

RELATÓRIO TÉCNICO – CIENTÍFICO

Design e análise de dispositivos multi-contato para spintrônica.

Prof. Dr. Dario Andres Bahamon Ardila

MackGraphe - Centro de Pesquisas Avançadas em Grafeno, Nanomateriais e
Nanotecnologia.

UNIVERSIDADE PRESBITERIANA MACKENZIE

Março 2017

Resumo

O presente relatório descreve os resultados obtidos no projeto de pesquisa “Design e análise de dispositivos multi-contato para spintrônica” fomentado pelo Fundo Mackenzie de Pesquisa no período entre fevereiro de 2016 e fevereiro de 2017. O projeto foi desenvolvido com pleno êxito, com os seguintes resultados quantitativos obtidos: três artigos publicados em periódicos científicos internacionais, apresentação de três trabalhos em conferências internacionais e a apresentação de dois trabalhos em conferências nacionais. Como resultados qualitativos podemos ressaltar o estabelecimento do grupo de teoria do Centro de Pesquisas Avançadas em Grafeno e Nanomateriais (Mackgraphe). Outros artigos estão em fase de elaboração, assim que novos cálculos decorrentes do progresso obtido.

1 Introdução

A movimentação simultânea de carga e spin oferece inovadoras possibilidades de dispositivos eletrônicos, correntes puras de spin reduziriam as perdas por efeito Joule (Joule heat loss) em um 75 % em comparação com os dispositivos atuais [1, 2, 3], além do mais, o controle do spin do elétron seria feito eletricamente e não com campos magnéticos [4]. Não obstante o design deste novo tipo de dispositivos é totalmente diferente dos dispositivos que usam só a carga do elétron. A detecção do acúmulo de spin deve ser realizada por meio de medidas não-locais [5], isso quer dizer que uma corrente de elétrons é injetada entre dois contatos e a acumulação de spin é detectada com uma voltagem em outros contatos [6]. Do ponto de vista teórico aparecem dois problemas que limitam a aplicação dos modelos e ferramentas usadas atualmente para o estudo, análise e design de dispositivos eletrônicos. O primeiro tem a ver com o fato que uma corrente de elétrons, além da carga, transportará uma quantidade vectorial como é o spin; pelo que grandezas tais como corrente (I_p^α) e o potencial químico (μ_p^α), no contato p teriam que ser definidos como um vetor com quatro componentes [3, 7, 8]. O segundo problema, tem a ver com a limitação que aparece para usar as funções de Green fora do equilíbrio (NEGF), ferramenta geralmente usada para simular o transporte de carga em dispositivos eletrônicos [9, 10, 11]. Devido à grande quantidade de memória necessária para armazenar uma matriz de números complexos e o custo computacional para a inversão de uma matriz quadrada de ordem N . Técnicas recursivas [10] permitem estudar e simular dispositivos maiores, mas seu uso tem sido limitado principalmente para sistemas com dois contatos e ligações com primeiros vizinhos [9, 10] limitando seu uso em sistemas com spin.

Do ponto de vista técnico, o projeto de pesquisa que é objeto deste relatório visou a adaptar as NEGF para incluir o grau de liberdade do spin do elétron e viabilizar seu uso em dispositivos com muitos contatos. Cientificamente, estudamos o efeito de adátomos não magnéticos na geração de correntes de spin em grafeno. Além disso, graças ao projeto foi montada uma infraestrutura computacional que vai permitir desenvolver as pesquisas de nosso grupo, assim como também dar suporte teórico as pesquisas desenvolvidas por outros grupos do Mack-

graphie. Como demonstramos neste relatório o projeto teve sucesso em todas as áreas acima mencionadas, aprestando contribuições importantes na área das propriedades eletrônicas, vibracionais e de transporte do grafeno e outros materiais.

2 Objetivos, Metas e Cumprimento dos Mesmos

A proposta apresentada ao Mackpesquisa fixou os seguintes objetivos:

1. Adaptação do método das funções de Green para calcular as novas grandezas físicas que aparecem ao incluir o spin. Condutância carga-spin $G_{qp}^{c;x(y)(z)}$, condutância de spin Hall para as possíveis orientações do spin (x,y e z) $G_{SH}^{x(y)(z)}$, corrente pura de spin $I_q^{S_{x(y)(z)}}$ total e mapeamento local desta, densidade de estados e densidade local de estados.

O objetivo foi atingido, o grau de liberdade do spin foi satisfatoriamente incluído no formalismo das NEGF. Desenvolvendo nossos próprios programas e rotinas conseguimos calcular condutância carga-spin e condutância spin Hall em sistemas com rede quadrada e hexagonal. Para familiarizarmos com o novo grau de liberdade do spin e para poder comparar nossos resultados primeiro incluímos o termo de acoplamento spin orbita (SOC) para todos os átomos do grafeno usando o Hamiltonano de Kene-Mele [12], depois incluímos SOC gerado aleatoriamente por adátomos [13]. Na seção de Descrição Detalhada dos Principais Resultados mostramos os resultados obtidos para G_{pq}^{cz} e G_{SH}^z em sistemas de grafeno com dois e quatro contatos.

2. Implementação e testes dos diferentes algoritmos para dispositivos multi-contatos que permitam calcular eficientemente, para sistemas de muitos átomos, as grandezas físicas mencionadas no ponto anterior.

O objetivo foi cumprido, calculamos propriedades eletrônicas e de transporte para sistemas grandes com dois e quatro contatos, para o sistema de quatro contatos usamos a configuração em cruz e em barra H. É importante ressaltar que atingimos valores de 300,000 átomos, isto foi possível graças a incorporação nos nossos programas de rotinas para resolver matrizes esparsas. Especificamente usamos o PARDISO [14] que é um de software de alto desempenho, robusto, eficiente em memória para resolver grandes sistemas de equações lineares em multiprocessadores de memória compartilhada. A metodologia e os programas desenvolvidos são totalmente flexíveis, já que adicional ao estudo do efeito spin Hall em grafeno estudamos processo de perda de coerência eletrônica em sistemas de grafeno com deformações mecânicas. Isto foi feito colocando contatos com corrente zero em diferentes pontos do sistema.

3. Aplicação da metodologia e os algoritmos desenvolvidos o caso de grafeno com adátomos. Aqui é importante lembrar que para confirmar se o estado SHE gerado é robusto tem que ser testadas diferentes tipos de adátomos mudando a densidade destes, assim como incluir desordem. Pelo que os algoritmos desenvolvidos têm que ser realmente eficientes.

A meta foi plenamente cumprida. Os programas desenvolvidos e testados nos objetivos 1 e 2 foram modificados com êxito para estudar o efeito de adátomos não magnéticos em grafeno. Usamos uma configuração em cruz com quatro contatos para calcular a condutância spin Hall e uma configuração H para medir a acumulação de carga entre os dois contatos não locais. Os códigos desenvolvidos conseguem incluir diferentes modelos para o SOC assim como também calcular a media das grandezas físicas de interesse sobre um numero de realizações nas posições dos adátomos. No começo do desenvolvimento deste objetivo utilizamos um modelo SOC que não gera espalhamento intervale [13], agora estamos estudando um modelo desenvolvido pelo Dr. Aires Ferreira da Universidade de York que adiciona termos intervale para o SOC.

4. Desenvolver a infraestrutura computacional necessária para dar suporte teórico as pesquisas desenvolvidas no Centro de Pesquisas Avançadas em Grafeno e Nanomateriais (Mackgraphe).

Montamos uma infraestrutura computacional composta por uma Workstation Supermicro com 2 Processadores Haswell 10C E5-2650V3 2.3G 25M 9.6GT/s QPI, 8 Memórias 32GB DDR4-2133 2Rx4 ECC REG RoHS e uma Placa de Video 1GB PCI-Express, DDR3, DVI | MINI-HDMI | DVI. Para proteger o equipamento foi comparado um Nobreak APC 1500VA Bivolt 115/220V. Com a infraestrutura computacional podemos desenvolver as pesquisas do grupo de teoria, assim como também para dar suporte teórico as pesquisas dos diferentes grupos do Mackgrape. Em relação a este último ponto temos interagido fortemente em dois projetos do grupo do Prof. Christiano J. S. De Mattos; na primeira colaboração fornecemos uma explicação teórica para entender umas novas propriedades vibracionais observadas nas bordas do fosforo negro. Na segunda colaboração, que ainda esta em andamento, estamos calculando o campo elétrico espalhado por amostras de fosforo negro em experimentos de microscopia óptica de campo próximo (SNOM), estes experimentos juntos com os cálculos teóricos permitem ver as mudanças no gap electrónico do fósforo negro sob diferentes condições de oxidação.

5. Formação de alunos da graduação e pós-graduação.

Lamentavelmente o objetivo não foi cumprido. Ao longo do projeto trabalhamos com diferentes alunos: (a) um aluno de iniciação científica (bolsa PIBIC) que depois de dois meses de trabalho foi trabalhar na indústria, (b) um aluno de mestrado tempo parcial que parou o curso depois de um semestre e (c) um aluno de doutorado que foi para outra área.

3 Produção Científica, acadêmica, impacto e visibilidade do projeto

Como produção científica do projeto podemos mostrar três publicações em revistas internacionais com seletiva politica editorial, como mostram seus fatores de impacto 3.718, 11.329 e 2.778. Apresentação de três trabalhos em conferencias internacionais e dois trabalhos em conferencias nacionais.

Como discutido na seção anterior as pesquisas relacionadas aos novos modelos de SOC com termos intervale continuam pelo que esperamos mais publicações geradas por este projeto.

Artigos Publicados:

1. BAHAMON, D. A.; QI, ZENAN.; PARK, HAROLD S.; PEREIRA, VITOR M.; CAMPBELL, DAVID K. Graphene kirigami as a platform for stretchable and tunable quantum dot arrays. *Physical Review B*, [s.l.], v. 93, n. 23, p.235408-1-235408-9, 6 jun. 2016. American Physical Society (APS). <http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.93.235408>. (**Fator de impacto 3.718**)
2. RIBEIRO, H. B.; VILLEGAS, C.E.P.; BAHAMON, D.A.;MURACA, D.; CASTRO NETO, A. H.; DE SOUZA E. A. T.; ROCHA, A. R.; PIMENTA, M. A.; DE MATOS, C. J. S. Edge phonons in black phosphorus. *Nature Communications*, [s.l.], v. 7, p.12191-12198, 14 jul. 2016. Springer Nature. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms12191>. (**Fator de impacto 11.329**)
3. PÁEZ, CARLOS J.; BAHAMON, DARIO A.; PEREIRA, ANA L. C.; SCHULZ, PETER A. Zigzag phosphorene nanoribbons: one-dimensional resonant channels in two-dimensional atomic crystals. *Beilstein Journal Of Nanotechnology*, [s.l.], v. 7, p.1983-1990, 13 dez. 2016. Beilstein Institut. <http://dx.doi.org/10.3762/bjnano.7.189>. (**Fator de impacto 2.778**)

Apresentação de trabalhos em conferencias internacionais:

1. APS march meeting 2016. March 14–18, 2016; Baltimore, Maryland. Quasi-bound states in strained graphene. (Apresentação oral)
2. APS march meeting 2016. March 14–18, 2016; Baltimore, Maryland. Black phosphorus edges: a polarized Raman study. (Apresentação oral)

-
3. APS march meeting 2016. March 14–18, 2016; Baltimore, Maryland. Zigzag phosphorene nanoribbons: one dimensional resonant tunnelling in two dimensional atomic crystals. (Poster).

Apresentação de trabalhos em conferencias nacionais:

1. XV Brazil MRS meeting. September 25-29, 2016; Campinas, São Paulo. Oxygen impact on the electronic and vibrational properties of black phosphorus probed by infrared nanospectroscopy. (Apresentação oral)
2. XV Brazil MRS meeting. September 25-29, 2016; Campinas, São Paulo. Raman Spectroscopy and AFM measurements of multi-layers phosphorene obtained by mechanical exfoliation in inert atmosphere. (Poster).

4 Descrição Detalhada dos Principais Resultados

4.1 Kirigamis de grafeno: pontos quânticos esticáveis

Influenciado pela arte japonesa de cortar o papel chamado kirigami, nanoestruturas de grafeno têm sido projetadas e testadas experimentalmente. Estes kirigamis de grafeno são robustos e apresentam incríveis taxas de estiramento (240%) [15]. Neste trabalho [16] utilizamos mecânica molecular combinada com tight-binding para calcular as propriedades eletrônicas e de transporte de kirigamis de grafeno, semelhantes aos estudados nas experiências. Um kirigami como o mostrado na figura 1(a) apresenta quatro estágios de deformação [17], no entanto, nós nos concentramos apenas em deformações elásticas e reversíveis (duas primeiras etapas). A condutância do kirigami não deformado na figura 1(b) apresenta minibandas originadas pelo acoplamento entre os estados localizados em diferentes seções do kirigami. Quando a carga de tração é aplicada, o kirigami é deformado e o acoplamento entre os estados localizados é

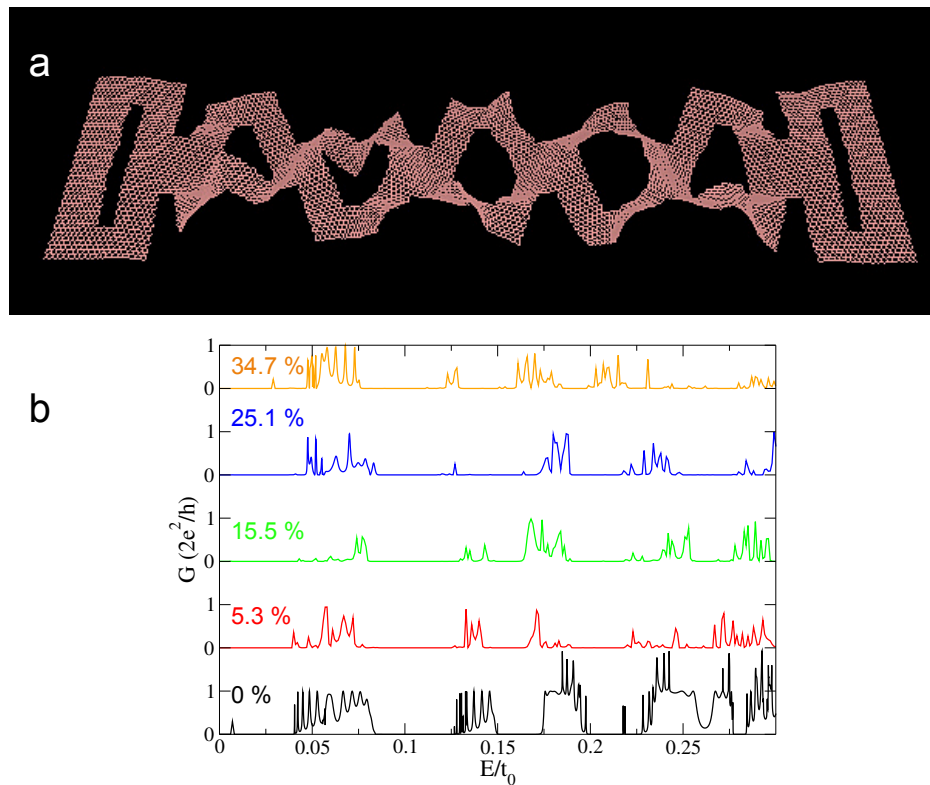


Figura 1: (a) Simulação de Dinâmica Molecular de um kirigami de grafeno deformado 15%. (b) Condutância do kirigami de grafeno para diferentes valores de deformação.

reduzido, como se vê na figura 1(b) para deformações de 5,3% e 15,5%, onde as minibandas na condutância são substituídos por picos isolados. Com base no acima referido, seria de esperar uma redução progressiva da condutância para deformações maiores. No entanto, a transmissão ressonante é reavivada para deformações de 25,1% e 34,7%. Usando LDOS e mapas de deformação associamos o reavivamento de condutância com o confinamento adicional criado por barreiras de deformação geradas pelo alongamento das ligações carbono-carbono nos cortes internos do kirigami. É importante ressaltar que o kirigami estudado tem 15000 átomos, devido a deformação que ele adquire é impossível usar uma técnica recursiva mesmo que o sistema tenha só dois contatos, pelo que usamos técnicas esparsas para estudar o sistema. Além da condutância calculamos: densidade local de estados (LDOS), densidade total de estados (DOS) e corrente; esta última mostra que o sistema apresenta resistência diferen-

cial negativa. Também usamos as técnicas multicontatos desenvolvidas para estudar o efeitos de quebra de fase, isto foi simulado incluindo 6000 contatos com corrente zero. Surpreendentemente quando o comprimento defasagem é menor que as secções do kirigami a condutância do kirigami deformado e não deformado não apresentam nenhuma diferença.

4.2 Fônons nas bordas do fósforo negro

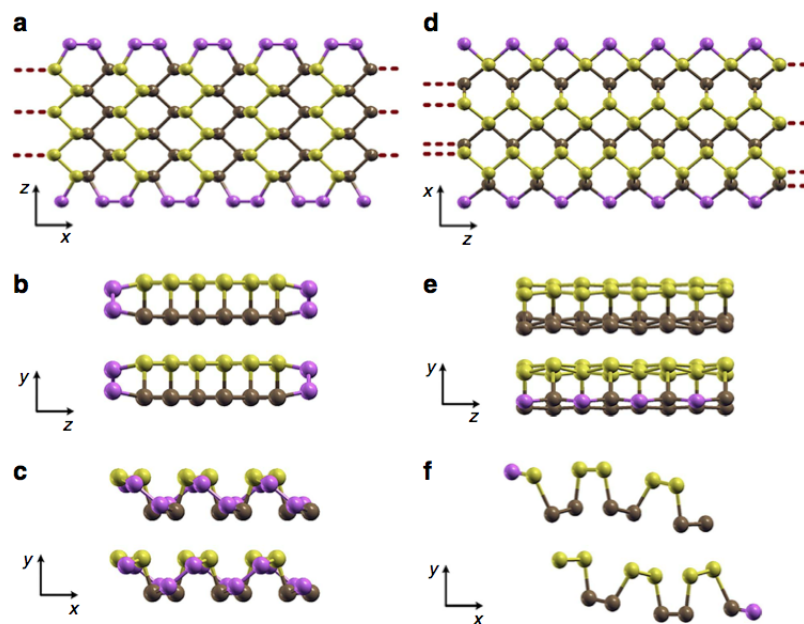


Figura 2: Estruturas de fósforo negro estudadas por cálculos DFT e suas bordas relaxadas correspondentes. (a) fósforo negro com bordas armchair, e as projeções correspondentes no plano (b) yz e (c) xy da célula unitária utilizada. (d) Fósforo negro com bordas com bordas zigzag e as projeções correspondentes no plano (e) yz e no plano (f) xy . Os átomos nas bordas de cada estrutura são mostrados em roxo para realçar os rearranjos atômicos. As estruturas são repetidas periodicamente na direção y e em ambos os casos, bem como na direção x para o sistema com bordas armchair e na direção z para ao sistema com bordas zigzag.

O fósforo negro emergiu recentemente como um novo cristal em camadas que, devido às suas estruturas cristalina e de bandas, pode ter importantes aplicações em electrónica, optoelec-

trónica e fotónica. Apesar do fato que o bulk do cristal apresenta uma gama de propriedades singulares cuja caracterização e exploração são de suma importância para o desenvolvimento de dispositivo, as bordas do fósforo negro permanecem mal caracterizadas. No trabalho [18], a estrutura atômica e o comportamento dos fônons perto de diferentes bordas de fósforo negro foram experimental e teoricamente estudados usando espectroscopia Raman e cálculos da teoria da densidade funcional. Os resultados Raman polarizados mostram o aparecimento de novos modos nas bordas da amostra, e seus espectros dependem da estrutura atômica dos bordos (zigzag e armchair). As simulações teóricas confirmam que os novos modos são devidos a estados de fônons na borda que são proibidos no bulk e originados a partir dos rearranjos dos átomos na borda.

Para elucidar a origem física das anomalias no espectro de Raman polarizado nas bordas do fosforo negro, foram realizados cálculos ab initio DFT para determinar o rearranjo da estrutura atômica nas terminações cristalinas e seu efeito sobre os modos fônons, tanto em zigzag como em armchair. A figura 2 mostra diferentes perspectivas da célula unitária relaxada utilizada neste trabalho. Aqui pode-se notar que os átomos ao longo das bordas têm posições significativamente diferentes em comparação com os seus homólogos no bulk. Para comparar os resultados experimentais de Raman com as vibrações atômicas teoricamente previstas nas bordas do fosforo negro, utilizamos o código PHonon integrado no pacote Quantum Espresso para obter os tensores Raman dentro da aproximação de Placzek. A intensidade Raman de um modo para uma dada configuração de experimental pode ser rastreada até os elementos do tensor Raman. Observamos para as estruturas relaxadas que novos elementos aparecem no tensor Raman devido à soma sobre os deslocamentos atômicos dos modos vibratórios normais nas bordas. Estes novos elementos são responsáveis pelos picos Raman anómalos nas bordas.

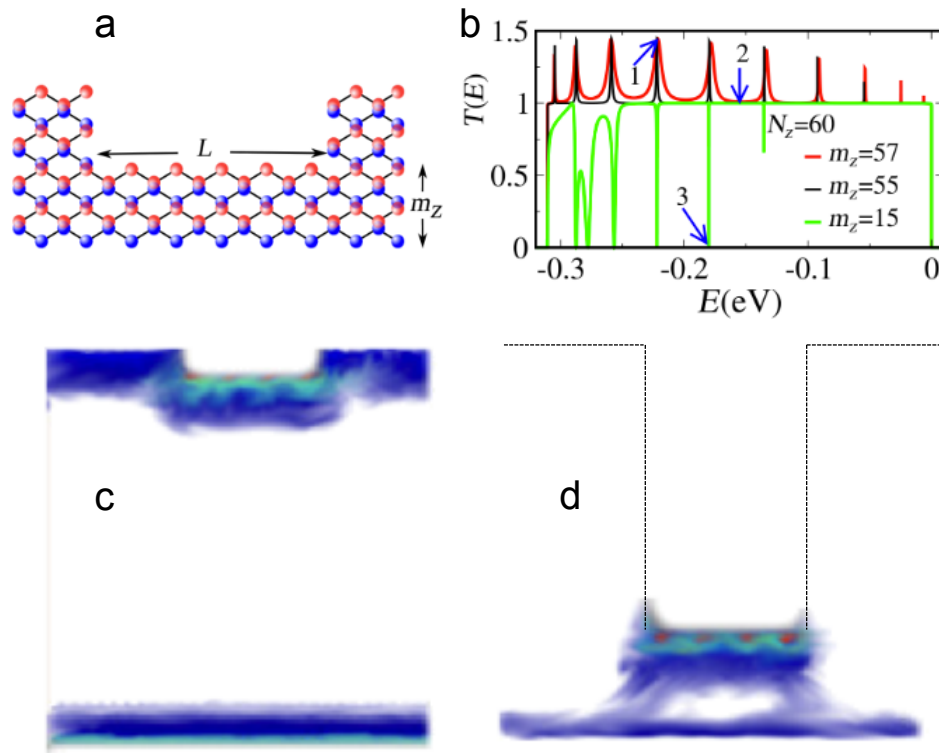


Figura 3: (a) Figura esquemática de uma constricção de fosforeno, caracterizada pelos parâmetros L (comprimento) e m_z (altura). (b) Transmissão dos estados de borda para constricções de fosforeno com diferentes valores de m_z (altura da barreira). (c) Densidade local de estados (LDOS) para o pico na transmissão mostrado pela seta 1 no panel (b) desta figura. (d) LDOS para a anti-ressonância mostrado pela seta 3 no panel (b).

4.3 Propriedades eletrônicas dos estados de borda zigzag em nanofitas de fosforeno

O fosforeno, a versão monocamada do fosforo negro tem chamado ultimamente à atenção por suas propriedades eletrônicas; especificamente o fosforeno apresenta um gap eletrônico, pelo que dispositivos lógicos podem ser feitos deste material. Pensando em dispositivos as nanofitas são as configurações mais simples que podem ser feitas; ao igual que o grafeno o fosforeno apresenta duas bordas zigzag e armchair. Estados de borda aparecem na orientação

zigzag. Para estudar as propriedades eletrônicas destes estados nos focamos no estudo da transmissão das constrições como a mostrada na figura 3(a). Neste sistema as bordas armchair que não apresentam estados nessa escala de energia agem como barreiras para os estados de borda zigzag, a altura da barreira esta determinada pelo comprimento da secção com bordas armchair. Nossos resultados [19] mostram que as constrições atuam como pontos quânticos confinando carga totalmente na borda zigzag, isso aparece na transmissão como picos ressonantes, veja a linha vermelha na figura 3(b). A densidade Local de estados para um pico mostra um estado fortemente confinado nas bordas zigzag da constrição (veja figura 3(c)) e o canal balístico dos estados da borda zigzag inferior. Quando a contrição é muito estreita os estados nas duas bordas ficam acoplados gerando ressonâncias de Fano que aparecem na transmissão como anti-ressonâncias ou picos assimétricos. No caso de constrição $m_z = 15$, linha verde da figura 3(b), observamos que a não existe transmissão quando os estados ficam acoplados, toda a carga fica confinada na constrição como se mostra na figura 3(d). Os picos na transmissão, para as constrições largas, são totalmente reproduzidos por modelos de cadeias atômicas do mesmo comprimento, isso mostra que os estados de borda zigzag se comportam como um sistema unidimensional em um sistema com dois dimensões.

4.4 SOC no grafeno gerado por adátomos

O Hamiltoniano para a rede hexagonal incluindo o efeito do SOC intrínseco e o Rashba SOC foi proposto por Kane e Mele [12] e pode-se escrever como:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + \frac{2i}{\sqrt{3}} t_{SO} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} c_i^\dagger \left(\vec{\sigma} \cdot (\vec{d}_{kj} \times \vec{d}_{ik}) \right) c_j + it_R \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger \left(\hat{z} \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{d}_{ij}) \right) c_j \quad (1)$$

Neste Hamiltoniano o operador de criação eletrônico no sitio i é c_i^\dagger e $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli. O primeiro termo é o usual de hopping dos primeiros vizinhos. O segundo termo é o SOC intrínseco permitido pela simetrias da rede hexagonal, neste termo i e j são segundos

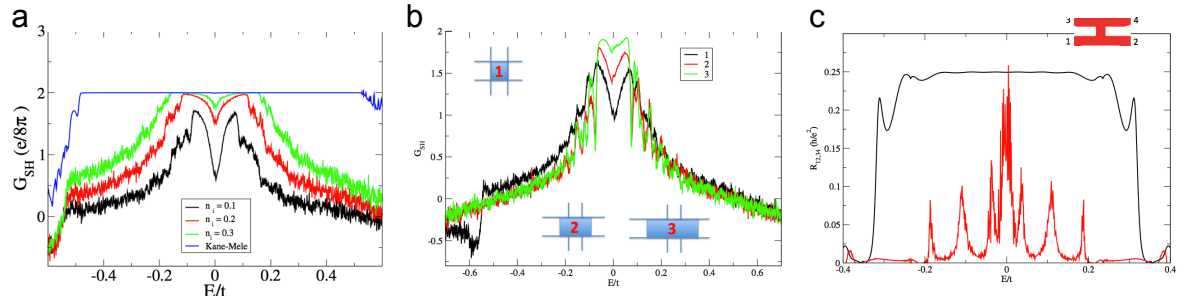


Figura 4: (a) Condutância spin-Hall para diferentes densidades de adátomos, Kane-Mele igual a densidade $n = 1$. (b) Condutância spin-Hall para diferentes densidades de adátomos, adicionamos uma (linha preta), duas (linha vermelha) e três (linha verde) vezes o comprimento do contato vertical a cada lado deste. (c) Resistência não local $R_{12,34}$ para densidades de adátomos $n = 0.1$ (linha vermelha) e $n = 1$ (linha preta). A configuração dos contatos é mostrado no inset. Todos os cálculos com densidades diferentes de zero foram feitos com 30 realizações na distribuição dos adátomos

vizinhos, sendo o sitio k o primeiro vizinho em comum; o vetor \vec{d}_{ik} aponta do sitio k ao sitio i . O terceiro termo é o Rashba SOC a primeiros vizinhos que aparece quando a simetria no plano é quebrada, no grafeno o valor deste termo pode ser controlado usando um campo elétrico o mudando o acoplamento do grafeno com o substrato. Infelizmente devido ao pequeno numero atômico do Carbono o valor de t_{SO} é da ordem de 4 meV, o valor de t_R é ainda menor e adicionalmente difícil de estimar já que depende do acoplamento com o substrato. O grafeno sendo um material 2D tem sua superfície exposta ligando algumas espécies químicas que modificam suas propriedades eletrônicas. O que se deseja é aumentar o valor do acoplamento SOC para gerar um SHE observável, gerando assim correntes puras de spin [13, 20, 21, 22, 23]. O principio físico que faz que um adátomo aumente o SOC do grafeno pode-se entender imaginando que um elétron do grafeno tunela para o adátomo sentindo o grande SOC deste e depois tunela de volta para o grafeno [13]. O Hamiltoniano que descreve a modificação local do SOC do grafeno pelo adátomo tem que ter a mesma forma que o Hamiltoniano da equação 1 [13]. Mas desta vez os termos do SOC intrínseco e o Rashba SOC só vão ser incluídos localmente onde o adátomo esta localizado [13, 20, 21].

Para verificar a formação de correntes puras de spin geradas por adátomos calculamos a condutância spin-Hall G_{SH} e a resistência não local $R_{12,34}$ para a barra H mostrada no inset da figura 4(c). Quando correntes puras de spin são geradas o valor esperado da resistência spin-Hall é $G_{SH} = 2$ em unidades de $\frac{e}{8\pi}$ e $R_{12,34} = 0.25$ em unidades de h/e^2 . Começamos tomando um valor não físico de $t_{SO} = 0.1t$, isto nos permitiu entender os diferentes efeitos envolvidos sem ficar de olho nos tamanhos do sistemas. O modelo de Kane e Mele (todas as plaquetas hexagonais com SOC) claramente mostra a formação de correntes puras de spin. A quantização da condutância spin Hall (linha azul) na figura 4(a) está claramente definida, no entanto, a linha preta da resistência não local $R_{12,34}$ na figura 4(c) mostra oscilações de Fabry-Perot. Esta diferença pode ser entendida lembrando que a duas grandezas são calculadas em sistemas diferentes, adicionalmente a condutância spin-Hall é um calculo direto das correntes puras de spin enquanto a resistência não local é uma medida indireta da diferença de acumulação de carga entre os dois contatos não locais pelo que o efeito dos contatos sem SOC aparece como oscilações de Fabry-Perot.

Surpreendentemente quando o calculo é feito para diferentes densidades de adátomos no grafeno a condutância spin-Hall na figura 4(a) não aparece quantizada. Para densidades altas como $n = 0.3$ os adátomos não geram correntes puras de spin perto do ponto de Dirac, esta situação mostra a importância do calculo com multi-contatos já que este efeito não aparece reportado em sistemas de dois contatos [13] e claramente mostra o efeito das bordas para estabilizar o efeito Hall de spin gerado por adátomos. Para estudar o efeito das bordas na geração das correntes puras de spin, tomamos o sistema de densidade $n = 0.1$ e adicionamos bordas a lado e lado dos contatos verticais. Adicionamos uma, duas e três vezes o comprimento do contato vertical a cada lado, como mostram os esquemas que aparecem no inset da figura 4(b). Fica claro observando a mesma figura que o valor da condutância spin-Hall aumenta mas não quantiza quando o sistema possui mais bordas, como é o caso 3. Semelhantemente, a medida não local também não mostra geração de correntes puras de spin, na figura 4(c) utilizando uma densidade de $n = 0.1$ observamos que a resistência $R_{12,34}$ mostra regiões de valor zero ou seja nenhuma acumulação de carga originada pelo SOC. É importante lembrar

que estes estudos foram feitos com valores grandes de $t_{SO} = 0.3t \approx 0.3$ meV, mais estudos incluindo desordem e utilizando valores mais reais para t_{SO} são requeridos. Nessa direção estamos trabalhando em colaboração com o Dr. Aires Ferreira da Universidade de Iorque na Inglaterra. Basicamente estamos desenvolvendo novos modelos para o SOC gerado pelos adátomos. No novo modelo foram incluídos termos de espalhamento intervalle e da dopagem local gerada pelo adátomo. Adicionalmente, fitando estrutura de bandas estamos fitando os valores dos diferentes termos. O trabalho nesta direção ainda continua.

Referências

- [1] Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S. Das Sarma. Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, 76(2):323–410, 2004.
- [2] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger. Spintronics: A spin-based electronics vision for the future. *Science*, 294(5546):1488–1495, 2001.
- [3] Branislav K. Nikolic, L. P. Zárbo, and Satofumi Souma. *Spin Currents in Semiconductor Nanostructures: A Nonequilibrium Green Function Approach*. Oxford University Press, 2010.
- [4] Supriyo Datta and Biswajit Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, 56:665, 1990.
- [5] R. H. Silsbee. Novel method for the study of spin transport in conductors. *Bulletin of Magnetic Resonance*, 2:284, 1980.
- [6] SERGIO O. VALENZUELA. Nonlocal electronic spin detection, spin accumulation and the spin hall effect. *International Journal of Modern Physics B*, 23(11):2413–2438, 2009.
- [7] T. P. Pareek. Pure spin currents and the associated electrical voltage. *Physical Review Letters*, 92(7), 2004.
- [8] Kerem Yunus Camsari, Deepanjan Datta, and Supriyo Datta. Four component conductance formulation of coherent spin currents. *arXiv:1402.7055*.
- [9] S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press., 1995.
- [10] D. K. Ferry and Goodnick S. M. *Transport in Nanostructures*. Cambridge University Press., UPH, Shaftesbury Road, Cambridge, CB2 8BS, United Kingdom, 1997.

-
- [11] Hartmut Haug and Antti-Pekka Jauho. Transport in mesoscopic semiconductor structures. In *Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*, volume 123 of *Solid-State Sciences*, pages 181–212. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [12] C. L. Kane and E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Physical Review Letters*, 95(22), 2005.
- [13] Conan Weeks, Jun Hu, Jason Alicea, Marcel Franz, and Ruqian Wu. Engineering a robust quantum spin hall state in graphene via adatom deposition. *Physical Review X*, 1(2), 2011.
- [14] Andrey Kuzmin, Mathieu Luisier, and Olaf Schenk. Fast methods for computing selected elements of the green’s function in massively parallel nanoelectronic device simulations. In Felix Wolf, Bernd Mohr, and Dieter an Mey, editors, *Euro-Par 2013 Parallel Processing*, volume 8097 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 533–544. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [15] Melina K. Blees, Arthur W. Barnard, Peter A. Rose, Samantha P. Roberts, Kathryn L. McGill, Pinshane Y. Huang, Alexander R. Ruyack, Joshua W. Kevek, Bryce Kobrin, David A. Muller, and Paul L. McEuen. Graphene kirigami. *Nature*, 524(7564):204–207, 08 2015.
- [16] D. A. Bahamon, Zenan Qi, Harold S. Park, Vitor M. Pereira, and David K. Campbell. Graphene kirigami as a platform for stretchable and tunable quantum dot arrays. *Physical Review B*, 93(23), 2016.
- [17] Zenan Qi, David K. Campbell, and Harold S. Park. Atomistic simulations of tension-induced large deformation and stretchability in graphene kirigami. *Physical Review B*, 90(24), 2014.
- [18] H. B. Ribeiro, C. E. P. Villegas, D. A. Bahamon, D. Muraca, A. H. Castro Neto, E. A. T. de Souza, A. R. Rocha, M. A. Pimenta, and C. J. S. de Matos. Edge phonons in black phosphorus. *Nature Communications*, 7:12191 EP –, 07 2016.

-
- [19] Carlos. J. Páez, Dario. A. Bahamon, Ana L. C. Pereira, and Peter. A. Schulz. Zigzag phosphorene nanoribbons: one-dimensional resonant channels in two-dimensional atomic crystals. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 7:1983–1990, 2016.
- [20] Aires Ferreira, Tatiana G. Rappoport, Miguel A. Cazalilla, and H. Castro Neto, A. Extrinsic spin hall effect induced by resonant skew scattering in graphene. *Physical Review Letters*, 112(6), 2014.
- [21] Alexandre Pachoud, Aires Ferreira, and A. H. Castro Neto. Scattering theory of spin-orbit active adatoms on graphene. *arXiv:1403.1251*.
- [22] Jayakumar Balakrishnan, Gavin Kok Wai Koon, Manu Jaiswal, A. H. Castro Neto, and Barbaros Ozyilmaz. Colossal enhancement of spin-orbit coupling in weakly hydrogenated graphene. *Nat Phys*, 9(5):284–287, 05 2013.
- [23] D. Marchenko, A. Varykhalov, M. R. Scholz, G. Bihlmayer, E. I. Rashba, A. Rybkin, A. M. Shikin, and O. Rader. Giant rashba splitting in graphene due to hybridization with gold. *Nat Commun*, 3:1232, 11 2012.