

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA CONDUTIVIDADE HALL QUÂNTICA NO GRAFENO

COMPUTATIONAL SIMULATION OF QUANTUM HALL CONDUCTIVITY IN GRAPHENE

SIMULACIÓN COMPUTARIZADA DE LA CONDUCTIVIDAD DE HALL CUÁNTICO EN EL GRAFENO

Christophe Bertrand Bigon¹
Daniel Guimarães Tedesco²

Resumo

O grafeno é um material recém-descoberto, com propriedades térmicas, mecânicas e elétricas promissoras. Esse material é objeto de investimentos importantes e tem alto potencial na indústria e no desenvolvimento de novas tecnologias. O trabalho a seguir tem como objetivo o estudo descritivo do efeito Hall quântico e as suas consequências sobre a condutividade elétrica no grafeno. A primeira parte do trabalho apresenta as ferramentas teóricas da física do estado sólido, necessárias ao entendimento do fenômeno, a partir de uma pesquisa bibliográfica. Em sequência, realizou-se um estudo de caso com o objetivo de aprimorar o entendimento sobre o tema, usando um *software* de simulação computacional. Essa ferramenta permitiu reproduzir o comportamento de uma fita de grafeno de dimensões nanométricas, ao aplicar um campo magnético. Os resultados obtidos nas consultas bibliográficas foram a descrição da estrutura do grafeno e os modelos teóricos do efeito Hall quântico, explicando a quantização da condutividade. Além disso, estudou-se qualitativamente o processo de simulação computacional. Finalmente, obteve-se o resultado quantitativo do cálculo numérico, no formato de gráficos. Nessa última etapa, apesar de um efeito espúrio, é possível observar claramente a quantização da condutividade com valores de e^2/h .

Palavras-chave: grafeno; condutividade; efeito hall quântico; física do estado sólido.

Abstract

Graphene is a newly discovered material with promising thermal, mechanical, and electrical properties. This material is the object of important investments and has high potential in industry and the development of new technologies. The following work aims at the descriptive study of the quantum Hall effect and its consequences on the electrical conductivity in graphene. The first part of the work presents the theoretical tools of solid-state physics, necessary to understand the phenomenon, based on bibliographic research. Subsequently, a case study was carried out to improve the understanding of the subject, using computer simulation software. This tool allowed to reproduce the behavior of a graphene ribbon of nanometric dimensions, when applying a magnetic field. The results obtained in the bibliographic consultations were the description of the graphene structure and the theoretical models of the quantum Hall effect, explaining the conductivity quantization. In addition, the computer simulation process was qualitatively studied. Finally, we obtained the quantitative result of the numerical calculation, in the format of graphs. In this last step, despite a spurious effect, it is possible to clearly observe the quantization of conductivity with values of e^2/h .

Keywords: graphene; conductivity; quantum hall effect; solid-state physics.

Resumen

El grafeno es un material recién descubierto, con propiedades térmicas, mecánicas y eléctricas promisoras. Ese material es objeto de inversiones importantes y tiene alto potencial en la industria y en el desarrollo de nuevas tecnologías. El trabajo a continuación tiene como objetivo el estudio descriptivo del efecto Hall cuántico y sus consecuencias sobre la conductividad eléctrica en el grafeno. La primera parte del trabajo presenta las herramientas

¹ Discente no curso de Física do Centro Universitário Internacional UNINTER. E-mail: c.bigon@gmail.com.

² Docente no Centro Universitário Internacional UNINTER. E-mail: daniel.te@uninter.com.

teóricas de la física del estado sólido, necesarias para la comprensión del fenómeno, a partir de una investigación bibliográfica. Luego, se realizó un estudio de caso con el objetivo de mejorar la comprensión sobre el tema, usando un software de simulación computarizada. Esa herramienta permitió reproducir el comportamiento de una cinta de grafeno de dimensiones nanométricas, al aplicarse un campo magnético. Los resultados obtenidos en las consultas bibliográficas fueron la descripción de la estructura del grafeno y los modelos teóricos del efecto Hall cuántico, explicando la cuantización de la conductividad. Además, se estudió cualitativamente el proceso de simulación computarizada. Finalmente, se obtuvo el resultado cuantitativo del cálculo numérico, en el formato de gráficos. En esa última etapa, a pesar de un efecto espurio, es posible observar claramente la cuantización de la conductividad con valores de e^2/h .

Palabras-clave: grafeno; conductividad; efecto hall cuántico; física del estado sólido.

1 Introdução

A descoberta e a caracterização de materiais novos são fundamentais no aprimoramento das tecnologias atuais, com aplicação direta na indústria, computação e engenharia. No caso do grafeno, objeto do presente trabalho, o investimento em projetos de pesquisa e desenvolvimento no Brasil alcançou R \$133 milhões no ano de 2020 (BELLUCCI; VASQUEZ; CONTI, 2021).

O grafeno, material constituído por uma única camada de grafite, foi previsto teoricamente no século XX e isolado no laboratório em 2004. Tal material possui características de interesse na física da matéria condensada, pelas suas propriedades mecânicas, elétricas ou térmicas. Nesse estudo, procuramos evidenciar o efeito Hall quântico e como ele contribui na condutividade elétrica do grafeno. O efeito Hall é um fenômeno físico fundamental no estudo de materiais condutores de eletricidade; apresentamos a sua evolução no tempo partindo da versão clássica até a atual versão quântica.

Na área da física da matéria condensada, pesquisas puras ou básicas constituem os alicerces das pesquisas aplicadas, as quais promovem tecnologias acessíveis no nosso dia a dia. Um exemplo do impacto social e econômico atual das pesquisas é a área estratégica dos semicondutores, que são parte da maioria dos equipamentos do nosso cotidiano. Esse estudo pretende apresentar de maneira descritiva um determinado fenômeno: o efeito Hall quântico no grafeno. Trazer tal conhecimento permite dar uma base para eventuais trabalhos do tipo exploratório, e contribuir didaticamente no conhecimento da física da matéria condensada.

Apresentamos em uma primeira parte o grafeno e as suas características relevantes no entendimento da nossa pesquisa. Em sequência, introduzimos os modelos teóricos descrevendo o efeito Hall clássico e quântico, elencados a partir de uma pesquisa bibliográfica. Para ilustrar os modelos apresentados, realizamos um estudo de caso, usando como procedimento uma simulação computacional do efeito Hall quântico no grafeno. Finalmente mostramos os resultados obtidos, dos quais trazemos as considerações finais e perspectivas de novos trabalhos.

2 Efeito Hall quântico no grafeno

2.1 Fundamentação teórica

Os estudos experimentais do grafeno iniciaram na década de 1960. A técnica usada para isolar uma película desse material foi encontrada em 2004 (NOVOSELOV *et al.*, 2004). A partir dessa comprovação no laboratório, novas perspectivas de pesquisa sobre as propriedades elétricas do grafeno foram abertas. Podemos descrevê-lo como um material condutor de eletricidade bidimensional, de dimensões da ordem do nanômetro.

O efeito Hall clássico, proposto por Edwin Hall em 1879, descreve a produção de uma corrente em um condutor ao aplicar um campo magnético. Esse fenômeno é amplamente documentado na literatura acadêmica, e pode ser demonstrado com um ferramental matemático relativamente simples. Em 1980, Von Klitzing, Dorda e Pepper introduzem um novo modelo mostrando a quantização do efeito Hall. Para descrever a versão quantizada do efeito Hall, é necessário listar de maneira introdutória as evoluções oriundas da mecânica quântica, que permitem o entendimento teórico e experimental (VON KLITZING; DORDA; PEPPER, 1980).

O efeito Hall quântico é evidenciado somente em condutores bidimensionais. A condutividade desses materiais é descrita por modelos em duas dimensões, ao contrário de materiais condutores tridimensionais tal como fios, placas, barras. Evidências do efeito Hall quântico no grafeno foram obtidas em laboratório, comprovando os estudos teóricos existentes (ZHANG *et al.*, 2005). Esse tipo de experimentos necessita acesso a equipamentos avançados e de custo elevado, portanto apoiamos o nosso trabalho em ferramentas de simulação computacional, permitindo assim ter acesso ao conhecimento sobre a física envolvida.

A computação aumentou significativamente o seu impacto na sociedade na última década, com o aprimoramento das capacidades de tratamento e armazenamento de dados. Na física do estado sólido, a computação permite apoiar a pesquisa tanto teórica como experimental, através de ferramentas de simulação numéricas. O *software* Kwant (GROTH *et al.*, 2014) é publicado na forma de uma biblioteca Python, linguagem de programação abundantemente usada na área científica. Kwant permite a simulação de fenômenos de transporte quânticos variando diversos parâmetros tais como: materiais, geometria, estrutura cristalina, estrutura de banda.

2.2 Metodologia

O presente trabalho foca no estudo de um fenômeno específico da natureza, o efeito Hall quântico no grafeno. Trata-se de uma pesquisa básica qualitativa, que pretende apresentar conhecimento científico existente sobre o tema, sem ter como objetivo aplicações práticas.

Como a nossa meta principal é caracterizar o efeito Hall quântico no grafeno, o objetivo da pesquisa é descritivo. Pretendemos descrever as ferramentas teóricas conhecidas explicando o fenômeno. Completamos a compreensão do estudo através de um estudo de caso, do qual a descrição do procedimento e a análise dos dados colhidos nos permite consolidar o entendimento do fenômeno.

A nossa pesquisa iniciou com uma pesquisa bibliográfica, visando coletar da maneira a mais exaustiva possível o formalismo teórico, descrevendo o material e os fenômenos estudados. Realizamos um trabalho embasado na metodologia científica. O conhecimento, quando classificado como científico, é, segundo Santos, Molina e Dias, "verificável pela ciência e comprovável por ela." (SANTOS; MOLINA; DIAS, 2008, p. 26). Os estudos na área da física, no nosso caso especificamente a física da matéria, se apoiam em diversas fontes de publicação como livros acadêmicos e artigos científicos oriundos de periódicos e resultantes da pesquisa acadêmica, devidamente revisados pelos pares dos pesquisadores.

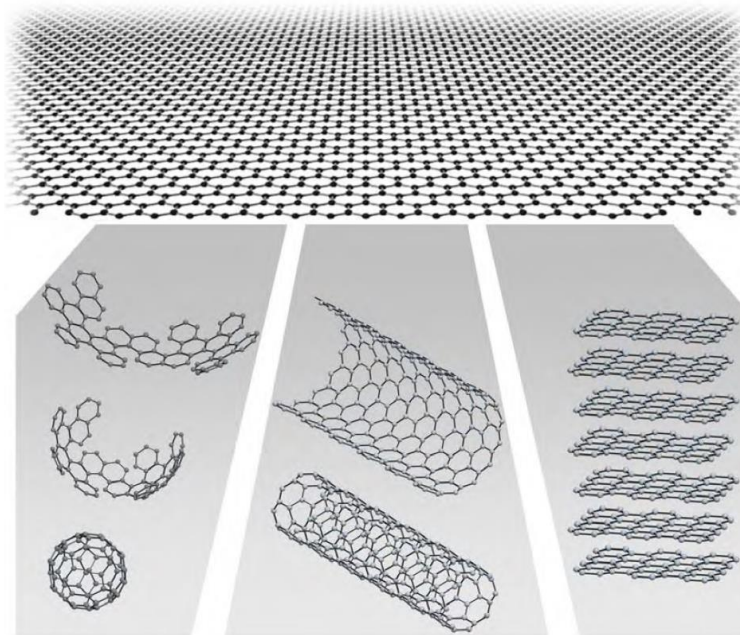
Ademais, como pretendemos aprofundar os detalhes do fenômeno físico escolhido, completamos o nosso trabalho com um estudo de caso, realizado através de uma simulação computacional. Tal ferramenta pediu uma abordagem mista dos resultados: o processo foi analisado de maneira qualitativa, e os resultados de maneira quantitativa. Conforme Gil (2002), a escolha de um estudo de caso nos permite aqui limitar a complexidade de um trabalho que seria somente possível efetuar no laboratório, usando o potencial das ferramentas de cálculo numérico. Delimitamos o escopo da simulação ao fenômeno físico selecionado, para gerar uma quantidade de dados condizente com o objetivo do presente estudo.

2.3 Resultados

2.3.1 O grafeno

Definimos o grafeno como um material bidimensional pelo seu aspecto extremamente fino, sendo constituído por uma camada de átomos de carbono. A sua estrutura hexagonal lhe confere propriedades de alto interesse na física da matéria, sejam térmicas, mecânicas ou elétricas. Apesar da previsão teórica na metade do século XX, o grafeno somente foi isolado em 2004, por Novoselov *et al.* (2004).

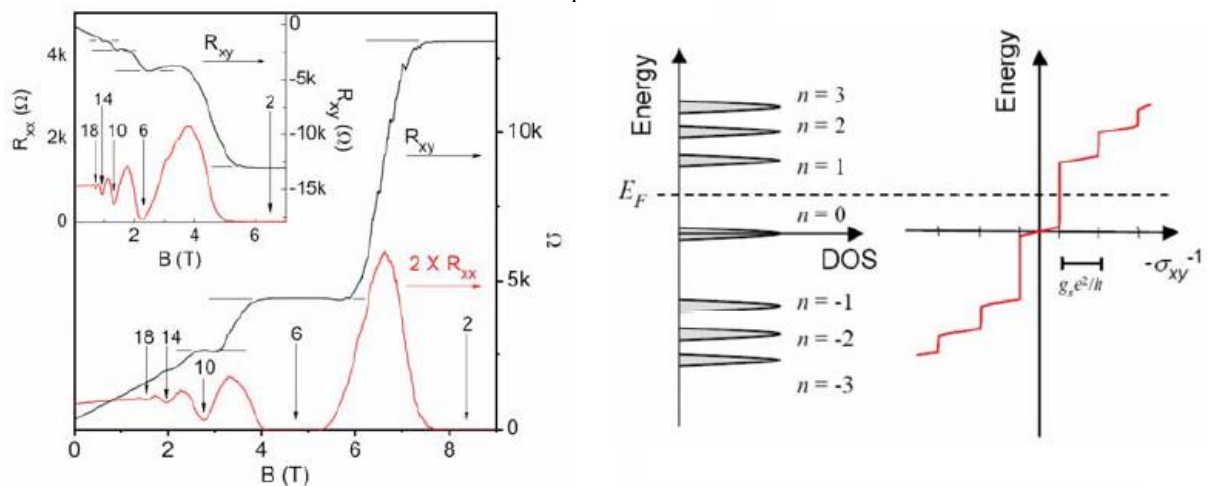
Figura 1: Estrutura atômica do grafeno. A disposição hexagonal dos átomos forma uma rede característica, do tipo “favo-de-mel” (honeycomb).



Fonte: extraído de Geim; Novoselov (2007)

No grafeno, as particularidades das propriedades elétricas são definidas pelo comportamento dos elétrons, teorizado pela mecânica quântica e a física do estado sólido.

Figura 2: Resistência Hall em função do campo magnético, na parte esquerda, e condutividade Hall em função da energia, no gráfico à direita. Podemos observar a quantização da condutividade, com os gráficos em escada ou *plateaux*.



Fonte: extraído e adaptado de Zhang *et al.* (2005)

Na literatura, coletamos algumas observações experimentais que mostram as especificidades da resistência e de resistividade elétrica, ao aplicar um campo magnético em amostras de grafeno (ZHANG *et al.*, 2005).

2.3.2 Efeito Hall clássico

Condutores elétricos são materiais nos quais as cargas elétricas conseguem se mover de maneira praticamente livre, gerando assim uma corrente elétrica. A estrutura atômica dos materiais explica a presença de cargas elétricas: os prótons e nêutrons constituem o núcleo do átomo, enquanto os elétrons são mantidos em certas órbitas ao redor do núcleo, em uma descrição clássica do modelo atômico (YOUNG; FREEDMAN, 2015).

A noção de carga elétrica é uma ferramenta puramente teórica, pois não é possível observar experimentalmente uma carga isolada. Considerando a carga do elétron como negativa e a carga do próton como positiva, ambos têm o módulo do valor da carga igual dado pela constante e dada em Coulomb:

$$e = 1,602176565(35) \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

Denotamos pela letra q uma carga teórica isolada, dita carga de teste.

Em função do tipo de material, tem mais ou menos elétrons fortemente ligados ao núcleo do átomo, em particular na camada de valência, lugar do átomo onde os elétrons estão mais afastados do núcleo e suscetíveis de ser arrancados ao aplicar uma força. Para gerar uma corrente no caso de condutores elétricos, é necessário aplicar um campo elétrico definido pela fórmula abaixo, onde E é o campo elétrico, F a força elétrica, e q uma carga de teste:

$$\vec{E} = \frac{\vec{F}}{q} \quad (1)$$

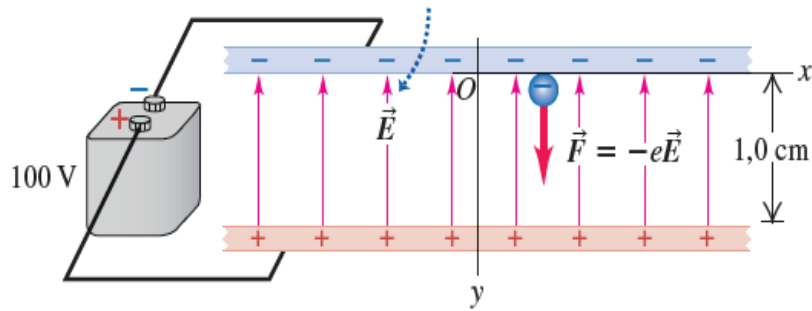
O campo elétrico é dependente da distribuição das cargas elétricas, portanto depende da configuração geométrica dessas cargas no espaço. No caso do campo gerado por uma carga pontual, e é definido pela equação:

$$\vec{E} = \frac{kq}{d^2} \hat{r} \quad (2)$$

Com k a constante eletrostática, d a distância entre a carga e o local onde o campo é medido, e r um vetor unitário, que define a orientação radial do campo elétrico.

Com a definição teórica do campo elétrico dependente da geometria das distribuições cargas, podemos expressar matematicamente um grande número de configurações de materiais condutores, tal como placas, esferas, fios. No nosso dia a dia, um campo elétrico real pode ser aplicado de maneira simples, como por exemplo ao ligar uma bateria ou pilha a um material condutor.

Figura 3: Campo elétrico gerado por uma pilha de 100V entre duas placas condutoras.



Fonte: extraído de Young; Freedman (2015)

Introduzimos acima a noção de corrente elétrica, que também pode ser expressa como uma derivada; é a taxa de cargas passando dentro de um intervalo de tempo em uma secção de área, por exemplo na secção reta de um fio:

$$I = \frac{dQ}{dt} \quad (3)$$

Considerando n a concentração de cargas elétrica, v a velocidade das partículas, e A a secção reta do fio, a corrente é definida pela expressão:

$$I = \frac{dQ}{dt} = nqvA \quad (4)$$

Finalmente, definimos a densidade de corrente J como a intensidade por secção de reta, dada por:

$$J = \frac{I}{A} = nqv \quad (5)$$

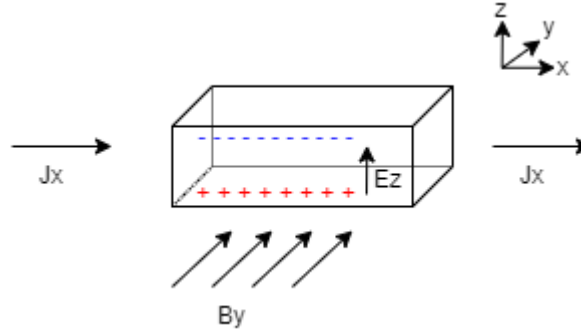
Edwin Hall propôs em 1879 um modelo da influência de um campo magnético sobre a corrente em um condutor, chamado de efeito Hall. Essa descoberta antecede a descrição teórica e experimental dos elétrons no início do século XX, porém, o conhecimento atual nos permite expressar esse modelo considerando os elétrons.

Para explicar o efeito de um campo magnético em um condutor, precisamos usar a força de Lorentz, a qual define a interação entre o campo elétrico, o campo magnético e um elétron em um condutor:

$$\vec{F} = q(\vec{E} + v \times \vec{B}) \quad (6)$$

Com F a força de Lorentz, E o campo elétrico, v a velocidade da carga q , e B o campo magnético. Escolhemos uma placa condutora, colocada conforme a Figura 4 abaixo:

Figura 4: Efeito Hall gerado por um campo magnético aplicado na direção y. O campo elétrico é gerado na direção Ez. A densidade de corrente J está na direção x.



Fonte: elaborado pelo autor, 2022.

Essa placa é atravessada por um campo elétrico J_x , a corrente elétrica na direção do eixo x , e um campo magnético B_y é aplicado na direção y . Os campos elétricos e magnéticos, descritos nas equações (1) e (6), tendem a se equilibrar, criando uma diferença de potencial e chegando na definição do efeito Hall:

$$E_z = \frac{J_x B_y}{nq} \quad (7)$$

Com E_z o campo elétrico na direção do eixo z , J_x a corrente elétrica na direção do eixo x , n a concentração de cargas elétricas, e q a carga elétrica.

A fórmula (7) é importante no estudo dos condutores, pois ela permite obter experimentalmente a concentração de cargas elétricas, ou portadores de cargas, ao aplicar um campo magnético. Ademais, podemos determinar a velocidade das cargas, usando a equação (5). Vários materiais existentes são caracterizados pelo coeficiente Hall R_H , dado por:

$$R_H = \frac{-1}{ne} \quad (8)$$

Neste caso, e representa os elétrons de cargas negativas, e n a concentração de elétrons.

Introduzimos a resistividade, e estabelecemos a relação com o efeito Hall. No caso de condutores metálicos, a resistividade é definida pela razão entre o campo elétrico E e a densidade de corrente elétrica J , conforme equação abaixo:

$$\rho = \frac{\vec{E}}{\vec{J}} \quad (9)$$

Observamos que a resistência de um condutor depende da condutividade, em função da fórmula:

$$R = \frac{\rho L}{A} \quad (10)$$

Com ρ a resistividade, L o comprimento do condutor, e A a seção de área. Vimos aqui a relação entre a geometria do material, a resistividade e a resistência. A sua inversa, a condutância é dada por:

$$G = \frac{A}{\rho L} \quad (11)$$

Como o nosso tema trata de casos bidimensionais, foi notado que nesse caso a resistência somente se aplica no plano, e, portanto, deduzimos a resistividade:

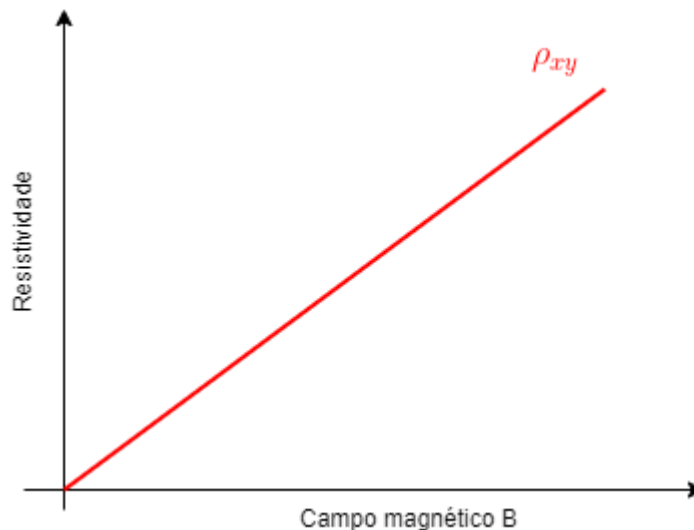
$$\rho = Rt \quad (12)$$

Com R a resistência de folha, conforme uma geometria plana, e t a espessura do material. Novamente, pudemos notar que a inversa se aplica, no caso da condutividade.

Finalmente, com as equações (5) e (7), obtivemos a resistividade dada em função do efeito Hall, no plano zx :

$$\rho_{zx} = \frac{E_z}{J_x} \quad (13)$$

Figura 5: Gráfico da resistividade Hall clássica em função do campo magnético.



Fonte: elaborado pelo autor, 2022.

Na figura 5, foi criado um gráfico representativo da resistividade Hall clássica. A resistividade é a inversa da condutividade. Observamos o comportamento linear em função do campo magnético, conforme mostrado na equação (13).

2.3.3 Efeito Hall quântico

No início do século XX, os estudos sobre o comportamento das partículas iniciaram uma nova era da física. O comportamento dual da luz, que tem tanto características de onda

como de partícula, foi aplicado por De Broglie aos elétrons (YOUNG; FREEDMAN, 2016). A natureza ondulatória das partículas finalmente levou à criação da mecânica ondulatória, hoje em dia chamada de mecânica quântica.

Ao descrever o modelo do efeito Hall, admitimos que os elétrons orbitam ao redor do núcleo atômico. A mecânica quântica nos forneceu os modelos de movimento dos elétrons, tratando-os como ondas. Uma das noções mais importantes dessa teoria é a quantização da energia, que determina certas posições de valores inteiros, fora das quais o elétron não pode ser encontrado.

Para explicitar a quantização da energia, usamos o modelo atômico de Bohr, no caso do átomo de hidrogênio. Esse átomo possui somente um elétron e, portanto, os cálculos permitem uma aproximação razoável, ao contrário de átomos com estrutura mais complexa.

A energia de cada órbita é definida pela fórmula:

$$E_n = \frac{-hcR}{n^2} \quad \text{com } n = 1, 2, 3 \dots \quad (14)$$

Com R a constante de Rydberg, h a constante de Planck, c a velocidade da luz no vácuo, e n o número quântico principal, a não confundir com a concentração de portadores de carga. O interesse dessa fórmula é observar o número quântico n , que somente admite valores inteiros. Assim, percebemos que a energia de cada órbita, e conseqüentemente a posição dos elétrons ao redor do átomo, somente admite determinados valores: é a definição de quantização.

A descrição teórica do efeito Hall quântico requer demonstrações avançadas em mecânica quântica e física do estado sólido, que fogem do escopo do presente trabalho. Listamos somente dois postulados importantes necessários para entendimento do estudo, conforme definido por Kittel e McEuen (2005):

- O efeito Hall quântico somente se aplica em materiais bidimensionais.
- Os níveis de Landau explicam as órbitas dos elétrons no caso da influência de um campo magnético.

Os níveis de Landau nos indicam qual é a energia de um elétron submetido à influência de um campo magnético, e similarmente a equação (14), fornecem quais órbitas são acessíveis ao elétron.

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \quad \text{com } n = 1, 2, 3 \dots \quad (15)$$

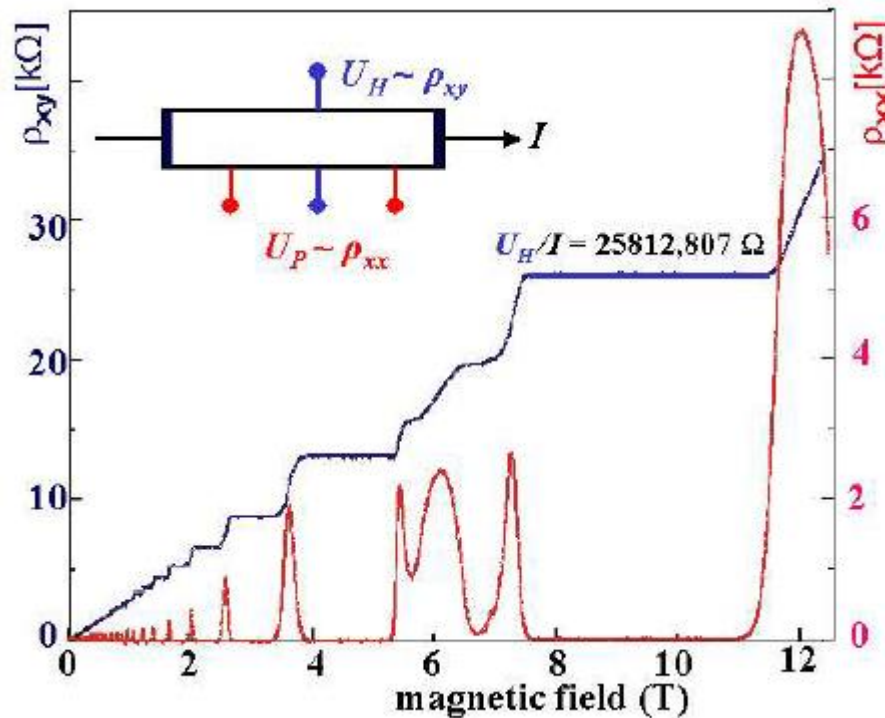
Com E_n a energia permitida, \hbar é a constante de Planck reduzida, e ω a frequência de cíclotron do elétron.

Finalmente introduzimos o efeito Hall quântico, que é a versão quantizada do efeito Hall clássico. Em um material condutor 2D, sob influência de um campo magnético, a resistividade é definida por:

$$\rho_{xy} = \frac{h}{\nu e^2} \quad \text{com } n = 1, 2, 3 \dots \quad (16)$$

Com ν um valor inteiro dependente do campo magnético, h a constante de Planck e e uma carga elementar.

Figura 6: Resistividade Hall em função do campo magnético, no GaAs/AlGaAs.



Fonte: extraído de von Klitzing (2005)

2.3.4 Estudo de caso: simulação computacional

No estudo de caso, foi usado um *software* de simulação computacional baseado no cálculo numérico para simular o comportamento do grafeno, e assim aprofundar os modelos elencados na pesquisa bibliográfica. Introduzimos considerações gerais respectivas ao *software* escolhido, e apresentamos os resultados obtidos através da simulação.

Reproduzir fenômenos físicos da matéria requer técnicas que envolvem o grande número de átomos ou partículas, e as fórmulas matemáticas correspondentes. Kwant implementa o modelo *tight-binding*, que permite resolver as equações oriundas da mecânica quântica, e assim simular o comportamento do transporte elétrico, que pode ser entendido como o movimento dos elétrons na matéria (GROTH *et al.*, 2014).

O *software* usado é baseado na linguagem de programação Python, e permitiu executar diferentes tarefas de computação através de funcionalidades amplamente utilizadas no meio científico. Chegamos ao cálculo de parâmetros físicos de um sistema, seguindo um roteiro pré-definido. Foi importante seguir as etapas na ordem abaixo:

- Criamos um sistema com os seguintes parâmetros: configuração geométrica, estrutura atômica. A configuração geométrica representa a forma e as dimensões do material; por exemplo um círculo, um fio, uma fita. A estrutura atômica representa a disposição dos átomos específica ao material, por exemplo uma estrutura do tipo “favo-de-mel”, vide Figura 1.
- Adicionamos uma função correspondente à energia aplicada ao sistema, chamada de função Hamiltoniana. Essa função matemática descreve o comportamento físico do sistema, incluindo, por exemplo, a presença de um campo magnético.
- Incluímos os limites do sistema. Como a simulação trata de transporte na matéria, os limites do sistema permitiram ao *software* entender o lugar da geometria onde parar o cálculo numérico. Uma analogia com o laboratório seria o lugar onde são colocados as pontas de prova em uma amostra.
- Resolvemos o sistema. É a etapa na qual o cálculo numérico aconteceu: o programa reuniu os parâmetros de entrada definidos pelo usuário, e simulou assim o comportamento físico do sistema, retornando o resultado.
- Geramos os gráficos da simulação. Etapa final do roteiro, os gráficos permitiram visualizar o sistema obter os resultados do cálculo numérico.

O código fonte em Python está disponível no apêndice A do presente documento, e inclui partes do artigo de Groth *et al.* (2014) e do site PHYS 824: Nanophysics and Nanotechnology (CONDUCTANCE OF GRAPHENE..., 2020).

Foi criado um sistema simulando uma fita nanométrica de largura 50 nm e comprimento 20 nm, com uma estrutura atômica do tipo “favo-de-mel”, similar à estrutura do grafeno.

Figura 7: Código fonte da estrutura atômica da fita nanométrica de grafeno.

```

22 def ribbon(W, L):
23     def shape(pos):
24         return (-L <= pos[0] <= L and -W <= pos[1] <= W)
25     return shape
26
27 def make_system(width, length):
28     graphene = Honeycomb()
29     a, b = graphene.sublattices
30
31     syst = kwant.Builder()
32     syst[graphene.shape(ribbon(width,length), (0, 0))] = 0
33     syst[graphene.neighbors()] = hopping
34

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2022.

Em sequência, foi incluída uma função equivalente à aplicação de um campo magnético necessário à geração do efeito Hall quântico. Essa função recebe dois parâmetros correspondentes à direção na estrutura atômica, e um parâmetro definindo o valor do campo magnético, em unidades arbitrárias.

Figura 8: Código fonte da geração de um campo magnético aplicado ao sistema do grafeno.

```

17 def hopping(sitei, sitej, phi):
18     xi, yi = sitei.pos
19     xj, yj = sitej.pos
20     return -exp(-0.5j * phi * (xi - xj) * (yi + yj))

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2022.

Os limites do sistema foram incluídos nas partes esquerda e direita da fita nanométrica, tendo valor igual ao comprimento da fita de 20 nm.

Figura 9: Código fonte da criação dos limites do sistema para fins de cálculo numérico.

```

35 # First the lead to the left
36 # (Note: TranslationalSymmetry takes a real-space vector)
37 pv1, pv2 = graphene.prim_vecs
38 sym_left_lead = kwant.TranslationalSymmetry(pv2 - 2*pv1) # Lattice symmetry in -x direction
39
40 left_lead = kwant.Builder(sym_left_lead)
41 axis=(0, 0)
42 left_lead[graphene.wire(axis, width)] = 0
43
44 left_lead[graphene.neighbors(1)] = hopping
45 syst.attach_lead(left_lead)
46 syst.attach_lead(left_lead.reversed())

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2022.

O cálculo do sistema foi executado tendo como parâmetro de entrada o campo magnético aplicado na direção perpendicular à fita.

Figura 10: Código fonte de execução do cálculo numérico.

```

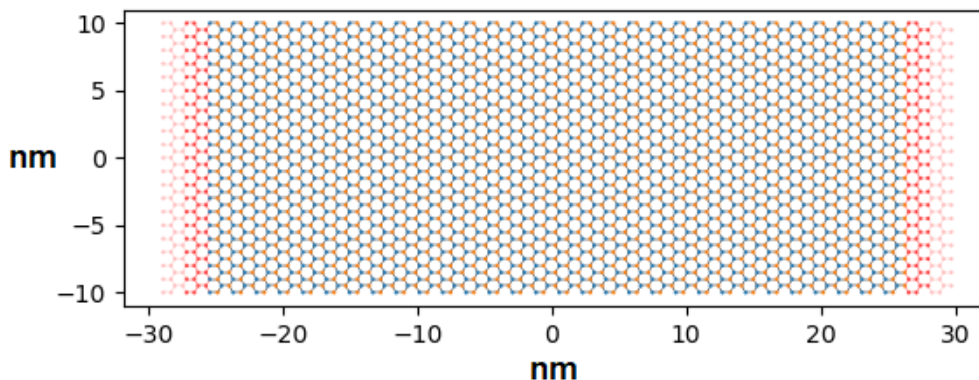
71     energy = 0.3
72
73     # Calculate and plot QHE conductance plateaus.
74     reciprocal_phis = numpy.linspace(4, 50, 200)
75     conductances = []
76     print(reciprocal_phis)
77     for phi in 1 / reciprocal_phis:
78         print(phi)
79
80     for phi in 1 / reciprocal_phis:
81         smatrix = kwant.smatrix(syst, energy, args=[phi])
82         conductances.append(smatrix.transmission(1, 0))

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2022.

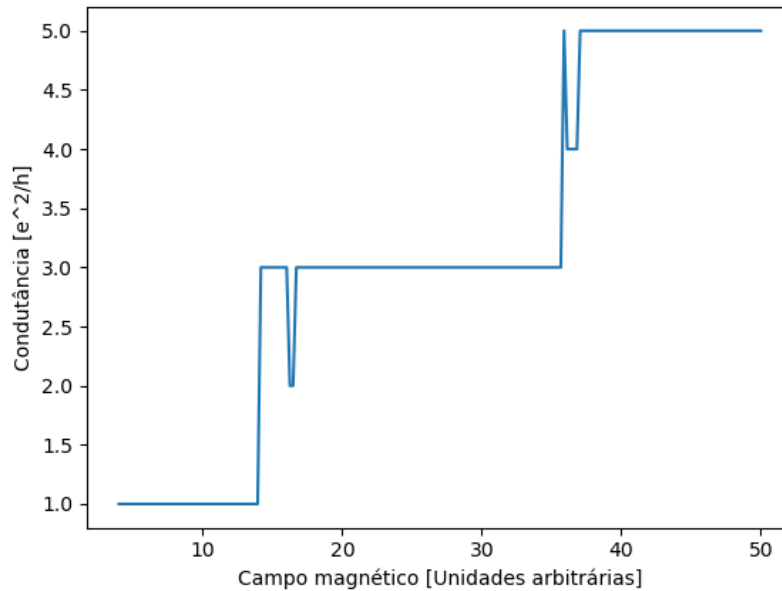
Finalmente, os gráficos resultados da simulação foram plotados. Obtivemos na figura 11 a representação da fita nanométrica de grafeno. Na figura 12, foi obtido o gráfico da condutância em função do campo magnético, mostrando a curva característica em escada do efeito Hall quântico.

Figura 11: Nanofita de grafeno de dimensões 20 por 50 nanômetros, obtida pela simulação computacional.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2022.

Figura 12: Curva obtida da simulação numérica do efeito Hall quântico no grafeno. Conseguimos observar os degraus da condutância em função do campo magnético com valores de e^2/h .



Fonte: Elaborado pelo autor, 2022.

A simulação com o *software* Kwant foi executada com sucesso, mostrando o sistema e o comportamento esperado na parte teórica. Foi possível observar a condutância, que pode ser facilmente relacionada com a condutividade de uma fita bidimensional, conforme equações (11) e (12). Essa condutância foi graficada em função do campo magnético em valores arbitrários, e mostrou a tendência esperada, com *plateaux* de valores múltiplos inteiros de e^2/h . Porém, observamos alguns efeitos espúrios nos valores 1 e 4 vezes e^2/h , nos quais a condutância sobe e desce de novo até o valor esperado. Podemos emitir como hipótese uma configuração incorreta no sistema ou na função definindo o campo magnético, que poderia ser investigada em um futuro trabalho.

3 Considerações finais

O presente trabalho teve como objeto a descrição do efeito Hall quântico no grafeno, material com propriedades promissoras no desenvolvimento de novas tecnologias. Foi realizada uma pesquisa bibliográfica, a qual forneceu uma descrição da estrutura do material estudado. Em sequência elencamos os modelos teóricos explicando a constituição de materiais condutores, e o comportamento deles quando submetidos a um campo magnético.

Seguindo um objetivo descritivo, usamos o *software* Kwant a fim de simular o comportamento do grafeno aplicando um campo magnético. Neste estudo de caso, e baseadas nas publicações científicas aferentes, foram criadas as rotinas necessárias ao cálculo numérico, do qual extraímos os resultados na forma de gráficos.

Qualitativamente, pudemos detalhar as diferentes etapas necessárias na realização da simulação computacional, e entender o vínculo com a fundamentação teórica. Quantitativamente, foi possível observar o comportamento esperado do gráfico representativo do efeito Hall quântico, com os *plateaux* característicos nos valores múltiplos de e^2/h . Foram observados alguns efeitos espúrios que poderiam ser investigados em um futuro trabalho de aprimoramento da simulação numérica.

A técnica usada no estudo de caso deste trabalho também é aplicável a pesquisas exploratórias, e poderia ser aproveitada para complementar o nosso estudo, propondo objetivos complementares. Ressalta-se a importância pedagógica da utilização de ferramentas computacionais, que auxiliam tanto os trabalhos teóricos como experimentais, e se tornaram uma necessidade no dia a dia da pesquisa científica.

Referências

BELLUCCI, F.; VASQUEZ, H.; CONTI, J. **Panorama tecnológico grafeno** - contexto brasileiro e sua demanda por financiamento. Rio de Janeiro: FINEP/MCTI, 2021.

CONDUCTANCE OF GRAPHENE nanoribbons. **PHYS 824: Nanophysics and Nanotechnology**, University of Delaware, Newark – Delaware, 31 Aug. 2020. Disponível em: https://wiki.physics.udel.edu/phys824/Conductance_of_graphene_nanoribbons. Acesso em: 06 fev. 2022.

GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. **Nature Materials**, London, v. 6, n. 3, mar. 2007.

GIL, A. C. **Como elaborar projetos de pesquisa**. 4. ed. São Paulo: Atlas, 2002.

GROTH, C. W. *et al.* Kwant: a software package for quantum transport. **New Journal of Physics**, Bristol UK, v. 16, n. 6, 26 jun. 2014.

KITTEL, C; McEUEEN, P. **Introduction to Solid State Physics**. 8. ed. Danvers: John Wiley & Sons, 2005.

NOVOSELOV, K. S. *et al.* Electric field effect in atomically thin carbon films. **Science**, American Association for the Advancement of Science (AAAS) Washington DC, v. 306, n. 5696, p. 666–669, 21 oct. 2004.

SANTOS, G. do R. C. M.; MOLINA, N. L.; DIAS, V. F. D. **Orientações e dicas práticas para trabalhos acadêmicos**. Curitiba: Ibpex, 2008.

VON KLITZING, K. v.; DORDA, G.; PEPPER, M. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. **Physical Review Letters, American Physical Society (APS)**, Washington DC, v. 45, n. 6, p. 494–497, ago. 1980.

VON Klitzing, K. 25 years of quantum Hall effect (QHE) A personal view on the discovery, physics and applications of this quantum effect. *In*: Douçot, B., Pasquier, V., Duplantier, B., Rivasseau, V. (ed.). **The quantum Hall effect**. Basel: Birkhäuser Verlag, 2005. (Progress in Mathematical Physics, 45).

YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A. **Física III** – Eletromagnetismo. 14. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2015.

YOUNG, H. D.; FREEDMAN, R. A. **Física IV** - Ótica e Física Moderna. 14. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2016.

ZHANG, Y. *et al.* Experimental observation of the quantum hall effect and berry's phase in graphene. **Nature, London**, v. 438, n. 7065, p. 201–204, nov. 2005.

Anexos e apêndices

Apêndice A: código fonte da simulação computacional

```

1 import kwant
2 from matplotlib import pyplot
3 import numpy
4 from math import sqrt
5 from cmath import exp
6
7 class Honeycomb(kwant.lattice.Polyatomic):
8     """Honeycomb lattice with methods for dealing with hexagons"""
9
10     def __init__(self, name=''):
11         prim_vecs = [[sqrt(3)/2, 0.5], [0, 1]] # bravais lattice vectors
12         # offset the lattice so that it is symmetric around x and y axes
13         basis_vecs = [[-1/sqrt(12), -0.5], [1/sqrt(12), -0.5]]
14         super(Honeycomb, self).__init__(prim_vecs, basis_vecs, name)
15         self.a, self.b = self.sublattices
16
17     def hopping(sitei, sitej, phi):
18         xi, yi = sitei.pos
19         xj, yj = sitej.pos
20         return -exp(-0.5j * phi * (xi - xj) * (yi + yj))
21
22     def ribbon(W, L):
23         def shape(pos):
24             return (-L <= pos[0] <= L and -W <= pos[1] <= W)
25         return shape
26
27     def make_system(width, length):
28
29         #graphene = kwant.Lattice.honeycomb()
30         graphene = Honeycomb()
31         a, b = graphene.sublattices
32
33         print('width = ', width)
34         print('length = ', length)
35
36         syst = kwant.Builder()
37         syst[graphene.shape(ribbon(width,length), (0, 0))] = 0
38         syst[graphene.neighbors()] = hopping
39
40         # First the lead to the left
41         # (Note: TranslationalSymmetry takes a real-space vector)
42         #pv2, pv1 = graphene.prim_vecs
43         pv1, pv2 = graphene.prim_vecs
44         sym_left_lead = kwant.TranslationalSymmetry(pv2 - 2*pv1) # Lattice symmetry in -x direction
45
46         left_lead = kwant.Builder(sym_left_lead)
47         axis=(0, 0)
48         left_lead[graphene.wire(axis, width)] = 0
49
50         left_lead[graphene.neighbors(1)] = hopping
51         syst.attach_lead(left_lead)
52         syst.attach_lead(left_lead.reversed())
53
54         return syst
55
56     def main():
57         syst = make_system(10, 25)
58
59         kwant.plot(syst)
60
61         # Finalize the system
62         syst = syst.finalized()
63
64         energy = 0.3
65
66         # Calculate and plot QHE conductance plateaus.
67         reciprocal_phis = numpy.linspace(4, 50, 200)
68         conductances = []
69         print(reciprocal_phis)
70         for phi in 1 / reciprocal_phis:
71             print(phi)
72
73         for phi in 1 / reciprocal_phis:
74             smatrix = kwant.smatrix(syst, energy, args=[phi])
75             conductances.append(smatrix.transmission(1, 0))
76
77         pyplot.plot(reciprocal_phis, conductances)
78         pyplot.xlabel("Campo magnético [Unidades arbitrárias]")
79         pyplot.ylabel("Condutância [e^2/h]")
80         pyplot.show()
81
82     if __name__ == '__main__':
83         main()

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2022.