dotted) and both (solid) rough surfaces, are shown in Fig. 5, considering (a)  $L_c = 5 \text{ Å}$ , with  $\sigma = 2 \text{ Å}$ , and (b)  $L_c = 5 \text{ Å}$ , with  $\sigma = 10 \text{ Å}$ . It can be observed that the existence of rough surfaces lifts the degeneracies at angular momentum transition points, and this effect becomes stronger when the amplitude  $\sigma$  is increased. Although the energy shift due to the presence of roughness on both ring surfaces is maximum (see Figs. 3(c) and 4(c)), the transition energies in this case are lower than those found for rings with roughness only on internal or external surfaces.

#### 4. Conclusions

In this work, a simple model for describing rough surfaces in semiconductor quantum rings is proposed, and the influence of the surface roughness on the electron energy spectrum of  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$  QR, under an applied magnetic field perpendicular to the ring plane, was theoretically investigated. It was demonstrated that the existence of rough surfaces is responsible for a considerably shift on the energy levels. Furthermore, the degeneracy of the angular momentum transition points in the AB oscillations is lifted when rough surfaces are considered, and in special cases, the ground state energy oscillations can even be suppressed.

#### Acknowledgments

This work has received financial support from the Brazilian National Research Council (CNPq), under contract NanoBioEstruturas/CNPq 555183/2005-0, and PRONEX/CNPq/FUNCAP.

#### References

- T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, T. Noda, K. Kuroda, K. Sakoda, G. Kido, N. Koguchi, Physica E 32 (2006) 46.
- [2] X. Yu, J.-L. Zhu, X. Hu, Appl. Phys. Lett. 82 (2003) 4567.
- [3] B. Szafran, F.M. Peeters, S. Bednarek, Phys. Rev. B 70 (2004) 125310.
- [4] A. Bruno-Alfonso, A. Latgé, Phys. Rev. B 71 (2005) 125312.
- [5] V.I. Mashanov, H.-H. Cheng, C.-T. Chia, Y.-H. Chang, Physica E 28 (2005) 531.
- [6] D. Granados, J.M. García, Appl. Phys. Lett. 82 (2003) 2401.
- [7] M.H. Degani, Phys. Rev. B 66 (2002) 23306.
- [8] T. Mano, T. Kuroda, S. Sanguinetti, T. Ochiai, T. Tateno, J. Kim, T. Noda, M. Kawabe, K. Sakoda, G. Kido, N. Koguchi, Nano Lett. 5 (2005) 425.

## **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.

#### The necessary conditions for type-1.5 vortex behavior in two-band superconductors

A. Chaves,<sup>1,2,\*</sup> L. Komendová,<sup>1,\*</sup> M. V. Milošević,<sup>1</sup> J. S. Andrade Jr.,<sup>2</sup> G. A. Farias,<sup>2</sup> and F. M. Peeters<sup>1,2,†</sup>

<sup>1</sup>Departement Fysica, Universiteit Antwerpen, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerpen, Belgium <sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Dated: December 8, 2010)

We describe a semi-analytic approach to the two-band Ginzburg-Landau theory, which predicts the behavior of vortices in two-band superconductors. We show that the character of the short-range vortex-vortex interaction is determined by the sign of the normal domain - superconductor interface energy, in analogy with the conventional differentiation between type-I and type-II superconductors. However, we also show that the long-range interaction is determined by a *modified* Ginzburg-Landau parameter  $\kappa^*$ , different from the standard  $\kappa$  of bulk superconductor. This opens the possibility for 'type-1.5' vortex-vortex interactions, while the exact type of vortex interactions is temperature*dependent*, and can be *further tuned* by alterations of the material on the microscopic scale.

PACS numbers: 74.25.Dw, 74.70.Ad, 74.70.Xa

The multi-gap superconductivity arises when the gap amplitudes on different sheets of the Fermi surface are radically disparate, e.g. due to different dimensionality of the bands for the usual phonon-mediated pairing, as is the case in  $MgB_2$  [1], or due to the repulsive pairing interaction, as it appears to be the case in recently discovered iron-pnictides [2, 3]. The other examples of multi-gap materials include OsB<sub>2</sub>, iron silicides such as Lu<sub>2</sub>Fe<sub>3</sub>Si<sub>5</sub>, chalcogenides (NbSe<sub>2</sub>), but also the conventional superconductors (SCs) such as Pb when reduced to nanoscale [4].

In a strong magnetic field all superconducting condensates form normal-metal voids, as an intermediate state before superconductivity is fully destroyed. These normal domains tend to *merge* in type-I SCs in order to minimize their positive surface energy, whereas in type-II SCs they have negative surface energy and *split* into quantized vortices. In other words, vortices always repel in type-II SCs, and attract in type-I samples. However, in 2005 Babaev and Speight predicted the so-called semi-Meissner state in two-band SCs [5], the state with localized regions of high and low vortex densities, arising from short-range repulsive while long-range attractive vortexvortex interaction. This is clearly neither type-I nor type-II behavior, and very recently V.V. Moshchalkov et al. named it 'type-1.5 superconductivity', after observing stripes and clusters of vortices in single-crystal  $MgB_2$  [6]. These results have been (and still are) debated in the scientific community (see e.g. Ref. [7]). To date, the matter of competing vortex interactions has not been conclusively settled although recent years saw a surge of activities in this field. Ref. [8] demonstrated the type-1.5 behavior in systems where just one band is fully superconducting, and the other superconducts only due to direct coupling. Dao et al. [9] found different types of possible vortex-vortex interactions, but could not determine a universal criterion to differentiate between them. Finally a number of authors expressed scepticism to anything else but type-I or type-II behavior. In particular, Gever *et al.* showed that the normal metal/two-gap superconductor surface energy close to  $T_c$  depends just on a single Ginzburg-Landau (GL) parameter  $\kappa$ , and thus only either repulsive or attractive vortex-vortex interaction is possible [10]. As reenforced later by Kogan and Schmalian in Ref. [11], in the strict region of validity of the two-band GL theory the two superconducting condensates have identical length scales and the two-band superconductors map onto the standard single-band, thus either type-I or type-II, description.

In this Letter we derive clear criteria for the appearance of type-1.5 superconductivity in two-gap systems. Our analysis is based on the two-band GL theory, but with correct microscopic parameters obtained either from theoretical band structure calculations or by fitting the experimental penetration depth or specific heat data by the so-called  $\gamma$ -model [12]. We begin from the GL energy functional, which comprises single-band contributions from both condensates, the coupling term, and the energy of the magnetic field in and around the sample:

$$\mathcal{F} = \sum_{j=1,2} \alpha_j |\Psi_j|^2 + \frac{1}{2} \beta_j |\Psi_j|^4 + \frac{1}{2m_j} \left| \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi_j \right|^2 - \Gamma(\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*) + \frac{(\mathbf{h} - \mathbf{H})^2}{8\pi}.$$
 (1)

Here the two Cooper-pair condensates are described by the order parameters  $\Psi_1$  and  $\Psi_2$ , **H** is the applied magnetic field and  $\mathbf{h}$  the net one. The Josephson coupling term provides the 'minimal coupling', well described in literature. The temperature enters the energy expression through  $\alpha_{j=1,2}$ , linearly dependent on the temperature term  $\tau$  which approaches zero as temperature T approaches the critical one,  $T_c$  (in GL theory,  $\tau = \ln T_c/T \approx$  $1 - T/T_c$  [13]). Strictly speaking, the expansion leading to the GL theory is valid only in the immediate vicinity of  $T_c$ . We will nevertheless use this theory at somewhat lower temperatures as well, arguing, contrary to Ref. [11], that order parameters of two bands are generally not proportional and that they should be evaluated with precision higher than  $\tau^{1/2}$ . Indeed, for the fully correct consideration of the higher-order temperature terms, the standard GL theory has to be expanded, but our present approach does capture important physics to a first approximation, and is applicable to any form of the (further expanded) GL functional [14]. Note also that standard two-band GL theory remains fully correct for artificial, coupled systems of two SCs.

In this work we demonstrate the exciting magnetic behavior of coupled condensates through the vortexvortex interaction, in a similar fashion to Ref. [5] but within a correct microscopic framework. The parameters in Eq. (1) can then be expressed as:  $\alpha_i =$  $\begin{array}{l} -N(0)n_j\chi_j = -N(0)n_j(\tau - S_j/n_j\eta), \ \beta_j = N(0)n_j/W^2, \\ m_j = 3W^2/N(0)n_jv_j^2 \ \text{and} \ \Gamma = N(0)\lambda_{12}/\eta, \ \text{where} \\ \Lambda = \left| \begin{array}{c} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} = \lambda_{12} & \lambda_{22} \end{array} \right| \ \text{is the coupling matrix with de-} \end{array}$ terminant  $\eta$ ;  $n_i$  (N(0)) denotes partial (total) density of states,  $v_j$  are the Fermi velocities in the two bands, and  $W^2 = 8\pi^2 T_c^2/7\zeta(3)$ . For details on constants  $S_j$ we refer to Ref. [11]. This allows us to formally de-fine the coherence lengths  $\xi_j = \frac{\hbar v_j}{\sqrt{6W}}$  and penetration depths  $\lambda_j = \sqrt{\frac{3c^2}{16\pi N(0)e^2 n_j v_j^2}}$ , as well as the GL parameters  $\kappa_j = \lambda_j / \xi_j$  of the two condensates. Notice that  $\alpha_1$ and  $\alpha_2$  change sign at different temperatures. In particular, close to  $T_c$  both  $\alpha_j$  are positive but the coupled system is still superconducting. Such situation is already different from the one studied in Ref. [8], where at least one  $\alpha_j$  was negative. The Ginzburg-Landau equations minimize the functional from Eq. (1), and read (in dimensionless form)

$$(-i\nabla - \mathbf{A})^2 \Psi_1 - (\chi_1 - |\Psi_1|^2) \Psi_1 - \gamma \Psi_2 = 0, \quad (2a)$$

$$(-i\nabla - \mathbf{A})^2 \Psi_2 - \alpha (\chi_2 - |\Psi_2|^2) \Psi_2 - \frac{\gamma \kappa_2^2}{\kappa_1^2 \alpha} \Psi_1 = 0, \quad (2b)$$

$$-\triangle \mathbf{A} = \kappa_1^{-2} j_1 + \alpha \kappa_2^{-2} j_2, \qquad (2c)$$

where  $j_j = \Re \left[ \Psi_j^* (-i\nabla - \mathbf{A}) \Psi_j \right]$ ,  $\alpha = (v_1/v_2)^2$ ,  $\gamma = \Gamma/n_1 N(0)$ , both order parameters are scaled to W, distances to  $\xi_1$ , and vector potential to  $hc/4e\pi\xi_1$ .

In what follows, we demonstrate the method to determine the asymptotic long range interaction of vortices, before going into fine details at short vortex-vortex distances. We begin by writing the GL equations in the cylindrical coordinates and inserting the ansatz for one circularly symmetric vortex:  $\Psi_j = e^{i\theta} f_j(r)$  with the gauge  $\vec{A} = a(r)\hat{\theta}/r$ . The flux quantization requires  $a(r \to \infty) = 1$ . We then find the asymptotic values for the amplitudes of the condensates  $a_j$  from the GL equations without gradient terms and with zero applied field

$$(\chi_1 - a_1^2)a_1 + \gamma a_2 = \alpha(\chi_2 - a_2^2)a_2 + \frac{\gamma}{\alpha}\frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2}a_1 = 0, \quad (3)$$

and rewrite the equations in terms of the auxiliary functions Q(r) = a(r) - 1 and  $\sigma_j(r) = f_j(r) - a_j$ . Keeping only the highest order, the equation for Q(r)decouples from the other two equations and its solution is easily found to be the modified Bessel function  $Q(r) = \delta_3 r K_1(r\xi_1/\lambda)$ , where  $\delta_3 \in \mathbb{R}$  and we defined  $\lambda^{-2} = (a_1/\lambda_1)^2 + (a_2/\lambda_2)^2$ . Finally, we combine the equations for  $\sigma_j$  and obtain

$$\nabla^2 \nabla^2 \sigma_1 + C_1 \nabla^2 \sigma_1 + C_2 \sigma_1 = 0, \qquad (4)$$

where  $C_1 = (\chi_1 - 3a_1^2) + \alpha (\chi_2 - 3a_2^2)$  and  $C_2 = \alpha (\chi_2 - 3a_2^2) (\chi_1 - 3a_1^2) - \gamma^2 \kappa_2^2 / \alpha \kappa_1^2$ . The eigenfunctions of the operator  $\nabla^2$  for axially symmetric solutions are the well known Bessel functions. In this case we choose  $K_0(\beta r)$ , since otherwise  $\sigma_j$  does not decay monotonically with r. Substituting  $\nabla^2 K_0(\beta r) = \beta^2 K_0(\beta r)$  in Eq. (4), one obtains

$$\beta_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[ -C_1 \pm (C_1^2 - 4C_2)^{1/2} \right], \tag{5}$$

 $\sigma_1(r) = \delta_1 \cos(\omega) K_0(\beta_r r) - \delta_2 \sin(\omega) K_0(\beta_r r), \text{ and } \\ \sigma_2(r) = \delta_1 \sin(\omega) K_0(\beta_r r) + \delta_2 \cos(\omega) K_0(\beta_r r). \text{ Here } \\ \delta_1, \delta_2 \in \mathbb{R} \text{ and the mixing angle } \omega \text{ is given by } \tan(\omega) = \\ \gamma / [\beta_+^2 + (\chi_1 - 3a_1^2)]. \text{ We finish this brief account by referring to the detailed derivation in the Supplementary Material [15].}$ 

Having the asymptotic form of the order parameters and the vector potential, we now follow the standard procedure [16] for finding the vortex-vortex interaction in the  $r \to \infty$  limit, obtaining

$$E_{2B}(\mathbf{r}) = \delta_3^2 K_0\left(\frac{\mathbf{r}}{\lambda}\right) - \delta_1^2 K_0\left(\frac{\beta_-\mathbf{r}}{\xi_1}\right) - \delta_2^2 K_0\left(\frac{\beta_+\mathbf{r}}{\xi_1}\right), \quad (6)$$

where the units are now explicitly shown. Here, we list the consequences of the above asymptotics. i) Comparing Eq. (6) to the one-band case [17], where

$$E_{1B}(\mathbf{r}) = \delta_4^2 K_0 \left( \mathbf{r} / \lambda_{1B} \right) - \delta_5^2 K_0 \left( \sqrt{2} \mathbf{r} / \xi_{1B} \right), \quad (7)$$

shows that the lengthscale  $\lambda^{-2} = (a_1/\lambda_1)^2 + (a_2/\lambda_2)^2$ is playing the role of an effective penetration depth for the two-band superconductor, contrary to the suggested  $\lambda^{-2} = (1/\lambda_1)^2 + (1/\lambda_2)^2$  in Refs. [5, 18] which holds only in the (unrealistic) absence of coupling. ii) The parameters  $\delta_k$  are mostly different from each other, but can be calculated exactly in the Bogomol'nyi point for the two band system as  $\delta_1^2 = \delta_2^2 = 2\delta_3^2$ . For  $\gamma = 0$ , the choice of  $\xi_1 = \xi_2 = 1$  and  $\kappa_1 = \kappa_2 = 1$  in the two-band case is thus analogous to the Bogomol'nyi point  $\kappa_{1B} = 1/\sqrt{2}$  for a single band case and, accordingly, the long range interaction must vanish (and change sign for  $\kappa_1 = \kappa_2 < 1$ ). This directly illustrates that coupling of two type-II condensates may lead to a type-I behavior of the coupled system! iii) In Eq. (7) for single band SCs, it is clear that if  $\kappa_{1B} = \lambda_{1B}/\xi_{1B} > 1/\sqrt{2}$  (<  $1/\sqrt{2}$ ), the interaction potential  $E_{1B}(\mathbf{r})$  will be repulsive (attractive). For two-band SCs, Eq. (6) shows that the relevant parameters are  $\kappa_{\pm}^* = \frac{\beta_{\pm}\lambda}{\sqrt{2}}$ , rather than the nominal GL parameters  $\kappa_j$  for each condensate. If either  $\kappa_{\pm}^*$  or  $\kappa_{\pm}^*$  are below  $1/\sqrt{2}$ , the long-range vortex interaction is attractive (type-I like). Eqs. (3) and (5) provide simple means to evaluate this condition. iv) In the presence of coupling, the long range behavior of both  $\sigma_j$  depends exponentially on the smallest of  $\beta_-$  and  $\beta_+$ . Therefore, in the coupled case, we can define not only a single penetration depth for both bands, but also the order parameters for both condensates exhibit the same decay at large distances which implies a joint coherence length  $\xi^* = \xi_1/\min(\beta_+, \beta_-)$ .

This brings us to the discussion of the real criterion for the type-I or type-II nature of the vortex interaction. In the single-band case, the changing sign of the normal domain - superconductor surface energy  $E_S$  at the Bogomol'nyi point is a correct criterion. However, in the two-band case and for large vortex-vortex distance, the Bogomol'nyi point is determined by a single valued  $\kappa^* =$  $\min(\kappa_{+}^{*},\kappa_{-}^{*}) = 1/\sqrt{2}$ , which is not necessarily where the surface energy of the normal domain (vortex) changes sign! To show this, we calculate the surface energy  $E_S$  in a 1D model similar to Ref. [18], which we now expand to take into account the Josephson coupling and the temperature dependence of the parameters. First, we formally define the thermodynamic critical field of each condensate as  $H_{c(j)} = hc/(4e\sqrt{2\pi\lambda_j}\xi_j) = 2W\sqrt{\pi N(0)n_j}$ . The thermodynamic critical field of the coupled system  $H_{cc}$  is then obtained from the condition that the GL functional in Eq. (1) converges to zero for  $H = H_{cc}$ , leading to

$$H_{cc}^{2} = H_{c(1)}^{2}a_{1}^{2}(2\chi_{1} - a_{1}^{2}) + H_{c(2)}^{2}a_{2}^{2}(2\chi_{2} - a_{2}^{2}) + 4\gamma H_{c(1)}^{2}a_{1}a_{2}.$$
(8)

We then calculate the surface energy at  $H = H_{cc}$  by numerically solving the 1D version of Eqs. (2), with the boundary conditions taken as  $\psi_j(x \to -\infty) = 0$ ,  $A'(x \to -\infty) = 1$  (in the normal domain),  $\psi'_j(x \to \infty) = 0$ , and  $A'(x \to \infty) = 0$  (in the fully superconducting region).

As an example, Fig. 1 shows the surface energy  $E_S$  and the numerically obtained vortex-vortex interaction potentials (in a similar fashion as in Ref. [19]) for a set of parameters corresponding (arguably) to MgB<sub>2</sub>:  $\kappa_1 = 3.71$ and  $\xi_1/\xi_2 = v_1/v_2 = 0.255$  are taken from Ref. [6], the coupling matrix is obtained from Ref. [20], the temperature is fixed at  $T = 0.82T_c$ , while we vary the density of states in the two bands. We note that in all considered cases  $\kappa^* < 1/\sqrt{2}$  and the long-range interaction is always attractive, whereas short-range interaction changes to repulsive exactly when the surface energy  $E_S$  changes sign with increasing  $n_1/n_2$ . To conclude, the longrange vortex-vortex interaction is determined by  $\kappa^*$  with respect to  $1/\sqrt{2},$  while the short range behavior is determined by the sign of the surface **energy**  $E_S$ . This also proves insufficient the naive con-



FIG. 1: (color online) The normal domain - superconductor surface energy  $E_S$  as a function of the ratio of the density of states in the two bands (a) and the corresponding vortexvortex interaction energies (b-d) for the indicated choice of parameters. The short-range interaction force changes sign when the surface energy changes sign.



FIG. 2: (color online) The long-range interaction phase diagram for a MgB<sub>2</sub> crystal, at different temperatures and for varied values of the ratio between (a) the Fermi velocities, and (b) the partial density of states, of the two bands. In each panel, the black line separates the long-range attraction and long-range repulsion regions (left to right). The white lines denote the where  $E_S$  changes sign and short-range interaction changes from attractive to repulsive (left to right).

jecture from Ref. [6] that if the system has  $\lambda/\xi_1 > 1/\sqrt{2}$ and  $\lambda/\xi_2 < 1/\sqrt{2}$ , the vortex interaction should be long range attractive and short range repulsive. The actual behavior is far more complex, and can be *exactly* determined as explained above.

Recent calculations [10] have shown that as  $T \to T_c$ , the order parameters of the two condensates become proportional to each other and no type-1.5 behavior can be observed. Indeed, by analyzing  $\kappa^*$  and the sign of  $E_S$  at  $T \to T_c$  as explained above, we always found the same type of interaction in either long or short range limit. However, for T immediately below  $T_c$  the sign change of  $E_S$  and the transition from  $\kappa^* > 1/\sqrt{2}$  to  $\kappa^* < 1/\sqrt{2}$ occur for different sets of parameters, opening up the parameter space for observation the occurrence of type-1.5



FIG. 3: (color online) (a) The long-range vortex interaction  $(v_1/v_2, n_1/n_2, T)$  phase diagram for LiFeAs, for other parameters taken from Ref. [3]. The shown isosurface corresponds to  $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$  and the change of the long range vortex-vortex interaction. (b-d) Cuts of (a) in the  $T = 0.9 T_c$ ,  $v_1/v_2 = 0.722$ , and  $n_1/n_2 = 1.384$  planes, respectively. Black (white) lines correspond to  $\kappa^* = 1/\sqrt{2} (E_S = 0)$ .

behavior. This is shown in Fig. 2, where we plot  $\kappa^*$  as a function of temperature and also the ratios between the Fermi velocities (Fig. 2a) and the partial density of states of each condensate (Fig. 2b). The black line in Fig. 2 denotes  $\kappa^* = 1/\sqrt{2}$  and the white line indicates where  $E_S = 0$ . At  $T = T_c$  these lines coincide, in agreement with Ref. [10], but as T decreases, the lines separate, bordering the region where the system exhibits short-range repulsion  $(E_S < 0)$  and long-range attraction ( $\kappa^* < 1/\sqrt{2}$ ), i.e. type-1.5 behavior. This finding further creates a new possibility of *tuning the magnetic* interactions in two-band SCs by changing temperature. For example, for the parameters of  $MgB_2$  given in Ref. [6] (Fig. 2a for  $v_1/v_2 = 0.255$ ), we find that type-1.5 superconductivity occurs for  $T \lesssim 0.49 T_c$ , whereas pure type-II behavior is expected at higher temperatures. The experiment in Ref. [6] is made at  $T \approx 0.1 T_c$ , and should thus be repeated at higher temperatures to verify our prediction.

In Fig. 3(a) a similar phase diagram is constructed for recently discovered, and for many reasons exciting, pnictides. In particular, we show the results for LiFeAs, using the parameters given in Ref. [3], except for the fact that  $\lambda_{12}$  in the  $\Lambda$  matrix must be taken negative due to the  $s_{\pm}$  pairing. For this material, we extract  $\kappa_1 = 2.4$ ,  $n_1/n_2 = 1.384$  and  $v_1/v_2 = 0.722$ . Interestingly enough, as  $\kappa_2 = \kappa_1 \sqrt{n_1 v_1^2/n_2 v_2^2}$ , we note that both GL parameters are larger than  $1/\sqrt{2}$  if  $\sqrt{n_1 v_1^2/n_2 v_2^2} \gtrsim 0.295$ . Therefore, it can be once more verified that in a large portion of In conclusion, we have demonstrated the method to easily determine the nature of vortex-vortex interaction in two-band superconductors. This is of significant theoretical and experimental importance, as Figs. 2, 3 sketch just two examples of many possibilities attainable by twoband hybridization. Note that a plethora of transitions, even reentrant behaviors, can be found as a function of the microscopic parameters, which can be tuned experimentally by e.g. current injection [21]. With appropriate modifications of the initial energy functional our approach can also provide insight in similar situations encountered in nanoscale superconductivity, tailor-made two-component superconducting hybrids, and dirty twoband compounds.

ductivity in the phase diagram which grows larger as the

temperature decreases (see Fig. 3(d)).

Discussions with A. Shanenko, R. Prozorov and A. Golubov are gratefully acknowledged. This work was supported by the Flemish Science Foundation (FWO-Vl), the Belgian Science Policy (IAP), the bilateral project between Flanders and Brazil, CAPES and PRONEX/CNPq/FUNCAP.

- \* These authors contributed equally to this work.
- <sup>†</sup> Electronic address: francois.peeters@ua.ac.be
- F. Bouquet et al., Phys. Rev. Lett. 87, 047001 (2001); P. Szabó et al., Phys. Rev. Lett. 87, 137005 (2001).
- [2] M.L. Teague *et al.*, arXiv:1007.5086v1.
- [3] H. Kim et al., arXiv:1008.3251v3 (2010).
- [4] D. Eom et al., Phys. Rev. Lett. 96, 027005 (2006); A.A.
   Shanenko et al., Phys. Rev. B 82, 104524 (2010).
- [5] E. Babaev and M. Speight, Phys. Rev. B 72, 180502 (2005).
- [6] V.V. Moshchalkov *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 117001 (2009).
- [7] E. H. Brandt and M. P. Das, arXiv:1007.1107v1.
- [8] E. Babaev, J. Carlström, and M. Speight, Phys. Rev. Lett. 105, 067003 (2010).
- [9] V. H. Dao et al., arXiv:1007.1849v1.
- [10] J. Geyer et al., Phys. Rev. B 82, 104521 (2010).
- [11] V.G. Kogan and J. Schmalian, arXiv:1008.0581.
- [12] Kogan et al., Phys. Rev. B 80, 014507 (2009).
- [13] M.E. Zhitomirsky and V.H. Dao, Phys. Rev. B 69, 054508 (2004).
- [14] A.A. Shanenko *et al.*, unpublished.
- [15] See EPAPS file xxx.
- [16] J.M. Speight, Phys. Rev. D 55, 3830 (1997).
- [17] F. Mohamed et al., Phys. Rev. B 65, 224504 (2002).

- [18] J.-P. Wang, Phys. Lett. A 374, 58 (2009); Phys. Rev. B 82, 132505 (2010).
- [19] A. Chaves *et al.*, arXiv:1005.4630v1 (2010).
- [20] A.A. Golubov et al., J. Phys. Cond. Matt. 14, 1353

(2002); A. Gurevich, Physica C 456, 160-169 (2007).
[21] Y. Koval *et al.*, Appl. Phys. Lett. 96, 082507 (2010).

#### THE LONG-RANGE BEHAVIOR OF A VORTEX IN A TWO-GAP SUPERCONDUCTOR

In cylindrical coordinates, considering the ansatz for one circular symmetric vortex  $\Psi_j = e^{i\theta} f_j(r)$ , and substituting the gauge  $\vec{A} = a(r)\hat{\theta}/r$ , we rewrite Ginzburg-Landau Eqs. (2a-c) from the main text as

$$\frac{d^2 f_1}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_1}{dr} - \frac{(a-1)^2}{r^2} f_1 + (\chi_1 - f_1^2) f_1 + \gamma f_2 = 0,$$
(1a)

$$\frac{d^2 f_2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{df_2}{dr} - \frac{(a-1)^2}{r^2} f_2 + \alpha (\chi_2 - f_2^2) f_2 + \frac{\gamma}{\alpha} \frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2} f_1 = 0,$$
(1b)

and

$$\frac{d^2a}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{da}{dr} - (a-1)\left(\frac{f_1^2}{\kappa_1^2} + \alpha\frac{f_2^2}{\kappa_2^2}\right) = 0.$$
(1c)

For  $r \to \infty$ , a converges to 1 and  $f_j$  to a constant  $a_j$ . The limit  $r \to \infty$  leads to the set of non-linear coupled equations for  $a_j$ :

$$(\chi_1 - a_1^2)a_1 + \gamma a_2 = 0, (2a)$$

$$\alpha(\chi_2 - a_2^2)a_2 + \frac{\gamma}{\alpha}\frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2}a_1 = 0.$$
 (2b)

These can be decoupled by defining the ratio  $\rho = a_1/a_2$ , which then obeys the fourth order equation

$$\frac{\gamma}{\alpha^2} \frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2} \rho^4 + \chi_2 \rho^3 - \chi_1 \rho - \gamma = 0.$$
 (3)

Such an equation has a laborious analytical solution known as Ferrari's method, which will not be presented here, but can be found in Ref. [1]. From Eq. (2), one obtains the dependence of the constants  $a_j$  on the ratio  $\rho$  as

$$a_1 = \sqrt{\frac{\gamma}{\rho} + \chi_1},\tag{4a}$$

$$a_2 = \sqrt{\frac{\gamma}{\alpha^2} \frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2} \rho + \chi_2}.$$
 (4b)

In order to eliminate high order terms for large distances, we must use auxiliary functions that approach zero as  $r \to \infty$ , namely, Q(r) = a(r) - 1 and  $\sigma_j(r) = f_j(r) - a_j$ . Keeping only first order terms in these functions, Eqs. (1) become

$$\frac{d^2\sigma_1}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\sigma_1}{dr} + (\chi_1 - 3a_1^2)\sigma_1 + \gamma\sigma_2 = 0, \qquad (5a)$$

$$\frac{d^2\sigma_2}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\sigma_2}{dr} + \alpha\left(\chi_2 - 3a_2^2\right)\sigma_2 + \frac{\gamma}{\alpha}\frac{\kappa_2^2}{\kappa_1^2}\sigma_1 = 0, \quad (5b)$$

and

$$\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{Q}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{Q}{r}\right) - \left(\frac{\xi_1^2}{\lambda^2} - \frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{Q}{r}\right) = 0, \quad (5c)$$

where we defined  $\lambda^{-2} = (a_1/\lambda_1)^2 + (a_2/\lambda_2)^2$ . The solution of Eq. (5c) is the Modified Bessel function  $Q(r) = \delta_3 r K_1(r\xi_1/\lambda)$ . Similarly, if  $\gamma = 0$ , Eqs. (5a) and (5b) are decoupled and easily identified as Modified Bessel equations, whose solutions are  $\sigma_1(r) = \eta_1 K_0(\sqrt{2\chi_1}r)$  and  $\sigma_2(r) = \eta_2 K_0(\sqrt{2\alpha\chi_2}r)$ . On the other hand, if  $\gamma \neq 0$ , the equations for  $\sigma_j$  are still coupled and, in order to decouple them, one must define the operator  $\hat{L}_2 = \nabla^2 + \alpha (\chi_2 - 3a_2^2)$ , so that  $\hat{L}_2 \sigma_2 = -(\gamma \kappa_2^2/\alpha \kappa_1^2)\sigma_1$ , and apply it on Eq. (5a), obtaining

$$\nabla^2 \nabla^2 \sigma_1 + C_1 \nabla^2 \sigma_1 + C_2 \sigma_1 = 0. \tag{6}$$

Here  $C_1 = (\chi_1 - 3a_1^2) + \alpha (\chi_2 - 3a_2^2)$  and  $C_2 = \alpha (\chi_2 - 3a_2^2) (\chi_1 - 3a_1^2) - \gamma^2 \kappa_2^2 / \alpha \kappa_1^2$ . The operator  $\nabla^2$  for axially symmetric solutions has eigenfunctions given by Bessel functions  $J_0(\beta r)$  and  $Y_0(\beta r)$ , with eigenvalue  $-\beta^2$ , or modified Bessel functions  $I_0(\beta r)$  and  $K_0(\beta r)$ , with eigenvalue  $\beta^2$ . From these four eigenfunctions, only the latter satisfies the condition that  $\sigma_j$  must decay monotonically with r. Substituting  $\nabla^2 K_0(\beta r) = \beta^2 K_0(\beta r)$  in Eq. (6), one obtains

$$\beta^4 + C_1 \beta^2 + C_2 = 0, \tag{7}$$

and

$$\sigma_1(r) = \delta_1 \cos(\omega) K_0(\beta_- r) - \delta_2 \sin(\omega) K_0(\beta_+ r), \quad (8a)$$

$$\sigma_2(r) = \delta_1 \sin(\omega) K_0(\beta_- r) + \delta_2 \cos(\omega) K_0(\beta_+ r), \quad (8b)$$

where

$$\beta_{\pm} = \sqrt{\frac{-C_1 \pm \sqrt{C_1^2 - 4C_2}}{2}}.$$
 (8c)

Notice that in Eqs. (8), each  $\sigma_j$  must contain the Bessel functions for both  $\beta_{\pm}$ , in a combination that is conveniently written in the form of a mixing angle  $\omega$  [2]. In the  $\gamma \to 0$  limit, one has  $\beta_- \to \sqrt{2\chi_1}$  and  $\beta_+ \to \sqrt{2\alpha\chi_2}$ . Moreover, substituting Eqs. (8) in the differential equation (5a), one obtains

$$\tan(\omega) = \frac{\gamma}{\beta_{+}^{2} + (\chi_{1} - 3a_{1}^{2})},$$
(9a)

so that  $\gamma \to 0$  leads to  $\omega \to 0$  and, consequently, to  $\sigma_1(r) \to \eta_1 K_0(\sqrt{2\chi_1}r)$  and  $\sigma_2(r) \to \eta_2 K_0(\sqrt{2\alpha\chi_2}r)$ , as expected.

The parameters  $\delta_k$   $(\eta_k)$  in the expressions for Q(r),  $\sigma_1(r)$  and  $\sigma_2(r)$  are unknown real constants that can only be determined by fitting numerical solutions for Eqs. (1) in analogy to what is done in Ref. [3]. Having the asymptotic form of the order parameters and the vector potential, one can further follow the standard procedure [4] for finding the vortex-vortex interaction in the  $r \to \infty$  limit, obtaining

$$E_{2B}(\mathbf{r}) = \delta_3^2 K_0\left(\frac{\mathbf{r}}{\lambda}\right) - \delta_1^2 K_0\left(\beta_-\frac{\mathbf{r}}{\xi_1}\right) - \delta_2^2 K_0\left(\beta_+\frac{\mathbf{r}}{\xi_1}\right),\tag{10}$$

where the units are explicitly shown, i.e.  $\mathbf{r} = r\xi_1$ , and  $\delta_k$  are undetermined parameters.

### THE ENERGY OF THE NORMAL DOMAIN-SUPERCONDUCTOR INTERFACE

The sign of the energy of the interfaces between normal-metal domains and the superconductor determines whether merging of those domains is energetically favorable or not (i.e. if the superconductor is type-I or type-II). In the case of vortices, the smallest possible normal domains, the positive vortex-superconductor surface energy therefore means that the vortices should repel (at least at short distances) in order to avoid the formation of a giant vortex. We here show how to calculate the normal-superconducting interface energy and by that predict the type of the short-range vortex-vortex interaction.

We follow a similar approach to that of Ref. [5], but we take into account the Josephson coupling and the temperature dependence of the Ginzburg-Landau (GL) parameters, within a correct microscopical framework. Namely, we consider the interface between normal and superconducting region as the yz-plane at x = 0 and calculate the surface energy  $E_S$  using the one-dimensional GL functional at the thermodynamic critical field  $H_{cc}$ , which reads

$$E_{S} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Big\{ 2(\Psi_{1}^{\prime 2} + A^{2}\Psi_{1}^{2}) + (2\chi_{1} - \Psi_{1}^{2})\Psi_{1}^{2} \\ + \alpha \frac{\kappa_{1}^{2}}{\kappa_{2}^{2}} \Big[ 2(\Psi_{2}^{\prime 2} + A^{2}\Psi_{2}^{2}) + \alpha(2\chi_{2} - \Psi_{2}^{2})\Psi_{2}^{2} \Big] \\ - 2\gamma \Psi_{1}\Psi_{2} + \Big(H_{cc} - \sqrt{2}\kappa_{1}A^{\prime}\Big)^{2} \Big\}, \quad (11)$$

where the thermodynamic critical field of the coupled system  $H_{cc}$  is given by Eq. (8) of the main text, the gauge potential is chosen as  $\vec{A} = (0, A(x), 0)$  and  $\Psi_{j=1,2}$  are taken real. The distances, the order parameters and the vector potential are re-scaled as explained in the main text. We then find  $\Psi_i$  and A that minimize  $E_S$  by numerically solving the set of Euler-Lagrange equations for the functional in Eq. (11), which are exactly the onedimensional versions of Eqs. (2a-c) of the main text:

$$\Psi_1'' = \frac{A^2}{2}\Psi_1 - (\chi_1 - \Psi_1^2)\Psi_1 - \gamma\Psi_2, \qquad (12a)$$

$$\Psi_2'' = \frac{A^2}{2} \Psi_2 - \alpha \left( \chi_2 - \Psi_2^2 \right) \Psi_2 - \frac{\gamma \kappa_2^2}{\alpha \kappa_1^2} \Psi_1, \qquad (12b)$$

$$A'' = \left(\frac{\Psi_1^2}{\kappa_1^2} + \alpha \frac{\Psi_2^2}{\kappa_2^2}\right) A.$$
 (12c)

The boundary conditions in the normal state  $(x \to -\infty)$ and deep in the superconducting state  $(x \to \infty)$  are  $\psi_j(x \to -\infty) = 0, A'(x \to -\infty) = 1, \psi'_j(x \to \infty) = 0$ and  $A'(x \to \infty) = 0$ .

#### THE GINZBURG-LANDAU EQUATIONS FOR FIXED VORTICES IN TWO-GAP SUPERCONDUCTORS

Since the two vortices problem does not have circular symmetry, we now consider the fixed-vortex ansatz in Cartesian coordinates  $\Psi_j = e^{in_1\theta_1}e^{in_2\theta_2}f_j(x,y)$ , describing two fixed vortices with winding numbers  $n_1$  and  $n_2$ , where  $e^{in_k\theta_k}$  is written in Cartesian coordinates as

$$e^{in_k\theta_k} = \left(\frac{x_k + iy_k}{x_k - iy_k}\right)^{n_k/2},\tag{13}$$

and  $\vec{r}_k = (x_k, y_k, 0)$  is the in-plane position vector with origin at the center of the vortex k. For the case of two vortices separated by a distance d, we take  $\vec{r}_1 = (x - d/2, y, 0)$  and  $\vec{r}_2 = (x + d/2, y, 0)$ . With this ansatz, the Euler-Lagrange equations for the energy functional in Eq. (1) of the main text read (see also Ref. [6])

$$\nabla^2 f_1 - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x \overline{Y} - A_y \overline{X}) + \overline{A}^2\right] f_1 + (\chi_1 - f_1^2) f_1 + \gamma f_2 = 0, \quad (14a)$$

$$\nabla^2 f_2 - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x \overline{Y} - A_y \overline{X}) + \vec{A}^2\right] f_2 + \alpha \left(\chi_2 - f_2^2\right) f_2 + \frac{\gamma \kappa_2^2}{\alpha \kappa_1^2} f_1 = 0, \quad (14b)$$

and

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} = -\left[\vec{A} - \frac{n_1\hat{\theta}_1}{r_1} - \frac{n_2\hat{\theta}_2}{r_2}\right] \left(\frac{f_1^2}{\kappa_1^2} + \alpha \frac{f_2^2}{\kappa_2^2}\right) = 0,$$
(14c)

where

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

and the angular unit vectors around each vortex are written as  $\hat{\theta_k} = (-y_k/r_k, x_k/r_k, 0)$ . In Eqs. (14a-c), the units

Eqs. (14a-c) are thus the GL equations for the two fixed vortices, and we solve them numerically by a relaxation method. The obtained order parameter and vector potential are then substituted back in the energy functional, yielding the energy E(d) for the vortex pair at distance d. Repeating this procedure for different vortexvortex separation, we obtain the interaction potential  $\Delta E = E(d) - E(0)$  between vortices in the two-gap superconductor, as shown e.g. in Fig. 1(b-d) of the main text.

- M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, pp. 17-18, New York - Dover, 1972.
- [2] E. Babaev, J. Carlström and M. Speight, arXiv:0910.1607v1(2009).
- [3] L. Kramer, Phys. Rev. B 3, 3821 (1971).
- [4] J. M. Speight, Phys. Rev. D 55, 3830 (1997).
- [5] J.-P. Wang, Phys. Lett. A **374**, 58 (2009).
- [6] A. Chaves, F. M. Peeters, G. A. Farias, M. Milošević, arXiv:1005.4630v1 (unpublished).

#### (Giant) Vortex - (anti) vortex interaction in bulk superconductors: The Ginzburg-Landau theory

Andrey Chaves,  $^{1,\,2,\,*}$  F. M. Peeters,  $^{1,\,2}$  G. A. Farias,  $^{2,\,\dagger}$  and M. Milošević  $^1$ 

<sup>1</sup>Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,

Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Dated: July 29, 2010)

The vortex-vortex interaction potential in bulk superconductors is calculated within the Ginzburg-Landau (GL) theory and is obtained from a numerical solution of a set of two coupled non-linear GL differential equations for the vector potential and the superconducting order parameter, where the merger of vortices into a giant vortex is allowed. Further, the interaction potentials between a vortex and a giant vortex and between a vortex and an antivortex are obtained for both type-I and type-II superconductors. Our numerical results agree asymptotically with the analytical expressions for large inter-vortex separations which are available in the literature. We propose new empirical expressions valid over the full interaction range, which are fitted to our numerical data for different values of the GL parameter.

PACS numbers: 74.20.De, 74.20.-z, 74.25.Wx

#### I. INTRODUCTION

The interaction potential between vortices has been an important study subject for many years. In 1971, Kramer<sup>1</sup> used the asymptotic behavior of the vortex fields for large distances in the Abelian Higgs model to obtain an analytical expression for the vortex-vortex interaction potential, which is given by modified Bessel functions. This potential is attractive (repulsive) for type-I (type-II) systems, i.e., for a superconductor Ginzburg-Landau parameter with  $\kappa = \lambda/\xi < 1/\sqrt{2}$  $(> 1/\sqrt{2})$ , where  $\lambda$  is the penetration depth and  $\xi$  is the coherence length. Moreover, this expression leads to a constant interaction energy as a function of the separation between vortices for the critical value  $\kappa = 1/\sqrt{2}$  (also called the Bogomol'nyi point), implying that vortices do not interact in this regime. A detailed analysis of the vortex-vortex (V-V) interaction was given later by Jacobs and Rebbi,<sup>2</sup> who constructed a variational function describing two separate vortices and obtained the variational parameters by minimizing the free energy. This variational function was able to model: i) the deformation of the vortex core when the vortices are brought close to each other, and ii) the formation of a giant  $vortex^{3-5}$ when vortices are superimposed on each other.

Thereafter, several works studied different aspects of the interaction between vortices in superconductors. For example, Brandt<sup>6</sup> used the asymptotic expression for the interaction potential to study the elastic properties of flux-line lattices in type-II superconductors. Speight<sup>7</sup> derived the V-V interaction from a linear field theory described by a Lagrangian of two singular point sources placed at the vortex centers. MacKenzie *et al.*<sup>8</sup> used the linear field theory proposed by Speight to obtain the interaction between separated strings in a model with two order parameters, which may be relevant for superconducting cosmic strings,<sup>9</sup> the SO(5) model of

high-temperature superconductivity and solitons in nonlinear optics. Eventually, all these analytical approximations lead to expressions which are the same, or at least very similar, to the one derived by Kramer for large separation between vortices. Other models were presented by Mohamed  $et al.^{10}$ , who used a perturbative approach to calculate the V-V interaction for superconductors with  $\kappa \approx 1/\sqrt{2}$  when the Ginzburg-Landau (GL) theory is extended to low temperatures, and by Hernández and López,<sup>11</sup> who used a variational approach based on the Clem trial function<sup>12</sup> to calculate the force between vortices. Auzzi et al.<sup>13</sup> showed recently that for non-Abelian vortex interactions, there are two other regimes besides the well-known type-I and type-II: depending on the relative orientation, the interaction potential can show attractive and repulsive regions for the same system. Similar behavior can be achieved in a twoband superconductor.<sup>14,15</sup>

In the present work, we solve numerically the set of Ginzburg-Landau (GL) differential equations for two vortices fixed at a certain distance from each other. We are able to recover the V-V potential obtained by Jacobs and Rebbi<sup>2</sup> and the asymptotic behaviors predicted by Kramer<sup>1</sup>. The results are generalized to the case of vortex-giant vortex (V-GV) and vortex-antivortex (V-AV) interactions. We parameterize all obtained forces for future use in e. g. molecular dynamics simulations of the vortex matter.

The remainder of this paper is organized as follows: in Sec. II, we review the asymptotic behavior of the magnetic field and order parameter of the single static vortex in the GL theory and expand the analytical expression suggested by Kramer to study the interaction between a single vortex and another vortex, an anti vortex or a giant vortex, in the limit of large separation between them. In Sec. III we discuss the set of coupled non-linear differential equations that describe these interactions, which are valid for arbitrary separation between vortices, and thus, also for small distances where deformations of the interacting vortex cores are important. This set of equations is solved numerically without any approximations for arbitrary values of  $\kappa$ , and the results for the V-V, V-GV and V-AV interactions are shown in Sec. IV and compared to the analytical expressions obtained in Sec. II. For each of these cases, a fitting function for the interaction is proposed and the fitting parameters are given. Our results are summarized in Sec. V.

#### II. ASYMPTOTICS OF THE INTER-VORTEX POTENTIAL

Let us start with the expression for the free energy in the GL theory, or equivalently, the potential in the Abelian Higgs model<sup>2,14</sup>:

$$E = \int \mathcal{F} d\vec{\mathbf{r}},\tag{1}$$

where the functional  $\mathcal{F}$  is given by

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

In this expression,  $\psi$  is the order parameter (a complex scalar field),  $\vec{A}$  is the electromagnetic vector (gauge) potential and  $\alpha$  and  $\beta$  are phenomenological parameters, which are related to the two characteristic lengths in a superconductor: the coherence length  $\xi = \hbar/\sqrt{4m\alpha}$  and the penetration depth  $\lambda = c/e(\sqrt{m\beta/8\pi\alpha})$ . It is convenient to define  $\mu = \sqrt{2}\kappa$ , so that when  $\mu < 1$  ( $\mu > 1$ ) we are in the type-I (type-II) regime ( $\kappa = 1/\sqrt{2}$  leads to  $\mu = 1$ ).<sup>2</sup> If we define  $\vec{A} = (2e/\hbar c)\vec{A}$  and  $\Psi = \sqrt{\beta/\alpha}\psi/\lambda$ , the expression for the energy functional can be rewritten in dimensionless units as

$$F = \frac{1}{2} |(\vec{\nabla} - i\vec{A})\Psi|^2 + \frac{1}{2} |\vec{\nabla} \times \vec{A}|^2 + \frac{\mu^2}{8} (1 - |\Psi|^2)^2, \quad (3)$$

where the distances are scaled by the magnetic field penetration depth  $\lambda$ , energy by  $E_0 = \beta/2\alpha^2\xi^2$  and the force by  $\Omega_0 = \beta/2\alpha^2\xi^2\lambda$ .

The lowest energy configuration of the system is found by minimizing E with respect to  $\Psi$  and the vector potential  $\vec{A}$ . The standard way of minimizing a functional is by the Euler-Lagrange equations, which in the case of Eq. (1) are

$$\frac{\partial F}{\partial \Psi} - \sum_{i} \frac{\partial}{\partial x_{i}} \frac{\partial F}{\partial (\frac{\partial \Psi}{\partial x_{i}})} = 0$$
 (4a)

and

$$\frac{\partial F}{\partial A_j} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial F}{\partial (\frac{\partial A_j}{\partial x_i})} = 0.$$
 (4b)

Equations (4a) and (4b) result in the well-known Ginzburg-Landau equations.  $^{16}$ 

To find the V-V interaction potential, one has to control the localization and the winding number (also called vorticity) of the vortices. As mentioned earlier, previous theoretical works propose a way to fix the vortices and obtain the interaction potential, based on four steps: i) fixing a circular phase change of  $2\pi$  around each vortex, ii) finding the asymptotic behaviors of the vector potential and the amplitude far from each of the vortices<sup>1</sup> or, equivalently, solving numerically the differential equations for these variables,<sup>2</sup> iii) constructing a superposition ansatz for  $\Psi$  and  $\vec{A}$  which describes the double vortex structure, and iv) using the latter ansatz in Eqs. (1) and (3) to obtain the energy for a given separation between vortices.

If we have the asymptotics of the vortices, obtained in step ii), the integral in Eq. (1) can be solved analytically, giving an analytical expression for the energy as a function of the separation between vortices. In order to find the analytical expression for the asymptotic interaction potential between a vortex and another vortex, an antivortex or a giant-vortex, we start from the sequence listed above: a circular phase is fixed around each vortex by assuming  $\Psi(r,\theta) = f(r)e^{in\theta}$ , where  $(r,\theta)$  are polar coordinates with the origin in the center of the vortex, n is its winding number and f(r) is the amplitude of its order parameter, which is assumed to be circularly symmetric around the vortex center. Considering the gauge  $\vec{A} = na(r)\hat{\theta}/r$ , the Euler-Lagrange equations (4a) and (4b) for a single vortex read

$$\frac{d^2f}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{df}{dr} - \frac{n^2(a-1)^2}{r^2}f - \frac{\mu^2}{2}f(f^2-1) = 0, \quad (5a)$$

and

$$\frac{d^2a}{dr^2} - \frac{1}{r}\frac{da}{dr} - (a-1)f^2 = 0,$$
(5b)

with  $f(\infty) = a(\infty) = 1$ . As is well known<sup>2</sup>, the winding number n also determines the number of zeros of the vortex field f(r) and, because of the circular symmetry, these zeros must be degenerate at r = 0. Substituting the auxiliary functions  $\sigma(r) = f(r) - 1$  and Q(r) = a(r) - 1in Eqs. (5a) and (5b), we can suppress the high order terms in the remaining differential equations when  $r \to \infty$ , as  $\sigma(\infty) = Q(\infty) = 0$ , which leads to the following equations, valid in the asymptotic limit:

$$\left[\frac{d^2\sigma}{d(\mu r)^2} + \frac{1}{\mu r}\frac{d\sigma}{d(\mu r)} - \sigma\right] = 0,$$
 (6a)

and

$$\frac{d^2}{dr^2}\left(\frac{Q}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{Q}{r}\right) - \left(1 + \frac{1}{r^2}\right)\left(\frac{Q}{r}\right) = 0. \quad (6b)$$

Equations (6a) and (6b) are easily identified as modified Bessel equations and their solutions are  $\sigma(r) = \gamma_1 K_0(\mu r)$ and  $Q(r) = \gamma_2 r K_1(r)$  where  $\gamma_1$  and  $\gamma_2$  are coefficients to be determined. For example, after solving Eqs. (5a) and (5b) numerically, one can obtain these coefficients by fitting  $f(r) = 1 + \gamma_1 K_0(\mu r)$  and  $\overrightarrow{A} = n(1 + \gamma_2 r K_1(r))\widehat{\theta}/r$  to the results obtained by the numerical procedure.

Several different procedures can be followed to extract the analytical expression for the interaction potential from these asymptotic functions. As an example, Bettencourt and Rivers<sup>9</sup> suggested that one can substitute the superposition ansatz  $\overline{\Psi}(r, r_1, r_2) = \Psi(|r - r_1|)\Psi(|r - r_2|)$ and  $\overline{A_{\theta}}(r, r_1, r_2) = A_{\theta}(|r - r_1|) + A_{\theta}(|r - r_2|)$ , for vortices centered at  $\vec{r_1}$  and  $\vec{r_2}$ , in the energy functional in Eq. (1) and keep only the terms that are linear in the fields for each vortex. After some calculations described in more detail in Ref.<sup>9</sup>, one obtains

$$E_{int}(d) = 2 \left[ n_1 n_2 \gamma_2^{(1)} \gamma_2^{(2)} K_0(d) - \gamma_1^{(1)} \gamma_1^{(2)} K_0(\mu d) \right],$$
(7)

where d is the separation between vortices,  $n_i$  is the winding number and  $\gamma_1^{(i)}$  and  $\gamma_2^{(i)}$  are the fitting coefficients for the vortex *i* in position  $\vec{r_i}$ . We point out that in the paper by Bettencourt and Rivers, the expression for  $E_{int}$ is slightly different from Eq. (7) because they assumed that  $\gamma_1^{(i)} = |n_i|\gamma_2^{(i)}$ , which is valid only in the critical coupling regime for  $\mu = 1$ , as stressed by Speight<sup>7</sup> and verified by Bogomol'nyi equations for this regime. The same expression for  $E_{int}(d)$  was found by Kramer by a perturbational approach<sup>1</sup> and can also be obtained by considering point sources in a linearized field theory<sup>7,8</sup>.

It can be easily seen that the potential in Eq. (7) is consistent with the fact that for  $\mu < 1$  (> 1), the V-V interaction is attractive (repulsive) for large separation, leading to a type-I (type-II) superconducting behavior. This statement is also valid for vortex-giant vortex interactions, as Eq. (7) still holds for this case, where the interaction potential is obtained just by setting  $n_1 = 1$ and  $n_2 > 1$  and finding the fitting coefficients  $\gamma_1^{(i)}$  and  $\gamma_2^{(i)}$  for this case. However, for a V-AV interaction,  $n_1 n_2$  is always negative, leading to an *attractive* potential  $E_{int}(d)$ for any value of  $\kappa$ . Furthermore, Eq. (7) shows that the interaction between an antivortex and a giant vortex is always attractive as well. This can be understood through a heuristic argument: when a vortex and an antivortex are far from each other, the energy of the system is nonzero, as it is the sum of the energies of one vortex and one antivortex; on the other hand, when they approach each other they should annihilate, giving zero energy. Hence, at least at some distance, the energy of the V-AV pair must decrease as d approaches zero and, as a result, the interaction potential is attractive. This result is in contradiction with the conjecture proposed by Ref.<sup>17</sup>, which claims that in type-I superconductors the interaction of a V-AV pair is repulsive, and which was used to explain the stability a V-AV molecule in mesoscopic superconducting triangles.<sup>18,19</sup> As follows from our theory, the V-AV interaction is always attractive and should lead to a disfavored V-AV molecule in type-I superconducting polygons, because in that case the V-V interaction is also attractive.  $^{20,21}$ 

One more question arises from the conjecture of Ref.<sup>17</sup>: if vortices attract (repel) each other in type-I (type-II) superconductors, whereas exactly the opposite occurs for V-AV interactions, what one would expect in a critically coupled system? In this regime, i.e., when  $\mu = 1$ , vortices do not interact; should we expect the same for V-AV? The answer to this question is provided by the Bogomol'nyi equations<sup>22</sup>

$$\left[ \left( \frac{\partial}{\partial x_1} - iA_1 \right) + sgn(n)i\left( \frac{\partial}{\partial x_2} - iA_2 \right) \right] \Psi = 0$$
(8a)  
$$\left| \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A} \right| + sgn(n)\frac{1}{2} \left( |\Psi|^2 - 1 \right) = 0.$$
(8b)

For the single vortex ansatz chosen before,  $\Psi(r,\theta) = f(r)e^{in\theta}$  and  $\overrightarrow{A} = na(r)\widehat{\theta}/r$ , these equations read<sup>23</sup>

$$r\frac{df}{dr} - sgn(n)n(1-a)f = 0$$
 (9a)

$$\frac{2n}{r}\frac{da}{dr} + sgn(n)(f^2 - 1) = 0.$$
 (9b)

Substituting the latter formulae in Eq. (9) and neglecting higher-order terms in  $\sigma(r)$  and Q(r) yields  $nQ = -sgn(n)r\frac{d\sigma}{dr}$  or, using the asymptotic forms of these functions,  $n\gamma_2 r K_1(r) = -sgn(n)\gamma_1 r dK_0(r)/dr =$  $sgn(n)\gamma_1 r K_1(r) \Rightarrow \gamma_1 = sgn(n)n\gamma_2$ . Substituting this expression for  $\gamma_1^{(i)}$  in Eq. (7) shows that the interaction potential for V-AV in the critical coupling regime is  $E_{int}(d) = 4n_1\gamma_2^{(1)}n_2\gamma_2^{(2)}K_0(d)$ , which is still attractive since  $n_1n_2 < 0$ . Hence, unlike vortex-vortex pairs, a V-AV pair exhibits an attractive interaction even in the critical case of  $\mu = 1$ .

Notice that the V-AV interaction potential in our work is derived for a bulk superconductor, in the absence of an external magnetic field. On the other hand, the V-AV molecules shown in Refs. 17–19 were found in a different situation, namely, in mesoscopic samples under applied external fields, so that the net magnetic field in the region of the antivortex was actually positive. Therefore, our results call in question the general statement and motivation of Refs. 17–19 that a vortex and an antivortex repel in type-I superconductors, since we have shown that, at least in bulk samples, this is not the case. Other reasons, related to the quantum confinement and the resulting electromagnetic fields, should be exploited for the explanation of the increased stability of V-AV molecules found in Refs. 17–19, which makes their findings even more intriguing.

It should be mentioned that, as  $\gamma_1 \neq \gamma_2$  for  $\mu \neq 1$ , the interaction potential given by Eq. (7) may diverge at small distances for some values of  $\mu$ . This signals the breakdown of this analytical expression for small d. Actually, for small separation d, the superposition ansatz proposed by Bettencourt and Rivers and used in the present section also fails, since it does not take into account either the spatial deformation of the fields, or the possibility of the formation of giant vortices.<sup>2</sup> Hence, the analytical expression for the interaction potential between vortices has a validity restricted to large d. Nevertheless, when the interaction potential is calculated by numerical means, taking into account all the features mentioned above, the result shows very good agreement with Eq. (7) for d larger than a critical separation  $d_c$  which depends on  $\mu$ , as will be shown in the next section.

The interaction force  $\Omega$  can be obtained by taking the derivative of the energies with respect to the distance between the two vortices. The results for  $\mu = 1$  in the V-V and V-GV cases clearly give  $\Omega(d) = 0$ . The analytical expression for the force for large vortex-vortex separation can be easily derived from Eq. (7) as

$$\Omega(d) = 2 \left[ n_1 n_2 \gamma_2^{(1)} \gamma_2^{(2)} K_1(d) - \gamma_1^{(1)} \gamma_1^{(2)} \mu K_1(\mu d) \right].$$
(10)

#### **III. GL EQUATIONS FOR FIXED VORTICES**

We recall step i) in the procedure described in the previous section for obtaining the V-V interaction, which is fixing a circular phase change around each vortex. In the present section, we derive the Euler-Lagrange equations from Eqs. (4a) and (4b) with the constraints imposed by step i).

In the paper by Jacobs and Rebbi<sup>2</sup>, the authors fixed the phase for a single vortex and obtained 'modified' GL equations, given by Eq. (2.18) of their paper or, equivalently, Eqs. (5a) and (5b) of the present work, as well as Eq. (7) of the paper by Babaev and Speight<sup>14</sup>. Although they presented these equations in their paper, Jacobs and Rebbi did not solve them directly, but used instead variational functions for f(r) and a(r) and minimized the energy E without solving the differential equations.

For the two vortex system, Jacobs and Rebbi made a different ansatz,  $\Psi = \exp[i\theta_1] \exp[i\theta_2]f(r,\theta)$ , where  $\theta_1$ and  $\theta_2$  are azimuthal angles around each vortex position, f is a real function which is not necessarily circularly symmetric and is zero at the position of each vortex, and the winding numbers were chosen as 1 for each vortex. Having fixed the positions and vorticities, they just needed to find f and  $\vec{A}$  that minimize E. As before, instead of deriving Euler-Lagrange (differential) equations, they used a variational procedure, considering trial functions that account for the deformation of the vortices towards the formation of the giant vortex.

The results of Jacobs and Rebbi are rather accurate and the advantage of their approach is that many terms of the variational function can be integrated analytically. However, the variational procedure involves many parameters, it is a very long analytical calculation and their trial function is not the most general function: if one wants to solve the problem for a V-AV or a V-GV pair, the trial function has to be modified and consequently also the analytical integrals in the variational procedure.

In order to obtain the inter-vortex potential, our approach starts from the ansatz for two vortices  $\Psi = e^{in_1\theta_1}e^{in_2\theta_2}f(x,y)$ , where we control the vorticity  $n_1$  and

 $n_2$  of each vortex. We further rewrite  $e^{in_j\theta_j}$  in Cartesian coordinates:

$$e^{in_j\theta_j} = \left(\frac{x_j + iy_j}{x_j - iy_j}\right)^{n_j/2},\tag{11}$$

where  $\vec{r}_j = (x_j, y_j, 0)$  is the in-plane position vector with origin in the center of the vortex j. As we will study the case for two vortices separated by a distance d, we take  $\vec{r}_1 = (x - d/2, y, 0)$  and  $\vec{r}_2 = (x + d/2, y, 0)$ .

Next, we substitute this ansatz into Eq. (3) to get the energy functional F for fixed position of vortices as

$$F = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} f^2 \left[ \overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x \overline{Y} - A_y \overline{X}) + A^2 \right] + \frac{\mu^2}{8} (1 - f^2)^2 + \frac{1}{2} |\vec{\nabla} \times \vec{A}|^2, \qquad (12)$$

where

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

Notice that although  $\overline{X}$  and  $\overline{Y}$  seem to have no physical meaning, they can be related to the gauge proposed by Jacobs and Rebbi for the vector potential,  $\vec{A} = na(r)\hat{\theta}/r$ , or  $\vec{A} = (-n\sin\theta/r, n\cos\theta/r, 0) = (-ny/r^2, nx/r^2, 0)$  in Cartesian coordinates, which was shown to be compatible with the symmetry of the Euler-Lagrange equations, leading to Eqs. (5a) and (5b) for a single vortex. However, as we are looking for general differential equations for two vortices, we will not make any a priori choice of gauge for the vector potential.

In previous works,<sup>2,14</sup> the Euler-Lagrange equations were not explicitly derived. We derived the Euler-Lagrange equations for the present problem setting, which are given by

$$\nabla^2 f - \left[\overline{X}^2 + \overline{Y}^2 + 2(A_x\overline{Y} - A_y\overline{X}) + A^2\right] f + \frac{\mu^2}{2}(1 - f^2)f = 0$$
(13a)

and

$$\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A} + \left[\overrightarrow{A} - \frac{n_1\widehat{\theta}_1}{r_1} - \frac{n_2\widehat{\theta}_2}{r_2}\right] f^2 = 0,$$
 (13b)

where the unitary angular vectors around each vortex can be rewritten as  $\hat{\theta}_j = (-y_j/r_j, x_j/r_j, 0)$ . One can even verify, after some manipulations of the equations, that inserting  $n_2 = 0$  in these equations leads to Eq. (2.18) in the paper by Jacobs and Rebbi, which is the equation for a single vortex, but in Cartesian coordinates. Solving Eqs. (13a) and (13b) is equally demanding as solving the common GL equations, which was done in many works in the literature.<sup>3,20,21</sup>

#### IV. NUMERICAL RESULTS AND FITTING FUNCTIONS

We solved Eqs. (13a) and (13b) numerically using the finite difference technique and a relaxation method suitable for non-linear differential equations.<sup>24</sup> The twodimensional system is divided in a uniform square  $601 \times 601$  grid with total dimensions  $60\lambda \times 60\lambda$ . The singularities in the amplitude of the order parameter appear naturally in the center of each vortex position, as a consequence of the fixed circular phase  $e^{in_i\theta_i}$  defined around each vortex *i*, which guarantees the existence of zeros of the order parameter in the center of the vortices.<sup>2</sup> The results for V-V, V-GV and V-AV interactions are presented separately in the following subsections. Analytical fitting functions will be proposed for the numerically obtained curves, where the fitting error is defined by the variance<sup>24</sup>

$$\nu = \sum_{n=1}^{N} \frac{[G(n) - G_{fit}(n)]^2}{(N - N_p)},$$
(14)

where G(n) is the numerical data set,  $G_{fit}(n)$  is the analytical fitting function, N is the length of the data set and  $N_p$  is the number of variational parameters of the fitting function.<sup>25</sup>

#### A. Vortex-vortex interaction

The numerical results for the V-V interaction force are shown in Fig. 1, for several values of  $\mu$  in the type-II (a) and type-I (b) regimes. Notice that for  $\mu \approx 0$  vortices should not interact and the force vanishes, but for  $0 < \mu < 1$  they attract (type-I regime) and the force is negative in this case. However, at the critical point  $\mu = 1$  the force vanishes again. Hence, in the type-I case, two different regimes can be identified: one where the force increases from zero, as  $\mu$  increases from zero, and the other when the force decreases back to zero, as  $\mu$  approaches 1. This can be seen from Fig. 1(c), where extremum of the force peak  $\Omega_{max}$  (open triangles, left scale) increases with  $\mu$  for small  $\mu$ , but for  $0.6 < \mu < 1$  the peak decreases with  $\mu$ , approaching zero when  $\mu = 1$ . The numerical results can be fitted to  $\Omega_{max}(\mu) = 0.0961 \mu (\mu - 1) / (1 + 0.2863 \mu)^{1.341}$ , which is shown by the red curve in Fig. 1(c). From Figs. 1(a,b)we see that the force exhibits a maximum at some critical separation  $d_c$ , which depends on the GL parameter  $\mu = \sqrt{2\kappa}$ . The critical separation  $d_c$  is also shown in Fig. 1(c) (open squares, right scale) as a function of  $\mu$ . The fit of this curve, given by  $d_c = 22.203(1+10.504\mu)^{-0.774}$ (with estimated variance  $\nu \approx 0.3\%$ ), is shown by the solid curve in Fig. 1(c), which suggests that the critical separation for the V-V interaction approaches zero in the extreme type-II situation  $(\mu \rightarrow \infty)$ . An effective extreme type-II scenario can also be achieved in a superconducting film of thickness  $w \ll \lambda$ , where the effective penetration depth is  $\Lambda = \lambda^2/w$ , and for which



FIG. 1: (Color online) Numerically obtained vortex-vortex interaction force  $\Omega$  as a function of the separation d between vortices, for several values of  $\mu = \sqrt{2}\kappa$  in the (a) type-II and (b) type-I regimes. (c) Critical separation  $d_c$  (open squares, right scale) and extremum  $\Omega_{max}$  (open triangles, left scale), which correspond respectively to the position and amplitude of the peak in the force, as a function of the GL parameter. The fitting functions for  $d_c$  and  $\Omega_{max}$  are plotted by the solid curves.

analytical expressions for the V-V interaction force were proposed by Pearl<sup>26</sup>, and later by Brandt<sup>27</sup>. However, in the case of superconducting films, the V-V force decays monotonically as  $1/d^2$ , while in the present case of a bulk superconductor the decay is exponential. Hence, although both situations can be considered as extreme type-II limits, our results for bulk superconductors with  $\mu \to \infty$  are quantitatively different from those for thin superconducting films.

The importance of solving Eqs. (13a) and (13b) numerically for two separate vortices lies in the possibility of obtaining the interaction force between vortices even in the small separation limit, which cannot be described by the asymptotic functions given in the literature<sup>9</sup> and described by Eq. (10). However, since solving these equations is generally not an easy task, we attempt to propose here an analytical expression that possesses all the features of the numerically obtained force as a function of the vortex separation. Such an analytical expression can be helpful e.g. for numerical modelling of vortex structures by means of molecular dynamics (MD) simulations, where vortices are considered as point particles. Up to now, in those MD simulations one typically uses the asymptotic analytical expressions for the V-V interaction which are only valid in the large separation limit.<sup>28,29</sup> To obtain a proper fitting function, we first analyze separately the behaviors for large and small vortex separations. For large separation, using the asymptotic form of the modified Bessel functions, Eq. (10) can be rewritten as

$$\Omega(d \to \infty) = \gamma d^{-\frac{1}{2}} \left( \delta e^{-d} - \sqrt{\mu} e^{-\mu d} \right), \qquad (15)$$

where  $\gamma$  and  $\delta$  are fitting parameters. For small separation, our results show that a power function of d describes the force satisfactorily, i.e.

$$\Omega(d \to 0) = pd^q, \tag{16}$$

with p and q as fitting parameters. Two examples of such fittings are shown in Fig. 2, for  $\mu = 0.6$  (bottom)



FIG. 2: (Color online) Comparison between the V-V interaction force as a function of the separation d obtained by the numerical method (symbols) and by the asymptotic expressions (curves) from Eqs. (15, 16), for  $\mu = 1.7$  (a) and  $\mu = 0.6$ (b). The forces are plotted on a  $log_{10}$  scale and the values of the fitting parameters  $p, q, \gamma$  and  $\delta$  are given in each panel.



FIG. 3: (Color online) (a) Comparison between the V-V interaction force as a function of the separation d obtained by the numerical method (symbols) and by the fitting function (curves) given by Eq. (17). The solid (dashed) curves and the open triangles (squares) are the results for  $\mu = 0.6$  (1.7). (b-c) The results for each  $\mu$  are plotted separately in a log-scale, to emphasize the maximal deviation of the fitting function from the data.

and  $\mu = 1.7$  (top). Notice that the parameter q depends weakly on  $\mu$ , exhibiting values between  $\approx 2.7$  and  $\approx 2.8$ for all values of  $\mu$  considered in the V-V case.

Following the established behavior of the interaction in the limiting cases, we propose a single function which has the above limits as limiting behaviors:

$$\Omega_{fit}(d) = \eta_1 \frac{d^{\eta_3}}{1 + \eta_2 d^{\eta_3 + \frac{1}{2}}} \left( \eta_4 e^{-d} - \sqrt{\mu} e^{-\mu d} \right), \quad (17)$$

where  $\eta_i$  (i = 1 - 4) are four fitting parameters.

Fig. 3 shows the fitting obtained with Eq. (17) for the same values of  $\mu$  presented in Fig. 2. The fitting is not ideal for  $d < \lambda$ , where the force becomes very small. Nevertheless, we found that the fitting error is lower than 1%. Please note that the V-V interaction potential, which is an integrated force, will be even more accurate.

The values of the four fitting parameters are given in Table I, for  $\mu$  from 0.2 to 2.5. Notice that the estimated variance  $\nu$  increases with  $\mu$ , and thus Eq. (17) should not be used in the extreme type-II case. Nevertheless,

in the extreme type-II case the critical separation  $d_c$  approaches zero, as mentioned earlier, and consequently, the short range part of the V-V interaction force will not be important in such a situation. Hence, the asymptotic expression  $\Omega(d) = f_0 K_1(d)$  frequently used in the literature,<sup>30,31</sup> which can be obtained from Eq. (10) by making  $\mu \to \infty$ , is expected to provide a good description of the V-V interaction force in extreme type-II situations.

We next attempt to find an analytical expression for the fitting parameters as function of  $\mu$ . Their dependence on  $\mu$  is shown in Fig. 4. Three different ranges of  $\mu$ , delimited by vertical dotted lines in Fig. 4, can be distinguished. The physical reason for the existence of three different behaviors of the parameters  $\eta_i$  as a function of  $\mu$  is the following: for type-I ( $\mu < 1$ ), as we explained earlier, there must be a regime where the size of the attractive force peak increases with  $\mu$  and another region where it decreases with  $\mu$ . This defines the ranges 1 ( $\mu < 0.5$ ) and 2 ( $0.5 < \mu < 1$ ), respectively. Range 3 is then the type-II regime, for  $\mu > 1$ , where the interaction force is repulsive. The functions  $\eta_i(\mu)$  in Fig. 4 were



FIG. 4: (Color online) Fitting parameters (symbols) in Eq. (17) as a function of  $\mu = \sqrt{2}\kappa$  for the V-V case. The curves are the fitting functions given by Eqs. (18) for  $\eta_i(\mu)$  (i = 1 - 4), in three different regions:  $0 < \mu < 0.5$ ,  $0.5 < \mu < 1$  and  $1 < \mu$ . The inset shows a magnification of the results for  $\eta_4$  at large  $\mu$ .

fitted as

$$\eta_1(\mu) = e^{B_1(\mu^{C_1} + A_1)},\tag{18a}$$

$$\eta_2(\mu) = e^{B_2(\mu^{C_2} + A_2)},\tag{18b}$$

$$\eta_3(\mu) = A_3 + B_3 e^{C_3 \mu} \tag{18c}$$

and

$$\eta_4(\mu) = A_4 + B_4 \mu^{C_4}, \tag{18d}$$

with different parameters  $A_i, B_i$  and  $C_i$  for each range listed in Table II. These fitting functions for  $\eta_i(\mu)$  are shown as solid curves in Fig. 4. Notice that the parameter  $\eta_4$  must satisfy the condition  $\eta_4 \leq \sqrt{\mu} \ (\geq \sqrt{\mu})$ in the type-I (type-II) case, otherwise the difference between the exponential terms in Eq. (17) would exhibit a sign change for small separations, leading to a spurious repulsive (attractive) region in this case. In the type-II case, this condition leads to  $\eta_4(\mu) \approx \sqrt{\mu}$  as the best value for this fitting parameter.

It is important to point out that the results obtained for  $\eta_2$  are not the same as the values of q in Eq. (16) for the power law at small separations, which, as mentioned earlier, are between  $\approx 2.7$  and  $\approx 2.8$ . This is reasonable, because the exponential terms in Eq. (17) still play a role in the small d limit of this expression, thus, the parameter  $\eta_2$  must assume a value that is different from qin order to compensate these terms. The values obtained for  $\eta_4$ , which is the parameter controlling the large d range of Eq. (10), are also not the same as the values obtained when one uses the asymptotics of each single vortex to find the parameters  $\gamma_1^{(i)}$  and  $\gamma_2^{(i)}$  in Eq. (10). Actually, for  $\mu > 1$ , we found  $\eta_4 \approx \sqrt{\mu}$ , which is equiva-lent as making  $\gamma_1^{(i)} = \gamma_2^{(i)}$ . As  $\mu$  increases, the difference between  $\gamma_1^{(i)}$  and  $\gamma_2^{(i)}$  is amplified<sup>7</sup>, leading to a higher variance  $\mu$  for large  $\mu$  as shown in Table I. From the difference variance  $\nu$  for large  $\mu$ , as shown in Table I. Even so, this choice of  $\eta_4$  conveniently leads to a function which decays exponentially for large separation d, as expected for V-V interactions in bulk superconductors, and which exhibits no sign change at small separations. Of course, the fitting function Eq. (17) can be improved to provide a better fitting of the large separation part and to reproduce a perfect power law for small separations, but this would require more fitting parameters and very complicated expressions. Equation (17) is simple and still accurate for  $0 \le \mu \le 2.5$ , as verified by the small variances  $\nu < 10^{-6}$ in Table I and by the comparison with the numerical results in Fig. 3.

#### B. Vortex-giant vortex interaction

As observed in Fig. 1, the interaction force between two vortices shows a maximum at some critical separation  $d_c$  and decays to zero for both very large and very

TABLE I: Fitting parameters  $\eta_i$  and the estimated variance  $\nu$  for Eq. (17) in the V-V case, for different values of  $\mu$ .

| $\mu$ | $\eta_1$               | $\eta_2$               | $\eta_3$ | $\eta_4$ | $\nu(\times 10^{-8})$ |
|-------|------------------------|------------------------|----------|----------|-----------------------|
| 0.2   | $6.564 \times 10^{-7}$ | $5.13 \times 10^{-7}$  | 6.135    | -83.611  | 1.42                  |
| 0.3   | $1.522 \times 10^{-5}$ | $7.268 \times 10^{-6}$ | 5.213    | -17.667  | 3.96                  |
| 0.4   | $5.698 \times 10^{-5}$ | $2.041 \times 10^{-5}$ | 4.950    | -8.014   | 5.06                  |
| 0.5   | $1.284 \times 10^{-4}$ | $3.911 \times 10^{-5}$ | 4.796    | -5.090   | 1.95                  |
| 0.6   | $4.474 \times 10^{-4}$ | $1.222 \times 10^{-4}$ | 4.440    | -1.538   | 0.448                 |
| 0.7   | $1.62 \times 10^{-3}$  | $3.968 \times 10^{-4}$ | 4.046    | 0.237    | 0.239                 |
| 0.8   | $4.12 \times 10^{-3}$  | $9.326 \times 10^{-4}$ | 3.760    | 0.766    | 0.215                 |
| 0.9   | $8.46 \times 10^{-3}$  | $1.79 \times 10^{-3}$  | 3.544    | 0.943    | 0.116                 |
| 1.1   | $1.546 \times 10^{-2}$ | $3.88 \times 10^{-3}$  | 3.489    | 1.049    | 0.139                 |
| 1.2   | $2.068 \times 10^{-2}$ | $5.37 \times 10^{-3}$  | 3.443    | 1.095    | 0.98                  |
| 1.3   | $2.67 \times 10^{-2}$  | $7.31 \times 10^{-3}$  | 3.410    | 1.140    | 3.16                  |
| 1.4   | $3.369 \times 10^{-2}$ | $9.78 \times 10^{-3}$  | 3.382    | 1.183    | 7.24                  |
| 1.5   | $4.175 \times 10^{-2}$ | $1.286 \times 10^{-2}$ | 3.358    | 1.225    | 13.8                  |
| 1.6   | $5.094 \times 10^{-2}$ | $1.664 \times 10^{-2}$ | 3.338    | 1.265    | 23.6                  |
| 1.7   | $6.136 \times 10^{-2}$ | $2.121 \times 10^{-2}$ | 3.320    | 1.304    | 36.8                  |
| 1.8   | $7.308 \times 10^{-2}$ | $2.667 \times 10^{-2}$ | 3.306    | 1.342    | 53.9                  |
| 1.9   | $8.618 \times 10^{-2}$ | $3.311 \times 10^{-2}$ | 3.294    | 1.378    | 75.3                  |
| 2.0   | 0.1008                 | $4.066 \times 10^{-2}$ | 3.283    | 1.414    | 101.1                 |
| 2.1   | 0.1169                 | $4.94 \times 10^{-2}$  | 3.275    | 1.449    | 131.6                 |
| 2.2   | 0.1347                 | $5.945 \times 10^{-2}$ | 3.268    | 1.483    | 166.7                 |
| 2.3   | 0.1542                 | $7.093 \times 10^{-2}$ | 3.262    | 1.517    | 206.6                 |
| 2.4   | 0.1756                 | $8.396 \times 10^{-2}$ | 3.258    | 1.549    | 251.1                 |
| 2.5   | 0.199                  | $9.866 \times 10^{-2}$ | 3.254    | 1.581    | 286.2                 |

TABLE II: Fitting parameters in Eqs. (18 a-d) for the V-V case, for three different ranges of  $\mu$ .

| 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                | $-4.221 \times 10^{-2}$ |
| $A_2$     | 13.845                  | $7.935 \times 10^{-2}$ | -0.9843                 |
| $B_2$     | -0.6218                 | -5.359                 | -379.321                |
| $C_2$     | -1.373                  | -0.9084                | $-1.057 \times 10^{-2}$ |
| $A_3$     | 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                       |
| $B_4$     | $-8.663 \times 10^{-2}$ | -0.1229                | 1                       |
| $C_4$     | -4.244                  | -6.022                 | 0.5                     |

small separations. The former is reasonable, since the interaction between vortices is expected to weaken as they are placed further from each other. The latter is due to the formation of a giant vortex state: when two vortices of winding numbers e.g.  $n_1 = 1$  and  $n_2 = 1$  are put close to each other, they coalesce, forming a  $n = n_1 + n_2 = 2$ giant vortex.<sup>2–5</sup> In the absence of lateral confinement, a giant vortex is a stable (unstable) state in type-I (type-II) systems and can interact as such with other vortices, and this motivated us to investigate the interaction force between a vortex and a giant vortex.

The V-GV interaction force is shown in Fig. 5 as a function of the distance between them, for several val-

ues of  $\mu$  in the type-II (a) and type-I (b) regimes. The behavior of the curves is quite similar to those in Fig. 1 for the V-V case, but with different amplitudes and critical separations. The critical separation  $d_c$ , beyond which the vortices start to coalesce, obtained numerically for the V-GV interaction is shown as a function of the GL parameter  $\mu$  in Fig. 5 (c), along with its fitting function  $d_c = 25.043(1 + 6.632\mu)^{-0.8862}$  (with estimated variance  $\nu \approx 2\%$ ). Notice that the critical separation for the V-GV interaction is always larger than the one for the V-V case, because the giant vortex has a larger core in comparison to a n = 1 vortex. Nevertheless, the fitting function shows that the smallest critical separation for the V-GV interaction force, which would be obtained in an extreme type-II regime, is also  $d_c(\mu \to \infty) = 0$ , as in the V-V case. The behavior of the extremum of the force peak  $\Omega_{max}$  as a function of  $\mu$ , shown as open triangles in Fig. 5(c), is similar to that found for the V-V case, with the amplitude approaching zero for  $\mu \to 0$ and  $\mu \to 1$ , and increasing monotonically for  $\mu$  increasing above 1. The extremum of the force peak can be fitted to  $\Omega_{max} = 0.1709 \mu (\mu - 1) / (1 + 1.854 \mu)^{0.6087}$ , which is shown by the solid curve in Fig. 5(c).

In Sec. II, we analytically found that Eq. (10) remains valid for the asymptotic V-GV interactions, simply by choosing  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 2$  and changing the parameters  $\gamma_1^{(i)}$  and  $\gamma_2^{(i)}$  accordingly. Moreover, our results show that the force in the small separation limit in this case can still be well described by a power function of the separation *d*. The fitting of the force for the small and large separation limits, given by Eqs. (15, 16), are shown



 $10^{-1}$ (a) 10<sup>-2</sup>  $10^{-3}$ 1.926 x 10  $10^{-4}$  $p = 5.76 \times 10^{-2}$  $10^{-5}$ q = 3.2 $\frac{\widehat{\underline{G}}}{\underline{G}} 10^{-6}$ (b)  $10^{-2}$  $10^{-3}$  $\gamma = 10.394$  $\delta = 5.706$ 10-4  $= 2.035 \times 10^{-4}$ q = 3.05 $10^{-5}$ 10 2 9 1 3 4 5 6 7 8 10  $d(\lambda)$ 

FIG. 5: (Color online) Numerically obtained V-GV interaction force  $\Omega$  as a function of the separation *d* between a vortex and a double-quantized vortex, for several values of  $\mu = \sqrt{2}\kappa$ in the (a) type-II and (b) type-I regimes. (c) Critical separation  $d_c$  (open squares, right scale) and extremum  $\Omega_{max}$  (open triangles, left scale), which correspond respectively to the position and amplitude of the peak in the force, as a function of the GL parameter. The fitting functions for  $d_c$  and  $\Omega_{max}$  are plotted by the solid curves.

in Fig. 6 for the V-GV interaction, agreeing well with the numerical results. This suggests that the fitting function given by Eq. (17) can not only be used for the V-V, but also for the V-GV interaction force.

The four fitting parameters  $\eta_i$  (i = 1 - 4) found for each value of  $\mu$  in the V-GV case are shown in Table III, for  $\mu$  from 0.2 to 2.5. As in the V-V case, the estimated variance  $\nu$  increases for  $\mu > 1$ , hence the offered function is expected to fail in the extreme type-II case. As an example, the V-GV interaction force for  $\mu = 1.7$  and 0.6 is shown in Fig. 7 as a function of the vortex-giant vortex separation d, along with the fitting curves given by Eq. (17) with the corresponding parameters in Table III. Although the estimated variances for these cases are smaller than  $10^{-5}$ , it can be seen in the log-plot in Fig. 7(b) and (c) that for small separation the fitting function is less accurate as compared to the V-V case shown in Fig. 3, where the variances are lower than  $10^{-7}$ . Nevertheless, in the low d region the force is small and consequently the deviation in the force will also be small.

FIG. 6: (Color online) Comparison between the V-GV interaction force as a function of the separation d, obtained by the numerical method (symbols) and by the asymptotic expressions (curves) from Eqs. (15, 16), for  $\mu = 1.7$  (a) and  $\mu = 0.6$ (b). The forces are plotted on a  $log_{10}$  scale and the values of the fitting parameters  $p, q, \gamma$  and  $\delta$  are given in each panel.

The dependence of the fitting parameters on  $\mu$  is shown in Fig. 8 (squares) for the case of a  $n_1 = 1$  and  $n_2 = 2$ V-GV interaction, where the fitting to the data is also shown (curves). Once more, the three different behaviors of  $\eta_i$  as a function of  $\mu$  are observed, with data fitted with different parameters  $A_i, B_i$  and  $C_i$ , using Eqs. (18a-d). The reason for the existence of three identifiable behaviors of the parameters  $\eta_i$  as a function of  $\mu$  is the same as in the V-V case. Moreover, for  $\mu > 1$  (type-II regime), we found  $\eta_4(\mu) \approx \sqrt{\mu}$ , similar to the V-V case. The parameters  $A_i, B_i$  and  $C_i$  for the V-GV case, for each range of  $\mu$ , are given in Table IV.

#### C. The three vortex problem

Up to now, we considered only the two-body interaction of vortices. In the study of the dynamics of many vortices, one generally considers the sum of pairwise interactions. In this sense, the force acting on vortex i in a system with many vortices forming a certain configu-

|       |                        |                         |          |          | (10=8)                |
|-------|------------------------|-------------------------|----------|----------|-----------------------|
| $\mu$ | $\eta_1$               | $\eta_2$                | $\eta_3$ | $\eta_4$ | $\nu(\times 10^{-1})$ |
| 0.2   | $1.495 \times 10^{-3}$ | $6.073 \times 10^{-10}$ | 8.440    | -443.65  | 1.72                  |
| 0.3   | $2.347 \times 10^{-7}$ | $4.944 \times 10^{-8}$  | 6.929    | -58.765  | 16.2                  |
| 0.4   | $1.165 \times 10^{-6}$ | $1.69 \times 10^{-7}$   | 6.679    | -24.312  | 33.7                  |
| 0.5   | $2.302 \times 10^{-6}$ | $2.823 \times 10^{-7}$  | 6.628    | -19.433  | 22.6                  |
| 0.6   | $1.083 \times 10^{-5}$ | $1.230 \times 10^{-6}$  | 6.199    | -8.372   | 8.6                   |
| 0.7   | $6.775 \times 10^{-5}$ | $6.892 \times 10^{-6}$  | 5.681    | -1.661   | 2.6                   |
| 0.8   | $3.681 \times 10^{-4}$ | $3.283 \times 10^{-5}$  | 5.173    | 0.446    | 0.91                  |
| 0.9   | $1.54 \times 10^{-3}$  | $1.196 \times 10^{-4}$  | 4.706    | 0.942    | 0.41                  |
| 1.1   | $3.81 \times 10^{-3}$  | $3.847 \times 10^{-4}$  | 4.539    | 1.049    | 0.69                  |
| 1.2   | $5.98 \times 10^{-3}$  | $6.366 \times 10^{-4}$  | 4.423    | 1.095    | 6.0                   |
| 1.3   | $8.78 \times 10^{-3}$  | $1.01 \times 10^{-3}$   | 4.330    | 1.140    | 21.7                  |
| 1.4   | $1.237 \times 10^{-2}$ | $1.55 \times 10^{-3}$   | 4.248    | 1.183    | 54.0                  |
| 1.5   | $1.684 \times 10^{-2}$ | $2.3 \times 10^{-3}$    | 4.175    | 1.225    | 108.8                 |
| 1.6   | $2.177 \times 10^{-2}$ | $3.27 \times 10^{-3}$   | 4.148    | 1.265    | 196.0                 |
| 1.7   | $2.813 \times 10^{-2}$ | $4.57 \times 10^{-3}$   | 4.095    | 1.304    | 315.8                 |
| 1.8   | $3.561 \times 10^{-2}$ | $6.22 \times 10^{-3}$   | 4.048    | 1.342    | 474.8                 |
| 1.9   | $4.428 \times 10^{-2}$ | $8.28 \times 10^{-3}$   | 4.008    | 1.378    | 676.0                 |
| 2.0   | $5.421 \times 10^{-2}$ | $1.08 \times 10^{-2}$   | 3.973    | 1.414    | 676.0                 |
| 2.1   | $6.549 \times 10^{-2}$ | $1.384 \times 10^{-2}$  | 3.942    | 1.449    | 1218                  |
| 2.2   | $7.818 \times 10^{-2}$ | $1.747 \times 10^{-2}$  | 3.916    | 1.483    | 1564                  |
| 2.3   | $9.236 \times 10^{-2}$ | $2.174 \times 10^{-2}$  | 3.894    | 1.517    | 1962                  |
| 2.4   | 0.1081                 | $2.671 \times 10^{-2}$  | 3.876    | 1.549    | 2410                  |
| 2.5   | 0.1255                 | $3.245 \times 10^{-2}$  | 3.861    | 1.581    | 2911                  |

TABLE III: Fitting parameters  $\eta_i$  and estimated variance  $\nu$  for Eq. (17) in the V-GV case ( $n_1 = 1$  and  $n_2 = 2$ ), for  $\mu$  between 0.2 and 2.5.

ration is given by  $^{30,31}$ 

$$\vec{\Omega}_{i} = \sum_{j \neq i} \Omega\left( \left| \vec{r_{i}} - \vec{r_{j}} \right| \right) \hat{r}_{i,j}$$
(19)

where  $\vec{r_i}$  is the position of the vortex *i* and  $\hat{r}_{i,j} = (\vec{r_i} - \vec{r_j})/|\vec{r_i} - \vec{r_j}|$ . In such a model, the V-V interaction force is derived from the interaction potential between a pair of vortices, and is usually taken as  $\Omega(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|) = f_0 K_1 (|\vec{r_i} - \vec{r_j}|/\lambda)$ , where  $f_0$  is a constant. As mentioned in Sec. IV A, this corresponds to the extreme type-II situation  $(\mu \gg 1)$ . For intermediate values of  $\mu$ , one should consider both Bessel functions in Eq. (10), which is not

TABLE IV: Fitting parameters in Eqs. (18a-d) for the V-GV case  $(n_1 = 1 \text{ and } n_2 = 2)$ , for three different ranges of  $\mu$ .

| 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                  | $-1.779 \times 10^{-2}$ | -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         |
| $B_4$     | $-2.396 \times 10^{-2}$ | -0.7764                 | 1         |
| $C_4$     | -6.075                  | -5.113                  | 0.5       |

convenient since, as mentioned in Sec. II, this expression diverges for small V-V separation and does not take into account neither the vortex core deformations, nor the formation of giant vortices. Hence, using Eq. (17) for the vortex pair interaction force, with the parameters given by Table I or by Eqs. (18a-d), would be an easy way to take these features into account and avoid the small separation divergence. Although this solves the problem in the standard simulations of vortex dynamics, which involves only pairwise interactions, here we will show when such an approach breaks down and take the interaction between three vortices placed in the vertices of an equilateral triangle as an example.

Let us consider three vortices placed in the positions  $r_1 = (-d/2, -\sqrt{3}d/4)$ ,  $r_2 = (d/2, -\sqrt{3}d/4)$  and  $r_3 = (0, \sqrt{3}d/4)$ , forming a triangle of side d. The three vortex ansatz is  $\Psi = e^{in_1\theta_1}e^{in_2\theta_2}e^{in_3\theta_3}f(x,y)$ , where we control the vorticity  $n_1, n_2$  and  $n_3$  of each vortex. For the present example, we consider three singly quantized vortices  $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ . Following the procedure described in Sec. III, we obtain the Euler-Lagrange equations for the three vortex problem, where the first equation is similar to Eq. (13a), but  $\overline{X}$  and  $\overline{Y}$  contains three terms

$$\overline{X} = \frac{x_1}{r_1^2} + \frac{x_2}{r_2^2} + \frac{x_3}{r_3^2}, \qquad \overline{Y} = \frac{y_1}{r_1^2} + \frac{y_2}{r_2^2} + \frac{y_3}{r_3^2},$$

and the second equation is

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A} + \left[\vec{A} - \frac{1}{r_1}\hat{\theta}_1 - \frac{1}{r_2}\hat{\theta}_2 - \frac{1}{r_3}\hat{\theta}_3\right]f^2 = 0.$$
(20)

Similarly to the case of V-V and V-GV interactions, we solved the Euler-Lagrange equations for three vortices numerically, by means of a finite-difference scheme and a relaxation method. The results obtained for the interaction energy as a function of the V-V distance, or equivalently, the side d of the triangle, are shown as dashed curves in Fig. 9 for two values of the GL parameter,  $\mu =$ 0.8 (type-I) and 1.7 (type-II). As we consider the same distance d between each pair of vortices forming the triangle, the standard procedure for the many-vortex problem, which considers only pair interactions, predicts an interaction energy  $E_{int}(d) = 3E_{int}^{pair}(d)$ , where  $E_{int}^{pair}(d)$  is the interaction energy for each V-V pair. This energy is shown by the solid curves in Fig. 9, where good agreement with the results obtained from the three vortex ansatz is observed only for larger separations d, whereas for smaller separations the energies predicted by the pair interaction model are clearly overestimated. This result is a manifestation of the importance of the vortex deformations for small V-V separation: the pairs interaction model simply does not account for giant vortex deformations with three vortices. As a consequence, this

model overestimates the energy. This is illustrated in Fig. 10, where the amplitude of the order parameter for the two (a, c) and three (b, d) interacting vortices is shown for  $\mu = 0.8$  (left panels) and 1.7 (right panels) at V-V separations  $d = 3.2\lambda$  and  $1.8\lambda$ , respectively. In the case of three vortices, we observe that each vortex is deformed towards the center of the vortex cluster. Such a deformation, which is found as the lowest energy state of the three vortex system, cannot be obtained by a model consisting only of interactions between pairs of vortices. Nonetheless, in the extreme type-II cases studied in the literature<sup>30,31</sup>, the critical V-V separation  $d_c$ where the vortices start to coalesce approaches zero (as demonstrated in the previous subsection) and the agreement between the results obtained by the pairwise model and by the three vortex ansatz is expected to improve at even smaller separations.

In the many-vortex problem, the vortices can approach each other in a combinatorially large number of ways, and the study of three vortices in a triangular geometry



FIG. 7: (Color online) (a) Comparison between the V-GV interaction force as a function of the separation d obtained by the numerical method (symbols) and by the fitting function (curves) given by Eq. (17). The solid (dashed) curves and the open triangles (squares) are the data for  $\mu = 0.6$  (1.7). The results for each  $\mu$  are also plotted separately on a log-scale: (b)  $\mu = 1.7$ ; (c)  $\mu = 0.6$ .



FIG. 8: (Color online) The fitting coefficients  $\eta_{i=1-4}$ (symbols) in Eq. (17) as a function of  $\mu = \sqrt{2}\kappa$  for the V-GV case. The curves present the  $\eta_i(\mu)$  fittings given by Eqs. (18a-d) for three different ranges, defined in the text as range 1 (0 <  $\mu$  < 0.5), range 2 (0.5 <  $\mu$  < 1) and range 3 (1 <  $\mu$ ).



FIG. 9: (Color online) Interaction energy for three vortices placed in the vertices of an equilateral triangle as a function of its side d, obtained by the three vortices ansatz (dashed) and by considering only interaction between pairs (solid), i.e.  $E_{int}(d) = 3E_{int}^{pair}(d)$ , for  $\mu = 0.8$  and 1.7.

presented in this subsection is a very specific case. Nevertheless, this example illustrates in a simple way that, apart from the extreme type-II case, an exact description of the many-vortex dynamics is a very difficult task. The



FIG. 10: (Color online) Amplitude of the order parameter for the cases indicated in Fig. 9, namely, for  $\mu = 0.8$  (1.7) and  $d = 3.2\lambda$  (1.8 $\lambda$ ), obtained for the two (a, c) and three (b, d) interacting vortices.

pair potential, even when taking V-V deformations into account, still provides only an approximate description of the problem, as the deformations due to the presence of all the other vortices are not included in the model. In this sense, the expressions proposed in the present work for the V-V and V-GV interaction forces provide an important improvement on the well-known expressions  $\Omega(|\vec{r_i} - \vec{r_j}|) = f_0 K_1 (|\vec{r_i} - \vec{r_j}|/\lambda)$  and Eq. (10), by including the deformations and the merger of vortices, but a molecular dynamics study of many vortices using these expressions is still not an ideal description of a system with comparable length scales  $\xi$  and  $\lambda$ .

#### D. Vortex-antivortex interaction

In the previous subsections, we showed that when two vortices or a vortex and a giant vortex are brought close to each other, they merge forming a single giant vortex state with vorticity  $n = n_1 + n_2$ , and in the limit of small separation the V-V or V-GV forces are very weak. Conversely, as discussed in Sec. II, a vortex and an antivortex attract and annihilate, both in type-I and type-II superconductors. In what follows, the behavior of the force for the vortex-antivortex (V-AV) interaction as a function of the V-AV separation is studied in greater detail.

Indeed, the V-AV interaction is quite different from the interaction observed in the V-V and V-GV cases studied in previous subsections. The V-AV interaction energy (a) and force (b) are shown in Fig. 11, for two values of the GL parameter,  $\mu = 0.6$  (triangles) and 1.7 (squares). As discussed previously in Sec. II, the V-AV interaction is always attractive, for any value of  $\mu$ . However, at some critical V-AV separation  $d_E$ , the solution with well defined super-currents around each vortex and antivortex ceases to be the lowest energy state of the system. A solution with lower energy exhibits a strong suppression of the amplitude of the order parameter and super-current in the region between the vortex and the antivortex, and represents the ground state for small V-AV distances. A hysteresis is observed in the vicinity of the critical separation  $d_E$ , as shown in Fig. 11(a). These results resemble those obtained by Priour and  ${\rm Fertig}^{32}$  in the case of a vortex placed close to an artificial defect. A suppressed amplitude of the order parameter is also observed by Sardella et al.<sup>33</sup> in the dynamics of V-AV annihilation in a square mesoscopic superconducting cylinder, for small V-AV separation. The absolute value of the force is shown in Fig. 11(b) on  $log_{10}$  scale, where two different behaviors, for separations d smaller and larger than  $d_E$ , are clearly observed.

The dependence of the numerically obtained critical separation  $d_E$  for the V-AV interaction on the GL parameter  $\mu$  is illustrated as the squares in Fig. 11(c), and can be fitted to a function similar to the one used for the critical separations in the V-V and V-GV cases, given by  $d_E = 0.337 + 31.249(1 + 10.264\mu)^{-0.6855}$  (with estimated variance  $\nu \approx 0.4\%$ ), which is shown as a



FIG. 11: (Color online) V-AV interaction (a) energy and (b) force (absolute value) as a function of the separation d, for  $\mu = 0.6$  (triangles) and 1.7 (squares). The full (open) symbols are the results obtained in the numerical relaxation procedure by gradually increasing (decreasing) d from 0 to 15  $\lambda$  (from 15  $\lambda$  to 0). A hysteresis is observed around a critical separation  $d_E$ , as indicated by the arrows, and the solution represented by open symbols is stable only for  $d > d_A$ . (c) Numerically obtained critical separations  $d_E$  (squares) and  $d_A$  (triangles) as a function of the GL parameter  $\mu$ , along with their fitting functions (curve).

solid curve in Fig. 10(c). The difference is that the  $\mu \to \infty$  limit is now finite, while previously it was zero. Although the solution with well defined super-currents around each vortex and antivortex is not the lowest energy state for  $d < d_E$ , it is still a stable state in the vicinity of this point, and becomes unstable only for  $d < d_A$ . The dependence of  $d_A$  on the GL parameter  $\mu$  is shown by the triangles in Fig. 11(c) and can be fitted by  $d_A = 0.337 + 12.222(1 + 2.461\mu)^{-0.7931}$  (with estimated variance  $\nu \approx 0.6\%$ ).

Figure 12 shows the distribution of the super-current  $\vec{J} = \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{A}$  and the amplitude of the order parameter along the direction of the V-AV approach (y = 0 axis) for different values of the V-AV separation. The critical separations for  $\mu = 0.6$  and 1.7 are  $d_E = 8.6\lambda$  and

 $4.5\lambda$ , respectively, and the values of V-AV separation in Fig. 12 are chosen as  $d = 9.2\lambda > d_E$  for  $\mu = 0.6$  and  $5.2\lambda > d_E$  for  $\mu = 1.7$ . Notice that for each of these separations, we can find two solutions with different energies. The black (gray) curves in Fig. 12 are related to the open (full) symbols in Fig. 11(b). When the V-AV separation is large, the currents around the vortex and the antivortex present well defined peaks at some distance which depends on  $\mu$ . As the vortex and antivortex are placed closer, their super-currents superimpose in the region between them, as observed in the black curves in Fig. 12 (top). The black curves in Fig. 12 (bottom) show that the amplitude of the order parameter in these solutions has zeros at each vortex and antivortex position and reaches  $\approx 1$  in the region between them. In the vicinity of  $d_E$ , for V-AV separation  $d > d_E$ , there is a higher energy state (see full gray symbols in Fig 11(a)) with strongly suppressed super-current and amplitude of the order parameter in the region between the vortex and antivortex, which is shown by the gray curves in Fig. 12. For  $d < d_E$ , the solution represented by black lines in Fig. 12 is no longer the lowest energy state, as shown in Fig. 11(a), and becomes unstable as the V-AV separation is reduced at  $d < d_A$ , while the solution with suppressed current and order parameter between the vortex and antivortex, shown by the gray curves, becomes the lowest



FIG. 12: Super-current (top) and amplitude of the order parameter (bottom) along the direction of the V-AV approach x, for the V-AV separations indicated by arrows in Fig. 10 (b), namely,  $d = 9.2\lambda$  (5.2  $\lambda$ ), for  $\mu = 0.6$  (1.7). Black (gray) curves refer to the states represented by open (full) symbols in Fig. 11 (b).

TABLE V: Fitting parameters  $\Delta_i$  and estimated variance  $\nu$  for Eq. (21) in the V-AV case  $(n_1 = 1 \text{ and } n_2 = -1)$ , for  $d > d_E$ .

| $\mu$ | $\Delta_1$ | $\Delta_2$ | $\nu(\times 10^{-9})$ |
|-------|------------|------------|-----------------------|
| 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                  |

energy state for  $d < d_E$  and the only stable solution for  $d < d_A$ .

The suppressed order parameter in the region between vortices observed in the only stable solution for  $d < d_A$ suggests that a vortex and an antivortex cannot coexist at these distances, unless somehow pinned, in which case this string solution is formed. This is reasonable, since at short distances the fields of the vortex and the antivortex compensate each other, and the flux quantization as an essential property of a(n) (anti)vortex is lost. Notice that this is different from the case of two merging vortices, which can coexist at short distances, deform and interact as described in previous sections, since the flux quantization of the V-V pair is preserved even at small V-V separations. The string formation goes beyond simulations of V-AV dynamics, since in this case the vortex-antivortex pair is no longer well defined by their surrounding supercurrent and order parameter. For molecular dynamics studies of the V-AV motion, one should consider the critical separation  $d_A$  as the separation where the V-AV pair annihilates (see, e.g. Ref.<sup>34</sup>).

Due to the peculiar behavior found for the V-AV force as a function of the separation d, which is discontinuous at  $d_E$ , it is not possible to find a single fitting function describing the force for both the  $d > d_E$  and  $d < d_E$ regimes, as we were able to do for the V-V and V-GV forces. On the other hand, as discussed in the previous section, the V-AV interaction force at large distances dcan be described by a combination of Bessel functions,



FIG. 13: (Color online) Fitting functions (curves) for the parameters  $\Delta_1$  and  $\Delta_2$  in Eq. (21), for the V-AV interaction force at  $d > d_E$ , as a function of the GL parameter  $\mu = \sqrt{2\kappa}$ . The data from Table V are shown as symbols for comparison.

given by Eq. (10), which can be rewritten as

$$\Omega(d) = -\Delta_1 K_1(d) - \Delta_2 K_1(\mu d), \qquad (21)$$

where  $\Delta_1$  and  $\Delta_2$  are fitting parameters. We have fitted our numerically obtained V-AV interaction force for  $d > d_E$  using Eq. (21), and a list of fitting parameters for the GL parameter  $\mu$  ranging from 0.3 to 2.5 is given in Table V. A list of such fitting parameters can also be found in Ref.<sup>7</sup>, where the relation between our fitting parameters and the parameters q and m of the cited work is  $\Delta_1 = m^2/2\pi^2$  and  $\Delta_2 = \mu q^2/2\pi^2$ . Following the same procedure of previous subsections, we propose fitting functions for these parameters as a function of the GL parameter  $\mu$ ,

$$\Delta_1(\mu) = 2.879 + 3.415\mu^{-3.166} \tag{22a}$$

and

$$\Delta_2(\mu) = \mu(-0.2258 + 1.044e^{1.866\mu}), \qquad (22b)$$

which are plotted as solid lines in Fig. 13 along with the data of Table V (symbols).

Notice that for the V-AV interaction, we did not find different behaviors in different ranges of  $\mu$ , as observed for the V-V and V-GV cases, since the V-AV interaction is always attractive and becomes only stronger as  $\mu$  increases from zero, instead of exhibiting zero force at  $\mu = 1$  and becoming repulsive for  $\mu > 1$ , as observed for V-V and V-GV interactions. Therefore, substituting Eqs. (22) into Eq. (21) yields a single expression

$$\Omega(d) = -(2.879 + 3.415\mu^{-3.166})K_1(d) + (0.2258 - 1.044e^{1.866\mu})\mu K_1(\mu d),$$
(23)
which is expected to provide an accurate description of the V-AV interaction force, at separations  $d > d_E$ , for any value of  $\mu$ .

## V. CONCLUSIONS

We presented a theoretical study of the interaction between vortices in bulk superconductors within the Ginzburg-Landau theory. An analytical study of the asymptotic behavior of the vortex-vortex interaction shows that a combination of first order modified Bessel functions of the second kind describes the behavior of the numerically obtained forces for large vortex-vortex separation. At small distances, the fitting curves for V-V and V-GV interactions show that the force in this region behaves as a power function of the separation between vortices. We proposed a fitting function that combines both limiting behaviors, namely, the power law for small distances and the modified Bessel function behavior for large distances. This function, given by Eq. (17), gives fairly accurate fitting of the interaction force for any value of  $\mu$ , even in the type-I regime. It depends on four fitting parameters, which can be obtained for any value of  $\mu$  either by interpolating our data presented in Table I (Table III), for vortex-vortex (vortex-giant vortex) interactions, or by using Eqs. (18 a-d) with the parameters presented in Table II (Table IV).

Our analytical study of the V-AV interaction shows that the V-AV interaction force is attractive for any value of the GL parameter  $\mu$ , which is confirmed by our numerical results and contradicts the conjecture proposed in previous works<sup>17–19</sup> which implies that the V-AV interaction force is repulsive for  $\mu < 1$  (type-I). For large V-AV separation d, the interaction force decays with d as a combination of modified Bessel functions. However, for d smaller than a critical separation  $d_E$ , the conventional V-AV pair is no longer the lowest energy state. Instead, the lowest energy state exhibits a strong suppression of 15

force at these separations, given by Eq. (23), which is valid for any value of  $\mu$ . The fitting functions for the V-V, V-GV and V-AV force given in this work will be useful, for instance, for the study of bulk and mesoscopic systems consisting of many vortices using molecular dynamics techniques. We nevertheless remark that, although deformations are taken into account in the interaction force between two vortices in this work, the deformations in a many vortices system are expected to be more complex. Hence, the molecular dynamics study of many vortices, even with the improved expressions for the interaction force provided in this paper, is still an approximate description of the system. As a method, the derivation and handling of the differential equations describing the interaction between vortices presented in this work can be further adapted to describe such interactions in e.g. two-band superconductors, or hybrid systems comprising different superconducting materials.

## Acknowledgments

This work was financially supported by CNPq, under contract NanoBioEstruturas 555183/2005-0, PRONEX/FUNCAP, CAPES, the Bilateral programme between Flanders and Brazil, the collaborative project CNPq-FWO-Vl, the Belgian Science Policy (IAP) and the Flemish Science Foundation (FWO-Vl).

- \* Electronic address: andrey@fisica.ufc.br
- <sup>†</sup> Electronic address: gil@fisica.ufc.br
- <sup>1</sup> L. Kramer, Phys. Rev. B **3**, 3821 (1971).
- <sup>2</sup> L. Jacobs and C. Rebbi, Phys. Rev. B **19**, 4486 (1979).
- <sup>3</sup> V. A. Schweigert and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 57, 13817 (1998).
- <sup>4</sup> A. Kanda, B. J. Baelus, F. M. Peeters, K. Kadowaki, and Y. Ootuka, Phys. Rev. Lett. **93**, 257002 (2004).
- <sup>5</sup> D. S. Golubović, M. V. Milošević, F. M. Peeters, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. B **71**, 180502(R) (2005).
- <sup>6</sup> E. H. Brandt, Phys. Rev. B **34**, 6514 (1986).
- <sup>7</sup> J. M. Speight, Phys. Rev. D 55, 3830 (1997).
- <sup>8</sup> R. MacKenzie, M.-A. Vachon, and U. F. Wichoski, Phys. Rev. D 67, 105024 (2003).
- <sup>9</sup> L. M. A. Bettencourt and R. J. Rivers, Phys. Rev. D 51, 1842 (1995).
- <sup>10</sup> F. Mohamed, M. Troyer, G. Blatter, and I. Luk'yanchuk,

- Phys. Rev. B 65, 224504 (2002).
- <sup>11</sup> A. D. Hernández and A. López, Phys. Rev. B 77, 144506 (2008).
- <sup>12</sup> J. R. Clem, J. Low Temp. Phys. **18**, 427 (1975).
- <sup>13</sup> R. Auzzi, M. Eto, and W. Vinci, J. High Energ. Phys. 2, 100 (2008).
- <sup>14</sup> E. Babaev and M. Speight, Phys. Rev. B **72**, 180502(R) (2005).
- <sup>15</sup> R. Geurts, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, arXiv:1005.2921v1.
- <sup>16</sup> D. R. Tilley and J. Tilley, Superfluidity and superconductivity, (IOP Publishing Ltd. - London, 1990).
- <sup>17</sup> V. R. Misko, V. M. Fomin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. Lett. **90**, 147003 (2003).
- <sup>18</sup> V. R. Misko, V. M. Fomin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov, Phys. C **404**, 251 (2004).
- <sup>19</sup> G. Teniers, V. V. Moshchalkov, L. F. Chibotaru, and A.

Ceulemans, Phys. B **329-333**, 1340 (2003).

- <sup>20</sup> G. R. Berdiyorov, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. **96**, 207001 (2006).
- <sup>21</sup> R. Geurts, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. **97**, 137002 (2006); *ibid.* Phys. Rev. B **75**, 184511 (2007).
- <sup>22</sup> E. B. Bogomol'nyi, Sov. J. Nucl. Phys. **24**, 449 (1976).
- <sup>23</sup> T. M. Samols, Commun. Math. Phys. **145**, 149 (1992).
- <sup>24</sup> William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, *Numerical Recipes in Fortran 77*, Second Edition (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- <sup>25</sup> A perfect fitting function gives  $\nu \to 0$ .
- <sup>26</sup> J. Pearl, Appl. Phys. Lett. **5**, 65 (1964).
- <sup>27</sup> E. H. Brandt, Phys. Rev. B **79**, 134526 (2009).

- <sup>28</sup> S. Zapperi, A. A. Moreira, and J. S. Andrade Jr., Phys. Rev. Lett. 86, 3622(2001)
- <sup>29</sup> E. H. Brandt, Rep. Prog. Phys. **58**, 1465 (1995).
- <sup>30</sup> C. Reichhardt, C. J. Olson, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. 78, 2648 (1997).
- <sup>31</sup> W. V. Pogosov, H. J. Zhao, V. R. Misko, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 81, 024513 (2010)
- <sup>32</sup> D. J. Priour Jr. and H. A. Fertig, Phys. Rev. B 67, 054504 (2003).
- <sup>33</sup> 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).
- <sup>34</sup> C. L. S. Lima and C. C. de Souza Silva, Phys. Rev. B 80, 054514 (2009).

## Aharonov-Bohm oscillations in the energy spectra of graphene quantum rings

Andrey Chaves,<sup>1, 2, \*</sup> M. Zarenia,<sup>1</sup> J. M. Pereira Jr.,<sup>2</sup> G. A. Farias,<sup>2,†</sup> and F. M. Peeters<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium

<sup>2</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará,

Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Dated: November 29, 2010)

The magnetic field dependence of the energy spectrum of graphene quantum rings is theoretically investigated. Energy levels of zigzag and armchair hexagonal quantum rings, as well as circular rings, are obtained by diagonalizing the tight-binding Hamiltonian. Due to the ring confinement, a gap is opened in the graphene spectrum at zero magnetic field and Aharonov-Bohm oscillations in the energy levels are observed as function of the flux penetrating the ring. Our results show that the energy spectra for each ring geometry and edge type exhibit qualitatively different features. The results obtained from the tight-binging model are compared with those obtained from the Dirac model of graphene, where we discuss which features of the former can be recovered by using the approximations imposed by the latter.

KEYWORDS: graphene, tight-binding model, Dirac Hamiltonian, quantum ring, Aharonov-Bohm effect

## I. INTRODUCTION

Graphene, a two-dimensional lattice of carbon atoms, has been widely studied during the past few years. This interest is not only due to its possible future technological applications, but also because it provides the possibility to probe interesting phenomena predicted by quantum field theories. Several of the exotic properties originate from the fact that the low energy electrons in graphene obey the zero mass Dirac equation.

Previous works have demonstrated interesting features coming from ring-like confinement in graphene. Recher et al.<sup>12</sup> have shown that the combined effects of a ring shaped mass-related potential and an external magnetic field can be used to break the valley degeneracy in graphene.

In this paper, we calculate the energy spectrum of graphene quantum rings with different geometries and different type of edges. The results present in this work, .... The Dirac approximation for graphene is meant to be valid for infinite graphene sheets. In finite samples, considering the appropriate boundary conditions, one might expect to obtain the correct energy spectrum. Even so, the results from tight-binding calculations for quantum rings presented here show that the edge structures play an important role in these systems,

## **II. TIGHT-BINDING MODEL**

Graphene consists of a honeycomb lattice of carbon atoms, which can be described by the Hamiltonian

$$H_{TB} = \sum_{i} (\epsilon_i + M_i) c_i^{\dagger} c_i + \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \tau_{ij} c_i^{\dagger} c_j + \tau_{ij}^* c_i c_j^{\dagger} \right), \quad (1)$$

where  $c_i(c_i^{\dagger})$  annihilates (creates) an electron in the site i, with on-site energy  $\epsilon_i$ , and the sum is taken only between nearest neighbors sites i and j, with hopping



FIG. 1: Sketch of the (a) Armchair and (b) zigzag hexagonal rings, as well as the (c) circular ring, considered in this work. The first two geometries are characterized by the number of carbon rings  $N_E$  in their outer (inner) edge, whereas the latter is characterized by its width W and average radius R.

energy  $\tau_{ij}$ . Due to the effect of Klein tunnelling in graphene, it is hard to confine electrons by applying an external potential profile.<sup>16</sup> On the other hand, a "site-dependent" potential  $M_i$ , which is positive (negative) if

*i* belongs to the lattice A (B),<sup>1</sup> opens a gap in the energy spectrum of graphene. Due to this property, such a potential is normally used to simulate confining structures in graphene, such as quantum  $dots^{11}$  and  $rings^{12}$ , within the Dirac model, where it appears as a massrelated term. Recent papers have suggested a way to obtain such a potential experimentally, namely, by depositing the graphene lattice over specific substrates.<sup>23,24</sup> The effect of an external magnetic field can be introduced in the TB model by including a phase in the hopping parameters according to the Peierls substitution  $\tau_{ij} \to \tau_{ij} \exp\left[i\frac{e}{\hbar}\int_{j}^{i} \vec{A} \cdot d\vec{l}\right]$ , where  $\vec{A}$  is the vector potential describing the magnetic field.<sup>10</sup> For a magnetic field  $\vec{B} = B\hat{z}$ , we conveniently choose the Landau gauge  $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ , so that the Peierls phase becomes zero in the *y*-direction and  $\exp\left[i\frac{e}{\hbar}\int_{j}^{i}\vec{A}\cdot\vec{dl}\right] = \exp\left[i\frac{2\pi x}{3a}\frac{\Phi}{\Phi_{0}}\right]$  in the *x*-direction, where a = 1.42 Å is the lattice parameter of graphene,  $\Phi_0 = h/e$  is the magnetic quantum flux and  $\Phi = 3\sqrt{3}a^2B/2$  is the flux through a carbon hexagon. After writing the Hamiltonian  $H_{TB}$  in a matrix form, we diagonalize it numerically, obtaining the energy spectrum for the different ring geometries schematically shown in Fig. 1: hexagonal rings, with (a) armchair and (b) zigzag edges, and (c) circular rings, where each edge exhibits an admixture of zigzag and armchair regions.

In Fig. 2, the energy spectra for hexagonal armchair rings are shown as a function of the magnetic flux  $\Phi$ . These spectra exhibit crossings and anti-crossings. The latter is a consequence of the hexagonal geometry of the ring. In fact, previous works have shown that the energy spectra of triangular and diamond-like graphene rings exhibit three-fold and four-fold sub-bands, respectively, separated by anti-crossings.<sup>9</sup> Moreover, these spectra exhibit a gap around E = 0 in the absence of a magnetic field, but E = 0 states are found for specific values of magnetic flux, which are almost equally spaced in flux for the thinner ring in Fig. 2(a). This is reminiscent of the energy spectrum for Schrödinger electrons confined in quantum rings under perpendicular magnetic fields,<sup>2–4</sup> where the energy oscillates periodically with the magnetic flux, due to the Aharonov-Bohm effect. A detailed analysis of this feature will be made further, in the next section. The qualitative features observed in Fig. 2(a), including the gap around E = 0 in the absence of magnetic fields, are present for all ring widths. This is surprising, since in armchair nano-ribbons, the character of the system oscillates between metallic and insulating as the width changes.<sup>17</sup> Although the armchair ring in Fig. 2(a)is made just by connecting six armchair nano-ribbons, the qualitative features of such ribbons are not directly transferable to the quantum ring case, which suggests that the ring geometry and the ribbons connections are playing a major role in these systems.<sup>18</sup> The influence of increasing the ring width on the energy states is shown in Fig. 2(b), where we observe that the gap between sub-bands is larger, compared to the thinner case in Fig.



FIG. 2: Energy spectrum as a function of the magnetic flux through a single carbon comb for the armchair hexagonal quantum rings schematically shown in Fig. 1(a), considering two ring widths: (a)  $N_E = 15$ ,  $N_I = 10$  and (b)  $N_E = 15$ ,  $N_I = 3$ . The spectrum is symmetric with respect to E = 0.

2(a), but decreases as the magnetic field is enhanced.

The energy spectra of zigzag hexagonal rings, on the other hand, are strongly dependent on the ring width. as shown in Fig. 3. Depending on the ring width, the system can either exhibit two six-fold sub-bands separated by a gap around E = 0, as shown in Fig. 3(a), or a central six-fold sub-band around this energy, as in Fig. 3(b). A structural difference determines the qualitative behavior of the spectrum: the (former) latter is obtained when the external and internal zigzag edges of the ring are (anti) aligned, as illustrated in the insets. As a consequence, the lowest energy states in the two cases shown are qualitative different; for instance, in the first (second) case, the ground state is non (double) degenerate. Thus, contrary to the nano-ribbon case, for quantum rings it is the zigzag structure that exhibits an oscillatory behavior as the width changes. This agrees with the fact that the electronic properties of  $120^{\circ}$  junctions of zigzag nano-ribbons exhibit oscillatory behavior as the width changes, whereas such junctions made with armchair nano-ribbons show no qualitative dependence on the width,<sup>19</sup> which supports the idea that the energy spectra of hexagonal graphene rings are strongly dependent on the electronic properties of their corner junctions.

The energy spectrum for the circular ring schemati-





FIG. 3: Energy spectrum as a function of the magnetic flux through a single carbon comb for the zigzag hexagonal quantum rings schematically shown in Fig. 1(b), considering two ring widths: (a)  $N_E = 15$ ,  $N_I = 10$  and (b)  $N_E = 15$ ,  $N_I = 9$ . In the (former) latter the inner and outer zigzag edges are (anti-) aligned, as sketched in the insets. The spectrum is symmetric with respect to E = 0.

cally illustrated in Fig. 1(c) is presented in Fig. 4(a)as a function of the magnetic flux  $\Phi_R = \pi R^2 B$  threading the average ring radius R = 80 Å. As there is no hexagonal symmetry, the energy sub-bands are no longer six-folded, as those discussed in the previous cases, but they are rather two-folded and exhibit AB oscillations as the magnetic flux increases, which are not perfectly periodic in  $\Phi_R$  due to the finite width W = 60 Å of the system. In Fig. 4(b), we present results for a different kind of circular quantum ring, suggested by previous  $papers^{12,21,22}$  in the litterature: we consider the case of an uncut graphene lattice, instead of the one cut into a circle illustrated in Fig. 1(c), but with a site-dependent potential  $M_i$  which is zero  $(M_0)$  inside (outside) the ring region. In order to avoid edge-related effects, we consider a smooth transition between the zero and  $M_0$  potential regions, so that  $M_i$  is given by

$$M_i(r_i) = \pm M_0[2 + \tanh(r_i^+) + \tanh(r_i^-)]$$
 (2)

where  $r_i^+ = (r_i - R - W/2)/S$  and  $r_i^- = (-r_i + R - W/2)/S$ , S is the width of the smooth region and  $r_i = \sqrt{x_i^2 + y_j^2}$  is the position of the *i*-th site of the lattice. The results for a potential height  $M_0 = 1$  eV and smooth

FIG. 4: Energy spectrum as a function of the magnetic flux through a single carbon comb for (a) the circular graphene ring schematically shown in Fig. 1(c), and (b) a quantum ring formed by a site-dependent potential given by Eq. (2), with smoothness S = 10 Å and height  $M_0 = 1$  eV. In both cases, the average radius of the ring is R = 80 Å and the width is 60 Å. The spectrum is symmetric with respect to E = 0.

region S = 10 Å are shown in Fig. 4(b), for a ring with the same radius and width as in Fig. 4(a). The spectrum in this case exhibits a  $\approx 170$  meV gap at zero magnetic field and a degenerate ground state. As the magnetic field increases, the ground state degeneracy is lifted and clear AB oscillations are observed.

## III. CONTINUUM MODEL

The energy spectrum of an infinite graphene sheet in the absence of external potentials and magnetic field, as obtained from the TB Hamiltonian (1), is gapless in six points of the reciprocal space, from which only two are inequivalent, labelled as K and K'.<sup>14,15</sup> In the vicinity of each of these points, the energy depends almost linearly on the wave vector  $\vec{k}$  and the electron behaves as a quasiparticle described by the Dirac Hamiltonian

$$H_D = \left[ v_F \vec{\sigma} \cdot (\vec{\mathbf{p}} + e\vec{A}) + V(\vec{r})\mathbf{I} + \tau M(\vec{r})\sigma_z \right], \quad (3)$$

where  $v_F = 3\tau a_0/2\hbar$  is the Fermi velocity,  $\vec{A}$  is the electromagnetic vector potential, V(x, y) is an external

potential, **I** is the identity matrix,  $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  is the Pauli vector and the wavefunctions are pseudo-spinors  $\Psi = [\Psi_A, \Psi_B]^T$ , with  $\Psi_{A(B)}$  as the probability of finding the electron in the sub-lattice A(B) that composes the honeycomb lattice of graphene. As mentioned earlier, the site-dependent potential  $M_i$  in the TB Hamiltonian (1) is introduced in the Dirac Hamiltonian as a mass-related potential  $M(\vec{r})$ , which is multiplied by a factor  $\tau = 1$ (-1) for the K(K') Dirac cone in Eq. (3). Considering the mass as zero (infinity) inside (outside) of the confinement region yields the condition  $\Psi_B(\vec{r})/\Psi_A(\vec{r}) = \tau e^{\phi}$  at the boundary between the zero and infinity mass regions, where  $\phi$  is the angular coordinate.<sup>13</sup>

Let us first consider a simplified model of a circular graphene ring. Around the K point  $(\tau = 1)$ ,<sup>26</sup> the Hamiltonian (3) in polar coordinates reads

$$H_D = \hbar v_F \begin{bmatrix} \frac{M}{\hbar v_F} & -i\left(\Pi_r^* + \frac{\pi r B}{\Phi_0}\right) \\ -i\left(\Pi_r - \frac{\pi r B}{\Phi_0}\right) & -\frac{M}{\hbar v_F} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

where  $\Pi_r = e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \phi}\right)$ . No confining potential is considered a priori in Eq. (4), and the constant M is able to model any possible gap in the energy spectrum. We then assume that the momentum in the radial direction approaches zero due to the quantum ring confinement and, from the definition of the radial momentum operator<sup>25</sup>

$$\mathbf{p}_r = \frac{1}{2} (\mathbf{p}_r \cdot \hat{r} + \hat{r} \cdot \mathbf{p}_r) = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2R}, \tag{5}$$

where  $\hat{r}$  is the unitary vector in the radial direction and R is the ring radius, we obtain  $\partial/\partial r \to -1/2R$ , as  $\hat{p}_r \to 0$  and  $r \to R$ . Then, the simplified Hamiltonian for the graphene quantum ring is

$$H_D = \begin{bmatrix} M & -e^{-i\phi} \left(\frac{d}{d\phi} + i\frac{\Phi_R}{\Phi_0} - \frac{i}{2}\right) \\ e^{i\phi} \left(\frac{d}{d\phi} + i\frac{\Phi_R}{\Phi_0} + \frac{i}{2}\right) & -M \end{bmatrix},$$
(6)

where  $\Phi_R = \pi R^2 B$  is the magnetic flux through the quantum ring and the energy is in units of  $E_0 = \hbar v_F/R$ .

Notice that the definition of the radial momentum Eq. (5) solves an old problem when describing electrons in quantum rings. Indeed, in 1993, Aronov and Lyanda-Geller<sup>6</sup> used the same approach, i.e. an electron confined in a quantum ring has approximately zero radial momentum, in the study of Schrödinger electrons in a quantum ring with Rashba spin-orbit interaction, which exhibits similarities to the Dirac Hamiltonian for graphene.<sup>14</sup> However, they mistakenly defined the radial momentum as  $\mathbf{p}_r = \frac{\partial}{\partial r}$ , which leads to  $\frac{\partial}{\partial r} \to 0$  as the radial momentum approaches zero. Due to this wrong assumption, they ended up with a non-Hermitian Hamiltonian for this system. The non-Hermiticity of this Hamiltonian was eliminated *artificially* in sub-sequent papers,<sup>7,8</sup> by assuming an additional term -1/2R in the off-diagonals

of the Hamiltonian. A physical explanation for such a term was given only almost ten years later in a work by Meijer et al.<sup>5</sup>, where the authors split the Hamiltonian into two parts, one for the radial confinement and the other for the Rashba interaction, and used the eigenfunctions of the radial part to show that the average value of the radial first derivative term in the Rashba Hamiltonian is  $\langle \partial/\partial r \rangle = -1/2R$ . However, this is not the most general way to explain this term and such an explanation does not help for the graphene ring Hamiltonian (4), since in this case we cannot split the Hamiltonian and obtain a separate radial confinement term. By using Eq. (5), on the other hand, one obtains the result found by Meijer et al. in a more natural way, showing that the identity  $\langle \partial / \partial r \rangle = -1/2R$  is actually a consequence of the zero radial momentum. Our derivation of the graphene ring Hamiltonian in Eqs. (4-6) shows that if one simply defines the radial momentum properly, the correct expression for the radial derivatives and, consequently, the Hermitian Hamiltonian will appear naturally from the derivation. It is straightforwardly seen that the same happens in the derivation of the Rashba interaction Hamiltonian for quantum rings.

The eigenstates of the Hamiltonian (6) are found as  $\Psi_l = [A_R e^{il\phi}, iB_R e^{i(l+1)\phi}]^T$ , with eigenenergies given by

$$E = \pm \sqrt{\left(l + \frac{\Phi_R}{\Phi_0} + 1\right)\left(l + \frac{\Phi_R}{\Phi_0}\right) + \frac{1}{4} + M^2}, \quad (7)$$

where l is the angular momentum index.

Among the quantum ring structures discussed in the previous section, the armchair hexagonal ring is the best candidate to exhibit the features predicted by the simplified model, since these structures do not present edge states, i.e. the electronic density is maximum inside the ring arms, which can be roughly modelled by a circle. Our results show that this is indeed the case: the energy spectrum given by Eq. (7) for the circular ring of radius R = 47 Å, illustrated by the red curve in Fig. 5(a), is shown by the solid curves in Fig. 5(b), where the symbols are the results obtained by the TB model for the hexagonal armchair ring shown in Fig. 5(a). In the energy spectrum obtained by the simplified model for M = 0, one observes that: i) the energy gap reaches a maximum value  $E = \hbar v_F/R$  at  $\Phi_R = n\Phi_0$  (*n* integer) and ii) the system is gapless for  $\Phi_R = (n+1/2)\Phi_0$ . The results from the TB model exhibit practically the same features, although a better agreement with the simplified model is observed for lower energies and magnetic fields, where the effects due to the curvature of the energy bands, which are due to the finite width of the sample, are less important. We also consider the case of a ring deposited over a substrate that provides a mass-related potential  $M = 0.5E_0$ . Notice that this is not the same as shown in Fig. 4(b), since in the present case we have a constant mass term M, instead of the space-dependent potential  $M_i(r_i)$  of Eq. (2). The simplified model (curves) then predicts that such a



FIG. 5: (a) Hexagonal armchair quantum ring (black circles) considered in the TB calculation, with  $N_E = 15$  and  $N_I = 10$ , along with the one-dimensional R = 47Å ring (red curve) considered in the simplified model. (b) Energy spectra, obtained from the simplified (curves) and TB (symbols) models, as a function of the magnetic flux threading the red circle illustrated in (a). Curves with different colors represent different angular momentum index l. The results from the TB model with a background mass term  $M = 0.5E_0$  are also compared to those from the simplified model in this case.

mass term is responsible for a minimum gap of  $E_0$  in the energy spectrum at  $\Phi_R = (n + 1/2)\Phi_0$ . Such prediction is confirmed by the results from the TB model (symbols) for such a site-dependent potential.

As discussed in the previous section, the energy spectra of hexagonal zigzag rings with aligned and anti-aligned zigzag edges are qualitatively different. It is clear that both spectra cannot be obtained from our simplified model. Nevertheless, we can still estimate the period of the AB energy oscillations observed in Fig. 3 by  $\Phi_R = n\Phi_0$ , using a reasonable value of ring radius, which in the case of Fig. 3 is  $\approx 29$  Å. As the energy spectrum for the anti-aligned case, shown in Fig. 3(a), exhibits a gap around E = 0, one could expect that introducing  $M \neq 0$  in Eq. (7) would lead to the correct energy spectrum. Although the low-lying states of this spectrum resembles qualitatively those in Fig. 4(b) for  $M = 0.5E_0$ , the AB oscillations found by the simplified model exhibit a  $\pi$ -phase shift in comparison to the results in Fig. 3(a), so that the ground state for  $\Phi_R = 0$  in Fig. 4(b) (Fig. 3(a)) is double (non) degenerate.

Finally, let us discuss the case of a finite width graphene ring. In this case, one must consider the appropriate boundary conditions in order to describe the zigzag and armchair edges properly.<sup>20</sup> Due to the geometry and the complicated boundary conditions involved in the case of armchair and zigzag hexagonal rings (see Figs. 1(a) and (b)), the Dirac equation for these cases does not allow analytical solutions. In the circular case shown in Fig. 1(c), although the circular symmetry provides an easy way to study the problem by a onedimensional (radial) equation, the boundary conditions are still too complicated for an analytical treatment of this system, since they are an admixture of zigzag and armchair edges. Thus, in order to compare the results from the Dirac equation with those from the TB model for finite width systems, one must solve the Dirac equation for these structures numerically, which is left for future works. On the other hand, Recher et al.<sup>12</sup> have shown that in the case of a circular ring, when the confinement is provided by a gap opened in its inner and outer regions due to an infinite mass term, an analytical solution can be obtained. This solution was repeated in subsequent papers, 21, 22 where it was shown that the ground state energy oscillates periodically with the magnetic flux and is degenerate in the absence of a magnetic field. As the analytical solution and these results where discussed previously in Refs. 12,21,22, we will not repeat them here. Nevertheless, we point out that the features of the energy spectrum that we mentioned are indeed observed in Fig. 4(b), although the energy spectrum is still a little different from those in Fig. 2 of Ref. 12, or Fig. 1 of Refs. 21 and 22, probably due to the smoothness and finiteness of the mass term that we considered in our TB model, which are technically necessary, as mentioned in the previous section.

## IV. CONCLUSION

We calculated the energy levels of graphene quantum rings under an applied magnetic field and observed that the energy spectrum and the AB oscillations for these systems are strongly dependent on their geometry and edge structures.

The energy spectrum obtained from the TB model for hexagonal quantum rings with armchair edges exhibits six-fold sub-bands separated by narrow gaps, which become larger as the width of the ring increases. The spectrum does not have E = 0 states at zero magnetic field, but exhibits such states for certain values of magnetic flux. The main features of this energy spectrum can be obtained by a simplified model, which considers electrons obeying the Dirac equation for a circular ring with zero width. With such a simple model, one can estimate the energy levels and the period of AB oscillations or, alternatively, estimate the ring radius by analyzing its energy spectrum as a function of the magnetic field. The approximation is better for smaller widths of the hexagonal ring and for lower energies and magnetic fields.

For zigzag rings, the spectrum is qualitatively different. The six-fold energy sub-bands, separated by large gaps, are more clearly seen than in the armchair case. When the inner and outer zigzag edges are aligned, the energy spectrum exhibits a sub-band around E = 0 and the lowest energy state is double degenerate. In addition, the system exhibits zero energy states for specific values of magnetic flux that can be approximated by  $\Phi_R = (n+1/2)\Phi_0$ . On the other hand, when these edges are anti-aligned, the spectrum is drastically modified: the degeneracy of the lowest energy level is broken and two sub-bands, separated by a small gap, are observed around E = 0. It is an interesting question whether the strong dependence of the energy spectrum on the edge structures, e.g. the oscillatory behavior of the spectra with changing ring width, can indeed be modelled by a continuum approach, which is an interesting topic to be an-

- \* Electronic address: andrey@fisica.ufc.br
- <sup>†</sup> Electronic address: gil@fisica.ufc.br
- <sup>1</sup> J. Wurm, A. Rycerz, I. Adagideli, M. Wimmer, K. Richter, and H. U. Baranger, Phys. Rev. Lett. **102**, 056806 (2009).
- <sup>2</sup> G. A. Farias, M. H. Degani, J. A. K. Freire1, J. Costa e Silva, and R. Ferreira, Phys. Rev. B 77, 085316 (2008).
- <sup>3</sup> A. C. A. Ramos, A. Chaves, G. A. Farias, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 77, 045415 (2008).
- <sup>4</sup> A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, and G.A. Farias, Microelect. J. **39**, 455 (2008).
- <sup>5</sup> F. E. Meijer, A. F. Morpurgo, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 033107 (2002).
- <sup>6</sup> A. G. Aronov and Y. B. Lyanda-Geller, Phys. Rev. Lett. 70, 343 (1993).
- <sup>7</sup> Y. S. Yi, T. Z. Qian, and Z. B. Su, Phys. Rev. B 55, 10631 (1997).
- <sup>8</sup> T. Choi, S. Y. Cho, C. M. Ryu, and C. K. Kim, Phys. Rev. B 56, 4825 (1997).
- <sup>9</sup> D. A. Bahamon, A. L. C. Pereira, and P. A. Schulz, Phys. Rev. B **79**, 125414 (2009).
- <sup>10</sup> M. Governale and C. Ungarelli, Phys. Rev. B 58, 7816 (1998).
- <sup>11</sup> S. Schnez, K. Ensslin, M. Sigrist, and T. Ihn, Phys. Rev. B 78, 195427 (2008).
- <sup>12</sup> P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya. M. Blanter, C. W. J. Beenakker, and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B 76, 235404 (2007).
- <sup>13</sup> M. V. Berry and R. J. Mondragon, Proc. R. Soc. London,

alyzed in future works.

We also studied two cases of circular rings within the TB model: in the first, where the ring is cut from a graphene layer, we observe an energy spectrum composed by pairs of energy states which exhibit AB oscillations as the magnetic field increases. In the second, where the electrons are confined in a ring-like structure by an external site-dependent potential, the energy spectrum exhibits a gap around E = 0 and the ground state is doubly degenerate in the absence of a magnetic field. As the magnetic field increases, this degeneracy is lifted and AB oscillations are observed. Similar results were obtained analytically in previous works<sup>12,21,22</sup> by considering sharp infinite mass barriers.

#### Acknowledgments

This work was financially supported by CNPq, under contract NanoBioEstruturas 555183/2005-0, PRONEX/FUNCAP, CAPES, the Bilateral programme between Flanders and Brazil, the Belgian Science Policy (IAP) and the Flemish Science Foundation (FWO-Vl).

Ser. A **412**, 53 (1987).

- <sup>14</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>15</sup> J. M. Pereira, A. Chaves, G. A. Farias, and F. M. Peeters, Semic. Sci. Tech. **25**, 033002 (2010).
- <sup>16</sup> A. Matulis and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **77**, 115423 (2008).
- <sup>17</sup> L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B **73**, 235411 (2006).
- <sup>18</sup> T. Luo, A. P. Iyengar, H. A. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. B 80, 165310 (2009).
- <sup>19</sup> A. Iyengar, T. Luo, H. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. B 78, 235411 (2008).
- <sup>20</sup> A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B 77, 085423 (2008).
- <sup>21</sup> C.-H. Yan and L.-F. Wei, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 295503 (2010).
- <sup>22</sup> D. S. L. Abergel, V. M. Apalkov, and T Chakraborty, Phys. Rev. B 78, 193405 (2008).
- <sup>23</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. Mat. **6**, 770 (2007).
- <sup>24</sup> G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P.J. Kelly, and J. van den Brink, Phys. Rev. B 76, 073103 (2007).
- <sup>25</sup> G. Paz, Eur. J. Phys. **22**, 337 (2001).
- <sup>26</sup> In the K' point, substituting  $\vec{\sigma} \to \vec{\sigma}^*$  (see e.g. Ref. 14), one obtains the same energy spectrum, but for  $l \to l + 1$ .

# 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<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 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<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 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<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 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).

## Topological confinement in graphene bilayer quantum rings

L. J. P. Xavier,<sup>1</sup> J. M. Pereira, Jr.,<sup>1</sup> Andrey Chaves,<sup>1,2,a)</sup> G. A. Farias,<sup>1</sup> and F. M. Peeters<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, Fortaleza, Ceará 60455-900, Brazil

<sup>2</sup>Department of Physics, University of Antwerp, Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium

(Received 18 March 2010; accepted 29 April 2010; published online 27 May 2010)

We find localized electron and hole states in a ring-shaped potential kink in biased bilayer graphene. Within the continuum description, we show that for sharp potential steps the Dirac equation describing carrier states close to the K (or K') point of the first Brillouin zone can be solved analytically for a circular kink/antikink dot. The solutions exhibit interfacial states which exhibit Aharonov–Bohm oscillations as functions of the height of the potential step and/or the radius of the ring. © 2010 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3431618]

Graphene, a one atom thick crystal sheet of carbon, has been shown to display striking electronic and mechanical properties which are expected to lead to the development of devices (for a review, see, e.g., Ref. 1). These properties are related to the unusual electronic structure of graphene, in which the charge carriers behave as massless fermions with a gapless linear dispersion. For two coupled graphene sheets, known as bilayer graphene (BG), the electronic structure is modified due to the interlayer interaction, with the otherwise linear dispersion becoming approximately parabolic. Another important feature of BG is the fact that the electronic dispersion can develop a gap, either by doping one of the layers or by the application of an external perpendicular electric field. This gap is tunable by varying the external electric field,<sup>2</sup> allowing the tailoring of the electronic structure of BG for the development of devices, such as quantum dots<sup>3,4</sup> and quantum rings.<sup>5,6</sup> Recently it has been shown that another consequence of the existence of a tunable gap in BG is the possibility of topological confinement of carriers in antisymmetric potential "kinks," i.e., at the interface between two regions of an antisymmetric external electric field.<sup>7–9</sup> These states have similarities with the surface states of topological insulators.<sup>10,11</sup> Their energies are found inside the gap and the wave functions are predicted to decay away from the interface of the kink potential. These topological states are expected to be robust with respect to the effect of disorder, with the carrier propagation along the potential kink displaying electron-hole asymmetry. In addition, the geometry of the potential interface is determined by the shape of the voltage gates used to induce the gap. That in turn can be used to further constrain the carrier propagation.

In this paper we propose a system in which topological confined states are realized at the interface of a kink potential shaped as a ring. This system can be regarded as a good approximation of an ideal quantum ring of zero width. We obtain analytical expressions for the electronic wave function of the BG four-band Hamiltonian. Bilayer graphene can be described as two bipartite coupled sheets with four triangular sublattices labeled as A(A') and B(B') in the upper (lower) layer. For Bernal stacking<sup>12</sup> the coupling between layers is described by the hopping energy  $\bar{t}$ =400 meV between sites

A and B', so that the Hamiltonian around the K point of the first Brillouin zone can be written as

$$H = \begin{bmatrix} \bar{U}_1 & \pi & \bar{t} & 0 \\ \pi^{\dagger} & \bar{U}_1 & 0 & 0 \\ \bar{t} & 0 & \bar{U}_2 & \pi^{\dagger} \\ 0 & 0 & \pi & \bar{U}_2 \end{bmatrix},$$
(1)

where  $\bar{U}_1$  and  $\bar{U}_2$  are external electrostatic potentials applied, respectively, to the upper and lower layers. In polar coordinates we have  $\pi = -i\hbar v_F e^{i\theta} [(\partial/\partial\rho) + (i/\rho) \times (\partial/\partial\theta)]$  and  $\pi^{\dagger} = -i\hbar v_F e^{-i\theta} [(\partial/\partial\rho) - (i/\rho)(\partial/\partial\theta)]$ . The eigenstates of Eq. (1) are four component pseudospinors  $\Psi = [\psi_A, \psi_B, \psi_{B'}, \psi_{A'}]^T$ , where  $\psi_A$  and  $\psi_B (\psi_{A'}$  and  $\psi_{B'})$  are the envelope functions for the probability amplitudes for sublattices A (A') and B (B'), respectively, in the upper (lower) layer. The resulting four coupled differential equations can be decoupled, giving, for  $\bar{U}_2 = -\bar{U}_1$ 

$$\nabla^2 \nabla^2 \psi_A + 2(\epsilon^2 + U_1^2) \nabla^2 \psi_A + [(U_1^2 - \epsilon^2)^2 + t^2 (U_1^2 - \epsilon^2)] \psi_A$$
  
= 0, (2)

with  $U_1 = \overline{U}_1 / \hbar v_F$ ,  $U_2 = \overline{U}_2 / \hbar v_F$ ,  $t = \overline{t} / \hbar v_F$ , and  $\epsilon = E / \hbar v_F$ , where *E* is the energy.

For the case of a quantum ring with radius R, following Ref. 7, we assume a sharp potential kink, so that one can define two regions, namely, (I)  $0 \le \rho < R$  and (II)  $\rho > R$ . The upper inset of Fig. 1 illustrates a sketch of the system considered in the present letter. In order to simplify the calculations, the potentials  $U_1$  (red, dashed-dotted) and  $U_2$  (blue, solid) are assumed to be piecewise constant, defined as V and -V for region I and -V and V for region II, respectively, as illustrated in the lower inset of Fig. 1. Notice that this quantum ring potential is different from the one studied in Ref. 5, where the potential was defined as zero inside a finite width circular ring and  $U_1 = -U_2 = V$  otherwise. In order to obtain an analytical solution for this problem, one must solve the system of differential equations for each region and match the eigenfunction at the boundaries. For region I the solutions are Bessel functions, which obey the relation  $\nabla^2 F_m(\alpha \rho) e^{im\theta} = \pm \alpha^2 F_m(\alpha \rho) e^{im\theta}$ , where the function  $F_m(\alpha \rho)$ denotes the Bessel functions  $J_m(\alpha \rho)$  or  $Y_m(\alpha \rho)$ , with eigen-

0003-6951/2010/96(21)/212108/3/\$30.00

#### 96, 212108-1

#### © 2010 American Institute of Physics

Downloaded 29 Nov 2010 to 200.19.190.5. Redistribution subject to AIP license or copyright; see http://apl.aip.org/about/rights\_and\_permissions

<sup>&</sup>lt;sup>a)</sup>Electronic mail: andrey@fisica.ufc.br.



FIG. 1. (Color online) Energy states with angular momentum index  $m = 0, \pm 1, ..., \pm 5$  as a function of the square root of the kink/antikink potential height (lower inset) for a bilayer graphene ring as schematically shown in the upper inset, considering a ring radius R=50 nm. Full (empty) symbols refer to negative (positive) m. The black solid lines depicts the limits  $\pm V$  between the confined states and the continuum, whereas the thin dotted line is E=0.

value  $+\alpha^2$ , or the modified Bessel functions  $I_m(\alpha\rho)$  or  $K_m(\alpha\rho)$ , with eigenvalue  $-\alpha^2$ . The circular symmetry of the problem implies that  $m=0, \pm 1, \pm 2, \ldots$  By substituting the solutions one finds a fourth order algebraic equation for  $\alpha$ , whose solutions are,

$$\alpha = \pm \sqrt{V^2 + E^2 \pm \sqrt{4V^2 E^2 - t^2 (V^2 - E^2)}}.$$
 (3)

Henceforth, we consider only energies within the interval where  $\alpha$  is complex, such that  $F_m(\alpha\rho)$  exhibits real and imaginary parts. If one chooses  $\alpha = \sqrt{V^2 + E^2} - \sqrt{4V^2E^2 - t^2(V^2 - E^2)}$ , four linearly independent (LI) solutions are found:  $\Re[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta}$ ,  $\Im[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta}$ ,  $\Re[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}$ , and  $\Im[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}$ . It can be verified that these functions are solutions of Eq. (2), although they are not separately eigenfunctions of the Laplacian. It is important to point out that, for this choice of  $\alpha$ , this set of functions is LI only when the imaginary part of  $\alpha$  is negative.

The functions  $\Re[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta}$  and  $\Im[J_m(\alpha\rho)]e^{im\theta}$  are finite at the origin but diverge as  $\rho \to \infty$  for any value of *m*. On the other hand,  $\Re[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}$  diverges for  $\rho \to 0$  and vanishes when  $\rho \to \infty$ , for any value of *m*. The function  $\Im[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}$  has the same behavior as  $\Re[K_m(i\alpha\rho)]e^{im\theta}$  for  $m \neq 0$  but for m=0 it is finite at the origin. Based on this we construct the wave function  $\phi_A^{<}$  for the region I as<sup>13</sup>

$$\psi_A^<(\rho,\theta) = \{A\Re[J_m(\alpha\rho)] + B\Im[J_m(\alpha\rho)]\}e^{im\theta}.$$
(4)

Using this expression for  $\psi_A^<$ , the radial part of the other components of  $\Psi^<$  for region I are

$$\phi_B^{<}(\rho) = \frac{i}{V - E} \{ A \Re[\alpha J_{m-1}(\alpha \rho)] + B \Im[\alpha J_{m-1}(\alpha \rho)] \}, \quad (5)$$

$$\phi_{B'}^{<}(\rho) = \frac{1}{t(V-E)} \{ A \Re [\gamma_1 J_m(\alpha \rho)] + B \Im [\gamma_1 J_m(\alpha \rho)] \}, \quad (6)$$

$$\phi_{A'}^{<}(\rho) = \frac{i}{t(V^2 - E^2)} \{ A \Re [\alpha \gamma_1 J_{m+1}(\alpha \rho)] + B \Im [\alpha \gamma_1 J_{m+1}(\alpha \rho)] \},$$
(7)

where  $\gamma_1 = \alpha^2 - (V - E)^2$  and  $\psi_B^<(\rho, \theta) = \phi_B^<(\rho) e^{i(m-1)\theta}$ ,



FIG. 2. (Color online) Energy spectrum for  $m=0, \pm 1, ..., \pm 7$  as a function of the ring radius for bilayer graphene in the presence of a circular kink/ antikink potential of height V=20 meV. Full (empty) symbols refer to negative (positive) values of *m*. Three lines are drawn to help visualization: the black solid lines delimits the potential height  $\pm V$ , whereas the thin dotted line is E=0.

 $\psi_{B'}^{<}(\rho,\theta) = \phi_{B'}^{<}(\rho)e^{i(m)\theta}$ , and  $\psi_{A'}^{<}(\rho,\theta) = \phi_{A'}^{<}(\rho)e^{i(m+1)\theta}$ . Similarly, for region II, we choose for the wave function  $\psi_{A}^{>}$  a linear combination of solutions that go to zero as  $r \rightarrow \infty$ , namely,

$$\psi_A^>(\rho,\theta) = \{C\Re[K_m(i\alpha\rho)] + D\Im[K_m(i\alpha\rho)]\}e^{im\theta},\tag{8}$$

and find the other components of  $\Psi^>$  as

$$\phi_B^{>}(\rho) = \frac{i}{(V+E)} \{ -C\Im[\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] + D\Re[\alpha K_{m-1}(i\alpha\rho)] \},$$
(9)

$$\phi_{B'}^{>}(\rho) = \frac{-1}{t(V+E)} \{ C \Re[\gamma_2 K_m(i\alpha\rho)] + D \Im[\gamma_2 K_m(i\alpha\rho)] \},$$
(10)

$$b_{A'}^{>}(\rho) = \frac{i}{t(V^2 - E^2)} \{ -C\Im[\alpha\gamma_2 K_{m+1}(i\alpha\rho)] + D\Re[\alpha\gamma_2 K_{m+1}(i\alpha\rho)] \},$$
(11)

where  $\gamma_2 = \alpha^2 - (V + E)^2$  and  $\psi_B^>(\rho, \theta) = \phi_B^>(\rho)e^{i(m-1)\theta}$ ,  $\psi_{B'}^>(\rho, \theta) = \phi_{B'}^>(\rho)e^{i(m)\theta}$  and  $\psi_{A'}^>(\rho, \theta) = \phi_{A'}^>(\rho)e^{i(m+1)\theta}$ . The continuity of the wave function at  $\rho = R$  implies that  $\Psi^<(R, \theta) = \Psi^>(R, \theta)$ . That condition leads to a system of equations from which we obtain the energy eigenvalues.

The energies of the topologically confined states of a bilayer graphene ring with radius R=50 nm are shown in Fig. 1 as function of the square root of the kink/antikink potential height. The energy spectrum exhibits the symmetry E(m)=-E(-m), which corresponds to  $E(k_y)=-E(-k_y)$  as found for a one-dimensional kink/antikink potential in the *x*-direction.<sup>7</sup> Notice that the m=0 state is not the lowest energy state, and the less energetic confined electrons in such a system will have nonzero angular momentum index, even in the absence of a magnetic field. The zero energy states are twofold degenerate (without taking spins into account), and are realized only for specific values of the potential height *V*. Moreover, the derivative of *E* with respect to *V* has not a unique sign at E=0, as it is negative (positive) for -m(+m).

Figure 2 shows the energy states with angular momentum index  $m=0, \pm 1, \dots, \pm 7$  as a function of the ring radius

Downloaded 29 Nov 2010 to 200.19.190.5. Redistribution subject to AIP license or copyright; see http://apl.aip.org/about/rights\_and\_permissions

9

*R* for a kink/antikink potential height V=20 meV. The solid lines delimits the -20 meV< E < 20 meV energy spectrum of confined states. Notice that double degenerate E=0 states are observed only for specific values of the radius. The energies converge to two values,  $\pm E_c$ , as the ring radius increases, forming two merged bands around these energies. The value  $E_c \approx 13.9$  meV is identical to the energy of the corresponding one-dimensional problem with  $k_y=0$ .

The origin of the zero energy states in Figs. 1 and 2 is similar to those found earlier for the one-dimensional problem: the energy spectrum for a kink/antikink potential, as shown in Ref. 7, exhibits E=0 states at two values of the linear momentum  $\hbar k_y$  with the same modulus, say,  $\hbar k_y^{(0)}$  and  $-\hbar k_{y}^{(0)}$ , which were shown to be proportional to the square root of the potential height V for  $V \ll t$ . In the bilayer graphene ring problem, an analogy can be made between the angular momentum  $L_z = \hbar m/R$  [see, e.g. Eq. (23) of Ref. 6] and the linear momentum  $\hbar k_y$  of the one-dimensional case. Whenever  $L_z = \hbar m/R = \pm \hbar k_y^{(0)}$ , zero energy states appear, hence, if one fixes the potential height V,  $k_y^{(0)}$  will be a fixed value, and for each value of m, there will be a value of R that satisfies this condition, leading to a double degenerate zero energy state for this value of the radius. For example, Fig. 2 shows the results for V=20 meV, where  $k_v^{(0)}$  is found to be  $\sim 0.1 \text{ nm}^{-1}$ , consequently, zero energy states are observed at  $R \sim 10$  nm for  $m = \pm 1$ ,  $R \sim 20$  nm for  $m = \pm 2$  and so on. Moreover, as the E=0 states satisfy the condition m/R $=k_v^{(0)} \simeq \sqrt{tV/(2^{3/4})}$  for  $V \ll t$ ,<sup>7</sup> the equally spaced zero energy states observed in Fig. 1 occur for  $m/\sqrt{V}=2^{-3/4}R\sqrt{t}$ , which for the parameters of Fig. 1 becomes  $\sqrt{V} \sim 0.9 \text{ meV}^{1/2}$  for  $m = \pm 1$ ,  $\sqrt{V} \sim 1.8 \text{ meV}^{1/2}$  for  $m = \pm 2$  and so on. It is worth to point out that the condition  $k_y^{(0)} = \sqrt{tV}/(2^{3/4})$  proposed by Martin et al.<sup>7</sup> for the one dimensional problem was obtained from the reduced  $2 \times 2$  Hamiltonian, which is valid only for  $V \ll t$ , hence the dependence of  $k_y^{(0)}$  on  $\sqrt{V}$  is no longer guaranteed for large values of the kink/antikink potential height. By analyzing Eqs. (14) and (15) of Ref. 7, one can also see that the derivative of E with respect to V in the onedimensional case has opposite signs for  $\hbar k_y^{(0)}$  and  $-\hbar k_y^{(0)}$ , which agrees with the nonunique definition of this derivative observed at E=0 for +m and -m in Fig. 1 for the ring case.

The fact that the energy of the lowest energy states oscillates as function of *R* and *V*, where angular momentum transitions take place, suggests the possibility of observing persistent currents in each valley *K* or *K'* induced by the external potential, in analogy to Aharonov–Bohm rings but in the absence of a magnetic field. The angular component of the probability density current<sup>6</sup> for the lowest energy state is shown as a function of the kink/antikink potential *V* (top) and the ring radius *R* (bottom) in Fig. 3, where current jumps are observed when angular momentum transitions occur between states with different |m|. We point out that  $J_{\theta}(m)$  $=J_{\theta}(-m)$  and that the current for *K* and *K'* valleys have opposite sign, so that the net current, taking into account both valleys, is zero. Nonzero persistent currents for each valley in the absence of magnetic fields were also observed



FIG. 3. (Color online) Angular component of the probability density current as a function of the square root of the kink/antikink potential height V (top), for a ring radius R=50 nm, and as a function of R (bottom), when V = 20 meV. The number on each curve refers to the angular momentum index *m*, and the solid curves are a guide to the eyes.

by Recher et al.<sup>14</sup> in single layer graphene quantum rings.

Although, for the sake of simplicity, the potential profile was assumed to be abrupt in the present work, in a more realistic description it should have a continuous shape. Nevertheless, the present results must give at least a good qualitative agreement with a kink/antikink BG ring, which would be helpful for the understanding of future experiments on such a system.

This work was financially supported by CNPq, under Contract No. NanoBioEstruturas 555183/2005-0, FUNCAP, CAPES, the Bilateral program between Flanders and Brazil, the Belgian Science Policy (IAP) and the Flemish Science Foundation (FWO-Vl).

- <sup>1</sup>A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
- <sup>2</sup>E. McCann and V. I. Fal'ko, Phys. Rev. Lett. **96**, 086805 (2006).
- <sup>3</sup>J. M. Pereira, Jr., P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Nano Lett. 7, 946 (2007).
- <sup>4</sup>J. M. Pereira, Jr., F. M. Peeters, P. Vasilopoulos, R. N. Costa, and G. A. Farias, Phys. Rev. B **79**, 195403 (2009).
- <sup>5</sup>M. Zarenia, J. M. Pereira, Jr., F. M. Peeters, and G. A. Farias, Nano Lett. **9**, 4088 (2009).
- <sup>6</sup>M. Zarenia, J. M. Pereira, Jr., A. Chaves, F. M. Peeters, and G. A. Farias, Phys. Rev. B **81**, 045431 (2010).
- <sup>7</sup>I. Martin, Ya. M. Blanter, and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. Lett. **100**, 036804 (2008).
- <sup>8</sup>J. C. Martinez, M. B. A. Jalil, and S. G. Tan, Appl. Phys. Lett. **95**, 213106 (2009).
- <sup>9</sup>P. San-Jose, E. Prada, E. McCann, and H. Schomerus, Phys. Rev. Lett. **102**, 247204 (2009).
- <sup>10</sup>J. E. Moore and L. Balents, Phys. Rev. B **75**, 121306(R) (2007).
- <sup>11</sup>L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. 98, 106803 (2007).
- <sup>12</sup>J. M. Pereira, Jr., F. M. Peeters, and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. 76, 115419 (2007).
- <sup>13</sup>In the case m=0, we could naively include an additional term  $G\Im[K_0(i\alpha\rho)]$  in the expression for  $\phi_A^<$ , as such a function does not diverge in the origin. However, if we calculate  $\phi_{A'}^<$  for the sublattice A', we would find a term  $G\Im[K_1(i\alpha\rho)]$ , which forces us to choose G=0, as this function diverges in the origin.
- <sup>14</sup>P. Recher, B. Trauzettel, A. Rycerz, Ya. M. Blanter, C. W. J. Beenakker, and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B 76, 235404 (2007).

## Electronic states above a helium film suspended on a ring-shaped substrate

A. C. A. Ramos,\* A. Chaves,<sup>†</sup> and G. A. Farias<sup>‡</sup>

Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Caixa Postal 6030, 60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

F. M. Peeters<sup>§</sup>

Departament of Physics, University of Antwerp (CGB), Groenenborgerlaan 171, B-2020 Antwerp, Belgium (Received 7 August 2007; published 18 January 2008)

We derived a nonlinear differential equation that describes the profile of a suspended helium film over a ring-shaped substrate in the presence of a perpendicular external electric field. The profile of the helium film was calculated as a function of the bulk liquid helium level and for several values of the external radius of the ring. The one electron surface states were calculated in the presence of external electric and magnetic fields. The electron energy levels increase with electric field as well as with the height of bulk helium. Aharonov-Bohm oscillations were observed in this system under appropriate conditions.

DOI: 10.1103/PhysRevB.77.045415

PACS number(s): 73.20.-r

## I. INTRODUCTION

Since the first works of Sommer,<sup>1</sup> Cole and Cohen,<sup>2</sup> and Shikin,<sup>3</sup> the study of surface states of electrons bounded to the surface of liquid helium has been the subject of many studies.<sup>4,5</sup>

The progress in nanofabrication of semiconductor materials allowed the construction of quantum wires and a new confined structure called quantum rings (QRs). The semiconductors materials, QRs, are modeled by a cylindrical quantum dot with an internal axially symmetric cavity. This unique geometry has attracted much attention in the last few years.<sup>6–8</sup> Although the new techniques of building new semiconductor structures improved considerably in the last few years, the electron properties are strongly influenced by spatial inhomogeneities and impurity scattering.<sup>9–11</sup> The uniformity and cleanliness of electron systems on a helium surface have proved to be practically ideal for experimental and theoretical research on low-dimensional systems. Taking into account these studies on low-dimensional systems devoted to quantum wires and quantum dots in semiconductor devices, it would be natural to study similar systems of electrons above a helium surface in quasi-one-dimensional (Q1D) and quasi-zero-dimensional structures (see review<sup>12</sup>). The physical realization of Q1D electron systems over liquid helium allowed us to study different phenomena, such as transport properties, plasmons, and polaronic states.<sup>12-14</sup> In these systems, the charge carriers can move only in one spatial direction due to lateral confinement. Such confinement leads to a lateral potential introducing a new spatial quantization leading to a multisubband electron system. Considering a parabolic lateral confinement, Sokolov and Studart<sup>15</sup> studied the effects of a transverse magnetic field on the electron states in a Q1D electron system over liquid helium. Recently, the profile of the suspended helium film, forming a channel, was calculated self-consistently. It was shown that, under certain experimental conditions reported in the literature,<sup>14</sup> the lateral potential can be approximated by a parabolic potential.<sup>16</sup> In fact, a very efficient way to produce Q1D electron systems over liquid helium is the technique of suspended helium film on a structured substrate. Compared to a thin van der Waals film, a suspended helium film has the advantage of being much thicker and therefore less sensitive to the roughness of the substrate beneath it. This improves the mobility of the electrons on the film.<sup>17</sup> Furthermore, since the suspended helium film follows the substrate shape, it opens up the possibility to create one-dimensional channels by suspending a film between ribs, zero-dimensional structures by making (small) holes in a flat substrate, and even rings.

The QR is usually modeled by a cylindrical quantum dot with an internal axially symmetric cavity. This unique geometry has attracted much attention in the last few years.<sup>6-10,18-22</sup> In the presence of an axially directed magnetic field, oscillations of the electron energy as a function of the magnetic flux [Aharonov-Bohm effect (ABE)] were found to occur.<sup>23</sup> The AB oscillations are due to a change of phase of the wave function when the magnetic flux  $\phi$  passing through the ring reaches the magnetic quantum flux  $\phi_0$ =h/e (h is the Planck constant and e is the electronic charge). As expected for semiconductor structures, some works have pointed out that the presence of impurities and geometrical imperfections affect strongly the optical properties and the electronic states of these structures and eventually can suppress the ABE in quantum rings.9,11,24,25 In order to study electron states in ring-shaped systems, free of impurities and pinning centers, Dyugaev et al.26 proposed an experimental apparatus consisting of a thin film of liquid helium over a substrate with a metal ring placed below, producing an electron confinement in the shape of a ring. Since its confinement potential is electrostatic, the proposal was applied only in the limit where the lateral confinement could be approximated by a parabolic potential, when the ABE is achieved.<sup>27,28</sup>

In the present paper, we propose a geometrical ringshaped electron confinement built by a liquid helium film suspended by a substrate, where the distance between the helium film surface and the substrate is large enough, such that the van der Waals effect is not important and subjected to external electric and magnetic fields. Considering a single electron problem, the paper is organized as follows. In Sec. II, we present the calculation of the helium film profile and calculate the lateral confining potential of the electron in the



FIG. 1. (a) The cell transversal section of the helium film suspended over a ring-shaped substrate. (b) Top view of the system.

ring for various values of the external electric field, height of the bulk helium, and for different external radii of the ring. In Sec. III, we present the energy states of one electron subjected to the lateral confining potential, where we observe AB oscillations in the presence of a magnetic field. Finally, in Sec. IV, we present our conclusions.

## II. HELIUM FILM PROFILE AND CONFINEMENT POTENTIAL

The system is schematically shown in Fig. 1 and consists of superfluid helium that flows from bulk liquid helium at a given level z=-H and fills a ring-shaped structure of height h, produced on a substrate, due to the action of capillary forces. The ring has internal and external radii  $r_{<}$  and  $r_{>}$ , respectively, where electrons over the liquid helium surface will be confined.

In order to obtain the helium profile suspended over the circular substrate, we calculate the pressure difference between the suspended film over the substrate and the free surface of the bulk liquid at height -H, as shown in Fig. 1, that produces a curved surface, due to the surface tension  $\alpha$ .<sup>29</sup> We use the fact that in equilibrium, the chemical potential per unit mass is the same everywhere on the surface of the helium.<sup>30</sup> Thus, the work necessary to deform the surface by  $-\delta\xi$  from its equilibrium position, z=0, is given by<sup>29</sup>

.

$$\delta W = \int (p_1 - p_2) \,\delta \xi df + \alpha \,\delta f, \tag{1}$$

where df is the surface element,  $p_1$  the pressure on the free surface of the bulk, and  $p_2$  the pressure inside the suspended helium film. The first term in Eq. (1) corresponds to the volume variation, whereas the second one corresponds to the surface area variation associated with this volume variation.

In accordance with Fig. 1, the surface of the helium film is described by  $z(r) = \xi(r) - h$  and we assume that  $\xi(r)$  is small everywhere, i.e., that the surface deviates only slightly from the plane z=0. Then, as the surface has angular symmetry, the surface area is given by

$$f = 2\pi \int_{r_{<}}^{r_{>}} r \sqrt{1 + \left(\frac{d\xi}{dr}\right)^2} dr, \qquad (2)$$

where  $r_{<}$  and  $r_{>}$  are the internal and external radii of the ring. Since we assumed  $\xi(r)$  to be small, we can expand Eq. (2) and obtain

$$f \simeq 2\pi \int_{r_{<}}^{r_{>}} \left[ 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{d\xi}{dr} \right)^2 \right] r dr,$$
 (3)

such that the variation  $\delta f$  is given by

$$\delta f = 2\pi \int_{r_{<}}^{r_{>}} \frac{d\xi}{dr} \frac{d\delta\xi}{dr} r dr.$$
(4)

Integrating Eq. (4) by parts, we find

$$\delta f = -2\pi \int_{r_{<}}^{r_{>}} \left(\frac{d^2\xi}{dr} + \frac{1}{r}\frac{d\xi}{dr}\right)\delta\xi r dr.$$
 (5)

Inserting Eq. (5) into Eq. (1) and taking  $\delta W=0$  (thermodynamic equilibrium condition), we obtain the pressure difference at the helium film that is suspended by the substrate,

$$p_2 = p_1 - \alpha \left( \frac{d^2 \xi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\xi}{dr} \right). \tag{6}$$

Knowing the pressures in and out of the ring, we can calculate the total chemical potential per unit mass in all regions, which is given by<sup>30</sup>

$$\mu = \frac{p}{\sigma} - sT + gz(r) - \frac{\gamma}{\sigma\xi^3(r)},\tag{7}$$

where p is the pressure per unit mass,  $\sigma = 0.145 \text{ g/cm}^3$  the helium density,  $\gamma = 9.5 \times 10^{-15}$  erg the van der Waals coupling constant of the helium substrate (assumed to be glass), s the specific entropy per unit mass, gz(r) the potential energy per unit mass at height z(r),  $\xi(r)$  the thickness variation of the helium film, and g the gravity acceleration. Consequently, the total chemical potential per unit mass of the free surface of the bulk liquid, at height -H, is given by

$$\mu_1 = \frac{p_1}{\sigma} - sT - gH, \tag{8}$$

and the chemical potential of the suspended liquid helium film by the substrate is given by

$$\mu_2 = \frac{p_2}{\sigma} - sT + gz(r) - \frac{\gamma}{\sigma\xi^3(r)},\tag{9}$$

where  $z(r) = \xi(r) - h$ . In thermodynamic equilibrium, we have  $\mu_1 = \mu_2$ . Using Eqs. (6)–(9), we obtain



FIG. 2. The lateral confining potential of an electron in the ring as a function of the radius for various values of H. The solid, dashed, dotted, and dot-dashed curves correspond to H=3, 4, 5, and 6 cm, respectively. In the inset, we show the corresponding helium film profile.

$$\frac{d^2\xi(r)}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\xi(r)}{dr} = \frac{\sigma g}{\alpha}[\xi(r) - h + H] - \frac{\gamma}{\alpha\xi^3(r)}, \quad (10)$$

which describes the profile of the liquid helium film in the ring, where  $\alpha = 0.378 \text{ erg/cm}^{22}$  is the liquid helium surface tension. Similar equation was obtained in Ref. 16 for the liquid helium film profile in channels.

Since the bonding energy of the electron over the liquid helium is around 8 K,<sup>31</sup> to confine the electron inside the ring of the suspended helium film, it is necessary to add an external electric field  $E_p$  in the *z* direction. The lateral confining potential due to the presence of this external electric field is given by

$$V(r) = \int_{\bar{r}}^{r} dr' e E_p \frac{dz(r')}{dr'},$$
(11)

where  $\overline{r}$  is the lowest point at the surface of the suspended helium film. Since  $z(r) = \xi(r) - h$ , the integral in Eq. (11) is straightforward and the lateral confining energy potential of the electron in the ring is given by

$$V(r) = eE_n[\xi(r) - \xi(\bar{r})].$$
<sup>(12)</sup>

We solved Eq. (10) numerically, considering a ring with fixed internal radius  $r_{<}=200$  Å and height  $h=3 \times 10^4$  Å, and calculated the lateral confining energy potential of the electron as a function of the radius for different values of the bulk liquid helium level *H*, ring external radius  $r_{>}$ , and external electric field.

Considering an external ring of radius  $r_>=6000$  Å and an external electric field  $E_p=3$  kV/cm, we show in Fig. 2 the lateral confining potential as a function of the radius for several values of *H*. The inset shows the corresponding helium film profile. First, we notice that the helium film profile becomes deeper with increasing *H* and, consequently, the lateral confining energy potential also increases, with energy values up to 35 K. As can be seen, the lateral confinement



FIG. 3. (a) Helium film profile in the ring for several values of the external radius. The solid, dashed, dotted, dash-dotted, dash-dotted, and short-dashed curves correspond to external radii  $r_>=1$ , 2, 3, 4, 5, and  $6 \times 10^4$  Å, respectively. (b) The lateral confining potential of an electron in the ring for the same conditions.

potential is asymmetrical, such that only very close to the region of the lowest point at the surface of the suspended helium film the parabolic approximation is valid.

In Fig. 3(a), we show the helium film profile for several values of the external radius. In Fig. 3(b), we show the confinement potential for the same external radius. These results were obtained for a bulk helium level of H=10 cm, internal radius  $r_{<}=200$  Å, height  $h=10^{4}$  Å, and an external electric field of  $E_{p}=3$  kV/cm. We note that the liquid helium profile becomes deeper when the external radius increases. Again, the lateral confinement is asymmetric and can reach values of the order of 4000 K, allowing electron confinement inside the ring for realistic values of the geometrical parameters. The parabolic approximation of the confinement potential is valid for values up to  $r_{>}=4.6 \times 10^{4}$  Å. In Fig. 4, we show the frequency ( $\omega_{0}$ ) associated with each parabolic potential approximation shown in Fig. 3(b), and in the inset, we present the minimum value of the liquid helium film profile



FIG. 4. The parabolic confining frequency versus  $r_>$ . In the inset, the minimum value of the liquid helium film profile  $(\xi_d)$  as a function of the external radius. The parameters used here are the same as in Figs. 3(a) and 3(b).

 $(\xi_d)$  as a function of the external radius. We observe that, for an external radius up to  $r_>=3.5\times10^4$  Å  $[r_>(\lim)]$ ,  $\xi_d$  is a linear function and  $\omega_0$  is a constant. For values of the external radius greater than  $r_>(\lim)$  and below  $r_>(\max)=r_>$  $=4.6\times10^4$  Å, there is a transition such that the curve  $\xi_d$ versus  $r_>$  is still linear but changes its slope and the frequency  $\omega_0$  decreases. For values above  $r_>(\max)$ , a second transition occurs, such that the parabolic approximation is no longer valid and the liquid helium profile becomes flat and behaves as a van der Waals film. The parameters used here for the liquid helium film are far below the first transition.

## III. HAMILTONIAN MODEL AND ELECTRON ENERGY LEVELS

Considering now the system subjected to external electric and magnetic fields applied in the z direction, the Hamiltonian is given by

$$H = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r),$$
(13)

where V(r) is given by Eq. (12). For an applied magnetic field perpendicular to the ring plane, i.e.,  $\vec{B} = B\hat{z}$ , the symmetric gauge  $\vec{A} = 1/2Br\hat{\theta}$  is taken for the vector potential, which leads to the following form for the Schrödinger equation:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{8} m \omega_c^2 r^2 \\ + V(r) \end{cases} \Psi(r, \theta) = E \Psi(r, \theta), \tag{14}$$

where  $\omega_c = eB/mc$ . Taking the solution in  $\theta$  given by  $e^{il\theta}/\sqrt{2\pi}$ , where  $l=0, \pm 1, \pm 2, \ldots$  is the angular momentum quantum number, the radial part of the Schrödinger equation will be<sup>32</sup>

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{l^2\hbar^2}{2mr^2} + \frac{l}{2}\hbar\omega_c + \frac{1}{8}m\omega_c^2r^2 + V(r) \end{cases} R_{n,l}(r) \\ = E_{n,l}R_{n,l}(r). \tag{15}$$

Again, considering a ring with fixed internal radius  $r_{<}$  =200 Å and height  $h=3\times10^4$  Å, we obtain the energy levels of the electron confined in the ring as a function of the external electric field, bulk liquid helium level *H*, and external magnetic field. Also, to solve numerically Eq. (15), we consider an infinity potential for the region  $r_{<}$ =200 Å which is a very good approximation, as can be seen from Figs. 2 and 3. This approximation does not change significantly our results since the electron wave function is already negligible for  $r < r_{<}$ .

Considering initially B=0, H=5 cm, and  $r_>=2000$  Å, we obtain the electron energy levels [Eq. (15)] as a function of the external electric field (Fig. 5). We observe that the number of bound states in the ring increases with the external electric field. This behavior is due to the fact that the lateral confining potential in the ring also increases with the external electric field. The line (n,l)=(3,0) represents a bound state energy limit on the ring. Moreover, we note degenerate



FIG. 5. Energy levels of the electron confined in the ring as a function of the external electric field. From bottom to top, the dashed, dotted, and solid curves correspond to energy levels  $n = 1(l=0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5)$ ,  $n=2(l=0, \pm 1, \pm 2)$ , and n=3(l=0), respectively.

states in the crossing of the levels, for  $E_p \approx 1.5 \text{ kV/cm}$ ,  $(n,l)=(1,\pm 4)$  and  $(2,\pm 1)$ , as well as for  $(1,\pm 4)$  and (2,0) for  $E_p \approx 2.5 \text{ kV/cm}$ .

Taking  $r_{>}=6000$  Å and  $E_p=3$  kV/cm, we obtain the energy levels of the electron confined in the ring as a function of the bulk liquid helium level (see Fig. 6). The results with  $l=\pm 1$  were not shown since they differ from the ones with l=0 by less than  $10^{-2}$  K. We observe that the distance between the energy levels with n and n+1 increases with H, whereas the difference between energy levels with l and l + 1 for a given n is constant, forming an energy band structure. The levels increase with H, as shown in Fig. 2.

In Fig. 7, we show the energy levels as a function of the external radius with B=0,  $E_p=3$  kV/cm,  $h=3\times10^4$  Å, and H=5 cm. The numbers of bound electron levels increase for rings with larger radius. We also note crossing of energy levels for different values of n. Therefore, more degenerate states can be obtained when increasing the external radius. Again, an energy band structure is observed in the limit of large values of the external radius. Note that the energy levels do not go to zero near  $r_>=10^4$  Å but remain constant. The reason for this remarkable result is that for this value of



FIG. 6. Electron energy levels as a function of the bulk liquid helium level. The dashed, dotted, and solid curves correspond to levels n=1, 2, and 3, with  $l=0, \pm 2, \pm 3$ , and  $\pm 4$  for each value of n, respectively.



FIG. 7. Energy levels of the electron confined in the ring as a function of the external radius. The solid and dotted curves correspond to levels n=1 and 2, respectively, for increasing values of *l*, from l=0 up to  $l=\pm 9$ .

the external radius, H=5 cm and  $h=3 \times 10^4$  Å, the confining potential may be approximated by a parabola, with confining frequency  $\omega_0 \approx 10^{11} \text{ s}^{-1}$ , which is constant up to  $r_>(\text{max}) \leq 9 \times 10^5$  Å. For external radius larger than  $r_>(\text{max})$ ,  $\omega_0$  decreases to zero since the helium film profile and the confining potential become flat. This is consistent with the results shown in Figs. 3 and 4.

In Fig. 8, we present the energy levels of the electron confined in the ring as a function of the external magnetic field for  $r_>=1600$  Å,  $E_p=3$  kV/cm, and H=5 cm. Notice that the magnetic field lifts the -l, l degeneracy as expected. We observe that the ground state oscillates with magnetic field, showing the well known Aharonov-Bohm oscillations.<sup>23</sup> The present results shown are not limited, as the ones obtained by Dyugaev *et al.*,<sup>26</sup> to the weak-field limit.

#### **IV. CONCLUSIONS**

We obtained the lateral confining potential for an electron, subjected to external electric and magnetic fields, in a sus-



FIG. 8. Energy levels as a function of the external magnetic field. The curves are for n=1 and several different values of *l*.

pended helium film over a ring-shaped substrate. Considering realistic values for the geometrical parameters, we found that the parabolic potential approximation for the confinement potential has a very limited applicability. The energy levels tend to form an energy band structure, in the limit of high external electric field and large values of the outer ring radius. AB oscillations were found when a magnetic field is applied. Finally, this system can be used to study similar phenomena previously observed in quantum rings grown in semiconductor heterostructures, where geometrical imperfections and impurities are usually present, and the geometrical dimensions are an order of magnitude less than the one considered here.

#### ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank the Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) and the Fundação Cearense de Apoio à Pesquisa (FUNCAP) for the financial support. This work was partially supported by the Flemish Science Foundation (FWO-VI) and the EU-RTNetwork on "Surface electrons."

\*acaramos@fisica.ufc.br

- †andrey@fisica.ufc.br
- <sup>‡</sup>gil@fisica.ufc.br
- §francois.peeters@ua.ac.be
- <sup>1</sup>W. T. Sommer, Phys. Rev. Lett. **12**, 271 (1964).
- <sup>2</sup>M. Cole and M. H. Cohen, Phys. Rev. Lett. **23**, 1238 (1969).
- <sup>3</sup>V. B. Shikin, Sov. Phys. JETP **31**, 936 (1970).
- <sup>4</sup>F. M. Peeters, in *The Physics of Two-Dimensional Electron Gas*, edited by J. T. Devreese and F. M. Peeters (Plenum, New York, 1987).
- <sup>5</sup>Two-Dimensional Electron Systems on Helium and the other Cryogenic Substrates, edited by E. Y. Andrei (Kluwer Academic, Dordrecht, 1997).
- <sup>6</sup>B. Szafran and F. M. Peeters, Europhys. Lett. **12**, 271 (2005); B. Molnàr, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Appl. Phys. Lett. **85**, 612 (2004); P Földi, B. Molnàr, M. G. Benedict, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **71**, 033309 (2005).
- <sup>7</sup>T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G.

Kido, and N. Koguchi, Phys. Rev. B **72**, 205301 (2005), and references therein.

- <sup>8</sup>Daniel Granados and Jorge M. Garcia, Appl. Phys. Lett. **82**, 2401 (2003).
- <sup>9</sup>B. S. Monozon and P. Schmelcher, Phys. Rev. B 67, 045203 (2003).
- <sup>10</sup>L. G. G. V. Dias da Silva, S. E. Ulloa, and A. O. Govorov, Phys. Rev. B **70**, 155318 (2004).
- <sup>11</sup>A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, Phys. Rev. B **71**, 125312 (2005).
- <sup>12</sup>Yu. Z. Kovdrya, Low Temp. Phys. **29**, 77 (2003).
- <sup>13</sup>S. S. Sokolov, A. C. A. Ramos, and N. Studart, J. Phys.: Condens. Matter **12**, 7341 (2000).
- <sup>14</sup>A. M. C. Valkering and R. W. van der Heidjen, Physica B 249–251, 652 (1998); A. M. C. Valkering, J. Klier, and P. Leiderer, *ibid.* 284–288, 172 (2000).
- <sup>15</sup>S. S. Sokolov and N. Studart, Phys. Rev. B 51, 2640 (1995).
- <sup>16</sup>A. C. A. Ramos, O. G. Balev, and N. Studart, J. Low Temp. Phys. 138, 403 (2005).

- <sup>17</sup>D. Coimbra, S. S. Sokolov, J. P. Rino, and N. Studart, J. Low Temp. Phys. **126**, 505 (2002).
- <sup>18</sup> H. W. Choi, C. W. Jeon, C. Liu, I. M. Watson, M. D. Dawson, P. R. Edwards, R. W. Martin, S. Tripathy, and S. J. Chua, Appl. Phys. Lett. **86**, 021101 (2005).
- <sup>19</sup>Boris S. Monozon, Mikhail V. Ivanov, and Peter Schmelcher, Phys. Rev. B 70, 205336 (2004).
- <sup>20</sup>T. Raz, D. Ritter, and G. Bahir, Appl. Phys. Lett. 82, 1706 (2003).
- <sup>21</sup>Z. Barticevic, M. Pacheco, and A. Latgé, Phys. Rev. B **62**, 6963 (2000).
- <sup>22</sup>A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. 84, 2223 (2000).
- <sup>23</sup>Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).
- <sup>24</sup>L. A. Lavenère-Wanderley, A. Bruno-Alfonso, and A. Latgé, J. Phys.: Condens. Matter 14, 259 (2002).
- <sup>25</sup>D. Gridin, A. T. I. Adamou, and R. V. Craster, Phys. Rev. B 69,

155317 (2004).

- <sup>26</sup>A. M. Dyugaev, A. S. Rozhavskii, I. D. Vagner, and P. Wyder, JETP Lett. **67**, 434 (1998).
- <sup>27</sup>R. J. Warburton, C. Schaflein, D. Half, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J. M. Garcia, W. Schoenfeld, and P. M. Petroff, Nature (London) **405**, 926 (2000).
- <sup>28</sup> A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000); A. Lorke and R. J. Luyken, Physica B **256**, 424 (1998).
- <sup>29</sup>L. Landau and E. Lifshitz, *Fluid Mechanics*, 2nd ed. (Pergamon, New York, (1987).
- <sup>30</sup>D. R. Tilley and J. Tilley, *Superfluidity and Superconductivity*, 3rd ed. (IOP, Bristol, 1990).
- <sup>31</sup>C. C. Grimes, Surf. Sci. **73**, 379 (1978).
- <sup>32</sup>F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B 53, 1468 (1996).

## Grading effects in semiconductor nanowires with longitudinal heterostructures

Andrey Chaves,\* J. A. K. Freire,<sup>†</sup> and G. A. Farias<sup>‡</sup>

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Received 16 June 2008; revised manuscript received 8 September 2008; published 6 October 2008)

The role of graded interfaces between materials in a cylindrical free-standing quantum wire with longitudinal heterostructures is theoretically investigated by solving the Schrödinger equation within the effective-mass approximation. Previous works on such wires with abrupt interfaces have predicted that, as the wire radius is reduced, the effective potential along the growth direction is altered and might lead to a carrier confinement at the barriers, as in a type-II system. Our results show that when graded interfaces are considered, such potential acquires a peculiar form, which presents cusps at the interfacial regions yielding to electron confinement at interfaces. Numerical results also show that, in some special cases, interfacial confinement and type-I to type-II transitions can also be induced by applying a magnetic field parallel to the wire axis.

DOI: 10.1103/PhysRevB.78.155306

PACS number(s): 73.21.Hb, 73.43.Cd

## I. INTRODUCTION

Semiconductor nanowires have attracted much interest due to their electronic and optical properties owing to their one dimensionality and possible quantum confinement effects in two dimensions.<sup>1</sup> In the past few years, many research groups have reported the growth of semiconductor nanowires with longitudinal heterostructures, namely, superlattice nanowires (SLNW).<sup>2,3</sup> Much theoretical and experimental study has been made about such wires, where potential applications of these structures as nanobar codes, waveguides, light-emitting diodes, and lasers have been suggested.<sup>4–6</sup>

Lin and Dresselhaus<sup>7</sup> have theoretically investigated SLNW composed by PbS, PbSe, and PbTe, and it was shown that they are promising systems for thermoelectric applications. A hybrid pulse laser ablation/chemical vapor deposition (PLA-CVD) process was developed by Wu *et al.*<sup>8</sup> for the synthesis of single-crystalline nanowires with periodic longitudinal Si/SiGe heterostructures. Moreover, it was suggested that these nanowires could be used as important building blocks for constructing nanoscale electronic circuits and devices. The fabrication of high quality InP/InAs SLNW by chemical beam epitaxy has been reported by Samuelson and co-workers,<sup>2,9</sup> where it reached a high degree of control of size and electron number of such systems. A recent publication by Gudiksen et al.<sup>4</sup> has presented high-resolution transmission electron microscopy (TEM) images and composition analysis of a GaAs/GaP SLNW, synthesized by laser-assisted catalytic growth. It was revealed that the transition between GaAs and GaP layers is not atomically abrupt but rather exhibits a graded interface of 15–20 nm for a  $\sim$ 20 nm diameter Au catalyst. Their results indicate that for a smaller wire radius the interface would be reduced, and a 5-nmdiameter SLNW, e.g., should have variations of <5 nm across the junction interfaces.

Calculations based on the one-band effective-mass theory were made by Lew Yan Voon and Willatzen<sup>10</sup> for studying the electronic states in free-standing (i.e., not embedded in a matrix) GaAs/AlAs and InAs/InP SLNW. They predicted the existence of a barrier localization of longitudinal states, as in a type-II confinement potential,<sup>11</sup> which is induced by the strengthening of the radial confinement for thin wires. Their results indicated the possibility of this modulated structure to display free-carrier-like behavior along the nanowire axis when a critical wire radius is considered. These predictions were confirmed later by Willatzen *et al.*<sup>12</sup> Moreover, it has been shown that the existence of critical radii for inversion of state localization is much more general and it is also present in multiband based calculations.<sup>13</sup> Although some of the experimental work in the literature has demonstrated gradual transitions between the heterostructure materials,<sup>4</sup> all of these theoretical investigations on SLNW have dealt only with models for abrupt interfaces, and the existence of graded interfaces was neglected.

In the present work, the effective-mass approximation is used to describe the confinement of electrons in a cylindrical free-standing quantum wire (QWR) with longitudinal heterostructures under an applied magnetic field parallel to the wire axis. In our model, the existence of graded interfaces between materials is taken into account, and the effective mass is assumed to depend on spatial coordinates.14 This model has been applied to the description of confined states of GaP/ GaAs and InP/InAs QWRs. Numerical results confirm the predictions of previous studies in the literature: indeed, for abrupt interfaces, as the wire radius becomes thinner, a change in longitudinal localization of carriers is induced by the creation of a steplike effective potential, composed by the heterostructure bands mismatch and the radial confinement energy. In this case, a critical radius can also be found where the longitudinal effective potential has a band offset equal to zero, which makes the electron behave like a free carrier along the wire axis, despite the presence of a heterostructure. However, considering smooth interfaces, the effective potentials along the wire axis acquire a peculiar form, in which electron states may be confined inside traps formed at the interfacial regions, even for a small interface thickness (less than 5 nm). This result allows us to discard any possibility of having free-carrier-like behavior in such wires with nonabrupt interfaces. Our model also shows that, for excited states, such features of abrupt and nonabrupt QWR can be observed not only by reducing the wire radius but also by increasing the intensity of a magnetic field parallel to the wire axis. This can be an interesting result for device applications, since it demonstrates that a change in longitudinal potential and carrier localization in heterostructured freestanding QWR can be obtained just by tuning an external parameter, namely, the magnetic-field intensity.

The paper is organized as follows: in Sec. II, we present our theoretical model for the description of electronic states in heterostructured QWR with graded interfaces under applied magnetic fields. In Sec. III, the results for GaP/GaAs and InP/InAs QWR are presented and discussed. Finally, in Sec. IV, we present our conclusions.

## **II. THEORETICAL MODEL**

Our system consists of a circular cylindrical quantum wire at an infinite potential region with a single longitudinal heterostructure. In cylindrical coordinates, the inclusion of a magnetic-field potential into the Hamiltonian, for a  $\vec{B} = B\hat{z}$ field, is made through the symmetric gauge vector potential, namely  $\vec{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{\theta}$ . Hence, the Schrödinger equation for this system, within the effective-mass approximation, is given by

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^{\parallel}(z)} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m^{\perp}(z)} \frac{\partial}{\partial z} \\ -\frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{8} m^{\parallel} \omega_c^2 \rho^2 + V(\rho, z) \end{cases} \Psi(\rho, z) = E \Psi(\rho, z),$$
(1)

where  $\omega_c = eB/m^{\parallel}$  is the cyclotron angular frequency and  $m^{\perp}$  ( $m^{\parallel}$ ) is the longitudinal (in-plane) mass, which depends on z, since there is a heterostructure along this axis. For a QWR with a R radius, the potential function is defined as  $V(\rho,z) = V^{\text{het}}(z)$  for  $\rho \leq R$ , and  $V(\rho,z) = \infty$  otherwise, where  $V^{\text{het}}(z)$  is the heterostructure quantum well potential. For numerical examples, we have used the parameters for GaP/ GaAs and InP/InAs heterostructures obtained in Ref. 15. For a better description of the interfacial layer between materials, the existence of graded interfaces is taken into account, considering a  $XP_{\chi}As_{1-\chi}$  (X=Ga or In) alloy at this region and assuming that the P composition  $\chi$  varies linearly with z from one (XP) to zero (XAs). Moreover, it also assumes that  $m^{\perp}(z) = m_{XP}^{\perp}\chi(z) + m_{XAS}^{\perp}[1-\chi(z)]$  and  $V^{\text{het}}(z) = Q_e[\varepsilon_1\chi(z) + \varepsilon_2\chi^2(z)]$ , where  $\varepsilon_1$  and  $\varepsilon_2$  are interpolation parameters and  $Q_e$  is the conduction-band offset.<sup>15</sup> This approach is similar to the model of Oliveira et al.<sup>16</sup> but now the in-plane mass is also assumed to depend on the material composition  $m^{\parallel}(z)$  $=m_{XP}^{\parallel}\chi(z)+m_{XAS}^{\parallel}[1-\chi(z)]$ . It is important to point out that this one-band approach within the effective-mass approximation for heterostructured QWR is good for studying only conduction-band states while the description of valence-band states must be made by a  $k \cdot p$  multiband model.<sup>13</sup>

To solve Eq. (1), we start from a separation of variables. The solution in  $\theta$  is chosen as  $(1/\sqrt{2\pi})e^{il\theta}$ , where  $l = 0, \pm 1, \pm 2,...$  is the angular momentum. This leads to

$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m^{\parallel}(z)} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{\hbar^2 l^2}{2m^{\parallel}(z)\rho^2} + \frac{l}{2} \hbar \omega_c \\ + \frac{1}{8} m^{\parallel} \omega_c^2 \rho^2 \end{bmatrix} R_{n,l}(\rho) = E_{n,l}^{(\rho)} R_{n,l}(\rho)$$
(2)

for the radial confinement. If  $\rho$  is transformed as  $\xi = \rho^2 / 2a_c$ ,

where  $a_c = (\hbar/eB)^{1/2}$  is the cyclotron radius, Eq. (2) is rewritten as

$$\xi \frac{d^2 R(\xi)}{d\xi^2} + \frac{dR(\xi)}{d\xi} - \left(\frac{l}{2} + \frac{l^2}{4\xi} + \frac{\xi}{4} - \frac{E}{\hbar\omega_c}\right) R(\xi) = 0.$$
(3)

It is reasonable to try a solution of the form  $R(\xi) = \xi^{|l|/2} \exp[-\xi/2]F(\xi)$ , where the polynomial and asymptotic behaviors of  $R(\xi)$  are explicit. With this solution, Eq. (3) becomes

$$\xi \frac{d^2 F(\xi)}{d\xi^2} + \left[ (|l|+1) - \xi \right] \frac{dF(\xi)}{d\xi} - \left( \frac{l}{2} + \frac{|l|}{2} + \frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar \omega_c} \right) F(\xi)$$
  
= 0. (4)

This equation is easily identified as a confluent hypergeometric equation, namely xy'' + (c-x)y' - ay = 0, which is solved in terms of Kummer functions.<sup>17</sup> The eigenfunctions are then found as

$$R_{n,l}(\rho_i) = N\xi^{|l|/2} \exp[-\xi/2]F(-x_{n,|l|}, |l|+1,\xi), \qquad (5)$$

where *N* is the normalizing parameter and  $F(\alpha, \beta, \xi)$  is the Kummer function of the first kind, which remains finite at  $\xi=0$ . From the boundary condition, since  $\Psi(R, z_i)=0$ , one has  $F(-x_{n,|l|}, |l|+1, \xi_R)=0$ ; hence  $x_{n,|l|}$  must be the *n*th zero of  $F(-x_{n,|l|}, |l|+1, R^2/2a_c)$ . The radial confinement energies are given by

$$E_{n,l}^{(\rho)} = \hbar \,\omega_c \bigg( x_{n,|l|} + \frac{l}{2} + \frac{|l|}{2} + \frac{1}{2} \bigg), \tag{6}$$

which clearly depends on z since  $\omega_c$  depends on  $m^{\parallel}(z)$ . Then, this energy must be added as a potential in the remaining equation for this coordinate, yielding

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{m^{\perp}(z)}\frac{\partial}{\partial z}\right) + V_{\rm eff}(z)\right]Z_m(z) = E_{n,l,m}Z_m(z), \quad (7)$$

where  $V_{\text{eff}}(z) = V^{\text{het}}(z) + E_{n,l}^{(\rho)}(z)$  for the heterostructure longitudinal confinement, which is solved by a finite differences scheme.

It is straightforward to show that Eq. (2) becomes the Bessel equation when  $B \rightarrow 0$ , giving the Bessel functions of the first kind as eigenfunctions, i.e.,  $R_{n,l}(\rho) = J_l(x_{n,l}\rho/R)$ , and then the energies are given by  $E_{n,l}^{(\rho)}(z) = \hbar^2 x_{n,l}^2/2m^{\parallel}(z)$ . Indeed, the former and the latter functions agree with Eqs. (5) and (6), respectively, when the limit of small *B* is taken.<sup>17</sup>

#### **III. RESULTS AND DISCUSSIONS**

We have calculated the electron confinement energies for cylindrical QWR with longitudinal heterostructures with graded interfaces under applied magnetic fields. The material parameters are considered as  $m_{\text{GaAs}}=0.063m_0$  ( $m_{\text{InAs}}=0.027m_0$ ) and  $m_{\text{GaP}}=0.33m_0$  ( $m_{\text{InP}}=0.077m_0$ ) for electron effective masses,  $\varepsilon_1=-1.473$  eV and  $\varepsilon_2=0.146$  eV ( $\varepsilon_1$  = -1.083 eV and  $\varepsilon_2=0.091$  eV) for the interpolation parameters, and the conduction-band offset is assumed as  $Q_e=0.5$  ( $Q_e=0.68$ ) for GaP/GaAs (InP/InAs) heterostructures.<sup>15</sup>

Figure 1(a) illustrates a representative sketch of our model of heterostructured QWR. The darker regions represent the



FIG. 1. (a) Sketch of a cylindrical QWR with wire radius R, consisting of a single-quantum well of width L and considering an interface thickness w. (b) Potential profiles along z for abrupt (dotted) and smooth (solid) interfaces. The vertical thin lines denote the limits of the interfacial regions.

material of the barrier, whereas the lighter one represents the material that compounds the well. There is a smooth change from one region to the other, which represents the existence of graded interfaces. In Fig. 1(b), a qualitative scheme shows the potentials  $V^{het}(z)$ , due to the bands mismatch between the heterostructure materials, and  $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$ , due to the lateral con-finement, both as functions of z. Looking at this scheme, it seems that  $V^{het}(z)$  exhibits linear behavior at the interfaces but actually it is parabolic in z at this region, as described by the quadratic expression given in Sec. II. In fact, with this expression, it can be easily shown that z at the interfacial region is far from the vertex of the parabola describing the potential at the interfaces and, consequently, the quadratic curve in this region looks linear. Since the effective masses at InAs and GaAs are lighter than the ones at InP and GaP, respectively, the lateral confinement energy  $E_{n,l}^{(\rho)}$  is higher at GaAs (InAs) than at GaP (InP); hence  $E_{n,l}^{(p)}(z)$  presents a barrierlike profile because this energy depends on the inverse of the effective mass. Besides, a reduction in the wire radius enhances this barrierlike potential since  $E_{n,l}^{(\rho)}$  also depends on the inverse of the squared radius. The effective confinement potential  $V_{\text{eff}}(z) = V^{\text{het}}(z) + E_{n,l}^{(\rho)}(z)$  is also illustrated in Fig. 1(b), where one observes that, depending on the wire parameters, it can exhibit a peculiar form where cusps appear at the interfacial regions. The effective potential  $V_{\text{eff}}(z)$  is adjusted so that the energy referential is at the GaP (InP) layers.

Figure 2 shows the confinement energies  $E_{n,l,m}$  of electrons in the absence of magnetic fields for  $E_{1,0,1}$  (symbols) and  $E_{1,1,1}$  (curves) states in a GaP/GaAs QWR as a function of the well width L, formed by the longitudinal heterostructure. We have considered interface thicknesses of (a) w=0and (b) 20 Å between materials, and two values for the wire radius R:35 (O, solid) and 75 Å ( $\triangle$ , dotted), which are a small and a large value of wire radius, in order to observe the different behaviors due to stronger or weaker bidimensional confinements. The electron wave functions for l=1 states in a L=200 Å nonabrupt QWR with R=35 Å and R=75 Å (points marked by arrows) are plotted in Fig. 4(a) for further analysis. For abrupt interfaces, all energies decrease as the well width L is enlarged, as usually observed in quantum wells. However, when graded interfaces are taken into account in a R=35 Å wire, the energy of the electron l=1 state



FIG. 2. Electron confinement energies in a cylindrical quantum wire with a longitudinal GaP/GaAs heterostructure with interface thickness (a) 0 and (b) 20 Å, as a function of the well width *L* for l=0 (symbols) and l=1 (curves). Two values of the wire radius *R* were considered: 35 ( $\bigcirc$ , solid) and 75 Å ( $\triangle$ , dotted). The electron wave functions for the points indicated by arrows (L=200 Å) are plotted in Fig. 4(a).

increases with the well width for small values of L. This indicates that this state is now confined at the interfacial regions so that an enlargement on the well width L further separates the interfaces and increases the confinement energy of the n=1 state, analogous to the case of confinement in double quantum wells.<sup>18</sup> On the other hand, l=0 states for R=35 Å and the states for R=75 Å keep the same qualitative behavior for abrupt and w=20 Å interfaces, i.e., their energies decrease as increasing L. But quantitatively, the presence of graded interfaces still plays an important role, giving a significative blueshift on these energies specially for small L and large R. As a numerical example, for L=45 Å, the energy blueshift due to the graded interfaces, given by  $\Delta E_e = E_e(w=20) - E_e(w=0)$ , is about  $\Delta E_e \simeq 30$  meV (105) meV) for l=0 states in a R=35 Å (75 Å) QWR. This blueshift, in confinement energies for nonabrupt heterostructures, has also been predicted in quantum wells, core-shell QWR, and quantum dots with graded interfaces.<sup>19-21</sup> In fact, for large wire radius,  $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$  is small; thus the presence of graded interfaces only reduces the confinement region in  $V_i^{\text{het}}(z)$ , enhancing the energy levels. Yet, for small R, the presence of an interfacial region creates cusps that can confine carriers [see Fig. 1(b), solid], which are responsible for the reduction in the energy blueshift due to interfaces in this case and can even lead to a redshift, as observed for l=1when R=35 Å.

As was just discussed, the interfacial confinement for electron lower energy states, as well as the type-I (well) to type-II (barrier) transition in effective potential predicted in previous works,<sup>13</sup> are found for small values of R, which can be troublesome for experimental verification of these fea-



FIG. 3. Electron confinement energies as functions of the well width *L* for l=1 states in a cylindrical GaP/GaAs QWR with wire radius R=42 Å, considering (a) abrupt and (b) w=20 Å interfaces, under applied magnetic fields B=0 (dashed dotted), 10 (dotted), 20 (dashed), and 30 T (solid). The electron wave functions for the points indicated by arrows (L=200 Å) are plotted in Fig. 4(b).

tures of QWR. Nevertheless, one could try to find another way to induce these variations on the carrier's localization: the main effect produced by reducing the QWR radius is that the carrier's wave functions are squeezed toward the wire axis. If a magnetic field is applied parallel to the wire axis, the same effect can be obtained; hence, type-I to type-II transitions and interfacial confinements, which were found for wires with small radii, are expected to be found for high magnetic fields as well.

Figure 3 is then devoted to the study of the influence of an applied magnetic field parallel to the wire axis on the confinement energies of electrons. The energies of l=1 states in a GaP/GaAs QWR with R=42 Å are shown as functions of the well width L, considering (a) w=0 Å and (b) w=20 Å. Four values of magnetic field are considered: B=0 (dashed dotted), 10 (dotted), 20 (dashed), and 30 T (solid). The l=0states are not shown because the dependence of such states on the magnetic field is negligible; l=1 states are much more affected by increasing this field since, in the Hamiltonian of Eq. (2), there is an additional term involving the cyclotron frequency  $\omega_c$  and the angular momentum *l*. The electron wave functions of l=1 states in the nonabrupt case with L =200 Å, for B=0 and 30 T (points marked by arrows), are plotted in Fig. 4(b) for further analysis. For abrupt interfaces [Fig. 3(a)], the presence of a magnetic field enhances the confinement energies but gives no appreciable change in qualitative behavior of  $E_{e} \times L$  curves. However, considering graded interfaces [Fig. 3(b)], these curves are qualitatively different: the energy behavior for B=20 (dashed) and 30 T (solid) is crescent as the well width L increases, whereas the opposite behavior is observed for B=0 (dashed dotted) and 10 T (dotted). This can be understood as an interfacial con-



FIG. 4. Electron wave functions for l=1 states in a cylindrical GaP/GaAs QWR with graded interfaces of w=20 Å thickness and well width L=200 Å, as a function of z, considering (a) wire radius R=35 (solid) and 75 Å (dotted) in the absence of magnetic fields; and (b) magnetic fields B=0 (dashed dotted) and 30 T (solid) for a R=42 Å wire radius.

finement of these states, not induced by reducing the wire radius, as in Fig. 2(b), but due to the presence of a magnetic field parallel to the wire axis. Numerical results obtained from our model demonstrate that, keeping the same interface thickness w=20 Å but considering a slightly smaller radius, R=40 Å, the electron would be already confined at the interface so that there is no need for applying a magnetic field to observe this kind of confinement. However, with R=40 Å and a smaller interface thickness w=15 Å, the electron is confined at the GaAs layer. Moreover, in this case, interfacial confinements induced by magnetic fields were also found but only for  $B \gtrsim 30$  T, which is higher than the values for R=42 Å and w=20 Å shown in Fig. 3(b), where a B=20 T magnetic field was enough for inducing an interfacial confinement. Our results also predict that interfacial confinement of l=1 electrons due to magnetic fields can be found in InP/InAs QWR, as well, with a slightly larger radius R=48 Å (not shown in this work). This can be an interesting feature of these systems since, once the QWR has grown, its radius is fixed and an external parameter, namely the magnetic field, can just be tuned to obtain an electron confinement at the well or at the interfaces.

The interfacial confinement of states in GaP/GaAs QWR can be verified by analyzing the electron wave functions as a function of *z* in such systems, which is illustrated in Fig. 4, for  $E_{1,1,1}$  states. In Fig. 4(a), two values of wire radius are considered in the absence of magnetic fields, while in Fig. 4(b) the wire radius is kept and two values of magnetic field are considered. It can be observed in Fig. 4(a) that a confinement of l=1 states at the interfaces is induced when the wire radius is reduced from R=75 (dotted) to 35 Å (solid). When



FIG. 5. (a) Electron confinement energies as functions of the well width *L* for l=1 states in a cylindrical InP/InAs QWR with wire radius R=45 Å and abrupt interfaces under applied magnetic fields B=0 (solid) and 10 T (dashed). (b) The same as (a) but considering graded interfaces of w=5 (curves) and 20 Å (symbols), and magnetic fields B=0 (solid,  $\bigcirc$ ) and 20 T (dotted,  $\triangle$ ).

a magnetic field is applied, in Fig. 4(b), the wave function of such states in a R=42 Å QWR is also altered, and for B=30 T (solid), two peaks at the interfacial regions can be seen. Thus, these results confirm that, in the presence of graded interfaces, confined states at the interfacial regions are observed by reducing the wire radius or increasing the magnetic field intensity.

In Fig. 5, we present the electron confinement energies as a function of the well width L for l=1 states in InP/InAs QWR with R=45 Å. These results demonstrate that the type-I to type-II transition predicted in previous work on abrupt wires can also be obtained by increasing the intensity of a magnetic field parallel to the wire axis: for w=0 Å [Fig. 5(a)], the confinement energies for B=0 (solid) decrease with increasing L, but for B=10 T (dashed)  $E_{1,1,1}=0$  for all L, which shows that these states are not confined in z despite the presence of a heterostructure. This indicates that the radial confinement energy  $E_{n,l}^{(\rho)}(z)$  for B=10 T, which is a barrierlike potential, is high enough to suppress the contribution of the heterostructure potential in  $V_{eff}(z)$  for this system, yielding a type-II effective potential. Hence, with a InP/InAs QWR with abrupt interfaces, one could control the electron band offset or even change from a confinement to a scattering potential for  $l \neq 0$  states just by setting the external magnetic field. However, real QWR are shown to present graded interfaces, and taking them into account in Fig. 5(b), the results show that if one considers an interface thickness w =20 Å (symbols), e.g., the magnetic field does not change the qualitative behavior of l=1 electrons, which are confined at the interfaces for both B=0 ( $\bigcirc$ ) and 20 T ( $\triangle$ ). For a small interface thickness w=5 A (curves), in the absence of magnetic fields (solid), the electron l=1 state is confined at the

InAs (well) layer and it depends weakly on the well width due to the new form of  $V_{\text{eff}}(z)$ : for *L* varying from 40 to 200 Å considering w=0 Å,  $E_{1,1,1}$  decreases in ~5 meV, whereas for w=5 Å, it varies only ~1 meV. For a *B* =20 T magnetic field, considering w=5 Å (dotted), a weak interfacial confinement of l=1 electrons is still observed for *L* lower than ~80 Å, while for greater values of *L*, the barrier on the effective potential is large enough to avoid confinement at the interfaces, leading to  $E_{1,1,1}=0$  with an electron localization at the InP layers just like in a type-II system. Thus, for a perfect type-I to type-II transition induced by a magnetic field in InP/InAs nonabrupt QWR, one would need a R=45 Å wire with a large InAs layer and small interfaces (<5 Å), i.e., with a very high quality of heterostructure modulation, in order to avoid interfacial confinements.

The presence of magnetic fields has been shown to induce interfacial confinement for l=1 states because this field enhances the radial confinement energy  $E_{n,l}^{(\rho)}$  and then supports this change of localization. However, for l=-1 states, the magnetic field reduces  $E_{n,l}^{(\rho)}$ ; hence, it would never induce a change from well to interfacial localization of such states. Conversely, there are some cases where the l=-1 electron state is already confined at the interfaces, for instance, in a GaP/GaAs QWR with R=39 Å and w=15 Å, and a magnetic field B=30 T can induce a transition from interfacial to well localization. Such a transition can also be obtained with R=40 Å and w=20 but applying a higher magnetic-field intensity, B=35 T.

Since the mass variation through the interfacial regions is of major importance for the effective potential and, consequently, for the carriers confinement, it is worthwhile to discuss on the possible types of function which can be used to describe such a variation. In present work, as one can verify in Sec. II, the interfacial region is assumed to be a  $XP_{\gamma}As_{1-\gamma}$ (X=Ga or In) alloy with a P composition  $\chi(z)$  varying linearly along z at the interfaces. The effective masses are then assumed to depend linearly on  $\chi(z)$ . However, other dependencies on  $\chi(z)$ , for instance, a linear dependence for the reciprocal effective mass, i.e.,  $1/m(z) = (1/m_{XP})\chi(z)$ + $(1/m_{XAs})[1-\chi(z)]$  could be considered. The following procedure shows straightforwardly that even for this kind of variation one can still tailor the system in order to find confining potentials at the interfaces. Suppose one has a linear function  $\chi(z) = z/w$  describing a composition variation at an interface lying within  $0 \le z \le w$ , the effective mass and the heterostructure potential are then given by 1/m(z) = A(z/w)+(1/ $m_{XAs}$ ) and  $V^{het}(z) = Q_e[\varepsilon_1(z/w) + \varepsilon_2(z/w)^2]$ , respectively, with  $A=1/m_{XP}-1/m_{XAs}$ . The effective potential in this region is then

$$V_{\rm eff}(z) = V^{\rm het}(z) + E_{n,l}^{(\rho)}(z) = a\frac{z}{w} + b\left(\frac{z}{w}\right)^2 + C\left(A\frac{z}{w} + \frac{1}{m_{X\rm As}}\right),$$
(8)

where  $a=Q_e\varepsilon_1$ ,  $b=Q_e\varepsilon_2$ , and *C* is obtained from Eq. (6) as  $C=\hbar eB[x_{n,|l|}+(l/2)+(|l|/2)]$ . A minimum value of  $V_{\text{eff}}(z)$  exists within  $0 \le z \le w$  if  $dV_{\text{eff}}/dz=0$  somewhere in this interval. After some manipulation of the equations, one eventu-



FIG. 6. Electron wave functions for l=1 states in cylindrical GaP/GaAs and InP/InAs QWR with graded interfaces of w=20 Å thickness and well width L=200 Å, as a function of z, considering three different approximations for the effective-mass variation on the interfacial region: direct (dotted) and reciprocal (solid) mass variations considering  $\chi(z)$  as an error function, and a variation on the reciprocal mass with a linear function for  $\chi(z)$  (dashed). The wire radius is R=33 Å (R=45 Å) for GaP/GaAs (InP/InAs).

ally finds that a minimum value of  $V_{\rm eff}(z)$  can still occur at the interface for this kind of mass variation, provided |(CA (2b) |<1. The parameters A, a, and b are constants of the material while C is a function of the wire radius R that can be tuned so that this inequality is satisfied. This inequality would be satisfied by no value of C only if b=0, i.e.,  $\varepsilon_2=0$ , and this means that the energy gap of the alloy depends linearly on the composition  $\chi$ , which is not true for most of the materials in the literature.<sup>15</sup> Figure 6 shows the electron wave functions along z for l=1 states in GaP/GaAs and InP/InAs QWRs with well width L=200 Å and interfaces thickness w=20 Å. Dashed line is obtained by considering  $\chi(z)$  as a linear function of z and a variation on the reciprocal effective mass 1/m, whereas the other curves depict the results considering  $\chi(z)$  as an error function<sup>5</sup> of z with variations on the direct m (dotted) and reciprocal 1/m(solid) effective masses. Electron confinement at interfaces is observed in all the curves shown although for the reciprocal mass cases the electron is just weakly bound in this region and is more dependent on the wire parameters: when the reciprocal mass varies in GaP/GaAs (InP/InAs), the interfacial confinement was found only for  $R \sim 33$  Å (~45 Å), whereas for a variation in the direct mass used in our model to obtain the previous results of this paper, an interfacial localization is observed for radii varying within a range from  $R \sim 27$  to  $\sim 40$  Å ( $R \sim 42$  to  $\sim 46$  Å).

The theoretical model we suggest in this work is good for the description of electron states in conduction band. But it fails when studying valence-band states because in cases where the wire diameter 2R and the heterostructure width L have almost the same dimensions, the lowest valence state is a combination of heavy-hole (HH) and light-hole (LH) states. Hence, to correctly solve the QWR problem for holes when  $2R \simeq L$ , one must use a 4  $\times$  4 Hamiltonian, taking into account HH and LH states. Even so, based on the fact that the changes in localization are strongly dependent on the differences between effective masses, it can be inferred that the critical radii for type-I to type-II transitions, as well as those for interfacial confinements, are not expected to be the same for electrons and holes since the effective masses of these carriers are completely different in each material. Indeed, in a previous work, Lew Yan Voon et al.<sup>13</sup> have used a four-band  $k \cdot p$  based theory to predict type-I to type-II transitions also for valence-band states in abrupt InGaAs/InP and GaAs/AlAs OWRs, and they found that critical radii are different for electrons and holes. Furthermore, considering a GaAs/GaP QWR, changes in valence-band state localization would hardly be obtained due to the small difference between the hole effective masses in GaAs and GaP. However, changes in the electron localization are found in this system [see Fig. 2(b)]. These electron-hole separations might decrease the overlap between their ground-state wave functions, which would reduce the probability of an interband transition for such states, a feature that is also commonly found in type-II systems.<sup>10</sup> Thus, a low probability of interband transitions would be observed in cases where the hole remains at the well layer and the electron is confined at the interfaces or vice versa.

## **IV. CONCLUSIONS**

The confinement energies of electrons in cylindrical nanowires with longitudinal GaP/GaAs and InP/InAs heterostructures, under an applied magnetic field parallel to the wire axis, were calculated for several values of wire radius, well width, interfaces thickness, and magnetic-field intensity. The difference between effective masses of the heterostructure materials plays an important role in the carrier confinement along the wire axis; it is responsible for creating a z-dependent potential since the lateral confinement energy depends on such masses. It was demonstrated that, for abrupt interfaces, reducing the wire radius leads to a weaker effective confinement potential along the wire axis due to an enhancement of the radial confinement energy. The energies of l=1 states are lower than the ones for l=0 states, which are due to the fact that the former present higher radial confinement energy, and consequently the effective confinement potential along the wire axis is reduced. The existence of smooth interfaces between materials drastically changes the effective potential profile and can yield to a carrier confinement at the interfacial region for thin wires with  $w \neq 0$  instead of the free-carrier behavior or the type-I to type-II transitions predicted in previous works on abrupt QWR.12,13 Several kinds of functions were considered for the description of the effective-mass variation at the interfaces, and our results demonstrate that an interfacial confinement of carriers can be found for all cases shown. The confinement energies are slightly affected by the presence of magnetic fields, particularly for l=0 states. But in some special cases, increasing the magnetic-field intensity also induces a type-II potential in the abrupt case or a carrier confinement at the interfaces when  $w \neq 0$ . This can be a useful feature of these systems for device applications since it shows that the carrier behavior can be controlled by an external field. Our results also suggest that in some cases of heterostructured QWR, interband transitions may be strongly suppressed due to spatial separation of electrons and holes states. Finally, the features shown in present work allow us to infer that a high control of com-

\*andrey@fisica.ufc.br

<sup>†</sup>Deceased.

- <sup>‡</sup>gil@fisica.ufc.br
- <sup>1</sup>M. Law, J. Goldberger, and P. Yang, Annu. Rev. Mater. Res. **34**, 83 (2004).
- <sup>2</sup>M. T. Björk, B. J. Ohlsson, T. Sass, A. I. Persson, C. Thelander, M. H. Magnusson, K. Deppert, L. R. Wallenberg, and L. Samuelson, Nano Lett. **2**, 87 (2002).
- <sup>3</sup>R. Solanki, J. Huo, J. L. Freeouf, and B. Miner, Appl. Phys. Lett. **81**, 3864 (2002).
- <sup>4</sup>M. S. Gudiksen, L. J. Lauhon, J. Wang, D. C. Smith, and C. M. Lieber, Nature (London) **415**, 617 (2002).
- <sup>5</sup>C. L. N. Oliveira, A. Chaves, E. W. S. Caetano, M. H. Degani, and J. A. K. Freire, Microelectron. J. **36**, 1049 (2005).
- <sup>6</sup>D. Li, Y. Wu, R. Fan, P. Yang, and A. Majumdar, Appl. Phys. Lett. **83**, 3186 (2003).
- <sup>7</sup>Y.-M. Lin and M. S. Dresselhaus, Phys. Rev. B **68**, 075304 (2003).
- <sup>8</sup>Y. Wu, R. Fan, and P. Yang, Nano Lett. 2, 83 (2002).
- <sup>9</sup> A. Fuhrer, L. E. Fröberg, J. N. Pedersen, M. W. Larsson, A. Wacker, M.-E. Pistol, and L. Samuelson, Nano Lett. **7**, 243 (2007).
- <sup>10</sup>L. C. Lew Yan Voon and M. Willatzen, J. Appl. Phys. 93, 9997

position and size parameters is essential to the design and fabrication of heterostructured quantum wire based devices.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work has received financial support from the Brazilian National Research Council (CNPq), under Contract No. NanoBioEstruturas 555183/2005-0, Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (Funcap), and Pronex/CNPq/Funcap.

(2003).

- <sup>11</sup>H. Grüning, P. J. Klar, W. Heimbrodt, S. Nau, B. Kunert, K. Volz, W. Stolz, and G. Weiser, Physica E (Amsterdam) **21**, 666 (2004).
- <sup>12</sup>M. Willatzen, R. V. N. Melnik, C. Galeriu, and L. C. Lew Yan Voon, Math. Comput. Simul. 65, 385 (2004).
- <sup>13</sup>L. C. Lew Yan Voon, B. Lassen, R. Melnik, and M. Willatzen, J. Appl. Phys. **96**, 4660 (2004).
- <sup>14</sup>E. C. Ferreira, J. A. P. da Costa, and J. A. K. Freire, Physica E (Amsterdam) **17**, 222 (2003).
- <sup>15</sup>E. H. Li, Physica E (Amsterdam) 5, 215 (2000).
- <sup>16</sup>C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, and G. A. Farias, Appl. Surf. Sci. **234**, 38 (2004).
- <sup>17</sup>S. V. Branis, G. Li, and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B 47, 1316 (1993).
- <sup>18</sup>R. Ferreira and G. Bastard, Rep. Prog. Phys. **60**, 345 (1997).
- <sup>19</sup>A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire, and G. A. Farias, J. Appl. Phys. **101**, 113703 (2007).
- <sup>20</sup>J. Costa e Silva, A. Chaves, J. A. K. Freire, V. N. Freire, and G. A. Farias, Phys. Rev. B **74**, 085317 (2006).
- <sup>21</sup>E. W. S. Caetano, M. V. Mesquita, V. N. Freire, and G. A. Farias, Physica E (Amsterdam) **17**, 22 (2003).

## Theoretical investigation of excitons in type-I and type-II Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> quantum wires

J. Costa e Silva,\* Andrey Chaves,<sup>†</sup> J. A. K. Freire,<sup>‡</sup> V. N. Freire, and G. A. Farias<sup>§</sup>

Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, Campus do Pici, 60455-900 Fortaleza, Ceará, Brazil

(Received 26 April 2006; published 25 August 2006)

This work presents a theoretical study of the excitonic properties of  $Si_{1-x}Ge_x$  cylindrical quantum wires surrounded by a Si matrix, considering two possibilities for the conduction band alignment, type I and type II. The effect of nonabrupt interfaces between these materials on the exciton energies is investigated: an interfacial region of 15 Å in a 50 Å wide  $Si_{0.85}Ge_{0.15}(Si_{0.7}Ge_{0.3})$  type-I (type-II) quantum wire leads to an exciton energy blueshift of the order of 10 meV. The excitonic behavior under an applied magnetic field parallel to the wire axis is also studied: exciton energies in type-I wires are weakly affected, while for type-II wires, increasing the field causes the electron angular momentum to change almost periodically, giving rise to Aharonov-Bohm oscillations of the exciton ground state energy.

DOI: 10.1103/PhysRevB.74.085317

PACS number(s): 78.67.Lt, 71.35.-y

## I. INTRODUCTION

Over the past few years, many researchers have studied one-dimensional nanoscale structures such as quantum wires (QWR), due to their potential applications in electronic devices, e.g, transistors, diodes, lasers, and biological sensors, and also because their chemistry is quite easily manipulated. <sup>1–3</sup> Many groups have used several growth techniques to synthesize QWR composed of two single-crystalline semiconductor materials, forming core-sheath, core-multishell, and block-by-block heterostructures.<sup>4–6</sup> In particular, recent papers have reported the growth of Si/SiGe QWR by using *chemical vapor deposition* and *vapor liquid solid deposition* methods, which exhibit enhanced electrical transport properties making possible high-mobility devices.<sup>4,7</sup>

Experimental studies on  $Si_{1-x}Ge_x$  quantum wells, wires, and dots surrounded by a Si matrix have indicated that such heterostructures exhibit a peculiar characteristic of their band structure: the valence band always forms a well for holes, whereas there are two possible kinds of band alignment for electrons, depending on the Ge concentration *x*. It has been shown that for low Ge concentrations, the conduction band forms a well (type I) for electrons, while at higher concentrations it may form a barrier (type II).<sup>8–12</sup>

There are many papers in the literature related to excitons in type-II quantum dots and wells. Although the exciton confinement in type-II wires is also an interesting problem, there have been few theoretical works on this subject. Rorison<sup>13</sup> was one of the first ones to present theoretical studies of excitonic properties of type-II QWR systems, in which exciton binding energies and oscillator strengths were calculated for GaAs/AlAs QWR, for both finite and infinite confining barrier cases, using a variational approach and a selfconsistent method. However, his work did not study how the excitonic properties of these systems may be affected by the presence of external magnetic fields. Recently, the problem of exciton confinement was addressed for type-II planar quantum dots under an applied magnetic field, perpendicular to the dot plane, by Janssens et al.,<sup>14</sup> where interesting results were found about the angular momenta of carriers in the ground state for high fields. The influence of magnetic fields on the exciton states in QWR has also been widely studied,<sup>15–19</sup> but mainly in type-I systems.

Another important topic is the influence of an interfacial layer between Si and SiGe on the calculation of exciton energies, since in almost all recent experimental publications, the composition analysis of the wires indicates the presence of nonabrupt interfaces between materials. The problem of graded interfaces in low dimensional systems, such as quantum dots and quantum wells, has been widely studied, and significant alterations of the exciton energy spectrum have been demonstrated.<sup>20–22</sup>

The aim of the present work is to study the excitonic properties of  $Si_{1-x}Ge_x$  cylindrical quantum wires embedded in a silicon matrix. We consider the two known possibilities for band alignment in these systems, type I and type II, for appropriate Ge compositions. Taking into account the existence of graded interfaces, the effective mass approximation is used to calculate the exciton energies. The electron and hole behaviors under an applied magnetic field parallel to the wire axis are also investigated, showing Aharonov-Bohm (AB) oscillations of the electron ground state energies of type-II Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> QWR.

#### **II. THEORETICAL MODEL**

Considering the symmetry of the problem, circular cylindrical coordinates are used, taking  $\rho$  as the confinement direction and z as the free direction. Using the symmetric gauge for the vector potential,  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}B\rho\hat{e}_{\theta}$ , the Hamiltonian that describes the system is given by<sup>25</sup>

$$H_{exc} = -\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \left( \frac{\rho_i}{m_i^{\parallel}(\rho_i)} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \right) + \frac{1}{m_i^{\parallel}(\rho_i)\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\mu_{\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \\ - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{8} m_i^{\parallel} \rho_i^2 \omega_c^2 + V_i(\rho_i), \tag{1}$$

where  $i=e, h, m_i^{\parallel}$  is the in plane  $\rho$ -dependent effective mass of each charge carrier,  $\mu_{\perp}$  is the electron-hole reduced mass in the *z* direction, and  $\omega_c = eB/m_i^{\parallel}$  is the cyclotron angular frequency. We use the relative coordinates  $z = |z_e - z_h|$  and  $\theta$  $= \theta_e - \theta_h$ . The potential  $V_i(\rho_i)$  includes the heterostructure potential  $V_i^{het}(\rho_i)$  and the Coulomb interaction between electrons and holes. To take into account the existence of a graded interface between materials, the Ge concentration  $\chi$  of the alloy is assumed to be  $\rho$ -dependent, similar to the model of Freire *et al.*<sup>23</sup> For a  $\chi(\rho_i)$  increasing linearly in the interfacial region, one has

$$\chi(\rho_i) = \begin{cases} x, & 0 \le \rho_i < \rho_1; \\ x - (\rho_i - \rho_1) x/w, & \rho_1 \le \rho_i < \rho_2; \\ 0, & \rho_i \ge \rho_2, \end{cases}$$

where  $\rho_1$  and  $\rho_2$  are the limits of the interfacial region and  $w = \rho_2 - \rho_1$  is the interface thickness.  $V_i^{het}(\rho_i)$  and  $m_i^{l}(\rho_i)$  are then expressed as functions of  $\chi(\rho_i)$ :  $V_i^{het}(\rho_i) = Q_i [\epsilon_1 \chi(\rho_i) + \epsilon_2 \chi^2(\rho_i)]$  and  $m_i^{l}(\rho_i) = \{m_{i,\text{Ge}}\chi(\rho_i) + m_{i,\text{Si}}[1 - \chi(\rho_i)]\}$ , where  $\epsilon_1$  and  $\epsilon_2$  are interpolation parameters and  $Q_i$  is the band offset.<sup>8</sup>

The eigenfunction which is the solution in the  $\theta$  coordinate is chosen as  $(1/\sqrt{2\pi})e^{il\theta}$ , where  $l=0,\pm 1,\pm 2,...$ , is the angular momentum. Using a variational approach, we take a Gaussian-type "orbital" wave function<sup>24</sup> as the solution in z

$$\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{\eta}} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{z^2}{\eta^2}\right),\tag{2}$$

with  $\eta$  as the variational parameter that minimizes the exciton binding energy.

For type-I systems, it is used for the exciton wave function  $\Psi(\rho_e, \rho_h, \theta, z) = (1/\sqrt{2\pi})e^{il\theta}\psi_e(\rho_e)\psi_h(\rho_h)\phi(z)$ , where  $\psi_e$ and  $\psi_h$  are normalized one particle wave functions, in the Schrödinger equation with the Hamiltonian of Eq. (1), namely  $\langle \Psi | H_{exc} | \Psi \rangle = E_x \langle \Psi | \Psi \rangle$ . Thus,

$$E_{x} = \langle \psi_{e} | H_{e} | \psi_{e} \rangle + \langle \psi_{h} | H_{h} | \psi_{h} \rangle + \langle \Psi | H_{e-h} | \Psi \rangle, \qquad (3)$$

where the one particle Hamiltonian  $H_i$  is given by

$$H_{i} = -\frac{\hbar^{2}}{2\rho_{i}}\frac{\partial}{\partial\rho_{i}}\left(\frac{\rho_{i}}{m_{i}^{\parallel}(\rho_{i})}\frac{\partial}{\partial\rho_{i}}\right) + \frac{\hbar^{2}l^{2}}{2m_{i}^{\parallel}(\rho_{i})\rho_{i}^{2}} + \frac{l}{2}\hbar\omega_{c}$$
$$+\frac{1}{8}m_{i}^{\parallel}(\rho_{i})\omega_{c}^{2}\rho_{i}^{2} + V_{i}^{het}(\rho_{i})$$
(4)

with i=, e, h, and  $H_{e-h}$  is the electron-hole interaction Hamiltonian

$$H_{e-h} = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon} \frac{1}{|\vec{r_e} - \vec{r_h}|}.$$
 (5)

This procedure leads to a differential equation in  $\rho$  for each carrier  $[H_i - E_i]\psi_i(\rho_i) = 0$ , which is solved by a discretization method<sup>25</sup> with an uniform mesh, and the binding energy follows from  $E_b = \langle \Psi | H_{e-h} | \Psi \rangle$ , which yields

$$E_{b} = -\frac{\hbar^{2}}{2\mu_{\perp}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^{*}(z) \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} \phi(z) dz$$
$$-\frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon} \int_{V} \frac{|\psi_{e}(\rho_{e})|^{2} |\psi_{h}(\rho_{h})|^{2} |\phi(z)|^{2}}{(z^{2} + |\vec{\rho_{e}} - \vec{\rho_{h}}|^{2})^{1/2}} dV, \qquad (6)$$

where  $dV = \rho_e d\rho_e \rho_h d\rho_h d\theta dz$  and the integral of the Coulomb term is carried out over a cylinder with an infinite interval along the *z* direction. Since  $\phi(z)$  is a variational function

such that in Eq. (2), one can solve analytically the first term integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi(z) dz = -\frac{1}{\eta^2},$$
(7)

and the second term assumes the form

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon\eta}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_V\frac{|\psi_e(\rho_e)|^2|\psi_h(\rho_h)|^2\exp(-2z^2/\eta^2)}{(z^2+\rho_e^2+\rho_h^2-2\rho_e\rho_h\cos\theta)^{1/2}}dV, \quad (8)$$

which is simplified, leading to the final expression for the binding energy

$$E_{b} = \frac{\hbar^{2}}{2\mu_{\perp}\eta^{2}} - \frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon\eta}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_{0}^{+\infty}|\psi_{e}(\rho_{e})|^{2}\rho_{e}$$
$$\times \int_{0}^{+\infty}|\psi_{h}(\rho_{h})|^{2}\rho_{h}\int_{0}^{2\pi}\exp(a)K_{0}(a/2)d\rho_{e}d\rho_{h}d\theta,$$
(9)

where  $a=-2|\vec{\rho_e}-\vec{\rho_h}|^2/\eta$  and  $K_0(x)$  is the modified zero-order Bessel function of the second kind.<sup>26</sup> These integrals are calculated numerically, and the exciton energy is obtained by  $E_{exc}=E_{gap}+E_e+E_h-E_b$ .

In type-II systems, since the potential for the electron has a step form, the electron is no more confined by the band mismatch of the wire materials, but it is just bounded by the Coulomb interaction. This implies that solving the Schrödinger equation for the electron in the absence of a Coulomb interaction leads to an electron energy  $E_e=0$ . To solve the type-II problem, one takes the same form of  $\Psi(\rho_e, \rho_h, \theta, z)$  used previously for the type-I case in  $H_{exc}|\Psi\rangle = E_x|\Psi\rangle$  and multiplies it by the complex conjugate of the  $\rho_h$  and z dependent parts of the wave function.<sup>27</sup> Therefore, the Schrödinger equation with the one particle Hamiltonian of Eq. (4) is solved first for the hole, so that

$$E_{x}|\psi_{e}\rangle = (H_{e} + E_{h} + \langle\psi_{h}\phi|H_{e-h}|\psi_{h}\phi\rangle)|\psi_{e}\rangle.$$
(10)

Once the hole wave function  $\psi_h$  is known, the electron effective Coulomb potential due to the presence of the hole is calculated, yielding the following differential equation for  $\psi_e(\rho_e)$ :

$$[H_e + E_h + I(\rho_e)]\psi_e(\rho_e) = E_x\psi_e(\rho_e), \qquad (11)$$

where  $I(\rho_e) = \langle \psi_h \phi | H_{e-h} | \psi_h \phi \rangle$  is the effective Coulomb potential, given by

$$I(\rho_e) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi(z) dz$$
  
$$-\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{+\infty} \frac{|\psi_h(\rho_h)|^2 |\phi(z)|^2}{(z^2 + \rho_e^2 + \rho_h^2 - 2\rho_e \rho_h \cos \theta)^{1/2}}$$
  
$$\times \rho_h d\rho_h d\theta dz, \qquad (12)$$

which is simplified such as in the type-I case,<sup>26</sup> yielding to

TABLE I. Selected properties of Si and Ge, which are used to obtain values for  $Si_{1-x}Ge_x$  by linear interpolation (Ref. 8).

|    | a (Å) | $E_g$ (eV) | $\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{\epsilon}_0)$ | $m_e(m_0)$ | $m_{hh}^{\perp}(m_0)$ | $m_{hh}^{\parallel}$ |
|----|-------|------------|--|------------|-----------------------|----------------------|
| Si | 5.43  | 1.12       | 12.1   | 0.191      | 0.277                 | 0.216                |
| Ge | 5.65  | 0.66       | 16.0   | 0.081      | 0.208                 | 0.057                |

$$I(\rho_e) = \frac{\hbar^2}{2\mu_{\perp}\eta^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\eta}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} |\psi_h(\rho_h)|^2 \rho_h \int_0^{2\pi} \\ \times \exp(a) K_0(a/2) d\rho_h d\theta.$$
(13)

The parameter  $\eta$  is adjusted to minimize the exciton energy  $E_x$ , as in the variational method developed for type-I wires, and now the exciton binding energy is given by  $E_b = E_h - E_x$ .

## **III. RESULTS AND DISCUSSIONS**

The binding and total exciton energies in  $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ QWRs are calculated for several wire radii and interface thicknesses, with x=0.15 (type I) and x=0.30 (type II). The material parameters of the alloy were obtained by an interpolation of pure Si and Ge parameters, which are listed in Table I.

## A. Type-I Si/Si<sub>0.85</sub>Ge<sub>0.15</sub> QWR

Figure 1 shows the binding energy (top) and the ground state energy (bottom) of e-hh excitons as a function of the Si/Si<sub>0.85</sub>Ge<sub>0.15</sub> QWR radius (type-I band alignment) for sev-



FIG. 1. Binding energy (top) and ground state energy (bottom) of *e*-*hh* excitons in Si/Si<sub>0.85</sub>Ge<sub>0.15</sub> type-I QWR as a function of the wire radius, for interface thicknesses *w* of 0 Å (solid), 5 Å (dashed), 10 Å (dotted), and 15 Å (dashed-dotted).



FIG. 2. Binding (top) and ground state exciton energies (bottom) of *e*-*hh* pairs in Si/Si<sub>0.85</sub>Ge<sub>0.15</sub> type-I quantum wires as functions of magnetic field, with w=0 Å (lines) and w=15 Å (symbols), for several values of wire radius  $\rho_2$ : 50 Å (dotted,  $\triangle$ ), 100 Å (dashed,  $\bigcirc$ ), 150 Å (solid,  $\nabla$ ), and 200 Å (dashed-dotted,  $\Box$ ).

eral interface thicknesses. It can be observed that  $E_b$  increases when the wire radius increases up to a maximum at  $R \sim 50$  Å, and after this it decreases. For wire radii below this value, the inclusion of a graded interface shifts down the binding energies, while the opposite occurs for a larger radii. This can be explained by considering that reducing the wire radius makes the system seem like bulk Si, where the binding energies are naturally lower.<sup>28</sup> For a 30 Å wire radius with interface thickness of w=15 Å, the binding energy is reduced by ~25%, while for wire radii greater than 50 Å there is an average increase in the binding energies of about 5.5%, in relation to the abrupt case.

On the other hand, the ground state exciton energy always decreases with the increase of the wire radius, and the inclusion of a graded interface shifts up this energy, especially for thin wires, where these shifts may reach about 30 meV. For a 50 Å radius Si/Si<sub>0.85</sub>Ge<sub>0.15</sub> QWR with interface thickness of w=15 Å, the increase in the total exciton energy is about 10 meV in relation to the abrupt case.

The influence of applied magnetic fields on the binding (top) and total (bottom) ground state exciton energies is presented in Fig. 2 for several values of the wire radius, for an abrupt interface (lines) and for a w=15 Å (symbols) interface thickness. As can be seen, the magnetic field does not greatly affect these energies, giving them only small blueshifts of the order of 2 meV, for all values of wire radii considered. Wires with larger radii are more affected by this external field. These results are in good agreement with previous studies in such systems for other materials.<sup>15,29</sup>

## B. Type-II Si/Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> QWR

Figure 3(a) shows the effective potential  $V_{eff}(\rho_e) = V_e^{het}(\rho_e) + I(\rho_e)$  for electrons in type-II quantum wires. A



FIG. 3. (a) Effective Coulomb potential for electrons in a type-II Si/Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> QWR with 50 Å wire radius. (b) The plot of this potential as a function of  $\rho$ , showing a depression near the interface between materials.

plot of this potential as a function of  $\rho$  is shown in Fig. 3(b), where it can be clearly seen that a depression in the potential appears due to the electron-hole Coulomb interaction, which is responsible for the electron bound state at the silicon layer near the Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> wire, despite the fact that the hetero-structure forms a barrier for this carrier.

In Fig. 4, the binding energy (top) and the ground state energy (bottom) of e-hh excitons are plotted as a function of the QWR radius for Si/Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> (type-II band alignment) wires with several interface thicknesses. The binding energies of type-II wires are lower than those of type I, which is expected, since in type-II systems the electron and hole are localized in different regions of space. Moreover, these energies are always reduced when the wire radius is enlarged. This occurs because now, in the limit of very thin wires, the



FIG. 4. Binding energy (top) and ground state energy (bottom) of *e*-*hh* excitons in Si/Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> type-II QWR as a function of the wire radius, for interfaces thicknesses *w* of 0 Å (solid), 5 Å (dashed), 10 Å (dotted), and 15 Å (dashed-dotted).



FIG. 5. Binding energies (top) and total exciton energies (bottom) of *e-hh* excitons in Si/Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> type-II QWR as a function of the magnetic field for 50, 100, and 150 Å wire radii, with abrupt interfaces. Solid lines are related to ground state excitons, while dotted lines are first excited states.

system no more seems like bulk Si, but like a bulk system with a localized impurity, since the hole is confined within the thin wire, while the electron is bound to it on the Si layer. For a Si/Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> with 40 Å wire radius and w=15 Å interface thickness, the increase of binding energies is about 12% in relation to the abrupt case, while the total exciton energy is increased by about 20 meV.

Figure 5 depicts the influence of a magnetic field parallel to the wire axis on the excitonic behavior of  $Si/Si_{0.70}Ge_{0.30}$ quantum wires with abrupt interfaces for the ground and first excited states. The split between these two states is large for the thinner wire, but it is reduced as the wire radius increases, becoming very small for a 150 Å wire radius, especially for the total exciton energy (bottom). It is also shown that the binding and total exciton energies in type-II wires oscillate almost periodically as the magnetic field increases, due to changes of the angular momentum of the electrons. The periodicity of the electron angular momentum depends on the wire radius. This can be explained by the fact that only the electrons in this system are localized around the wire, which causes the magnetic field to push the electron towards the barrier, giving rise to a change in *l* in each electron state, because this is energetically more favorable. Since the holes are localized inside the wire, they are just squeezed towards the wire axis by the magnetic field, hence there is no change in their angular momentum. These changes in l induced by an increase of a magnetic field are analogous to the Aharonov-Bohm effect, which has been widely studied lately for several structures where carriers are localized around a barrier potential, such as quantum-rings.<sup>30–32</sup>

Although type-II wires have a ringlike potential for the electron, the periodicity of the Aharonov-Bohm oscillations



FIG. 6. Average radius of the electron ground state in Si/Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> type-II QWR as a function of the magnetic field, for 50, 100, and 150 Å wire radii, considering w=0 Å (solid) and w=15 Å (dashed). Inset: Exciton energy dependence with the applied magnetic field, for the ground and first excited states of a 50 Å QWR radius with w=0 Å (solid) and w=15 Å (dashed).

exhibits small changes by increasing the magnetic field, in contrast to the energy states of quantum-ring structures where this periodicity is constant and well defined.<sup>30,31,33</sup> There is a clear dependence of the periodicity on the sectional area of the wire: the number of electron angular momentum transitions increases when the wire radius increases, representing a lower period for a larger radius. Since the periodicity depends on the area enclosed by the ringlike potential, its variation even for a constant wire radius can also be explained. In fact, increasing the magnetic field changes the hole wave function, causing the effective Coulomb potential to vary with the field, and consequently, the area enclosed by the effective potential for electrons does not remain constant for all values of the field, implying in a change of the periodicity of the AB oscillations.

The electron behavior in type-II wires under applied magnetic fields is further illustrated in Fig. 6, which shows the average radii of the electron ground state  $(\langle \rho_e \rangle)$  as a function of the applied magnetic field, for three values of wire radius with interface thicknesses of w=0 Å and w=15 Å. The inset shows the exciton energies related to a 50 Å QWR radius, for ground and first excited states, considering abrupt and nonabrupt interfaces. Increases of the magnetic field also give rise to oscillations in  $\langle \rho_e \rangle$ , which is expected since the angular momentum of this carrier is changing almost periodically, and wave functions for states with a larger modulus of angular momentum are more extensive than those for l = 0. Thus, when the magnetic field pushes the electron towards the Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> layer, its average radius decreases until a

change of angular momentum occurs, when l assumes a higher modulus value, which implies a more spread electron wave function. For magnetic fields varying from 0 up to 10 T, for a 50 Å wire radius there is just one transition, whereas for a 150 Å wire radius there are five such transitions. It also can be seen in Fig. 6 that a graded interface affects the angular momentum transition points of AB oscillations, which is expected since the inclusion of such an interface reduces the effective radius of the quantum wire potential. Indeed, its influence on the transition points of AB oscillations can be observed even for larger radii. For a 150 Å wire radius with an abrupt interface, the fifth electron angular momentum transition occurs in a magnetic field Babout 8.75 T, while for a w=15 Å interface it occurs at B  $\simeq 9.4$  T. For a smaller radius, 50 Å, for example, this effect is stronger: the first transition occurs at  $B \simeq 5$  T for an abrupt interface, whereas for w=15 Å it occurs at  $B \simeq 6.4$  T. An exciton energy blueshift also appears due to the inclusion of graded interfaces, as one can observe in the inset of Fig. 6, which is consistent with earlier results of Fig. 4 (bottom).

## **IV. CONCLUSIONS**

We have investigated the excitonic properties of  $Si/Si_{1-x}Ge_x$  cylindrical quantum wires with type-I and type-II band alignments. Our results show that the existence of a graded interface between materials gives a significant blueshift of the exciton energies for thin wires. The presence of a magnetic field parallel to the wire axis does not greatly affect the ground state excitons in type-I QWR, especially for smaller wire radii. However, such a field alters drastically the excitonic behavior for type-II wires, since the ringlike shape of electron states is responsible for the occurrence of the Aharonov-Bohm effect, where the angular momentum lof each electron state changes almost periodically by increasing magnetic field, whereas the l of hole ground states remains the same for all *B*. The periodicity of these energy oscillations depends on the area enclosed by the electron effective confinement potential. This explains the nonperiodicity of Aharonov-Bohm oscillations in such systems, since the area of the effective Coulomb potential produced by the hole is altered by changes of the magnitude of the external field, which squeezes the hole wave function towards the wire axis. For a type-II Si/Si<sub>0.70</sub>Ge<sub>0.30</sub> QWR with 40 Å wire radius, and w = 15 Å interface thickness, the binding energies increase about 12% in relation to the abrupt case, while the total exciton energy is blueshifted by about 20 meV. Graded interfaces alter the angular momentum AB periodicity even for a larger wire radius.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This work has received financial support from the Brazilian National Research Council (CNPq) under Contract No. 555183/2005-0, and Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (Funcap). We thank A. Donegan for a critical reading of the manuscript.

- \*Electronic address: jusciane@fisica.ufc.br
- <sup>†</sup>Electronic address: andrey@fisica.ufc.br
- <sup>‡</sup>Electronic address: king@fisica.ufc.br
- <sup>§</sup>Electronic address: gil@fisica.ufc.br
- <sup>1</sup>D. Appell, Nature (London) **419**, 553 (2002).
- <sup>2</sup>Y. Cui, Q. Wei, H. Park, and C. M. Lieber, Science **293**, 1289 (2001).
- <sup>3</sup>M. Law, J. Goldberger, and P. Yang, Annu. Rev. Mater. Res. **34**, 83 (2004).
- <sup>4</sup>L. J. Lauhon, M. S. Gudiksen, D. Wang, and C. M. Lieber, Nature (London) **420**, 57 (2002).
- <sup>5</sup>H.-J. Choi, J. C. Johnson, R. He, S.-K. Lee, F. Kim, P. Pauzauskie, J. Goldberger, R. J. Saykally, and P. Yang, J. Phys. Chem. B **107**, 8721 (2003).
- <sup>6</sup>J. Goldberger, R. He, Y. Zhang, S. Lee, H. Yan, H.-J. Choi, and P. Yang, Nature (London) **422**, 599 (2003).
- <sup>7</sup>Y. Wu, R. Fan, and P. Yang, Nano Lett. **2**, 83 (2002).
- <sup>8</sup>C. Penn, F. Schäffler, G. Bauer, and S. Glutsch, Phys. Rev. B **59**, 13314 (1999).
- <sup>9</sup>M. L. W. Thewalt, D. A. Harrison, C. F. Reinhart, J. A. Wolk, and H. Lafontaine, Phys. Rev. Lett. **79**, 269 (1997).
- <sup>10</sup>D. C. Houghton, G. C. Aers, S. R. Eric Yang, E. Wang, and N. L. Rowell, Phys. Rev. Lett. **75**, 866 (1995).
- <sup>11</sup>B. V. Kamenev, L. Tsybeskov, J.-M. Baribeau, and D. J. Lockwood, Phys. Rev. B **72**, 193306 (2005).
- <sup>12</sup>S. Fukatsu and Y. Shiraki, Semicond. Sci. Technol. 9, 2017 (1994).
- <sup>13</sup>J. M. Rorison, Phys. Rev. B 50, 8008 (1994).
- <sup>14</sup>K. L. Janssens, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 64, 155324 (2001).
- <sup>15</sup>P. Villamil, C. Cabra, and N. P.-Montenegro, Microelectron. J. 36, 383 (2005).
- <sup>16</sup>A. Struck, S. Mohammadi, S. Kettemann, and B. Kramer, Phys. Rev. B **72**, 245317 (2005).
- <sup>17</sup> Y. Sidor, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **71**, 165323 (2005).

- <sup>18</sup>J. Maes, M. Hayne, Y. Sidor, B. Partoens, F. M. Peeters, Y. González, L. González, D. Fuster, J. M. García, and V. V. Mosh-chalkov, Phys. Rev. B **70**, 155311 (2004).
- <sup>19</sup>N. Miura, H. Kunimatsu, K. Uchida, Y. Matsuda, T. Yasuhira, H. Nakashima, Y. Sakuma, D. Fuster, Y. Awano, T. Futatsugi, and N. Yokoyama, Physica B **256**, 308 (1998).
- <sup>20</sup>J. S. de Sousa, E. W. S. Caetano, J. R. Gonçalves, G. A. Farias, V. N. Freire, and E. F. da Silva Jr., Appl. Surf. Sci. **190**, 166 (2002).
- <sup>21</sup>E. W. Caetano, M. V. Mesquita, and V. N. Freire, Physica E (Amsterdam) **17**, 22 (2003).
- <sup>22</sup>C. L. N. Oliveira, J. A. K. Freire, V. N. Freire, and G. A. Farias, Appl. Surf. Sci. **234**, 38 (2004).
- <sup>23</sup> V. N. Freire, M. M. Auto, and G. A. Farias, Superlattices Microstruct. **11**, 17 (1992).
- <sup>24</sup>F. L. Madarasz, F. Szmulowicz, F. K. Hopkins, and D. L. Dorsey, Phys. Rev. B **49**, 13528 (1994).
- <sup>25</sup>F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B 53, 1468 (1996).
- <sup>26</sup>I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, London, 1994).
- <sup>27</sup>A. Bellabchara, P. Lefebvre, P. Christol, and H. Mathieu, Phys. Rev. B 50, 11840 (1994).
- <sup>28</sup>E. C. Ferreira, J. A. P. da Costa, J. A. K. Freire, G. A. Farias, and V. N. Freire, Appl. Surf. Sci. **190**, 191 (2002).
- <sup>29</sup>S. V. Branis, G. Li, and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B 47, 1316 (1993).
- <sup>30</sup>L. G. G. V. Dias da Silva, S. E. Ulloa, and A. O. Govorov, Phys. Rev. B **70**, 155318 (2004).
- <sup>31</sup>B. Szafran, F. M. Peeters, and S. Bednarek, Phys. Rev. B 70, 125310 (2004).
- <sup>32</sup>J. Liu, A. Zaslavsky, and L. B. Freund, Phys. Rev. Lett. 89, 096804 (2002).
- <sup>33</sup>A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. 84, 2223 (2000).

## 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] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 20, 1064 (1950).
- [91] A. A. Abrikosov, Soviet Physics JETP 5, 1174 (1957).
- [92] J. W. Rohlf, Modern Physics from a to Z0, Wiley 1994.
- [93] L. Kramer, Phys. Rev. B **3**, 3821 (1971).
- [94] L. Jacobs and C. Rebbi, Phys. Rev. B **19**, 4486 (1979).
- [95] V. A. Schweigert and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 57, 13817 (1998).
- [96] A. Kanda, B. J. Baelus, F. M. Peeters, K. Kadowaki, and Y. Ootuka, Phys. Rev. Lett. 93, 257002 (2004).
- [97] D. S. Golubović, M. V. Milošević, F. M. Peeters, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. B 71, 180502(R) (2005).
- [98] E. H. Brandt, Phys. Rev. B **34**, 6514 (1986).
- [99] J. M. Speight, Phys. Rev. D 55, 3830 (1997).
- [100] R. MacKenzie, M.-A. Vachon, and U. F. Wichoski, Phys. Rev. D 67, 105024 (2003).
- [101] L. M. A. Bettencourt and R. J. Rivers, Phys. Rev. D 51, 1842 (1995).
- [102] F. Mohamed, M. Troyer, G. Blatter, and I. Luk'yanchuk, Phys. Rev. B 65, 224504 (2002).
- [103] A. D. Hernández and A. López, Phys. Rev. B 77, 144506 (2008).
- [104] J. R. Clem, J. Low Temp. Phys. 18, 427 (1975).
- [105] R. Auzzi, M. Eto, and W. Vinci, J. High Energ. Phys. 2, 100 (2008).
- [106] E. Babaev and M. Speight, Phys. Rev. B **72**, 180502(R) (2005).
- [107] R. Geurts, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, arXiv:1005.2921v1.
- [108] V.V. Moshchalkov et al., in Handbook of Nanostructured Materials and Nanotechnology, Academic Press, pp. 451-525 (1999).
- [109] 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).
- [110] M.L. Teague, G. Drayna, G. Lockhart, P. Cheng, B. Shen, H.-H. Wen, and N.-C. Yeh, arXiv:1007.5086v1.
- [111] B.L. Blackford and R.H. March, Phys. Rev. **186**, 397 (1969).
- [112] D. Eom, S. Qin, M.-Y. Chou, and C. K. Shih, Phys. Rev. Lett. 96, 027005 (2006).
- [113] M.E. Zhitomirsky and V.H. Dao, Phys. Rev. B 69, 054508 (2004).
- [114] S.-Z. Lin, X. Hu, arXiv:1007.1940v1 (2010).
- [115] V. G. Kogan and J. Schmalian, arXiv:1008.0581.
- [116] J. Geyer, R. M. Fernandes, V. G. Kogan, and J. Schmalian , Phys. Rev. B 82, 104521 (2010).
- [117] N. Watanabe and M. Tsukada, Phys. Rev. E 62, 2914 (2000).
- [118] M. Suzuki, Phys. Lett. A **146**, 319 (1990).
- [119] A. Chaves, J. Costa e Silva, J. A. K. Freire and G. A. Farias, Microelectr. J. 39, 455 (2008).
- [120] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Numerical Recipes in Fortran 77, Second Edition, (1992).
- [121] K. L. Janssens, B. Partoens, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 67, 235325 (2003).
- [122] M. Governale and C. Ungarelli, Phys. Rev. B 58, 7816 (1998).
- [123] 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).
- [124] T. Kramer, C. Kreisbeck, and V. Krueckl, Physica Scripta 82, 038101 (2010).
- [125] R. Kosloff and D. Kosloff, J. Comput. Phys. **63**, 363 (1986).
- [126] D. Neuhauser and M. Baer, J. Chem. Phys. **90**, 4351 (1988).
- [127] S. Mahapatra and N. Sathyamurthy, J. Chem. Soc., Faraday Trans. 93, 773
- [128] A. Arnold, M. Ehrhardt and I. Sofronov, Comm. Math. Sci. 1, 501 (2003).
- [129] D. E. Manolopoulos, J. Chem. Phys. **117**, 9552 (2002).
- [130] M. H. Degani, Phys. Rev. B 66, 233306 (1997). (2002).
- [131] R. ROBINETT Quantum Mechanics: Classical Results, Modern Systems, and Visualized Examples. Oxford University Press, Oxford (2006).
- [132] J. Planelles and J. I. Climente, Eur. Phys. J. B 48, 65 (2005).
- [133] 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.
- [134] F. Sols, M. Macucci, U. Ravaioli and K. Hess, Appl. Phys. Lett. 54, 350 (1989).

- [135] 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).
- [136] V. I. Mashanov, H. -H. Cheng, C. -T. Chia and Y. -H. Chang, Physica E 28, 531 (2005).
- [137] D. Granados and J. M. García, Appl. Phys. Lett. 82 2401 (2003).
- [138] 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).
- [139] M. Zarenia, J. M. Pereira, A. Chaves, F. M. Peeters, and G. A. Farias, Phys. Rev. B 81, 045431 (2010).
- [140] L. Brey and H. A. Fertig, Phys. Rev. B 73, 235411 (2006).
- [141] T. Luo, A. P. Iyengar, H. A. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. B 80, 165310 (2009).
- [142] A. Iyengar, T. Luo, H. Fertig, and L. Brey, Phys. Rev. B 78, 235411 (2008).
- [143] C.-H. Yan and L.-F. Wei, J. Phys.: Condens. Matter 22, 295503 (2010).
- [144] D. S. L. Abergel, V. M. Apalkov, and T Chakraborty, Phys. Rev. B 78, 193405 (2008).
- [145] G. Paz, Eur. J. Phys. **22**, 337 (2001).
- [146] A. G. Aronov and Y. B. Lyanda-Geller, Phys. Rev. Lett. 70, 343 (1993).
- [147] Y. S. Yi, T. Z. Qian, and Z. B. Su, Phys. Rev. B 55, 10631 (1997).
- [148] T. Choi, S. Y. Cho, C. M. Ryu, and C. K. Kim, Phys. Rev. B 56, 4825 (1997).
- [149] F. E. Meijer, A. F. Morpurgo, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B 66, 033107 (2002).
- [150] A. R. Akhmerov and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B 77, 085423 (2008).
- [151] G. M. Maksimova, V. Ya. Demikhovskii and E. V. Frolova, Phys. Rev. B 78, 235321 (2008).
- [152] H. N. Nazareno, P. E. de Brito, and E. S. Rodrigues, Phys. Rev. B 76, 125405 (2007).
- [153] J. M. Pereira Jr., V. Mlinar, F. M. Peeters and P. Vasilopoulos, Phys. Rev. B 74, 045424 (2006).
- [154] V. V. Cheianov, V. Fal'ko, and B. Altshuler, Science **315**, 1252 (2007).
- [155] A. Chaves, L. Covaci, Kh. Yu. Rakhimov, G. A. Farias, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 82, 205430 (2010).
- [156] J.-H. Chen, W. G. Cullen, C. Jang, M. S. Fuhrer, and E. D. Williams, Phys. Rev. Lett. 102, 236805 (2009).

- [157] T. M. Rusin and W. Zawadzki, Phys. Rev. B 78, 125419 (2008).
- [158] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, New York, 1975).
- [159] E. Romera and F. de los Santos, Phys. Rev. B 80, 165416 (2009).
- [160] V. Krueckl and T. Kramer, New J. Phys. **11**, 093010 (2009).
- [161] D. R. Tilley and J. Tilley, Superfluidity and superconductivity, (IOP Publishing Ltd. London, 1990).
- [162] V. R. Misko, V. M. Fomin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. Lett. 90, 147003 (2003).
- [163] V. R. Misko, V. M. Fomin, J. T. Devreese, and V. V. Moshchalkov, Phys. C 404, 251 (2004).
- [164] G. Teniers, V. V. Moshchalkov, L. F. Chibotaru, and A. Ceulemans, Phys. B 329-333, 1340 (2003).
- [165] G. R. Berdiyorov, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. 96, 207001 (2006).
- [166] R. Geurts, M. V. Milošević, and F. M. Peeters, Phys. Rev. Lett. 97, 137002 (2006); *ibid.* Phys. Rev. B 75, 184511 (2007).
- [167] E. B. Bogomol'nyi, Sov. J. Nucl. Phys. 24, 449 (1976).
- [168] T. M. Samols, Commun. Math. Phys. **145**, 149 (1992).
- [169] J. Pearl, Appl. Phys. Lett. 5, 65 (1964).
- [170] E. H. Brandt, Phys. Rev. B **79**, 134526 (2009).
- [171] S. Zapperi, A. A. Moreira, and J. S. Andrade Jr., Phys. Rev. Lett. 86, 3622(2001)
- [172] E. H. Brandt, Rep. Prog. Phys. 58, 1465 (1995).
- [173] C. Reichhardt, C. J. Olson, and F. Nori, Phys. Rev. Lett. 78, 2648 (1997).
- [174] W. V. Pogosov, H. J. Zhao, V. R. Misko, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B 81, 024513 (2010)
- [175] D. J. Priour Jr. and H. A. Fertig, Phys. Rev. B 67, 054504 (2003).
- [176] 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).
- [177] C. L. S. Lima and C. C. de Souza Silva, Phys. Rev. B 80, 054514 (2009).
- [178] E. Babaev and M. Speight, Phys. Rev. B 72, 180502 (2005); ver também arXiv:0910.1607 e Physica C (2010).
- [179] A.A. Shanenko *et al.*, (submetido).

- [180] A. Gurevich, Phys. Rev. B 67, 184515 (2003); Physica C 456, 160-169 (2007).
- [181] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, pp. 17-18, New York - Dover, 1972.
- [182] A. Chaves, F. M. Peeters, G. A. Farias, M. Milošević, arXiv:1005.4630v1 (2010).
- [183] J.-P. Wang, Phys. Lett. A **374**, 58 (2009).
- [184] H. Kim, M. A. Tanatar, Yoo Jang Song, Yong Seung Kwon, R. Prozorov, arXiv:1008.3251v3 (2010).
- [185] 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).

## Livros Grátis

(<u>http://www.livrosgratis.com.br</u>)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração Baixar livros de Agronomia Baixar livros de Arquitetura Baixar livros de Artes Baixar livros de Astronomia Baixar livros de Biologia Geral Baixar livros de Ciência da Computação Baixar livros de Ciência da Informação Baixar livros de Ciência Política Baixar livros de Ciências da Saúde Baixar livros de Comunicação Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE Baixar livros de Defesa civil Baixar livros de Direito Baixar livros de Direitos humanos Baixar livros de Economia Baixar livros de Economia Doméstica Baixar livros de Educação Baixar livros de Educação - Trânsito Baixar livros de Educação Física Baixar livros de Engenharia Aeroespacial Baixar livros de Farmácia Baixar livros de Filosofia Baixar livros de Física Baixar livros de Geociências Baixar livros de Geografia Baixar livros de História Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura Baixar livros de Literatura de Cordel Baixar livros de Literatura Infantil Baixar livros de Matemática Baixar livros de Medicina Baixar livros de Medicina Veterinária Baixar livros de Meio Ambiente Baixar livros de Meteorologia Baixar Monografias e TCC Baixar livros Multidisciplinar Baixar livros de Música Baixar livros de Psicologia Baixar livros de Química Baixar livros de Saúde Coletiva Baixar livros de Servico Social Baixar livros de Sociologia Baixar livros de Teologia Baixar livros de Trabalho Baixar livros de Turismo